



HAL
open science

Modélisation du comportement effectif du combustible MOX par une analyse micro-mécanique en champs de transformation non uniformes

Rodrigue Largeton

► **To cite this version:**

Rodrigue Largeton. Modélisation du comportement effectif du combustible MOX par une analyse micro-mécanique en champs de transformation non uniformes. Mécanique des solides [physics.class-ph]. Université de Provence Aix-Marseille 1, 2012. Français. NNT: . tel-01337923

HAL Id: tel-01337923

<https://hal.science/tel-01337923>

Submitted on 27 Jun 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.

UNIVERSITÉ DE PROVENCE AIX MARSEILLE I
ED 353 École Doctorale Sciences pour l'ingénieur :
mécanique, physique, micro et nanoélectronique

THÈSE

présentée le 29 juin 2012 par

Rodrigue LARGENTON

pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ DE PROVENCE

en Mécanique des Solides

**MODÉLISATION DU COMPORTEMENT
EFFECTIF DU COMBUSTIBLE MOX**
**par une analyse micro-mécanique
en champs de transformation non uniformes**

JURY

M. Rénald BRENNER	Chargé de recherche CNRS UPMC	Rapporteur
M. Patrice CARTRAUD	Professeur Centrale Nantes	Rapporteur
M. Stéphane ANDRIEUX	Directeur scientifique EDF R&D	Examineur
M. Jean-Louis CHABOCHE	Directeur de recherche ONERA	Examineur
M. Renaud MASSON	Ingénieur-Chercheur CEA Cadarache	Examineur
M. Jean-Claude MICHEL	Directeur de recherche CNRS LMA	Directeur de thèse
M. Pierre SUQUET	Directeur de recherche CNRS LMA	Directeur de thèse
M. Gilles THOUVENIN	Ingénieur-Chercheur EDF R&D	Invité

Thèse préparée au sein du :

Laboratoire LMA

(Mécanique et Acoustique)

Centre National de la Recherche Scientifique
CNRS - 13402 Marseille Cédex 20

en collaboration avec :

Service SESC

(Etudes et Simulation du comportement des Combustibles)
Commissariat à l'énergie atomique
Centre de Cadarache - 13108 Saint-Paul-Lez-Durance Cédex

Département MMC

(Matériaux et Mécanique des Composants)
Électricité de France
Centre des Renardières - 77818 Moret-sur-Loing Cédex

UNIVERSITÉ DE PROVENCE AIX MARSEILLE I
ED 353 École Doctorale Sciences pour l'ingénieur :
mécanique, physique, micro et nanoélectronique

THÈSE

présentée le 29 juin 2012 par

Rodrigue LARGENTON

pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ DE PROVENCE

en Mécanique des Solides

**MODÉLISATION DU COMPORTEMENT
EFFECTIF DU COMBUSTIBLE MOX**
**par une analyse micro-mécanique
en champs de transformation non uniformes**

JURY

M. Rénald BRENNER	Chargé de recherche CNRS UPMC	Rapporteur
M. Patrice CARTRAUD	Professeur Centrale Nantes	Rapporteur
M. Stéphane ANDRIEUX	Directeur scientifique EDF R&D	Examineur
M. Jean-Louis CHABOCHE	Directeur de recherche ONERA	Examineur
M. Renaud MASSON	Ingénieur-Chercheur CEA Cadarache	Examineur
M. Jean-Claude MICHEL	Directeur de recherche CNRS LMA	Directeur de thèse
M. Pierre SUQUET	Directeur de recherche CNRS LMA	Directeur de thèse
M. Gilles THOUVENIN	Ingénieur-Chercheur EDF R&D	Invité

Thèse préparée au sein du :

Laboratoire LMA

(Mécanique et Acoustique)

Centre National de la Recherche Scientifique
CNRS - 13402 Marseille Cédex 20

en collaboration avec :

Service SESC

(Etudes et Simulation du comportement des Combustibles)
Commissariat à l'énergie atomique
Centre de Cadarache - 13108 Saint-Paul-Lez-Durance Cédex

Département MMC

(Matériaux et Mécanique des Composants)
Électricité de France
Centre des Renardières - 77818 Moret-sur-Loing Cédex

« L'enseignement devrait être ainsi : celui qui le reçoit le recueille comme un don inestimable mais jamais comme une contrainte pénible »

Albert Einstein

Remerciements

Mes remerciements se tournent, dans un premier temps, vers les membres du jury : M. Jean-Louis Chaboche pour m'avoir fait l'honneur de présider mon jury de thèse mais également M. Patrice Cartraud et M. Régnald Brenner pour avoir consacré une partie de leur temps précieux à la lecture et à l'examen de ce mémoire. Je tiens également à remercier très chaleureusement Stéphane Andrieux, directeur scientifique d'Électricité de France Recherche et Développement (EdF R&D), pour m'avoir fait l'honneur de participer à mon jury de thèse. Bien avant le démarrage de cette thèse (depuis 2003) j'étais salarié et ingénieur-chercheur à EdF R&D au sein du département Matériaux et Mécanique des Composants (département MMC). EdF R&D et de surcroît Stéphane Andrieux, mais aussi Christophe Varé (chef de département MMC) ainsi que Philippe Ollar (chef de département adjoint MMC), m'ont donc permis de réaliser cette thèse dans un cadre extrêmement favorable à mon épanouissement scientifique. Je tenais donc à leur adresser toute ma reconnaissance et à les remercier très sincèrement.

En second lieu, je tiens à remercier mes encadrants de thèse et tout d'abord mes directeurs de thèse. Cette thèse s'est déroulée au sein du Laboratoire de Mécanique et d'Acoustique du CNRS de Marseille sous la direction de Jean-Claude Michel et Pierre Suquet. J'ai été extrêmement touché d'être encadré par Jean-Claude et Pierre car leurs compétences et leurs connaissances dans les domaines de la mécanique et de l'homogénéisation m'impressionnent particulièrement. Je les remercie très amicalement pour s'être toujours mis à mon niveau de néophyte et pour avoir toujours pris le temps de répondre à mes questions bien que leurs emplois du temps soient particulièrement chargés. Cette thèse est également le fruit d'une étroite collaboration avec le Laboratoire de Simulation du comportement des Combustibles du CEA de Cadarache sous l'encadrement de Renaud Masson. Je tiens à le remercier aussi très amicalement car au delà de ses connaissances en mécanique, en homogénéisation et dans le domaine du nucléaire qu'il m'a transmises, il a toujours su être à mon écoute et me diriger vers les bonnes pistes de recherche. Enfin cette thèse s'est aussi déroulée en collaboration avec le département MMC d'EdF R&D sous l'encadrement de Gilles Thouvenin. Je le remercie également très amicalement car au delà de son apport scientifique c'est en grande partie grâce à lui si j'ai pu me déplacer et aller aux différents congrès malgré mon handicap. Je garde notamment un très bon souvenir de l'Italie à ses côtés.

Je tiens à souligner les très grandes qualités humaines de ces quatre encadrants, car grâce à eux, jamais ma paraplégie n'a été un frein au déroulement de ma thèse, à mon épanouissement et à mon enrichissement personnel dans ces différents domaines scientifiques. A leurs côtés j'ai beaucoup appris et je les en remercie.

En troisième lieu, je tiens à remercier les collègues des différents laboratoires qui ont su m'aider et apporter une pierre à l'édifice de ce mémoire de thèse. Mes premiers remerciements vont tout d'abord aux collègues du CEA et plus particulièrement à Victor Blanc qui m'a soutenu tout au long de cette thèse. Non seulement j'ai pu bénéficier des différents outils qu'il a développés dans sa thèse, mais en plus à ses côtés j'ai trouvé un ami et un confident doué de très grandes qualités humaines et

d'écoute. Je tiens également à remercier Bruno Michel, Étienne Castelier, Thomas Helfer, Jean-Marie Gatt, Laureline Barbié pour leurs différents apports scientifiques, ainsi que Régine Bousquet sans qui l'organisation et le déroulement de cette thèse n'auraient pas été un franc succès. Ensuite mes remerciements vont aux collègues du CNRS. Je tiens à remercier, tout d'abord, Mme Dominique Habault ainsi que tous les membres de la direction du LMA pour m'avoir rendu accessibles les locaux. Et je veux également remercier l'ensemble des membres de l'équipe MESH. Enfin mes remerciements vont aux collègues d'EdF. Je tiens à remercier très amicalement Daniel Baron qui, au delà de cette thèse, m'a tout appris sur le combustible nucléaire. Je remercie aussi Charles Pétry, Jean-Baptiste Minne, Nicolas Prompt, Antoine Ambard, Charles Toulemonde, Sylvain Leclercq pour les différentes questions intéressantes posées au cours de cette thèse.

En quatrième et dernier lieu, je souhaite remercier, tout d'abord, mes meilleurs amis, Céline et Mathias, qui ont toujours su être là dans les moments difficiles mais également Romain et Sylvie, Gilles et Emmanuelle, Camille et Benoît ainsi que l'ensemble de mes amis du Club Handisport Aixois de natation. Enfin je tiens à remercier l'ensemble des membres de ma famille et plus particulièrement ma maman pour les longues études qu'elle m'a permis de réaliser ainsi que mon frère et ma belle-soeur qui ont toujours été à mes côtés, bien au delà de cette thèse, et notamment lorsque j'ai eu ma maladie.

Je terminerai ces remerciements en dédiant ce mémoire de thèse à mon papa qui est, à mon goût, parti trop tôt de ce monde. Merci à vous tous de m'avoir permis de m'épanouir dans un domaine que j'affectionne particulièrement, celui de la science.

Sommaire

INTRODUCTION GÉNÉRALE

Le combustible MOX : un matériau hétérogène	11
---	----

I ÉTAT DE L'ART SUR LE COMBUSTIBLE MOX ET LES MODÈLES D'HOMOGENÉISATION 15

1 Contexte et problématique industrielle	17
1.1 Quelques généralités sur le fonctionnement des Réacteurs à Eau Pressurisée	18
1.1.1 Principe et fonctionnement	18
1.1.2 Assemblage et crayon combustible	19
1.1.3 Régimes de fonctionnement	22
1.1.4 Conclusion	22
1.2 Morphologie du combustible MOX après fabrication	23
1.2.1 Principaux procédés de fabrication	23
1.2.2 Conséquences structurales et microstructurales	26
1.2.3 Conclusion	29
1.3 Problématique industrielle	29
1.3.1 Les moyens de qualification d'une nouvelle gestion combustible	29
1.3.2 Les différentes représentations numériques du comportement du crayon combustible	30
1.3.3 Conclusion	35
1.4 Bilan du chapitre	36
2 Déformations induites par l'irradiation dans le combustible MOX en service	37
2.1 Principe de la fission nucléaire et ses effets	38
2.1.1 Principe de la fission	38
2.1.2 Conclusion	40
2.2 Les mécanismes locaux au sein des phases du MOX	40
2.2.1 Densification	40
2.2.2 Gonflement solide	41
2.2.3 Restructuration	43
2.2.4 Fluage induit par l'irradiation	45
2.2.5 Conclusion	45
2.3 Problème mécanique local	46
2.4 Bilan du chapitre	47

3	Principe de la méthode de changement d'échelles et modèles d'homogénéisation en adéquation avec le comportement du combustible MOX en service	49
3.1	Motivation et méthodologie	51
3.1.1	Motivation	51
3.1.2	Méthodologie	51
3.2	La représentation	51
3.2.1	Séparation des échelles	52
3.2.2	Représentation VER	53
3.2.3	Conclusion	53
3.3	La localisation	54
3.3.1	Principe	54
3.3.2	Conditions aux limites	54
3.3.2.1	Contraintes homogènes sur le contour (CH) :	55
3.3.2.2	Déformations homogènes sur le contour (DH) :	55
3.3.2.3	Conditions aux limites périodiques (CLP) :	55
3.3.3	Le tenseur de localisation	56
3.4	Les fondements de l'homogénéisation	56
3.4.1	Déformation homogène imposée au contour	57
3.4.1.1	Cas général :	57
3.4.1.2	Cas particulier - Élasticité linéaire [BORNERT et al., 2001b] :	57
3.4.2	Contrainte homogène imposée au contour	58
3.4.2.1	Cas général :	58
3.4.2.2	Cas particulier - Élasticité linéaire [BORNERT et al., 2001b] :	58
3.4.3	Approches moyennes par phase	59
3.4.4	Conclusion - Localisation et Homogénéisation	60
3.5	Modèles d'homogénéisation en adéquation avec le comportement local du combustible MOX	61
3.5.1	Matériaux standard généralisés	61
3.5.2	Mori-Tanaka incrémental biphasé [RICAUD and MASSON, 2009]	62
3.5.2.1	Comportement retenu	62
3.5.2.2	L'aspect visco-élastique linéaire compressible non vieillissant	64
3.5.2.3	L'aspect visco-élastique linéaire compressible non vieillissant avec déformations libres	67
3.5.2.4	L'aspect visco-élastique linéaire compressible vieillissant avec déformation libre	70
3.5.2.5	Conclusion	71
3.5.3	TFA [DVORAK and BENVENISTE, 1992]	71
3.5.3.1	Principe	71
3.5.3.2	Correction de la méthode - augmentation du nombre de sous domaines	74
3.5.3.3	Correction de la méthode - tenseurs d'influence plastique	74
3.5.4	NTFA [MICHEL et al., 2000]	75
3.5.4.1	Principe	76
3.5.4.2	Identification des modes	78
3.5.4.3	Choix des modes plastiques par la transformation de Karhunen-Loève	79
3.5.4.4	Conclusion TFA - NTFA	79
3.6	Bilan du chapitre	80

II REPRÉSENTATION ET ANALYSE EN CHAMPS COMPLETS DU COMBUSTIBLE MOX

4	Représentation 3D de la microstructure - méthodologie et outils développés	91
4.1	Acquisition et traitement des images	93
4.1.1	Acquisition	93
4.1.2	Traitement	94
4.1.3	Conclusion	96
4.2	Stéréologie	96
4.2.1	La problématique	96
4.2.1.1	Biais de sous estimation introduit par les coupes :	96
4.2.1.2	Biais de sur-estimation des grandes classes :	97
4.2.1.3	Représentativité statistique :	97
4.2.2	Bibliographie des méthodes stéréologiques	98
4.2.2.1	Méthodes stéréologiques classiques :	98
4.2.2.2	Méthodes «analytiques» - modèle sphérique :	98
4.2.2.3	Méthodes «numériques»	104
4.2.2.4	Conclusion	104
4.2.3	Application de la méthode stéréologique de Saltykov	105
4.2.4	Conclusion	106
4.3	Représentation 3D de la microstructure	106
4.3.1	Représentation géométrique : algorithme et outil développés	106
4.3.2	Validation géométrique : définition et confrontation des covariances	108
4.3.2.1	Définition de la covariance	108
4.3.2.2	Confrontation covariance expérimentale et numérique	110
4.3.3	Maillage : algorithme et outil développés	113
4.3.4	Conclusion	114
4.4	Bilan du chapitre	114
5	Analyse en champs complets de composites particuliers multiphasés	115
5.1	Détermination des constituants du VER	116
5.1.1	Les microstructures étudiées	116
5.1.2	Comportement local - propriétés matériaux	117
5.1.3	Résultats	118
5.1.3.1	Résultats effectifs	118
5.1.3.2	Résultats locaux	119
5.1.4	Conclusion	120
5.2	Détermination de la taille caractéristique du VER	120
5.2.1	Les différentes réalisations	120
5.2.2	Comportement local - propriétés matériaux	121
5.2.3	Résultats	122
5.2.3.1	Résultats effectifs	122
5.2.3.2	Comportement moyen par phase et champs locaux	123
5.2.4	Conclusion	125

5.3	Bilan du chapitre	125
BILAN PARTIE 2		
	Volume Élémentaire Représentatif et comportement local retenus	129
III EXTENSION DE L'APPROCHE NTFA AUX ASPECTS 3D, DÉFORMATIONS LIBRES, VIEILLISSANT ET OPTIMISATION		
	133	
6	NTFA 3D - comportement visco-élastique linéaire incompressible	135
6.1	Principe de la méthode	136
6.1.1	Choix des modes plastiques - Transformation de <i>Karhunen-Loève</i>	136
6.1.2	Rappel des équations du modèle NTFA pour la visco-élasticité linéaire incompressible	138
6.1.3	Conclusion	138
6.2	Mise en oeuvre du modèle NTFA	138
6.2.1	VER et propriétés matériaux	138
6.2.2	Calcul des modes plastiques en 3D	139
6.2.3	Calculs des paramètres de la NTFA	142
6.2.4	Conclusion	144
6.3	Résultats - essais non vieillissants	144
6.3.1	Comportement effectif	144
6.3.1.1	Essais d'«écrouissage»	144
6.3.1.2	Essais de fluage et de relaxation	146
6.3.1.3	Conclusion	148
6.3.2	Comportement moyen par phase	148
6.3.2.1	Essais d'«écrouissage»	148
6.3.2.2	Essais de fluage et de relaxation	149
6.3.2.3	Conclusion	151
6.3.3	Champs locaux	151
6.3.3.1	Essais d'«écrouissage», fluage et relaxation	151
6.3.3.2	Conclusion	155
6.4	Bilan du chapitre	156
7	NTFA 3D avec déformations libres - comportement visco-élastique linéaire compressible vieillissant	157
7.1	Principe de la méthode	159
7.1.1	Relations constitutives pour les constituants	159
7.1.2	Champs de transformation non-uniformes	161
7.1.3	Variables réduites	161
7.1.4	Relations constitutives pour les variables réduites	162
7.1.5	Choix des modes plastiques - Transformation de <i>Karhunen-Loève</i>	163
7.1.6	Récapitulatif des équations du modèle NTFA pour la visco-élasticité linéaire compressible avec déformations libres imposées	166
7.2	Mise en oeuvre du modèle NTFA	167
7.2.1	VER et propriétés matériaux	167
7.2.2	Calcul des modes plastiques en 3D	168
7.2.3	Calculs des paramètres de la NTFA	170
7.2.4	Intégration de la loi de comportement	172

7.2.5	Conclusion	174
7.3	Résultats - essais non vieillissants	174
7.3.1	Comportement effectif	174
7.3.1.1	Essais d'«écrouissage»	174
7.3.1.2	Essais de fluage et de relaxation	176
7.3.1.3	Essai tournant	177
7.3.1.4	Conclusion	178
7.3.2	Comportement moyen par phase	179
7.3.2.1	Essais d'«écrouissage»	179
7.3.2.2	Essais de fluage et de relaxation	180
7.3.2.3	Essai tournant	181
7.3.2.4	Conclusion	182
7.3.3	Champs locaux	183
7.3.3.1	Essais d'«écrouissage»	183
7.3.3.2	Conclusion	185
7.4	Résultats - essais vieillissants d'«écrouissage»	186
7.4.1	Comportement effectif	187
7.4.2	Comportement moyen par phase	187
7.4.3	Champs locaux	188
7.4.4	Conclusion	190
7.5	Bilan du chapitre	190
8	NTFA 3D avec déformations libres - comportement visco-élastique non linéaire incompressible	193
8.1	Principe de la méthode	194
8.1.1	Potentiel de dissipation - Traitement de la non linéarité	194
8.1.2	Récapitulatif des équations du modèle NTFA pour la visco-élasticité non linéaire incompressible avec déformations libres imposées	195
8.1.3	Mise en oeuvre du modèle NTFA	195
8.2	Résultats - essais non vieillissants	196
8.2.1	Comportement effectif	196
8.2.2	Comportement moyen par phase	197
8.2.3	Champs locaux	198
8.3	Bilan du chapitre	198
9	Optimisation de l'approche NTFA - Perspectives de recherche	201
9.1	Méthode 1 - Relaxation du critère numérique <i>Karhunen-Loève</i>	202
9.1.1	Principe	202
9.1.2	Résultats - essais non vieillissants	202
9.1.2.1	Comportement effectif	203
9.1.2.2	Comportement moyen par phase	204
9.1.2.3	Champs locaux	204
9.1.2.4	Conclusion	205
9.2	Méthode 2 - Modes sur tout le VER	205
9.2.1	Principe	205
9.2.2	<i>Karhunen-Loève</i> modifiée	207
9.2.3	Résultats - essais non vieillissants	209
9.2.3.1	Comportement effectif	209

9.2.3.2	Comportement moyen par phase	210
9.2.3.3	Champs locaux	210
9.2.3.4	Conclusion	211
9.3	Bilan du chapitre	212
BILAN PARTIE 3		
Un modèle NTFA pour des composites particuliers triphasés, type MOX		215
IV POSITIONNEMENT DE L'APPROCHE NTFA PAR RAPPORT AU MODÈLE [RICAUD and MASSON, 2009]		219
10	Extension de « Mori-Tanaka incrémental »	
	[RICAUD and MASSON, 2009] aux composites triphasés [BLANC et al., 2011]	221
10.1	Comportement retenu	222
10.2	Homogénéisation d'un composite particulaire triphasé utilisant une formulation à variables internes	223
10.2.1	Comportement effectif	223
10.2.2	Comportement moyen par phase	227
10.3	Bilan du chapitre	228
11	Comparaisons théoriques et numériques des approches NTFA et « Mori-Tanaka incrémental »	229
11.1	Comparaison théorique NTFA vs «Mori-Tanaka incrémental»	230
11.1.1	NTFA - Formulation en variables internes	230
11.1.2	«Mori-Tanaka incrémental» - Formulation en variables internes	232
11.1.3	Comparaisons théoriques	232
11.2	Comparaisons numériques NTFA vs «Mori-Tanaka incrémental»	233
11.2.1	VER et propriétés matériaux	233
11.2.2	Comportement effectif	234
11.2.3	Comportement moyen par phase	236
11.3	Bilan du chapitre	237
BILAN PARTIE 4		
Orientation sur le choix de la méthode à intégrer dans un code de calcul industriel		241
CONCLUSION - PERSPECTIVES		
Intégration dans un code de calcul industriel		245
RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES		253
ANNEXES		267
A	Annexe 1 : Thermique et élasticité homogène au sein d'un MOX biphasé	269
A.1	Données amont aux études	270
A.1.1	Choix des microstructures	270
A.1.2	Facteurs d'hétérogénéités	270

A.1.3	Conditions aux limites périodiques	272
A.1.4	Conclusion	272
A.2	Analyse de l'aspect homogène ou hétérogène	273
A.2.1	Etude thermique linéaire avec sources	273
A.2.2	Etude élastique linéaire	285
A.3	Conclusion	294
B	Annexe 2 : Principe d'Eshelby et quelques modèles d'homogénéisation en élasticité linéaire	295
B.1	Principe d'Eshelby	296
B.1.1	Problème d'Eshelby homogène [ESHELBY, 1957]	296
B.1.2	Problème d'Eshelby inhomogène [ESHELBY, 1961]	298
B.2	Schéma des distributions diluées	299
B.3	Schéma auto-cohérent [KRÖNER, 1958], [HILL, 1965]	300
B.4	Schéma de Mori-Tanaka [MORI and TANAKA, 1973]	300
B.5	Encadrement -Bornes	301
B.5.1	Bornes de Voigt et de Reuss [PAUL, 1960]	301
B.5.2	Bornes de Hashin et Shtrikman [HASHIN and SHTRIKMAN, 1963]	303
B.5.3	Bornes du troisième ordre	307
B.6	Conclusion	307

INTRODUCTION GÉNÉRALE

Le combustible MOX : un matériau hétérogène

L'industrie nucléaire civile est la principale source d'électricité en France, avec près de 80 % de la production nationale. Les avantages des technologies basées sur l'utilisation de combustibles à base de dioxyde d'uranium (UO_2) ne sont plus à démontrer. Cependant depuis 1987, un nouveau type de combustible a été introduit dans 20 REP 900 MW_e ¹ français : le *MOX*, acronyme de Mixed Oxide car il combine de l'oxyde de plutonium et de l'oxyde d'uranium.

Ce combustible permet d'utiliser le plutonium issu de diverses sources (notamment de la fertilisation en REP de l'uranium plus précisément de l'isotope U_{238}) dans le but de produire de l'énergie, idéalement dans les mêmes réacteurs que ceux qui utilisent actuellement le combustible UO_2 . Cependant, diverses caractéristiques du *MOX* font que son comportement sous irradiation diffère de celui du dioxyde d'uranium.

L'introduction de plutonium contribue fortement à hétérogénéiser le matériau. Lors de la fabrication du combustible *MOX*, le mélange des poudres de dioxyde d'uranium appauvri (UO_2) et de dioxyde de plutonium (PuO_2) peuvent induire des inhomogénéités de répartition des différents composés, à des échelles de taille très différentes.

Ces hétérogénéités sont tout particulièrement visibles dans le *MOX* MIMAS², qui sont actuellement les *MOX* les plus utilisés sous irradiation en France. Sur des champs d'un millimètre carré, et avec une définition spatiale de l'ordre du micron, on distingue souvent visuellement deux ou trois phases, correspondant à des teneurs massiques en plutonium différentes. Il a été généralement remarqué que ces phases avaient des caractéristiques propres distinctes (teneur en plutonium massique différente donc teneur en plutonium massique fissile³ différente mais aussi taille de grain, porosité...). Du fait de la teneur en matière fissile différente dans chacune des phases, celles-ci évoluent différemment sous irradiation, tant du point de vue mécanique que du point de vue chimique ou structurel.

Or comme le combustible UO_2 , le combustible *MOX* est empilé sous forme de pastilles cylindriques dans des tubes métalliques, l'ensemble constituant le crayon combustible. En fonctionnement normal (en service), l'intégrité de ces crayons, dit «moxés», est établie à l'aide d'irradiations expérimentales et, à l'échelle du cœur du réacteur, à l'aide de simulations numériques thermomécaniques. Compte tenu du grand nombre de crayons à modéliser dans un REP 900 MW_e (total : 41448 crayons, en simulation 5000 à 6000 crayons du fait de la symétrie du cœur), la réponse thermomécanique de ces crayons est, en général, approchée par une description «1D_{1/2}» (axisymétrie autour de l'axe z du crayon, découpage en tranches axiales dans les codes de calculs existants).

La problématique industrielle est que dans ces codes les lois de comportement associées au combustible *MOX* reposent sur une démarche phénoménologique fondée par une réponse macroscopique de l'échantillon à une sollicitation. Ces lois tiennent rarement compte de la microstructure du combustible *MOX*. L'évolution retenue pour les futures gestions combustibles avec du *MOX* (évolution du vecteur isotopique du plutonium, utilisation du procédé de fabrication par voie sèche) nécessite de progresser dans l'identification des lois de comportement et dans la nature des couplages. Les modèles macroscopiques, exploités par les codes, ont besoin d'être alimentés de façon pertinente en propriétés effectives. D'autre part, à travers ces modèles, il est également intéressant de disposer des informations sur les champs locaux afin d'établir des couplages entre les mécanismes (couplage mécanique physico-chimie), des critères d'endommagement (fissures intra-phase)...

¹Réacteur à Eau Pressurisée 900 Méga Watts électriques

²Micronyse MASTer Blend

³Les isotopes du plutonium fissiles dans un REP (domaine thermalisé) sont essentiellement : Pu_{239} et Pu_{241}

Les défis scientifiques, posés par les combustibles MOX, se situent sur plusieurs plans :

1. Les hétérogénéités se situent à plusieurs niveaux : des amas UO_2 et $(U - Pu)O_2$ de tailles, de morphologies et de fractions volumiques différentes au sein d'une matrice $(U - Pu)O_2$.
2. Dans chacune de ces phases, on trouve des porosités et des bulles de gaz pressurisées de tailles, de morphologies et de fractions volumiques différentes.
3. Les fuseaux granulaires des inclusions respectives sont continus.

La différence d'échelle entre la pastille MOX (échelle millimétrique) et les inclusions (échelle de l'ordre de la centaine de microns pour les amas $(U - Pu)O_2$ ou UO_2 et de l'ordre du micron pour les bulles de gaz pressurisées), ainsi que la complexité de la microstructure (distribution aléatoire des inclusions de tailles différentes), ne permettent pas de représenter explicitement la géométrie de ce milieu hétérogène dans un calcul par éléments finis de la pastille. Les approches multi-échelles constituent une solution pour remonter ou extrapoler ces propriétés effectives. Elle fournit, d'une part, une estimation du comportement effectif de la structure en tenant compte des phénomènes intervenant à l'échelle inférieure sans avoir à la représenter explicitement et, d'autre part, la possibilité de post-traiter les champs mécaniques induits au sein de chaque constituant afin d'analyser leur tenue mécanique.

L'objectif de la thèse est donc de développer une modélisation par changement d'échelles permettant d'estimer plus précisément la distribution des champs thermo-mécaniques locaux au sein de ce type de milieu hétérogène.

Dans le cadre de cette thèse nous avons choisi une méthode d'analyse par champs de transformation non uniformes (abrégé anglais NTFA (Cf. ref. [MICHEL and SUQUET, 2003])), adaptée au problème du changement d'échelles en présence d'un couplage entre effets élastiques et effets dissipatifs. Pour cette large classe de comportements, incluant les comportements dépendants du temps, il est connu que la description exacte du comportement effectif du milieu hétérogène nécessite la considération d'une infinité de variables internes. L'objectif est ici de construire des modèles **réduits** facilement exploitables par les codes de calculs industriels et intégrant aussi précisément que possible l'influence des variables internes locales dans le comportement effectif global du combustible MOX. Les modèles issus de la NTFA se nourrissent (identification des modes) de calculs de microstructure. L'intérêt de ces modèles a été montré dans le cadre de composites non linéaires à renforts de fibres longues (Cf. ref. [MICHEL and SUQUET, 2004, MICHEL and SUQUET, 2007]). Toujours en deux dimensions, la thèse de Roussette (Cf. ref. [ROUSETTE, 2005]) a mis en évidence leur adéquation à la problématique des combustibles MOX biphasés pour un fonctionnement en transitoire de puissance (comportement local des constituants : poro elastoviscoplasticité).

Nous souhaitons donc ici nous intéresser au développement d'un modèle NTFA basé sur des microstructures particulières triphasées et tridimensionnelles, représentatives du combustible MOX, pour un fonctionnement en service (comportement local des constituants : visco-élastique vieillissant avec déformations libres), développement pour lequel des études théoriques (les aspects tridimensionnel, déformation libre et vieillissant sont des axes d'étude qui n'ont jamais été abordés jusqu'à présent) et numériques seront nécessaires (choix de la décomposition modale, réduction du nombre de modes, sensibilité à la microstructure considérée, à l'essai mécanique, au chargement...)

Dans le cadre de cette thèse, la démarche scientifique que nous allons suivre se décompose en quatre parties :

1. **Première partie : réaliser un état de l'art sur le combustible MOX**, afin de mieux comprendre les enjeux associés au développement d'une modélisation par changement d'échelles. Dans le premier chapitre, le contexte et la problématique industrielle, associé à ce combustible, seront rappelés. Nous y donnerons quelques généralités sur le principe de fonctionnement d'un REP 900 MW_e, puis nous y détaillerons les principaux procédés de fabrication des combustibles MOX en donnant un aperçu de la morphologie des différents types de combustible et les conséquences structurales et microstructurales. L'objectif de ce chapitre est de montrer que la compréhension du comportement du combustible MOX sous irradiation passe par la construction de lois macroscopiques faisant intervenir explicitement le comportement de chaque phase. Une telle approche nécessite la connaissance des mécanismes locaux au sein des phases du combustible MOX. Ces mécanismes seront donc exposés dans le deuxième chapitre. Dans le troisième chapitre, la méthodologie de l'approche par changement d'échelles, à mettre en place en mécanique des milieux continus, sera abordée. L'objectif de ce chapitre est d'exposer les trois étapes majeures à réaliser pour construire un modèle d'homogénéisation :

- (a) représentation,
- (b) localisation,
- (c) homogénéisation,

ainsi que de rappeler brièvement les fondements de l'homogénéisation. Le deuxième objectif de ce chapitre est de présenter les modèles d'homogénéisation susceptibles d'être en adéquation avec le comportement local retenu au chapitre 2 et avec le cahier des charges du modèle fixé au chapitre 1. Les modèles d'homogénéisation qui suscitent notre intérêt, à savoir NFTA (Cf. [MICHEL and SUQUET, 2003]) et Mori-Tanaka incrémental (Cf. [RICAUD and MASSON, 2009]), seront donc analysés dans ce chapitre. Cette analyse permettra d'identifier les développements à réaliser sur ces approches pour les adapter au comportement du combustible MOX (composite 3D triphasé dans un régime de fonctionnement normal). Ces travaux seront ensuite réalisés dans les parties deux, trois et quatre de ce mémoire de thèse. Les étapes (a) et (b) seront décrites dans la deuxième partie tandis que l'étape (c) correspondra aux parties trois et quatre.

2. **Deuxième partie : représenter et analyser en champs complets des composites multiphasés particuliers, type MOX, afin de déterminer le Volume Élémentaire Représentatif (VER) retenu et le comportement local de chacune des phases considéré pour les études NTFA (partie 3)**. Dans le quatrième chapitre, il s'agira, tout d'abord, de présenter l'acquisition et le traitement (segmentation) des images expérimentales bi-dimensionnelles (2D) d'une microstructure représentative d'un combustible MOX. Pour cela nous exploiterons des outils existants développés par *Oudinet* (Cf. [OUDINET, 2003]). Dans un deuxième temps, nous réaliserons une étude bibliographique sur les méthodes stéréologiques qui permettent le remontage des informations bi-dimensionnelles (obtenues sur les images expérimentales 2D précédentes et segmentées) en tri-dimensionnelles. Puis, nous mettrons en application la méthode stéréologique sélectionnée (Cf. [SALTYKOV, 1967]). Enfin, dans un troisième temps, nous exposerons les deux outils numériques développés dans le cadre de cette thèse. Il s'agira, tout d'abord, de développer un outil de génération de microstructures particulières aléatoires 3D où la périodicité géométrique est assurée (par exemple des inclusions, nommées amas UO_2 et $(U - Pu)O_2$ de tailles différentes, distribuées aléatoirement dans une matrice $(U - Pu)O_2$). Une microstructure référence sera ensuite générée afin de la caractériser. Ce travail sera réalisé à l'aide de l'outil

de caractérisation morphologique, nommé la covariance. Enfin, nous présenterons l’outil développé pour discrétiser (maillage aux éléments finis) périodiquement cette géométrie. Dans le cinquième chapitre, plusieurs réalisations de microstructures aléatoires, représentatives du combustible MOX, seront soumises à des analyses en champs complets. Ces analyses permettront, non seulement d’établir les résultats de référence pour le développement de la méthode NTFA (partie 3), mais aussi et surtout de déterminer le VER (dimension, phases retenus) retenu pour ces études.

3. **Troisième partie : étendre l’approche NTFA aux aspects 3D, déformations libres, vieillissants et optimisation de celle-ci.** Dans cette partie, le comportement local établi au deuxième chapitre et retenu au sein de chaque phase du VER (composite particulière triphasé 3D) sera progressivement pris en compte dans les équations constitutives du modèle NTFA. Du chapitre six à huit, nous présenterons les différentes extensions apportées à l’approche NTFA dans le cadre de cette thèse :

- Extension de la NTFA au **3D** pour un comportement local visco-élastique linéaire incompressible (chapitre six).
- Extension de la NTFA au **3D** et aux **déformations libres** pour un comportement local visco-élastique linéaire **compressible et vieillissant** (chapitre sept)
- Extension de la NTFA au **3D** et aux **déformations libres** pour un comportement local visco-élastique **non linéaire** incompressible (chapitre huit).

Dans chaque chapitre, nous présenterons, soit succinctement soit de façon détaillée, les équations constitutives du modèle (principe de la méthode et choix des modes plastiques), la mise en oeuvre de celui-ci (calcul des modes plastiques, calculs des paramètres de la NTFA et intégration de la loi de comportement) et les résultats de celui-ci par rapport à des calculs de référence en champs complets. Ces analyses seront menées aussi bien sur le comportement effectif que sur les champs locaux et pour différents types d’essais (essais à vitesse de déformation et à direction de contrainte imposées, de fluage, de relaxation et tournant). Les études de sensibilité à la microstructure considérée seront surtout abordées dans le sixième et septième chapitre, tandis que les études de vieillissement seront exposées dans le septième chapitre. Les méthodes d’optimisation du modèle NTFA (réduction du nombre de modes), proposées et développées dans le cadre de cette thèse, et les résultats effectifs et locaux de ces modèles optimisés seront abordées dans le neuvième chapitre.

4. **Quatrième partie : positionner l’approche NTFA par rapport au modèle Mori-Tanaka incrémental biphasé (Cf. [RICAUD and MASSON, 2009]) et par rapport au modèle Mori-Tanaka incrémental triphasé développé (Cf. [BLANC et al., 2011]) dans cette thèse.** Dans cette dernière partie et notamment à travers le dixième chapitre, nous présenterons les extensions apportées au modèle d’homogénéisation [RICAUD and MASSON, 2009], pour modéliser le comportement effectif du combustible MOX ADU : il s’agit d’une extension du modèle semi-analytique « Mori-Tanaka incrémental » biphasé (Cf. [RICAUD and MASSON, 2009]) au triphasé (Cf. [BLANC et al., 2011]). Dès lors, dans le onzième chapitre, nous positionnerons notre approche NTFA, développée dans la partie trois, par rapport à ces deux méthodes d’homogénéisation semi-analytiques. Une analyse théorique y sera menée, ainsi que des comparaisons numériques par rapport à des calculs de référence en champs complets. Ces méthodes d’homogénéisation (Mori-Tanaka incrémental et NTFA) sont très rapides en temps de calcul et donc très intéressantes à intégrer dans un code de calcul industriel. L’objectif de ce chapitre est donc d’orienter le choix de l’utilisateur. Nous verrons que ce choix sera souvent gouverné par le degré de précision et d’informations souhaitées mais également par le temps de travail amont disponible.

Première partie

ÉTAT DE L'ART SUR LE COMBUSTIBLE MOX ET LES MODÈLES D'HOMOGENÉISATION

Chapitre 1

Contexte et problématique industrielle

Objet du chapitre :

L'objet de ce chapitre est de décrire le contexte de l'étude ainsi que la problématique industrielle associée au combustible *MOX*. Le premier paragraphe donne les notions essentielles concernant le fonctionnement des réacteurs à eau pressurisée afin de fixer le cadre de nos travaux de thèse. Les principaux procédés de fabrication du combustible *MOX* ainsi que les conséquences structurales et microstructurales sont présentés dans le deuxième paragraphe. Le troisième paragraphe présente la problématique industrielle associée au combustible *MOX*. Il s'agit de montrer que la compréhension du comportement du combustible *MOX* sous irradiation passe par la construction de lois macroscopiques faisant intervenir les effets microstructuraux.

Sommaire

1.1	Quelques généralités sur le fonctionnement des Réacteurs à Eau Pressurisée	18
1.1.1	Principe et fonctionnement	18
1.1.2	Assemblage et crayon combustible	19
1.1.3	Régimes de fonctionnement	22
1.1.4	Conclusion	22
1.2	Morphologie du combustible MOX après fabrication	23
1.2.1	Principaux procédés de fabrication	23
1.2.2	Conséquences structurales et microstructurales	26
1.2.3	Conclusion	29
1.3	Problématique industrielle	29
1.3.1	Les moyens de qualification d'une nouvelle gestion combustible	29
1.3.2	Les différentes représentations numériques du comportement du crayon combustible	30
1.3.3	Conclusion	35
1.4	Bilan du chapitre	36

1.1 Quelques généralités sur le fonctionnement des Réacteurs à Eau Pressurisée

Les principales généralités, exposées ci-dessous de manière succincte, sont issues des références : [BAILLY et al., 1996], [BARON, 2002] et [BARON and BOUFFIOUX, 2002]. Nous renvoyons donc le lecteur à ces références pour plus de détails.

1.1.1 Principe et fonctionnement

Les réacteurs de puissance construits en France sont issus de la filière des **Réacteurs à Eau Pressurisée (REP)**. Actuellement, 58 réacteurs sont en fonctionnement, 34 réacteurs ont une puissance de 900 MW_e , 20 réacteurs une puissance de 1300 MW_e et 4 réacteurs de 1450 MW_e . Ces réacteurs sont à l'origine d'environ 80 % de la production d'électricité en France. Sur les 34 réacteurs de 900 MW_e , 20 contiennent du combustible *MOX* (environ un tiers du cœur du réacteur est chargé en combustible *MOX*, le reste étant du combustible *UO₂*).

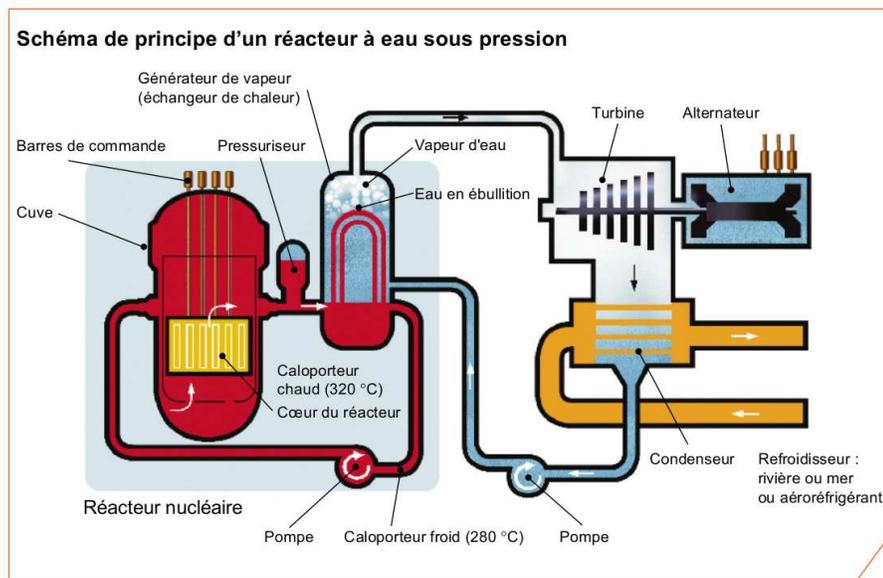


FIG. 1.1: Schéma de principe d'un réacteur à eau pressurisée. Figure tirée de <http://www.cea.fr/>

Le principe de fonctionnement d'un REP est illustré sur la figure 1.1. Dans les REP, l'eau ordinaire du **circuit primaire**, pressurisée à 15,5 MPa sert à la fois à extraire (rôle du **caloporteur**) l'énergie produite dans le **combustible (cœur du réacteur)** et à ralentir les neutrons (rôle du **modérateur**). En effet, le faible enrichissement du combustible en noyaux fissiles implique que les neutrons rapides issus de la fission doivent, pour plus d'efficacité, être «thermalisés¹».

En fonctionnement normal, le fluide caloporteur rentre dans ce circuit à une température de 285°C et en ressort à une température de 320°C environ. La chaleur ainsi récupérée est transmise au **circuit secondaire** au niveau d'un échangeur de chaleur. L'eau du circuit secondaire y est vaporisée. Ceci permet l'activation de turbines qui produisent l'électricité. L'eau du circuit secondaire étant elle-même refroidie par un circuit tertiaire.

¹terme neutronique pour dire que l'énergie des neutrons (issue de la fission) est réduite de 2 MeV (domaine d'énergie dit rapide) à une énergie inférieure à 1/40 eV (domaine d'énergie dit thermalisé)

1.1.2 Assemblage et crayon combustible

L'assemblage :

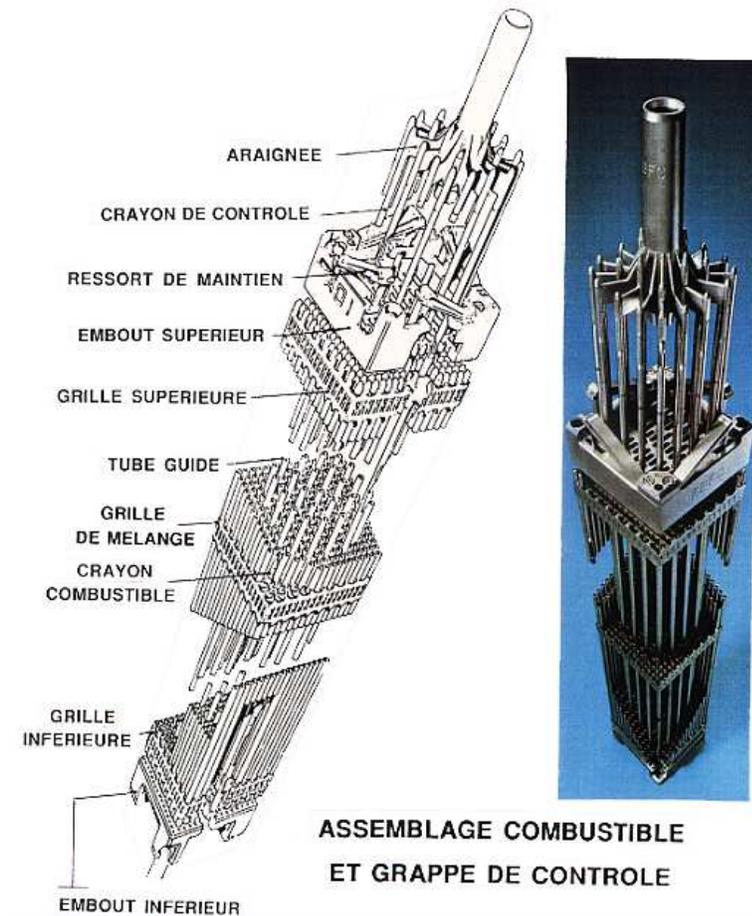


FIG. 1.2: L'assemblage combustible. Images tirées de la référence [BARON and BOUFFIOUX, 2002]

Le coeur d'un REP est constitué d'un ensemble d'assemblages combustible. L'assemblage représenté sur la figure 1.2 est un réseau à pas carré, 17 par 17, contenant 264 crayons combustibles, 24 tubes guides servant à introduire des barres de commande 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. Ces grilles étaient originellement conçues en inconel. Dans les nouvelles conceptions, elles sont en alliage de zirconium, moins neutrophage.

Les crayons sont maintenus, «flotants», dans chaque alvéole entre deux bossettes et un ressort en Inconel. Des languettes inclinées, appelées ailettes de mélange, garantissent une bonne homogénéisation du débit du fluide réfrigérant traversant le faisceau de crayons du bas vers le haut à une vitesse moyenne de 4.8 m/s . Comme nous l'avons vu au paragraphe 1.1.1, la température du réfrigérant est de l'ordre de 285°C en entrée de l'assemblage et 320°C à la sortie.

La plaque de pied de l'assemblage permet son maintien et son positionnement lors des opérations de chargement par encastrement sur des tétons ménagés sur la plaque inférieure du coeur. La plaque de tête est munie de ressorts qui s'opposent à la force ascensionnelle du réfrigérant en prenant appui sur la plaque supérieure du coeur. Des lumières sont aménagées pour permettre le passage des grappes de commande du réacteur et du réfrigérant.

Un réacteur d'une puissance de $900M_e$ contient 157 assemblages combustible, soit plus de 41000 crayons.

Le crayon :

Le **crayon combustible**, illustré par la figure 1.3, est un ensemble cylindrique de longueur 3,85 m.

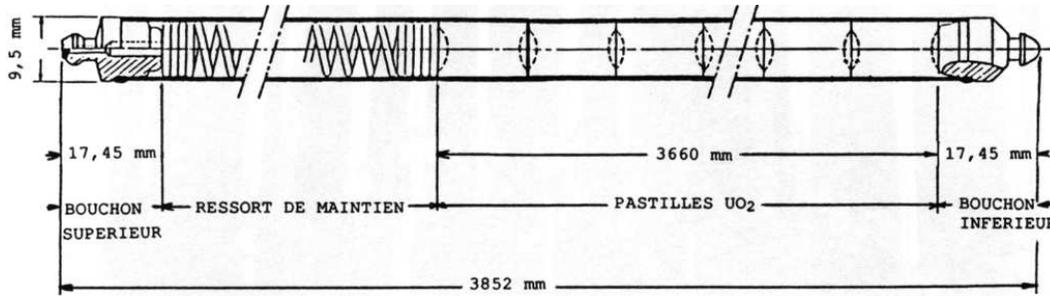


FIG. 1.3: Dimensions caractéristiques d'un crayon combustible utilisé dans les REP. Figure tirée de la référence [BARON and BOUFFIOUX, 2002]

Celui-ci est constitué :

1. D'un **tube de gainage** en alliage de zirconium². Son diamètre externe est de 9,50 mm et son épaisseur est de 0,570 mm.
2. D'un empilement de **pastilles** (environ 265, (Cf. paragraphe 1.1.2)), d'une longueur totale de 3,60 m. Cet empilement est appelé la **colonne combustible**.
3. D'une **chambre d'expansion** supérieure nécessaire à l'accommodation des gaz de fission et au gonflement axial de la colonne combustible par les produits de fission. Dans le cas des crayons dits «moxés», on trouve également une chambre d'expansion inférieure, puisque ce type de combustible relâche une quantité de gaz de fission largement supérieure à celle des combustibles UO_2 .
4. D'un **ressort** en inconel, garantissant le maintien de la colonne combustible pendant le transport de l'usine vers la centrale. On doit en effet éviter tout espace interpastille pendant l'irradiation (flambage local du gainage).
5. De **deux bouchons** d'extrémité en alliage de zirconium, soudés, assurant l'étanchéité et l'intégrité de l'ensemble. Le bouchon supérieur est profilé pour faciliter la manutention lors d'éventuelles opérations de réparation de l'assemblage.

Avant fermeture, le crayon est pressurisé avec de l'hélium entre 1,5 MPa et 3 MPa additionné de 0,1 MPa d'air. La pression de remplissage est optimisée pour d'une part contrebalancer la pression extérieure du réfrigérant en début de vie et d'autre part éviter une trop forte augmentation de la pression interne pendant l'irradiation, l'arrivée des gaz de fission et la réduction des volumes libres contribuant à une augmentation progressive de celle-ci.

²Ce matériau a été choisi dans le cadre des réacteurs à eau pressurisée pour son bon comportement mécanique, chimique, ainsi que sa bonne perméabilité neutronique.

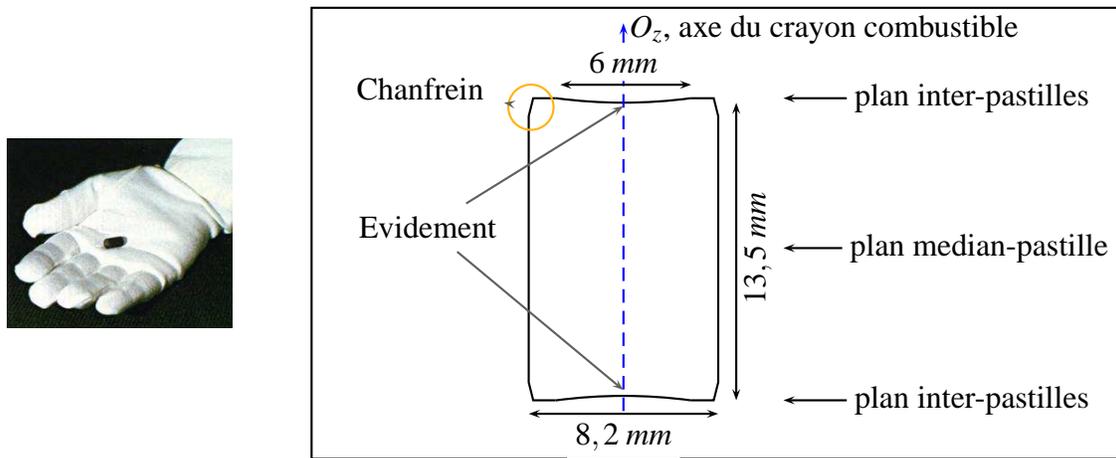
La pastille :

FIG. 1.4: Dimensions caractéristiques des pastilles combustible utilisées dans les REP.

Le combustible se présente sous forme de **pastilles cylindriques**, soit du **dioxyde d'uranium** (UO_2) légèrement enrichi (inférieur à 5 %) en noyaux fissiles ($^{235}_{92}U$), soit dans le cadre du recyclage du plutonium récupéré au retraitement des pastilles UO_2 irradiées, d'un mélange de dioxyde d'uranium et de dioxyde de plutonium (PuO_2) jusqu'à des teneurs moyennes en plutonium (pastille), pour ce dernier, de 12 % en masse. Ce combustible se nomme le combustible **MOX** (acronyme anglais : Mixed OXYde). Le plutonium, dans ce type de combustible, provient du retraitement des pastilles UO_2 , irradiées 3 à 4 cycles (Un cycle d'irradiation représentant une période d'environ un an). Pour comprendre l'origine de ce plutonium (élément artificiel), il faut savoir que les pastilles de dioxyde d'uranium irradiées sont également constituées en majorité par l'isotope $^{238}_{92}U$ qui est fertile. Ainsi sous irradiation, par capture neutronique dans le domaine épithermique³ et décroissance β^- , cet isotope de l'uranium se transforme en $^{239}_{94}Pu$, élément qui est fissile et donc source d'énergie nucléaire comme l' $^{235}_{92}U$. Ainsi, au terme des quatre cycles d'irradiation, dans les pastilles de dioxyde d'uranium, l' $^{235}_{92}U$ a été consommé en quasi totalité, tandis que le $^{239}_{94}Pu$ a été partiellement consommé. Il est donc intéressant de retraiter ces pastilles de dioxyde d'uranium pour récupérer cette isotope du plutonium. D'autres isotopes du plutonium, créés sous irradiation, sont également intéressants, comme le $^{241}_{94}Pu$ (isotope également fissile dans un REP).

Mais, il est important de noter, que plus le temps d'irradiation d'une pastille de dioxyde d'uranium est long, plus les isotopes fissiles et impaires du plutonium ($^{239}_{94}Pu$ et $^{241}_{94}Pu$) sont consommés, tandis que des isotopes paires du plutonium ($^{238}_{94}Pu$, $^{240}_{94}Pu$, $^{242}_{94}Pu$) augmentent en masse sous irradiation. Or, ces isotopes sont des «polluants» neutroniques (ils absorbent les neutrons en créant, par décroissance, des éléments non fissiles ou non fertiles : on a donc une dégradation de la réaction en chaîne), particulièrement dans le cadre des réacteurs à eau pressurisée. En conséquence, lors de la phase de retraitement, suivant le temps de séjour des pastilles de dioxyde d'uranium en réacteur, les industriels peuvent se retrouver avec un vecteur isotopique du plutonium plus ou moins dégradé (plus la teneur massique en éléments fissiles, $^{239}_{94}Pu$ et $^{241}_{94}Pu$, sera élevée plus le vecteur isotopique sera de bonne

³Domaine d'énergie neutronique situé entre le domaine dit rapide et celui dit thermalisé. Nous avons vu que les neutrons qui sont émis lors d'une fission, avec une énergie cinétique de 2 MeV (domaine d'énergie dit rapide), doivent être ralentis (rôle du modérateur) et avoir une énergie cinétique inférieure à 1/40 eV (domaine dit thermalisé) pour pouvoir fissionner l' $^{235}_{92}U$. Le passage entre ces deux domaines d'énergie correspond au domaine épithermique. Or, dans ce domaine d'énergie, il s'avère que la section efficace (terme neutronique pour décrire la probabilité d'absorption : unité le barn) de capture d'un neutron par l' $^{238}_{92}U$ est très élevée.

qualité et inversement sinon). En effet, à ce jour, les industriels ne sont pas capables de séparer les différents isotopes du plutonium (la masse de chaque isotope est trop proche). Ainsi, à la fabrication, l'enrichissement moyen des combustibles MOX en plutonium va donc dépendre fortement de la qualité du vecteur isotopique du plutonium. La figure 1.4 donne les caractéristiques géométriques principales des **pastilles** nucléaires MOX d'un REP. Celles-ci présentent un **évidement** hémisphérique à leurs extrémités. Son but est d'accommoder les déformations de la pastille. Les pastilles sont également **chanfreinées** pour faciliter leur introduction dans le tube de gainage. On remarque que la géométrie est telle que le crayon, constitué de la colonne combustible, présente un axe de symétrie qui sera identifié par l'axe O_z des coordonnées cylindriques.

Dans le cadre de nos travaux de thèse, l'ensemble de nos études porteront donc sur **les pastilles MOX**. Dans le paragraphe 1.2, nous verrons pour quelles raisons nous nous intéressons à ce combustible.

1.1.3 Régimes de fonctionnement

Dans les réacteurs à eau pressurisée français, on peut trouver deux types de conditions de fonctionnement :

1. le **fonctionnement normal** ;
2. le **fonctionnement incidentel**.

Le fonctionnement incidentel est envisagé dans le cadre des études de sûreté. Ce fonctionnement correspond à une variation de puissance de grande amplitude, par exemple des **transitoires de puissance dits de classe II**. Dans le cadre de nos travaux thèse, nous ne nous intéresserons pas à ce type de fonctionnement. Nous allons donc nous intéresser au fonctionnement normal du réacteur. Ce fonctionnement est caractérisé par une puissance générée variant peu au cours du temps. Il est également nommé **fonctionnement en base**, **fonctionnement en service** ou **fonctionnement nominal**.

Les conditions de fonctionnement sont, en régime nominal :

1. la pression du caloporteur (eau ordinaire) : $15,5 \text{ MPa}$;
2. la température du caloporteur, qui varie de 285°C à l'entrée du coeur à 323°C en sortie ;
3. la température externe de gaine qui se situe au maximum à 350°C .

La génération de puissance dans le crayon combustible sera caractérisée par une **puissance linéique** notée P_{lin} . La puissance linéique est la puissance générée par unité de longueur de crayon combustible. Cette puissance varie, axialement, le long du crayon considéré sous l'effet des conditions neutroniques locales. Dans les réacteurs de puissance, en **condition de fonctionnement nominal**, la puissance P_{lin} , dite alors **nominale**, est de l'ordre de 200 W.cm^{-1} .

1.1.4 Conclusion

Le paragraphe 1.1 nous a permis de situer le cadre de nos travaux thèse. Dans la suite du document, nous étudierons le **combustible MOX** qui est soumis à des **sollicitations** représentatives des conditions de **fonctionnement normal** d'un REP. L'intérêt porté au combustible MOX est justifié dans le paragraphe 1.2.

1.2 Morphologie du combustible MOX après fabrication

Nous donnons ci-après un aperçu de la morphologie des différents types de combustible *MOX* à l'issue de la fabrication.

1.2.1 Principaux procédés de fabrication

Aperçu global de la fabrication

Comme nous avons vu au paragraphe 1.1, le combustible nucléaire (*MOX* ou UO_2) est introduit dans les coeurs des REP par l'intermédiaire des assemblages, eux mêmes constitués des crayons combustibles contenant les pastilles *MOX* ou UO_2 .

Il est actuellement impossible de constituer un coeur REP 900 MW_e intégralement alimenté en *MOX* (ceci pour des raisons de sûreté : le *MOX* ayant une réactivité accrue). Le combustible *MOX* doit obligatoirement cohabiter avec le combustible UO_2 . La figure 1.5, qui montre le plan de chargement d'un coeur REP 900 MW_e dit «moxé», illustre ces propos. Il s'agit d'une coupe transversale du coeur où chaque carré représente un assemblage (total : 157 assemblages dont 48 assemblages «moxés»). Les assemblages «moxés» étant marqués par la lettre *M*.

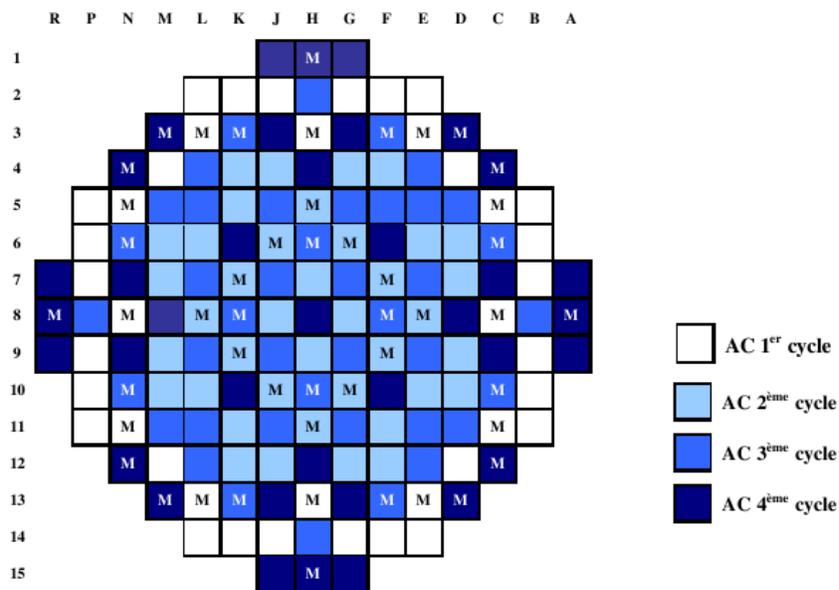


FIG. 1.5: Plan de chargement d'un réacteur à eau pressurisée 900 MW_e «moxé» (Coupe $R\theta$).

Le comportement neutronique différent des combustibles *MOX* nécessite un aménagement de la transition entre les assemblages *MOX* et UO_2 . En effet, dans un assemblage *MOX*, les crayons n'ont pas tous la même teneur en plutonium ((Cf. figure 1.6) qui montre une coupe transversale d'un assemblage «moxé»), chaque carré représente ici un crayon combustible «moxé»). C'est le rôle du zonage des assemblages *MOX*, où les crayons basse teneur sont disposés en coin (continuité du flux neutronique avec les crayons UO_2 voisins), les crayons moyenne teneur sur les deux rangés du bord et les crayons haute teneur partout ailleurs dans l'assemblage [GUERIN et al., 1997]. Les procédés de fabrication ont donc pour objectif de contrôler la teneur finale en plutonium des pastilles, mais ils

induisent inévitablement des caractéristiques microstructurales propres.

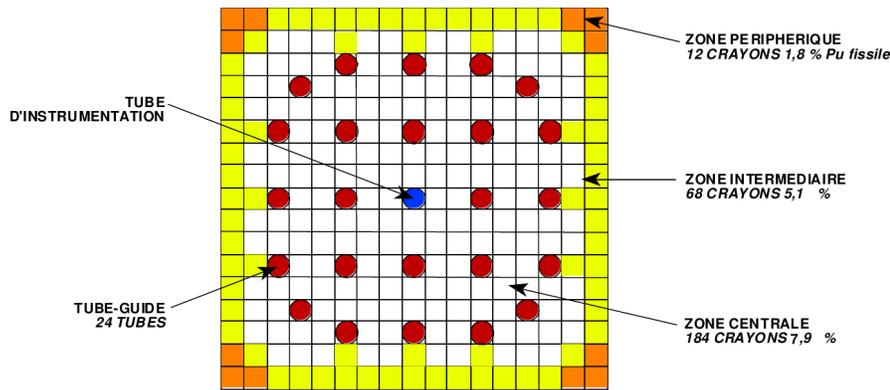


FIG. 1.6: Plan de chargement d'un assemblage «moxé» (Coupe $R\theta$).

Les principales différences induites dans les microstructures sont la conséquence de la méthode de mélange de la poudre d'oxyde de plutonium avec la poudre d'oxyde d'uranium. **L'obtention directe** de la teneur finale est recherchée lorsque le mélange est fait en une seule étape ; a contrario, le procédé à deux étapes passe par **l'obtention d'un mélange dit «mélange-mère»**, à teneur élevée en plutonium, qui sera dilué une seconde fois avec de la poudre d'oxyde d'uranium appauvri.

Obtention directe de la teneur finale

C'est la méthode retenue par exemple pour le procédé COCA (CObroyage CADarache, dont l'utilisation en réacteur est abandonnée depuis 1996) ou pour le procédé SBR (Short Binderless Route) [WHITE et al., 2001]. Les poudres de dioxyde d'uranium et de dioxyde de plutonium sont versées ensemble dans des proportions correspondant à la teneur finale visée en plutonium. Elles sont ensuite cobroyées dans un broyeur à boulet (procédé COCA) ou dans un broyeur spécifique à haute énergie (procédé SBR).

Un ajout de porogène, de lubrifiant, de chamotte (poudre constituée en partie de morceaux de pastilles frittées rebutées) ou d'additif chimique est classiquement fait à des stades divers du cobroyage. Dans le cas du procédé SBR, la poudre subit en fin de traitement une sphéroïdisation, afin d'améliorer sa coulabilité.

Passage par un mélange mère intermédiaire

Cette méthode a été préférée pour le procédé OCOM (Optimized COMilling), et surtout pour le procédé MIMAS (MICronized MASTer blend) qui fournit les crayons utilisés dans les REP du parc français (technique actuellement employée par l'usine française de fabrication des combustibles MOX : usine MELOX). Le mélange des poudres de dioxyde d'uranium et de dioxyde de plutonium se fait en deux étapes distinctes [GOTTA, 1996], [WHITE et al., 2001].

Les poudres des deux oxydes sont versées ensemble et cobroyées, mais les proportions sont telles que la teneur en plutonium est plusieurs fois supérieure à celle visée au final. La poudre ainsi obtenue

est appelée «**mélange-mère**», de teneur en plutonium comprise entre 22 et 28 %. Une sélection **granulométrique** des constituants de cette poudre (les inclusions nommées amas plutonifères $((U - Pu)O_2))$ peut être faite par exemple par **tamissage ou tamissage-forçage**.

Le «mélange-mère» est ensuite **dilué** (étape appelée littéralement «dilution») dans de la poudre de dioxyde d'uranium, de manière à obtenir la concentration finale en plutonium visée. Ce mélange est simple, sans cobroyage. C'est l'étape privilégiée pour ajouter du **porogène** et du **lubrifiant**, ou encore de la **chamotte** qui permet le recyclage de rebuts de fabrication.

La méthode d'obtention de la poudre d'uranium, initiatrice du mélange d'oxydes, induit des différences de dénomination des fabrications MIMAS. La poudre sera appelée **ADU** si elle a été fabriquée à partir de **di-uranate d'ammonium**, ou **AUC** si elle a été fabriquée à partir d'**urano-carbonate d'ammonium**.

Étapes finales de la fabrication

La poudre mêlant UO_2 et PuO_2 dans les proportions désirées permet de fabriquer des pastilles céramiques. Elle est d'abord pressée (Cf. figure 1.7(a)), pour donner un comprimé dit «cru», **cylindrique de section circulaire**, dont **les arêtes sont chanfreinées** par moulage (forme adaptée des poinçons), et qui présentent deux **concavités aux extrémités, appelées «dishing»**. Puis un **frittage** (Cf. figure 1.7(b)) réactif à haute température est réalisé (4 heures à environ 1740° sous atmosphère réductrice d'hydrogène), pour obtenir une pastille parachevée. A ce stade, nous sommes environ à 95 % de la densité théorique de la pastille *MOX*. En d'autres termes, il reste environ 5 % de porosité résiduelle de fabrication.

Les pastilles sont ensuite contrôlées, et rejetées en cas de non-conformité (Cf. figure 1.7(c)). Les pastilles satisfaisantes sont empilées dans la gaine tubulaire en alliage de zirconium (Cf. figure 1.7(d)). Le crayon final est alors hermétiquement soudé, puis contrôlé à son tour. Les nombreux contrôles, ainsi que la traçabilité associée, permettent de garantir le respect des spécifications client (teneur Pu,...).

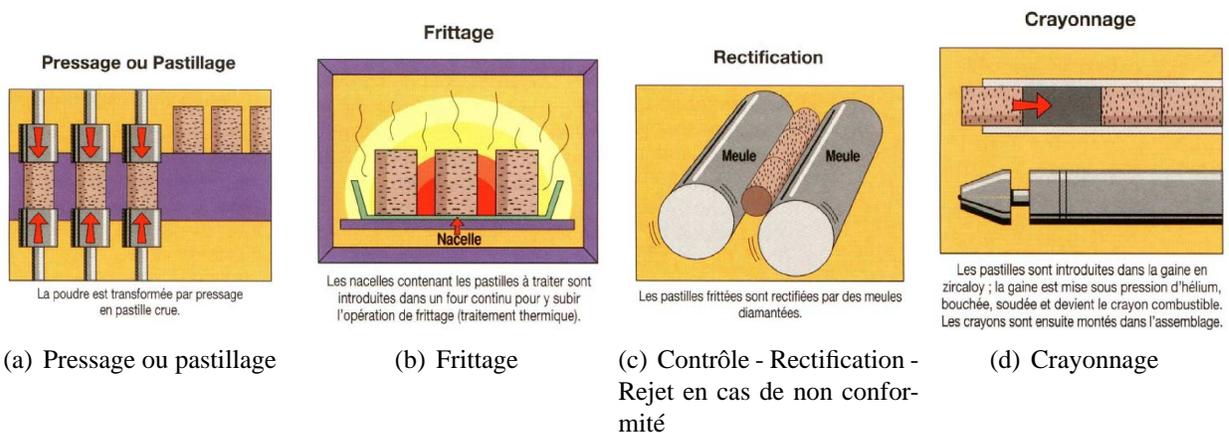


FIG. 1.7: Procédés de la fabrication des pastilles «moxées» COGEMA1994

L'intégralité des étapes de la fabrication des crayons de combustible *MOX* est illustrée sur la figure 1.8 :

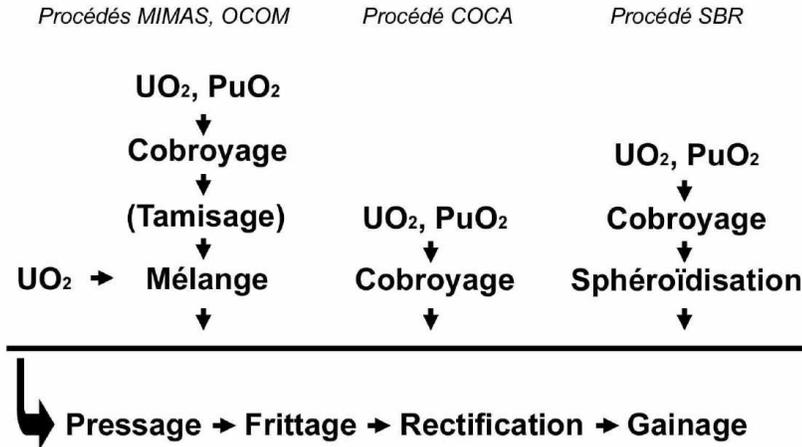


FIG. 1.8: Principaux procédés de fabrication de pastilles *MOX*.

1.2.2 Conséquences structurales et microstructurales

Structure physique de la pastille *MOX*

Les pastilles ayant passé les contrôles de fabrication sont exemptes de fissuration. L'adjonction de porogène ajoute, comme nous l'avons vu au paragraphe 1.2.1, de la porosité dans ce matériau. L'adjonction de chamotte a un rôle similaire au porogène, du fait qu'elle a déjà été frittée et qu'elle évolue différemment du reste des composés lors du frittage de la pastille *MOX*. En effet, la porosité qu'elle induit est générée par retrait différentiel [GOTTA, 1999].

Nous pouvons également mentionner les forces de surface [HORN, 1990] entre les particules de poudre, qui sont surtout présentes lors des opérations de mélange. Néanmoins, lors du pressage, on peut négliger ces forces par rapport à la pression d'empastillage (500 MPa ou plus).

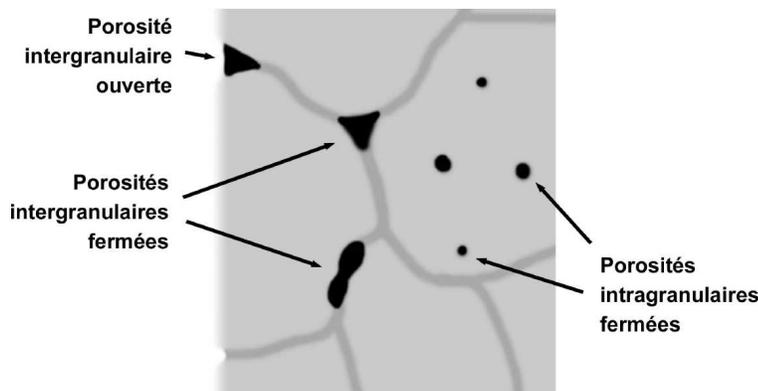


FIG. 1.9: Schéma de représentation de la porosité de fabrication dans une pastille *MOX*

La porosité présente après fabrication est dite ouverte si elle est en contact avec l'environnement extérieur de la pastille. Dans le cas contraire elle est dite fermée. Elle peut être aussi intra ou intergranulaire comme l'illustre le schéma, figure 1.9 [BELVA et al., 2007]. Enfin, elle peut varier en taille en fonction, entre autre, de la phase environnante (plus ou moins riche en plutonium), et avoir une forme géométrique plus ou moins isotrope.

La taille des grains UO_2 ou de PuO_2 est aussi un paramètre important de la microstructure des pastilles «moxées». L'ajout de certains additifs chimiques lors du mélange des poudres permet d'obtenir des grains de différentes tailles après frittage.

Ces pores et grains sont visualisables à l'aide de microscopes optiques et électroniques, de manière immédiate pour les premiers, et après révélation chimique ou thermique pour les seconds (afin d'augmenter le contraste des joints de grain, ce qui permet de dessiner les frontières intergranulaires).

Structure chimique de la pastille MOX

La manière d'obtenir le mélange à teneur finale visée influe fortement sur la **répartition des composés de la pastille**. Que le mélange soit réalisé en une ou deux étapes (Cf. figure 1.8), uranium et plutonium sont toujours présents en tant qu'entités distinctes dans les pastilles MOX.

La première hétérogénéité se situe au niveau des grains de matière. A leur échelle de taille, il est possible de passer directement d'une zone UO_2 à une zone $(U - Pu)O_2$. La teneur locale en plutonium peut donc varier très rapidement pour cet ordre de grandeur de taille d'analyse.

A une échelle de taille légèrement supérieure, les forces électrostatiques, de Van der Waals et coulombiennes peuvent jouer un rôle non négligeable dans la réagglomération des fines particules qui constituent les poudres [DUBOIS, 2000], [GOTTA, 1996], [HORN, 1990]. Des analyses microsonde confirment aisément que même dans le cas de mélanges COCA ou SBR, il y a toujours présence de sur-concentrations ou sous-concentrations en plutonium (certes très localisées : blanc = sur-concentration en plutonium ; noir = concentration en plutonium quasi nulle), au milieu d'une matrice de concentration sensiblement égale à la concentration visée (Cf. figure 1.10(a))

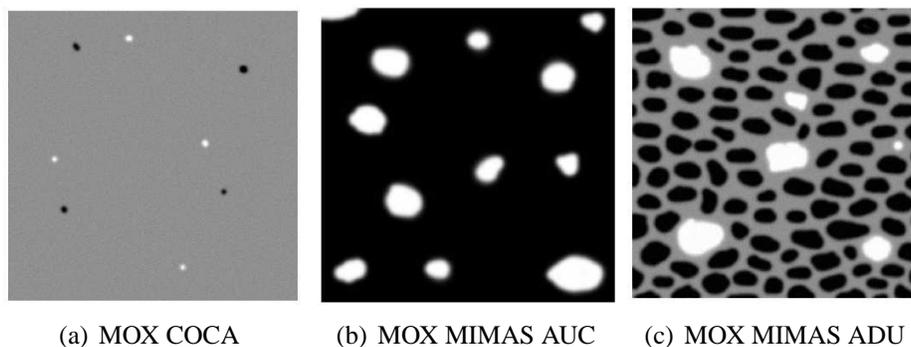


FIG. 1.10: Représentation schématique de la répartition du plutonium pour 3 types de fabrication sans les niveaux de gris

Les procédés de fabrication en deux étapes (MIMAS ou OCOM) ajoutent encore un niveau d'hétérogénéité. Nous rappelons au lecteur que le procédé industriel actuellement utilisé en France est le MIMAS. La seconde étape mêle sans cobroyage le mélange mère avec de l' UO_2 . Ces deux

composés sont ainsi faiblement amalgamés. Des analyses à l'aide d'une microsonde, d'un analyseur de longueur d'onde (WDS) ou l'autoradiographie alpha, permettent d'identifier des **îlots de mélange mère** (appelés ci-après amas $(U - Pu)O_2$ dans le domaine du nucléaire, même si il est vrai que le terme ne soit pas très approprié. Il aurait été plus judicieux de parler d'inclusions. En effet, les amas, dans le domaine de la représentation des milieux hétérogènes, constitue ce que l'on appelle un regroupement d'inclusions) au milieu d'une matrice d' UO_2 (Cf. 1.10(b)). Cette dernière occupe généralement la plus grande partie de la fraction surfacique de l'image, alors que les amas plutonifères (amas $(U - Pu)O_2$) sont disséminés de manière aléatoire avec une fraction surfacique inférieure à 20 %. C'est donc le cas des fabrications MIMAS de type AUC.

Les fabrications MIMAS de type ADU (type de combustible MOX actuellement fabriqué en France par l'usine MELOX et irradié par l'exploitant EDF⁴ dans ses REP) possèdent une **microstructure encore plus complexe**. A celle de type AUC vient s'ajouter une **troisième phase**, usuellement qualifiée d'enrobage car elle enveloppe les amas de mélange-mère (amas plutonifères $(U - Pu)O_2$), et vient aussi partitionner la matrice UO_2 , pour révéler que celle-ci est aussi une phase inclusionnaire, nommée : amas uranifères UO_2 (le terme amas étant encore une fois mal choisi). La phase d'enrobage possède une teneur moyenne en plutonium intermédiaire, voir figure 1.10(c) (la couleur grisée pour l'enrobage signifiant une teneur en plutonium qui est intermédiaire entre la couleur blanche des amas plutonifères (teneur élevée en plutonium) et la couleur noire des amas uranifères (teneur nulle en plutonium avant irradiation)).

Le combustible MOX MIMAS ADU, actuellement exploité par EDF, est donc un composite particulaire triphasé :

1. **les amas plutonifères** $(U - Pu)O_2$, avec une teneur élevée en plutonium (environ 28 % en masse) et donc une teneur élevée en plutonium fissile ($^{239}_{94}\text{Pu}$, $^{241}_{94}\text{Pu}$). La densité de fission locale dans cette phase va donc être très élevée (2 à 3 fois supérieure aux autres phases). Dans les combustibles *MOX* actuels, la fraction surfacique de cette phase ne dépasse pas les 20 %. Néanmoins, le fuseau granulométrique peut être très étendu, par exemple de 10 microns à plus de 200 microns de diamètre du cercle équivalent pour certains lots de fabrication. L'amélioration des méthodes de fabrication (tamisage...) ont permis de réduire le fuseau de 10 à 150 microns au maximum. D'autre part, la morphologie de cette phase est également très complexe.
2. **les amas uranifères** UO_2 , avec une teneur nulle en plutonium et donc une teneur nulle en plutonium fissile. Cette phase a également une teneur quasi nulle en $^{235}_{92}\text{U}$ (élément fissile voir paragraphe 1.1.2), seul l' $^{238}_{92}\text{U}$ est en quantité majoritaire. Au début de l'irradiation, la densité de fission locale dans cette phase sera donc quasi nulle. Néanmoins, au cours de l'irradiation et du fait du phénomène de capture radiative par l' $^{238}_{92}\text{U}$ (Cf. paragraphe 1.1.2), l'apparition du $^{239}_{94}\text{Pu}$ au sein de cette phase va augmenter la densité de fission locale. Dans les combustibles *MOX* actuels, la fraction surfacique de cette phase ne dépasse pas 35 %. Le fuseau granulométrique est quant à lui beaucoup moins étendu que celui des amas plutonifères, de 10 microns à 60 microns. Enfin, la morphologie de cette phase est plus proche d'une forme géométrique connue : ellipse.
3. **L'enrobage**, ayant une teneur intermédiaire en plutonium, aura donc une densité de fission locale intermédiaire entre les amas uranifères et plutonifères.

⁴Électricité De France

1.2.3 Conclusion

Les combustibles *MOX* diffèrent de UO_2 sur plusieurs points. La localisation et la distribution en taille des porosités sont des paramètres qui agissent de manière importante sur la densité du matériau, et leurs évolutions influent directement sur des mécanismes ayant lieu sous irradiation, mécanismes que nous aborderons au chapitre 2 (densification, gonflement...).

La structure générale des pastilles est liée directement à la taille des grains UO_2 et PuO_2 . Ces tailles sont susceptibles d'évoluer sous irradiation (mécanisme de restructuration abordé au chapitre 2), et de manière différente selon que les grains se trouvent dans une zone riche (amas plutonifères par exemple) ou pauvre (amas uranifères par exemple) en plutonium.

La répartition du plutonium est en elle-même une caractéristique capitale de la microstructure du combustible *MOX*, car le taux de combustion des noyaux fissiles (différent dans chaque phase) va avoir des conséquences mécaniques et thermiques locales. En effet, le mécanisme de combustion est à la source des modifications de densité et de morphologie des grains citées plus haut, et apporte des mécanismes locaux propres à chaque phase et détaillés au chapitre 2.

Le paragraphe 1.2 nous a permis de montrer que la **compréhension du comportement du combustible MOX**, durant l'irradiation, passe donc par la construction de **lois macroscopiques faisant intervenir les effets microstructuraux** (porosité, grains, amas uranifères, amas plutonifères). Dans le **cadre de nos travaux de thèse**, nous nous limiterons à l'**échelle des phases inclusionnaires : amas uranifères et plutonifères** (échelle de la dizaine à environ la centaine de microns). La porosité et les grains, se plaçant à une échelle inférieure (échelle inférieure à la dizaine de microns), seront intégrés, de façon implicite, à travers les propriétés matériaux et les lois de comportement appliquées à chaque phase inclusionnaire. La problématique industrielle associée au combustible MOX, présentée dans le paragraphe suivant, renforce ces conclusions.

1.3 Problématique industrielle

1.3.1 Les moyens de qualification d'une nouvelle gestion combustible

Électricité De France (EDF), exploitant des réacteurs à eau pressurisée (REP) français, se doit de garantir, auprès de l'Autorité de Sûreté française (AS), la conservation de l'intégrité mécanique de la gaine du crayon combustible (*Cf. figure 1.3*), en régime de fonctionnement normal, quels que soient les sollicitations ou les matériaux envisagés. En effet, la gaine constitue la première barrière de confinement des produits de fission générés par les réactions nucléaires dans le combustible.

Ainsi, lors du lancement d'une nouvelle gestion combustible *MOX*, gestion où l'exploitant a décidé de changer les conditions de sollicitations (par exemple augmentation du temps d'irradiation ou augmentation des amplitudes de puissances...) ou d'employer de nouveaux matériaux (par exemple changement du matériau de gainage, ou modification du vecteur isotopique en plutonium de la pastille *MOX*, ou changement du procédé de fabrication de la pastille *MOX* (recours à la voie sèche pour les poudres UO_2 et/ou recours à de la poudre UO_2 enrichie)...), deux voies complémentaires sont employées pour valider la faisabilité de cette nouvelle gestion auprès de l'AS :

1. La voie expérimentale. Des crayons combustibles, représentatifs de cette nouvelle gestion, sont irradiés dans les réacteurs industriels et expérimentaux dans les conditions de sollicitations envisagées.
2. La voie numérique. En effet, compte tenu du coût élevé des irradiations expérimentales et du nombre important de crayons dans un REP type 900 MW_e (environ 41000 crayons) la démonstration de faisabilité de cette nouvelle gestion à l'échelle du cœur nécessite le recours à la simulation numérique.

1.3.2 Les différentes représentations numériques du comportement du crayon combustible

Pour comprendre la représentation numérique utilisée dans les codes de structure «cayon combustible», nous allons rapidement rappeler, dans le paragraphe suivant, l'évolution du crayon sous irradiation en fonctionnement normal.

Description succincte de l'évolution du crayon combustible sous irradiation, en fonctionnement normal

A la mise en température et en pression du réacteur, lors de la première montée en puissance, la pastille combustible MOX ou UO_2 se fracture en 6 ou 8 fragments radiaux. Nous pouvons expliquer cette fracturation en modélisant la pastille par un cylindre infini (approche cohérente avec la représentation géométrique de la structure : longueur axiale de la colonne combustible égale à 3,66 m tandis que le diamètre d'une pastille est égal à 8,2 mm) et en cherchant, dans un premier temps, à évaluer le champ de température **radial** au sein de cette pastille. Pour cela nous posons k la conductivité thermique de la pastille. En écrivant la loi de *Fourier*, le profil de température T , en régime stationnaire, est donné par la relation suivante :

$$T(r) = T_{\text{cœur}} - \frac{P_{\text{lin}}}{4\pi k} \left(\frac{r}{R}\right)^2 \quad (1.1)$$

avec R le rayon de la pastille, r la distance à l'axe axial de symétrie du crayon et P_{lin} la puissance linéique. Si on prend $k = 3.10^{-2} \text{ W.cm}^{-1}.\text{K}^{-1}$, la différence de température entre le cœur de la pastille et le bord est de plus de 500°C soit un gradient thermique supérieur à $120^\circ\text{C.mm}^{-1}$ pour une puissance en fonctionnement nominal. La figure 1.11 représente le profil radial de la température dans la pastille en fonctionnement normal ($P_{\text{lin}} = 200 \text{ W.cm}^{-1}$).

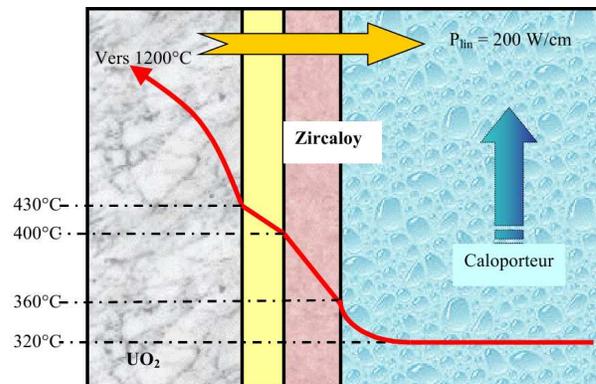


FIG. 1.11: Profil radial de température dans la pastille combustible

Le centre de la pastille étant à une température plus élevée que la périphérie, il se dilate davantage. Ce différentiel de dilatation thermique génère d'importantes contraintes dans la pastille. Un calcul thermoélastique simplifié⁵ permet d'obtenir le champ des contraintes principales suivant :

$$\begin{cases} \sigma_{rr}(r) = \frac{E\alpha\Delta T}{4(1-\nu)} \left[\left(\frac{r}{R}\right)^2 - 1 \right] \\ \sigma_{\theta\theta}(r) = \frac{E\alpha\Delta T}{4(1-\nu)} \left[3\left(\frac{r}{R}\right)^2 - 1 \right] \\ \sigma_{zz}(r) = \frac{E\alpha\Delta T}{4(1-\nu)} \left[4\left(\frac{r}{R}\right)^2 - 2 \right] \end{cases} \quad (1.2)$$

avec :

- ΔT la différence de température entre le centre de la pastille et sa périphérie donnée par l'équation (1.1);
- E le module d'Young ;
- ν le coefficient de Poisson ;
- α le coefficient de la dilatation thermique ;

Le centre de la pastille se retrouve sollicité en compression tandis que la périphérie est sollicitée en traction. La contrainte radiale est nulle en périphérie puisque la pastille est libre de se dilater (jusqu'à la fermeture du jeu entre la pastille et la gaine). Aux températures, où la pastille est sollicitée, elle a un comportement fragile. Une fissuration apparaît dès que les contraintes atteignent la résistance à la rupture. Cette contrainte à rupture en flexion est estimée par le CEA [BAILLY et al., 1996] à environ 130 MPa, ce qui signifie que la pastille est susceptible de se fissurer lorsque la différence de température entre la surface et le centre de la pastille dépasse 100°C. Cette condition est largement atteinte dès le début de la première montée en puissance du réacteur. Un exemple de réseau de fissures est représenté sur la figure 1.12.



FIG. 1.12: Céramographie d'une pastille REP fissurée par le gradient thermique, après un cycle d'irradiation - plan transversal de la pastille

⁵Pour réaliser ce calcul, on considère que la pastille est un cylindre infini. On se place alors en déformations planes généralisées ($\epsilon_{zz} = \text{cst}$), on suppose une invariance par translations ($\frac{\partial u_r}{\partial z} = \frac{\partial u_\theta}{\partial z} = 0$) et une symétrie de révolution ($\epsilon_{rr} = \frac{\partial u_r}{\partial r}(r)$ et $\epsilon_{\theta\theta} = \frac{u_r(r)}{r}$). On suppose également que la pastille est libre sur le bord extérieur (il n'y a pas de contact entre la pastille et la gaine) et le comportement est élastique isotrope.

Le jeu initial entre la gaine et le combustible autorise le déplacement des différents fragments. Dès lors, il y a une augmentation du diamètre apparent de la pastille. D'autre part, sous l'effet du fort gradient thermique, par dilatation thermique différentielle, la pastille se déforme en «diabolo» (Cf. *figure1.13*). Cela se traduit par un sur-déplacement des points situés au plan inter-pastilles par rapport aux points situés au plan médian-pastille.

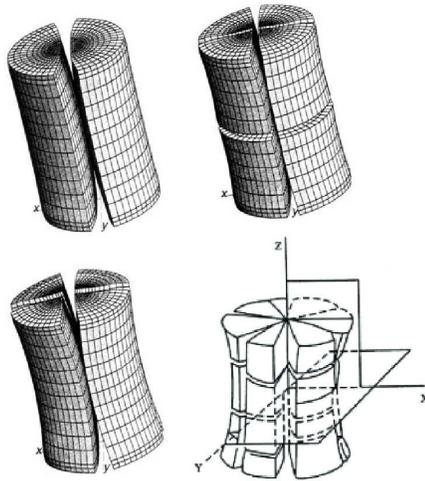


FIG. 1.13: Déformation thermique en diabolo de la pastille. [BAILLY et al., 1996], [DIARD, 2001]

De plus, au cours de l'irradiation, la gaine flue vers la pastille sous l'action de la pression différentielle entre le caloporteur (pression = $15,5 \text{ MPa}$) et les gaz contenus dans le crayon (pression environ 6 MPa à chaud et qui va augmenter en fonction du relâchement des gaz de fission de la pastille). La pastille, quant à elle, après avoir densifié (disparition d'une partie de la porosité de fabrication sous l'effet des pointes de fission), gonfle sous l'effet de l'irradiation, son diamètre augmente d'environ 0.07% par 10 GWj/tM (**taux de combustion**)⁶. Le jeu entre pastille et gaine diminue donc pour conduire, après environ $10\,000$ heures de fonctionnement, généralement au début du deuxième cycle d'irradiation, à un contact intime entre pastille et gaine. Il s'opère alors un réarrangement des fragments céramiques vers l'intérieur du crayon. Du fait, de la mise en «diabolo» de la pastille, le contact entre la pastille et la gaine s'opère en premier au droit des plans inter-pastilles. Ce phénomène augmente très nettement les contraintes subies par la gaine, et fait apparaître un réseau de points anguleux. Il se forme alors sur la gaine, au niveau des interfaces, des plis dits «primaires». Ce contact finit par s'établir à tous les niveaux entre la pastille et la gaine (Cf. *figure1.14*).

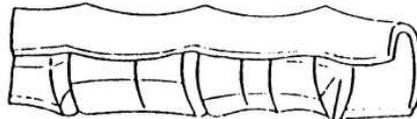


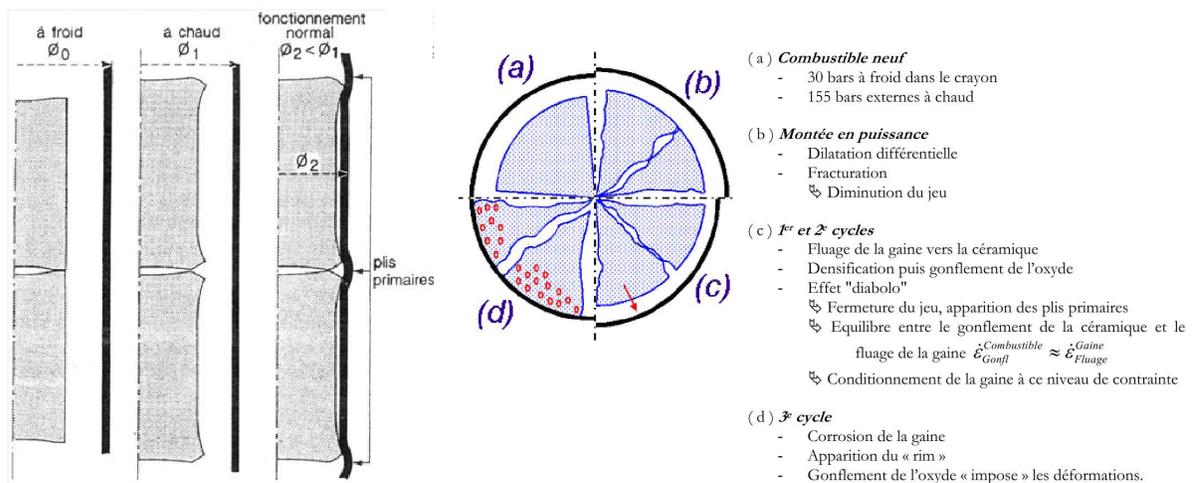
FIG. 1.14: Illustration du contact pastille gaine au médian-pastille et inter-pastilles (plis primaires)

⁶Il s'agit d'une unité typique dans le domaine du nucléaire qui traduit l'épuisement. Nous entendons par épuisement le cumul dans le temps du nombre relatif de noyaux disparus par fissions. L'unité peut être alors le % de noyaux initiaux. Mais, nous utilisons plus couramment la notion de taux de combustion représentant l'intégrale dans le temps de la puissance générée par unité de masse d'atomes métalliques : il s'exprime en GWj/tM (Gigawatt jour par tonne de Plutonium ou d'Uranium (suivant le combustible utilisé))

Le gonflement du combustible impose les sollicitations à la gaine, engendrant des contraintes de traction tangentielle dans le tube de gainage. Ces contraintes augmentent jusqu'à atteindre un équilibre vis-à-vis des pressions externes du caloporteur. Le crayon est alors dit «conditionné» à ce niveau de puissance, ce qui correspond, en régime de fonctionnement de base, à une puissance linéique d'environ $P_{lin} = 200 \text{ W.cm}^{-1}$. D'autres phénomènes apparaissent également en fonctionnement normal :

1. dans les deux premiers cycles d'irradiation, nous pouvons assister au relâchement des produits de fission hors de la pastille, donc dans les volumes libres du crayon, par des mécanismes de recul et d'éjection : on parle alors de relâchement athermique. De plus, au troisième et quatrième cycle, la zone centrale du combustible, qui est à une température relativement élevée (1000°C à 1200°C), voit apparaître des gaz de fission aux joints des grains. Ces gaz, accumulés, commencent lentement à coalescer sous forme de bulles (bulles inter-granulaires avec une morphologie proche d'une ellipse) et à former un réseau de canaux (tunnels) permettant une percolation des gaz vers des porosités ouvertes du combustible et donc vers les volumes libres du crayon. Ce relâchement de gaz est qualifié de type thermique. En conséquence, l'ensemble de ces relâchements contribuent à augmenter la pression interne dans le crayon. Cette pression ne doit en aucun cas dépasser une pression limite.
2. D'autre part, au troisième cycle d'irradiation, le combustible UO_2 perd sa structure granulaire polyédrique en périphérie de pastille. Dans cette zone, la teneur en plutonium fissile est élevée du fait du phénomène d'autoprotection⁷. Du coup, le taux de combustion est aussi très élevé ce qui perturbe fortement la microstructure du combustible. L'énergie interne conduit à une restructuration du combustible, c'est la formation du RIM : microstructure formée de petits grains arrondis (de l'ordre du micron) et de bulles nanométriques remplies de gaz (Xenon - Krypton). La fraction volumique de ces bulles peut atteindre 15 à 20 %.

L'évolution du crayon combustible, sous irradiation et en fonctionnement normal, peut donc être résumée par la figure 1.15 :



(a) Evolution du crayon combustible sous irradiation coupe longitudinale (Rz) (b) Evolution du crayon combustible sous irradiation coupe transverse (Rθ)

FIG. 1.15: Représentation schématique de l'évolution du crayon [BAILLY et al., 1996]

⁷le phénomène de capture radiative de l' $^{238}_{92}\text{U}$ a une probabilité plus élevée en périphérie de pastille qu'au centre, ce qui crée un effet d'autoprotection

Du fait du nombre important de crayons combustibles dans un REP type 900 MW_e , les codes industriels, modélisant l'évolution de la structure «crayon combustible», utilisent des approches simplifiées. Cette approche est donc présentée dans le paragraphe suivant.

Représentation uni-dimensionnelle : 1D

La modélisation mono-dimensionnelle du crayon combustible est la modélisation actuellement utilisée dans les codes de calculs industriels tel que CYRANO3 : code d'EDF. Une description plus précise de la modélisation du code CYRANO3 est disponible dans [BARON et al., 1997]. Depuis 2003, les équipes EDF et CEA, développant des outils de simulation du crayon combustible, se sont regroupées dans le Laboratoire de Simulation du comportement du Combustible du CEA de Cadarache, dans le cadre du projet PLEIADES, afin de développer un code, nommé ALCYONE, basé sur un noyau thermomécanique multi-D commun (CAST3M), CYRANO3 devenant l'application REP industrielle de cette plateforme de développements.

La représentation numérique 1D de CYRANO3 et d'ALCYONE est composé d'une colonne de pastilles combustibles et de la gaine en vis-à-vis. La discrétisation axiale du crayon est réalisée à partir de tranches qui représentent ce qui se passe en moyenne sur plusieurs pastilles (Cf. figure 1.16).

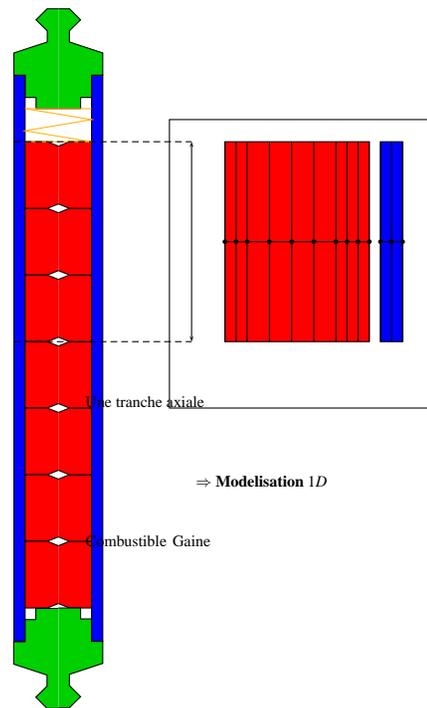


FIG. 1.16: Découpage du crayon en tranches axiales. Chaque tranche est représentée par un segment 1D incluant la gaine, le jeu et le combustible. Résolution 1D sur ce segment

Les principales hypothèses mécaniques sur lesquelles se basent la modélisation mono-dimensionnelle sont les suivantes :

- le crayon combustible possède une **symétrie de révolution** ce qui conduit à utiliser une **description 1D axisymétrique du milieu** continu composé de la pastille et de la gaine.
- dans la direction axiale du crayon, ce dernier est modélisé en **déformations planes généralisées ou en contraintes planes généralisées**. Puisque nous sommes en 1D axisymétrique, il n'y

a qu'un seul degré de liberté : la déformation axiale (qui doit être la même pour tous les points dans le cadre des déformations planes généralisées).

Ces hypothèses cinématiques imposent des restrictions sur le champ de déplacement admissible :

$$\underline{u}(r, \theta, z) \approx u(r)\underline{e}_r + \varepsilon_{zz} \cdot z \underline{e}_z$$

L'ensemble de ces hypothèses conduisent à représenter la tranche axiale du crayon combustible par deux segments de droites : un pour la pastille combustible et un pour la gaine. Quand le jeu est ouvert, nous avons également un segment supplémentaire entre la pastille et la gaine. Le contact entre la pastille et la gaine est traité par une condition de non-interpénétration ce qui signifie que le rayon externe de la pastille combustible est toujours inférieur ou égal au rayon interne de la gaine. Lorsqu'il y a contact entre la pastille et la gaine, on suppose qu'il y a une forte interaction entre le reste de la colonne combustible frottant sur la gaine et la tranche de pastille courante. Pour modéliser cette interaction, on impose une condition dite de solidarisation traduisant le fait que la pastille et la gaine ont dorénavant le même déplacement axial. Cette interaction montre qu'en l'absence de contact entre la pastille et la gaine, les degrés de liberté des deux plans sont indépendants ce qui traduit le fait que les efforts transmis au reste de la colonne combustible ne sont pas repris par la gaine. Lorsque le jeu entre la pastille et la gaine est fermé, la condition cinématique correspond à une solidarisation des deux plans traduisant un encastrement dû au frottement de la colonne combustible sur la gaine.

A partir de la représentation mono-dimensionnelle présentée, il est possible de représenter un crayon sur toute sa hauteur. En effet, le crayon combustible peut se découper en plusieurs tranches axiales qui auront une puissance linéique différente entre elles. D'un point de vue mécanique, ces tranches axiales sont couplées par le bilan axial des forces (poids des tranches se trouvant au-dessus, effet de la pression interne du crayon ou effet de la condition de solidarisation des tranches voisines). Pour parler de cette possibilité de décrire les phénomènes intervenant à différentes cotes axiales, il est d'usage de parler de modélisation $1D_{1/2}$. Le recours à cette représentation numérique, dans le code industriel CYRANO3, permet de réaliser des études de faisabilité d'une nouvelle gestion combustible non seulement à l'échelle du coeur mais aussi dans des délais acceptables pour un industriel.

Dans les codes comme CYRANO3 ou ALCYONE, la problématique est que les **lois de comportement associées au combustible MOX reposent sur une démarche phénoménologique fondée par une réponse macroscopique de l'échantillon à une sollicitation**. Par conséquent **ces lois tiennent rarement compte des effets microstructuraux du combustible MOX** (Cf. *paragraphe 1.2.3*).

1.3.3 Conclusion

Le paragraphe 1.3 confirme donc les arguments avancés au paragraphe 1.2.3. La **compréhension du comportement du combustible MOX**, durant l'irradiation, passe donc par la construction de **lois macroscopiques faisant intervenir les effets microstructuraux** (porosité, grains, amas uranifères, amas plutonifères). Comme annoncé dans le paragraphe 1.3, nous nous limiterons, dans le cadre de nos travaux de thèse, à l'**échelle des phases inclusionnaires : amas uranifères et plutonifères**. La porosité et les grains, seront intégrés, de façon implicite, à travers les propriétés matériaux et les lois de comportement appliquées à chaque phase inclusionnaire.

1.4 Bilan du chapitre

Ce chapitre confirme donc l'objectif et les intérêts industriels de la thèse, à savoir :

1. **Objectif : développer une modélisation par changement d'échelles (échelle des phases inclusionnaires : amas uranifères et plutonifères) permettant d'estimer plus précisément la distribution des champs thermo-mécaniques locaux au sein du combustible MOX, en régime de fonctionnement normal.** Pour être en adéquation avec les attentes industrielles, ce modèle devra, en plus, remplir le cahier des charges suivant :
 - **Un modèle donnant accès aux informations** (exemple : champ de contraintes....) :
 - **locales par phases ;**
 - **moyennes par phases ;**
 - **macroscopiques.**
 - **Un modèle peu consommateur de temps de calcul (CPU) :**
 - cela implique donc **un modèle avec un faible nombre de variables internes.**
 - **Un modèle devant avoir un schéma d'intégration numérique «simple»,** c'est à dire cohérent avec les schémas que l'on trouve dans les codes $1D_{1/2}$, type CYRANO3 ou ALCYONE
2. **Intérêts industriels :**
 - **Simuler correctement le comportement macroscopique du combustible MOX dans les codes industriels** (en fonctionnement normal)
 - **Analyser ce qui se passe dans chaque phase,** afin de **progresser dans la compréhension et l'apparition de certains mécanismes locaux :** par exemple propagation de micro-fissures au sein d'une phase (phénomène déjà observé sur un lot de fabrication de combustibles MOX).
 - **Prévoir numériquement le comportement macroscopique et local du combustible MOX dès sa conception,** afin d'**orienter les choix de microstructures à la fabrication.**

Le développement de ce type de modélisation nécessite de connaître, en amont, le comportement local de chacune des phases constitutives du combustible MOX, en fonctionnement normal. Ce travail est réalisé dans le chapitre suivant.

Chapitre 2

Déformations induites par l'irradiation dans le combustible MOX en service

Objet du chapitre :

L'objet de ce chapitre est de décrire le comportement local que nous allons appliquer au sein de chacune des phases du combustible *MOX*. Pour cela, nous rappelons, dans un premier temps, le principe de la fission nucléaire et ses effets. Puis, dans un second temps, nous décrivons succinctement l'ensemble des mécanismes se manifestant au sein de chacune des phases sous les effets de l'irradiation. Enfin, nous présentons le problème mécanique local à résoudre au sein du combustible *MOX*.

Sommaire

2.1	Principe de la fission nucléaire et ses effets	38
2.1.1	Principe de la fission	38
2.1.2	Conclusion	40
2.2	Les mécanismes locaux au sein des phases du MOX	40
2.2.1	Densification	40
2.2.2	Gonflement solide	41
2.2.3	Restructuration	43
2.2.4	Fluage induit par l'irradiation	45
2.2.5	Conclusion	45
2.3	Problème mécanique local	46
2.4	Bilan du chapitre	47

2.1 Principe de la fission nucléaire et ses effets

2.1.1 Principe de la fission

Les réactions nucléaires amorcées dans les coeurs des réacteurs à eau pressurisée sont des réactions de fission. Elles consistent en la capture d'un neutron lent par un noyau lourd instable ($^{235}_{92}\text{U}$ et $^{239}_{94}\text{Pu}$). Cette capture provoque la dislocation du noyau (spallation), qui se scinde alors généralement en deux noyaux plus légers, et émet de l'énergie ainsi que quelques neutrons (Cf. figure 2.1).

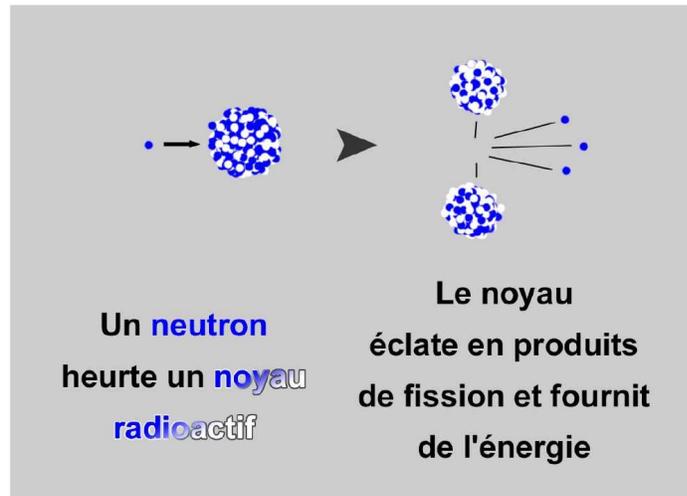
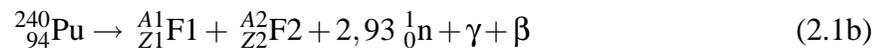


FIG. 2.1: Principe générale d'une fission nucléaire.
[BARON, 2002]

Ainsi, la fission, au sein du combustible *MOX* peut être présentée en deux étapes : la première concerne la capture du neutron (équation (2.1a)) et la seconde représente la fission de l'atome de Plutonium (équation (2.1b)).



La fission du plutonium ${}^{239}_{94}\text{Pu}$ crée deux produits de fission, ${}^{A1}_{Z1}\text{F1}$ et ${}^{A2}_{Z2}\text{F2}$, de nature chimique variable et en moyenne 2,93 neutrons ${}^1_0\text{n}$ ainsi que des rayonnements β et γ . Les éléments de fission obtenus sont tels que de nombreuses combinaisons de nombres de masses et de numéros atomiques sont possibles. La seule condition à respecter est la conservation masse-énergie (équation (2.2)) :

$$240 = A1 + A2 + A3 + \Delta M \quad \text{avec} \quad A3 = 2,93 \text{ en moyenne} \quad (2.2)$$

La somme des masses des produits de fission ($A1 + A2 + A3$) est inférieure à la masse initiale. Cette différence de masse, notée ΔM , représente la création d'une énergie cinétique qui sera source de production d'énergie calorifique. L'irradiation engendre un grand nombre de défauts ponctuels, bien plus que l'agitation thermique, qui va influencer le comportement de l'oxyde combustible.

L'objectif de ce paragraphe est surtout de s'intéresser aux conséquences les plus marquantes de l'irradiation. **L'augmentation de la densité des défauts ponctuels et l'insertion des produits de fission** (après la perte totale de leur énergie cinétique, les produits de fission restent dans le réseau cristallin sous forme d'impuretés mais ils peuvent également réagir chimiquement avec d'autres atomes du réseau, il se forme alors des composés chimiques plus ou moins complexes) **dans le réseau cristallin induisent les conséquences suivantes :**

1. une évolution des propriétés matériaux du combustible en fonction du temps : on parle de **vieillessement des propriétés matériaux**. Ces propriétés (par exemple propriétés élastiques, visqueuses ...) dépendent généralement implicitement de la densité de fission locale et explicitement du taux de combustion local.
2. **Une activation de mécanismes à basse température alors qu'ils ont lieu généralement à très haute température : densification** (Cf. *mécanisme détaillé au paragraphe 2.2.1*) **et fluage** (Cf. *mécanisme détaillé au paragraphe 2.2.4*). La diffusion est un phénomène principalement activé par la température. Néanmoins l'irradiation modifie fortement les vitesses de diffusion. Ainsi, les mécanismes de densification ou de fluage peuvent intervenir en réacteur pour des températures beaucoup plus basses. Cette diffusion sous irradiation, nommée diffusion athermique, fonction de la densité de fission locale, s'opère grâce aux défauts ponctuels créés par l'irradiation.
3. **Une apparition d'un mécanisme nommé le gonflement solide** (Cf. *mécanisme détaillé au paragraphe 2.2.2*). Nous avons vu au paragraphe 2.1.1 que la réaction de fission libère, outre les neutrons, deux noyaux élémentaires avec un rendement variable suivant l'élément considéré. Environ 70 % de ces produits de fission se trouvent sous forme solide et pseudo-solide (dans les gammes de températures atteintes dans la pastille, en service). **Cette quantité de produits de fission solide dépend de la densité de fission locale.**
4. **Une apparition d'un autre mécanisme nommé la restructuration** (Cf. *mécanisme détaillé au paragraphe 2.2.3*). **Ce mécanisme apparaît pour un fort taux de combustion local et une température locale inférieure à 850°C.**

Nous avons vu au chapitre 1 que le combustible *MOX* était constitué de plusieurs phases : dans un combustible *MOX* MIMAS ADU, nous rappelons qu'on observe des amas à forte concentration en plutonium (amas plutonifères, 25 à 30 % de Pu en teneur massique), des amas uranifères (teneur massique nulle en Pu hors irradiation) et une phase matricielle, nommée l'enrobage, à teneur massique modérée en plutonium (entre 7 et 10 %). Hors pile (hors irradiation) les caractéristiques mécaniques de ces différentes phases constitutives sont proches de sorte que ce matériau hétérogène (du point de vue chimique) présente des propriétés physiques homogènes. Par contre sous irradiation, la réaction de fission nucléaire est deux à trois fois plus élevée dans les amas plutonifères par rapport à l'enrobage et quatre à neuf fois plus élevée par rapport aux amas uranifères. Cette hétérogénéité de la densité de fission locale dans chaque phase, et par conséquent du taux de combustion local, conduit donc en fonctionnement normal à :

1. une évolution des propriétés matériaux, en fonction du temps, différente dans chacune des phases. On parle de **vieillessement hétérogène**.
2. **Une cinétique d'apparition des phénomènes (densification, fluage d'irradiation, gonflement solide, restructuration) différente** dans chacune des phases.

Tant du point de vue du comportement (fluage d'irradiation) que du point de vue du chargement (retrait imposé par la densification et gonflements imposés par le gonflement solide et la restructuration) le combustible *MOX* devient donc hétérogène en service.

2.1.2 Conclusion

Nous venons de voir, à travers le paragraphe 2.1.1, les effets de l'irradiation au sein de la microstructure du combustible *MOX*. Les conclusions sont les suivantes :

1. **Les propriétés matériaux évoluent différemment dans chacune des phases** puisque celles-ci dépendent explicitement du taux de combustion local qui est, lui même, différent au sein de chaque phase.
2. **Des mécanismes comme la densification ou le fluage apparaissent malgré des températures de fonctionnement relativement basse** (les coefficients de diffusion étant accélérés sous irradiation). **Ces mécanismes** dépendent de la densité de fission locale et **vont donc être hétérogènes** au sein du *MOX*.
3. Deux autres mécanismes, baptisés **le gonflement solide et la restructuration, vont induire des hétérogénéités** au sein du *MOX* puisqu'ils dépendent implicitement de la densité de fission locale.

Pour bien comprendre ces différents mécanismes, nous allons les décrire succinctement dans le paragraphe suivant.

2.2 Les mécanismes locaux au sein des phases du MOX

2.2.1 Densification

La densité macroscopique des pastilles de combustible MOX évolue durant l'irradiation. Ce phénomène a entre autres été mis en évidence lors de la surveillance des REP du parc d'EDF, mais aussi par des expériences telles que *DENSIMOX* (Cf. [BOULORÉ, 2001],[GARCIA et al., 2000]). Des mesures de densité hydrostatique et de longueur de colonne fissile (Cf. [BLANPAIN et al.,]), traditionnellement faites sur UO_2 , indiquent que le volume macroscopique des pastilles diminue. Le mécanisme de densification, sous irradiation, est l'interaction entre un fragment de fission et une porosité de fabrication, qui redistribue des lacunes dans le volume du matériau. Cela induit du retrait volumique. Les paramètres qui influent sur cette interaction sont :

1. la densité de fission locale de chaque phase ;
2. la répartition de la porosité de fabrication par phase mais aussi la distribution en taille des porosités de fabrication et la répartition inter/intragranulaire de celles-ci ;
3. la répartition en taille des grains.

L'ensemble de ces paramètres confirme donc que la cinétique de densification va être différente au sein de chacune des phases du combustible *MOX*. Ainsi, comme nous l'avons signalé au paragraphe 2.1.2, ce mécanisme va induire des hétérogénéités mécaniques car il crée du retrait volumique différentiel entre les phases.

Le tenseur d'ordre 2 associé à cette déformation sera considéré comme une déformation libre (mécanisme indépendant du champ de contrainte), uniforme par phase (la densité de fission est considérée comme uniforme par phase), hydrostatique et isotrope. Elle sera notée : $\underline{\underline{\epsilon}}^{\text{dens}}$. La composante de ce tenseur pourra être alimentée par un modèle proposé par Bouloré (Cf. [BOULORÉ, 2001]).

Remarque importante :

L'évaluation de cette composante nécessite également de connaître, en amont, la densité de fission locale et le taux de combustion local au sein de chaque phase. Pour cela, nous aurons recours à un calcul de neutronique simplifié. Il s'agit d'un module, à un groupe d'énergie, nommé RADAR, et appliqué à chacune des phases au sein du combustible *MOX*. Ce module est intégré dans les codes CYRANO3 et ALCYONE. **Ce calcul neutronique nous fournira, à tout instant,** la concentration en noyaux fissiles, fertiles et en produits de fission ainsi que le nombre de neutrons traversant une section unitaire d'un centimètre carré en une seconde. A partir de ces données et des constantes nucléaires (énergie libérée par fission, énergie des rayonnements γ ...) il sera aisé de déduire **la densité de fission locale par phase ainsi que le taux de combustion local** (Remarque : il s'agit d'une approche uniforme par phase). **Ces deux variables alimenteront localement non seulement le modèle de densification mais également bien d'autres modèles comme le gonflement solide (Cf. paragraphe 2.2.2), la restructuration du combustible (Cf. paragraphe 2.2.3), le fluage induit par l'irradiation (Cf. paragraphe 2.2.4), ainsi que l'évolution des propriétés matériaux sous les effets de l'irradiation.**

2.2.2 Gonflement solide

Des mesures de paramètre cristallin des combustibles UO_2 et $(U - Pu)O_2$ (Cf. [ANSELIN, 1969], [HARISSON and DAVIS, 1968]) dans lesquels ont été mis en solution individuellement des produits de fission montrent que seul le lanthane et le césium entraînent une dilatation de la maille. Tous les autres produits de fission insérés en solution induisent une contraction de cette maille. Les produits de fission non gazeux se retrouvent dans une phase solide :

1. Soit sous forme d'un élément chimique qui vient s'insérer dans l'édifice cristallin de l'oxyde (réseau $(U - Pu)O_2$: amas plutonifères ou enrobage ou réseau UO_2 : amas uranifères), en général en substitution des ions uranium ou plutonium, ce qui va correspondre à la création de nouvelles mailles d'oxydes, lacunaires en oxygène. Le nombre de mailles augmente, mais le paramètre de maille diminue.
2. Soit ils contribuent à la formation de composés de nouvelles phases qui contribuent également au gonflement global de la céramique.

Même si la solution solide voit son paramètre cristallin diminuer, le volume global du combustible augmente pendant l'irradiation. Ce gonflement est dû à l'augmentation du nombre d'atomes.

A l'issue du programme de surveillance des REP d'EDF, une des grandeurs fondamentales, accessible à la mesure, est la densité hydrostatique. Par le biais de cette grandeur nous pouvons évaluer le gonflement volumique apparent. La figure 2.2 montre l'évolution de cette grandeur, après densification, en fonction du taux de combustion moyen des pastilles *MOX* de type MIMAS AUC et ADU. **Nous observons expérimentalement une variation de volume macroscopique (gonflement dit solide) qui est proportionnelle au taux de combustion moyen pastille.** Cette constatation est vraie aussi bien pour les pastilles *MOX* AUC (Cf. figure 2.2(a)) que pour les pastilles *MOX* ADU (Cf. figure 2.2(b)). Nous remarquons également que la vitesse moyenne de gonflement solide macroscopique des combustibles *MOX* ADU (Cf. droite de régression figure 2.2(b)) est légèrement inférieure à celle des combustibles *MOX* AUC (Cf. droite de régression figure 2.2(a)). La différence de microstructure pourrait expliquer cet écart. Il faut néanmoins rester prudent car celle-ci est de faible amplitude.

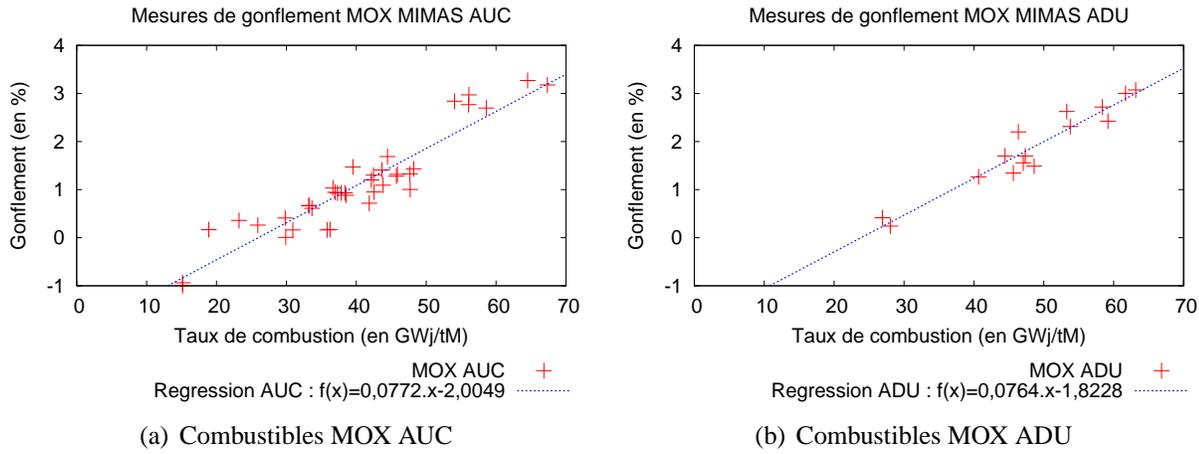


FIG. 2.2: Mesures de gonflement volumique apparent obtenu sur les différents types de combustibles MOX (après densification)

Ce gonflement du combustible peut être représenté par une loi linéaire en fonction du **taux de combustion moyen au point d'intégration de la pastille**, aussi bien pour les combustibles *MOX* que *UO₂* :

$$\frac{\Delta V}{V_0} = \beta \rho_0 Bu \quad (2.3)$$

avec :

- Bu le taux de combustion moyen au point d'intégration ($MW j/tM$) ;
- ρ_0 la densité relative initiale exprimée en pourcentage de la densité théorique de l' UO_2 ou de l' $(U - Pu)O_2$;
- β la vitesse de gonflement solide ($\%/MW j/tM$) évaluée par les pentes des courbes précédentes (courbes : 2.2(a) et 2.2(b)) ;
- V_0 volume initial de la pastille (cm^3) ;

L'utilisation de cette approche permet de bien évaluer le gonflement solide macroscopique des pastilles *UO₂* et *MOX* mais elle ne permet, en aucun cas, d'évaluer les champs locaux au sein des phases du combustible *MOX*. Dès lors, pour évaluer ces champs locaux, nous ferons l'hypothèse que la relation 2.3 reste vraie à l'échelle des phases inclusionnaires (amas uranifères et plutonifères) et de l'enrobage, mais nous appliquerons le taux de combustion local de la phase (Celui-ci ayant été évalué par les calculs de neutronique précédents).

Le tenseur d'ordre 2 associé à cette déformation sera considéré comme une déformation libre (mécanisme indépendant du champ de contrainte), uniforme par phase (le taux de combustion est considéré comme uniforme par phase), hydrostatique, isotrope et noté : $\underline{\underline{\epsilon}}^{gs}$. Cette déformation pourra être alimentée par les modèles que l'on trouve dans les codes $1D_{1/2}$.

2.2.3 Restructuration

Le phénomène de restructuration a, au même titre que la densification ou le gonflement solide, une influence importante sur la microstructure du combustible *MOX* au cours de l'irradiation et de surcroît sur son comportement mécanique. Ce mécanisme apparaît au sein du combustible *MOX* du fait des deux effets combinés de la fission nucléaire : température et irradiation. Contrairement à la densification et au gonflement solide, la restructuration dépend également de l'état de contrainte hydrostatique locale qui règne au sein du milieu hétérogène.

La restructuration du combustible a été identifiée, tout d'abord, sur les pastilles UO_2 comme étant caractéristique des pastilles fortement irradiées. Pour ce combustible, la fertilisation neutronique de l'uranium est plus intense en périphérie des pastilles qu'au centre, ce qui conduit à la création d'une quantité plus importante de plutonium. Le taux de combustion dans cette zone est donc plus élevé que le taux moyen de la pastille, avec pour effet la création d'un grand nombre de défauts dans la structure atomique de l'oxyde (Cf. [LEMOINE and BARON, 2009]). La faible température de cette région, inférieure à 850°C , ne permet pas la restauration de ces défauts et l'on observe une transformation complète de la microstructure de la zone (fin du troisième, début du quatrième cycle d'irradiation). Les conséquences (Cf. [LEMOINE and BARON, 2009]), expliquées ici de façon succincte, en sont à la fois une fragmentation des grains pour évacuer l'énergie des défauts, ce qui engendre une taille de grains submicronique, ainsi qu'une porosité (bulles sphériques de taille nanométrique remplies de gaz : Xénon et Krypton) importante qui augmente au delà d'un taux de combustion de 60 GWj/tM . Celle-ci peut atteindre environ 10 à 15 % en fraction volumique. Les produits de fissions gazeux (Xénon, Krypton), qui étaient créés dans cette zone et dissous au sein des grains polyédriques (taille d'une dizaine de microns) avant restructuration, se retrouvent progressivement à précipiter sous forme de nano-bulles après restructuration. Ces changements influencent fortement les propriétés du combustible. Ce mécanisme est appelé effet «RIM» (acronyme anglais : jante ou bord). Diverses analyses ont montré que la majeure partie des gaz de fission est toujours présente dans la région. Cet effet de peau a peu d'influence sur l'accélération du relâchement de gaz aux forts taux de combustion. Par contre cette microstructure particulière, sur une épaisseur de $200\mu\text{m}$, va jouer un rôle bénéfique lors des phénomènes d'interactions pastille-gaine. Elle est a priori beaucoup plus facilement déformable que le combustible «massif».

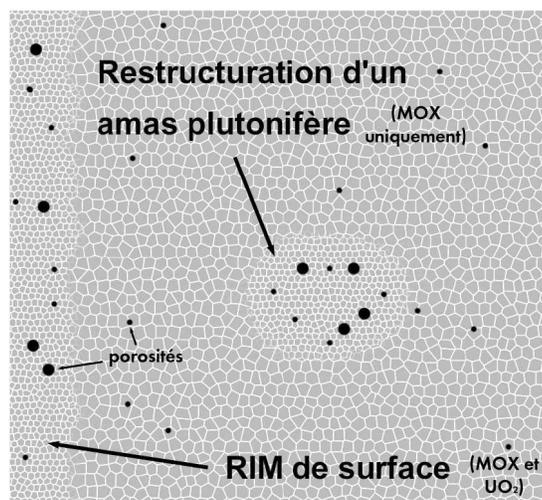


FIG. 2.3: Illustration schématique des différentes conséquences de la restructuration

Les amas plutonifères MOX constituent des surconcentrations intrinsèques en plutonium du matériau. Ainsi, un mécanisme similaire à celui décrit précédemment se produit au sein de ces amas (Cf. partie 4 de [LEMOINE and BARON, 2009]), mais dès la fin du premier cycle d'irradiation. En effet, le taux de combustion d'un amas plutonifères étant par définition supérieur au taux de combustion moyen de la pastille, ces amas se restructurent sous irradiation de manière «similaire» à ce qui est observé en périphérie des pastilles UO_2 voir figure 2.3. Dans ce paragraphe, nous ne décrivons pas l'ensemble des équations constitutives pour modéliser ce mécanisme. Nous allons uniquement évoquer l'existence de modules de physico-chimie capables de prendre en compte ce mécanisme aussi bien au sein du combustible UO_2 que du combustible MOX. Le code de calcul MARGARET (Cf. [NOIROT, 2005]) permet de décrire le mécanisme de restructuration au cours de l'irradiation, quel que soit l'état du combustible (sain, en restructuration ou restructuré). Ce code (Cf. [BOULORE, 2004b], [BOULORE, 2004a]) de calcul permet, également, de modéliser l'hétérogénéité des combustibles MOX. **Le principe général du modèle MARGARET V3.2 (adapté aux combustibles MOX) est de considérer que chaque phase modélisée se comporte comme une phase homogène, et en cela vérifie le modèle de comportement des gaz de fission MARGARET V3.1. Simplement, on considère que les termes sources de gaz sont différents en fonction de la phase car les taux de fission locaux y sont différents. Des effets de réimplantation interphase locaux sont également à prendre en compte.** De ce code de calcul nous pouvons donc extraire plusieurs informations, notamment, le gonflement moyen par phase induit par le phénomène de restructuration. En couplant cette approche à nos calculs micro-mécaniques, cela nous permettra de bien évaluer les champs mécaniques locaux. **Remarque :** il existe également des modules simplifiés et intégrés dans les codes comme CYRANO3 ou ALCYONE capables de modéliser la restructuration du combustible.

En conclusion, le mécanisme de restructuration est un mécanisme qui apparaît à la fois dans les combustibles UO_2 et MOX, et qui est issu des mêmes mécanismes de création. La fragmentation et l'apparition d'une forte porosité pressurisée sont la conséquence première d'un fort taux de combustion (ce seuil est très vite atteint dans les amas plutonifères). Un facteur qui vient annihiler la restructuration est la température locale élevée, qui permet une relaxation des contraintes liées aux défauts ponctuels, et empêche la fragmentation. Bien que les propriétés mécaniques locales du matériau soient légèrement améliorées par la restructuration, la quantité de bulles présentes dans les amas plutonifères peut avoir une influence directe sur le relâchement des gaz de fission. En effet, une fracturation ou une fissuration qui intercepterait ces bulles, donc contenant beaucoup de produits de fission, pourrait déverser dans le volume libre du crayon une quantité importante de ces produits et donc augmenter la pression interne du crayon. Or, nous avons vu que la pression interne du crayon peut vite devenir un critère limitant pour l'exploitant, particulièrement avec les combustibles MOX. Il est donc primordial de bien évaluer la taille de ces bulles ainsi que la fraction volumique de celles-ci. Par conséquent, on comprend l'importance d'avoir recours à un calcul micro-mécanique couplé aux codes de physico-chimie actuels.

Le tenseur d'ordre 2 associé à cette déformation sera considéré comme une déformation non libre (on supposera une dépendance linéaire de cette vitesse de déformation viscoplastique à la contrainte hydrostatique locale, conformément aux hypothèses de [RICAUD and MASSON, 2008]), uniforme par phase (on fait l'hypothèse que les bulles sont petites et distribuées de manière uniforme), hydrostatique, isotrope et notée : $\underline{\underline{\epsilon}}^{vpm}$. La composante de ce tenseur pourra être alimentée (couplage) par les modèles que l'on trouve dans les codes $1D_{1/2}$, type MARGARET.

2.2.4 Fluage induit par l'irradiation

En irradiation de base, le combustible flue de façon athermique. Dans ce régime de fonctionnement le fluage thermique n'est pas activé. Le potentiel de dissipation (Cf. [GATT, 2004]) associé est le suivant :

$$\Psi_{irr}(\sigma_{eq}) = \frac{1}{2} A_{irr} \dot{F} \sigma_{eq}^2 e^{-\frac{Q_{irr}}{RT}} \quad (2.4)$$

avec σ_{eq} la contrainte de von Mises définie par $\sigma_{eq} = \sqrt{\frac{3}{2} \underline{\underline{\sigma}}^{dev} : \underline{\underline{\sigma}}^{dev}}$ où $\underline{\underline{\sigma}}^{dev} = \underline{\underline{\sigma}} - \sigma_m \underline{\underline{\mathbb{I}}}$ et σ_m la contrainte hydrostatique définie par $\sigma_m = \frac{Tr(\underline{\underline{\sigma}})}{3}$. Comme signalé au paragraphe 2.1.2, **le fluage induit par l'irradiation dépend linéairement de la contrainte σ_{eq} et de la densité de fission locale \dot{F} . Mais il dépend également de la température T .** Q_{irr} , A_{irr} et k_{irr} sont des constantes à identifier (R la constante des gaz parfaits). L'ensemble de cette analyse confirme donc que la cinétique de fluage va être différente au sein de chacune des phases du combustible *MOX*. Dès lors, pour évaluer les champs locaux, nous supposons que la relation macroscopique 2.4 reste vrai à l'échelle des phases inclusionnaires (amas uranifères et plutonifères) et de l'enrobage (La densité de fission locale de chacune des phases étant évaluée par des calculs de neutronique amonts). Par la suite nous écrirons le potentiel de dissipation de la façon suivante : $\Psi_{irr}(\sigma_{eq}) = \frac{1}{6\mu_r^{vp}(t)} \sigma_{eq}^2$ avec μ_r^{vp} le module de cisaillement visqueux de la phase d'indice r (uniforme) qui dépend du temps t (vieillessement).

Le tenseur d'ordre 2, associé à cette déformation, sera considéré comme une déformation non libre (elle dépend linéairement de la contrainte équivalente), déviatorique et isotrope. Elle sera notée : $\underline{\underline{\epsilon}}^{vpd}$. La composante de ce tenseur sera alimentée par le potentiel de dissipation (2.4).

2.2.5 Conclusion

Le paragraphe 2.2 nous a permis d'analyser succinctement l'ensemble des déformations qui apparaissent, en fonctionnement normal (service), au sein de chacune des phases du combustible *MOX*. Ces déformations dépendent implicitement ou explicitement de la densité de fission locale qui est hétérogène dans un combustible *MOX* (effet de la répartition du plutonium). Elles vont donc se produire avec une cinétique plus ou moins importante. Ces déformations sont :

- **Déformations indépendantes du champ de contraintes et de la température :**
 - la densification ;
 - le gonflement solide ;
- **Déformations dépendantes du champ de contraintes et de la température :**
 - la restructuration du combustible qui induit du gonflement ;
- **Déformations dépendantes du champ de contraintes :**
 - le fluage athermique induit par l'irradiation ;

Parmi ces déformations, certaines n'apparaissent qu'au sein d'une phase : la restructuration et son gonflement se produisent essentiellement dans les amas plutonifères (fin de premier cycle d'irradiation). Tandis que le fluage induit par l'irradiation (Cf. equation (2.4)) se produit dans les trois phases et dès la mise en puissance du réacteur. Il en va de même pour le gonflement solide et la densification.

Au sein de la microstructure MOX, ces déformations vont conduire à des hétérogénéités mécaniques. Nous allons donc présenter dans le paragraphe suivant le problème local à résoudre afin de saisir le niveau d'implication de ces déformations.

2.3 Problème mécanique local

Nous appliquons ici des conditions aux limites périodiques (conditions aux limites détaillées au chapitre 3). Le problème local à résoudre est le suivant :

$$(P_{meca}) \left\{ \begin{array}{l} \underline{\text{div}} \underline{\underline{\sigma}}(\underline{x}, t) = 0 \quad \forall \underline{x} \in V, \\ \underline{\underline{\sigma}}(\underline{x}, t) = \underline{\underline{C}}(t) : \left(\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{x}, t) - \underline{\underline{\varepsilon}}^{\text{in}}(\underline{x}, t) \right) \text{ avec } \underline{\underline{\varepsilon}}^{\text{in}}(\underline{x}, t) = \underline{\underline{\varepsilon}}^{\text{dens}}(\underline{x}, t) + \underline{\underline{\varepsilon}}^{\text{gs}}(\underline{x}, t) + \underline{\underline{\varepsilon}}^{\text{vp}}(\underline{x}, t), \\ \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{x}, t) = \frac{1}{2} \left(\underline{\underline{\text{grad}}}(\underline{u}(\underline{x}, t)) + {}^T \underline{\underline{\text{grad}}}(\underline{u}(\underline{x}, t)) \right), \\ \underline{\underline{\varepsilon}}^{\text{dens}}(\underline{x}, t) = \sum_{r=1}^N \chi^{(r)}(\underline{x}) \varepsilon_r^{\text{dens}}(t) \underline{\underline{i}} \text{ et } \underline{\underline{\varepsilon}}^{\text{gs}}(\underline{x}, t) = \sum_{r=1}^N \chi^{(r)}(\underline{x}) \varepsilon_r^{\text{gs}}(t) \underline{\underline{i}}, \\ \underline{\underline{\varepsilon}}^{\text{vp}}(\underline{x}, t) = \sum_{r=1}^N \chi^{(r)}(\underline{x}) \frac{\partial \psi_r}{\partial \underline{\underline{\sigma}}}(\sigma_{eq}(\underline{x}, t), \sigma_m(\underline{x}, t)) \text{ où } \psi_r(\sigma_{eq}, \sigma_m, t) = \frac{1}{6\mu_r^{\text{vp}}(t)} \sigma_{eq}^2 + \frac{1}{2k_r^{\text{vp}}(t)} \sigma_m^2, \\ \underline{u}(\underline{x}, t) = \underline{\underline{E}}(t) \cdot \underline{x} + \tilde{\underline{u}}(\underline{x}, t) \text{ avec } \underline{\underline{E}} \text{ déformation macroscopique,} \\ \tilde{\underline{u}}(\underline{x}, t) \cdot \underline{\underline{n}} \text{ et } \underline{\underline{\sigma}}(\underline{x}, t) \cdot \underline{\underline{n}}(\underline{x}) = 0, \quad \forall \underline{x} \in \partial V \end{array} \right. \quad (2.5)$$

On désigne par :

- $\underline{\underline{\sigma}}$ le champ de contrainte en MPa et $\underline{\underline{\varepsilon}}$ le champ de déformation total (-) ;
- $\underline{\underline{i}}$ le tenseur identité du deuxième ordre, $\chi^{(r)}(\underline{x})$ la fonction caractéristique de la phase r , N le nombre de constituants ($N = 2$ pour un MOX biphasé type AUC et $N = 3$ pour un MOX triphasé type ADU). On définit la fonction caractéristique associée à la phase r par :

$$\chi^{(r)}(\underline{x}) = \begin{cases} 1 & \text{si } \underline{x} \in V_r \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (2.6)$$

avec V_r le volume de la phase r ;

- $\underline{\underline{\varepsilon}}^{\text{in}}$ le champ de déformation inélastique composé de l'ensemble des déformations inélastiques que nous avons citées au paragraphe 2.2 :
 - $\underline{\underline{\varepsilon}}^{\text{dens}}$ la densification et $\varepsilon_r^{\text{dens}}(t)$ la déformation scalaire de densification associée à la phase r ;
 - $\underline{\underline{\varepsilon}}^{\text{gs}}$ le gonflement solide et $\varepsilon_r^{\text{gs}}(t)$ la déformation scalaire de gonflement solide associée à la phase r ;
 - $\underline{\underline{\varepsilon}}^{\text{vp}}$ traduit à la fois le fluage induit par l'irradiation ($\underline{\underline{\varepsilon}}^{\text{vpd}}$ où μ_r^{vp} est le module de cisaillement visqueux de la phase r qui dépend du temps) et le gonflement induit par la restructuration ($\underline{\underline{\varepsilon}}^{\text{vpm}}$ où k_r^{vp} est le module de compressibilité visqueux de la phase r qui dépend du temps). Dans la suite nous assimilons donc cette déformation ($\underline{\underline{\varepsilon}}^{\text{vpm}}$) à une déformation viscoplastique (car, formellement nous allons la traiter comme une déformation viscoplastique). Nous supposons par ailleurs que, au premier ordre au moins, une relation linéaire lie ce gonflement à la pression. Nous introduisons ainsi ce module de compressibilité visqueux ;

- \underline{u} le vecteur déplacement en mètre ;
- $\underline{\underline{C}}(t)$ le tenseur élastique, considéré comme isotrope, homogène et vieillissant. Il sera donc défini par $\underline{\underline{C}}(k(t), \mu(t))$ (k module de compressibilité élastique en MPa et μ module de cisaillement élastique en MPa) ou par $\underline{\underline{C}}(E(t), \nu(t))$ (E module d'Young en MPa et ν coefficient de Poisson (-)). On a $k(t) = \frac{E(t)}{3(1-2\nu(t))}$ et $\mu(t) = \frac{E(t)}{2(1+\nu(t))}$;
- V le volume du VER en m^3 , ∂V le bord de celui-ci, \underline{x} le vecteur position au sein du VER et \underline{n} la normale sortante.

A ce stade, plusieurs hypothèses ont été adoptées :

1. Le champ de température et la source de chaleur sont considérés comme homogènes au sein de la microstructure *MOX*. L'homogénéité de ces champs a été vérifiée en réalisant une étude de thermique linéaire avec sources de chaleur. Souhaitant quantifier l'impact de la source de chaleur locale sur le champ de température, nous avons été contraints de réaliser un développement asymptotique à double échelle et à l'ordre 2. Cette démonstration a été réalisée sur différentes microstructures représentatives du combustible *MOX* type AUC (Cf. annexe A). Néanmoins, uniquement des microstructures biphasées (*MOX* AUC) ont été considérées. En perspective de cette thèse, il serait donc intéressant, de vérifier, à minima, si cette hypothèse reste vraie sur les microstructures *MOX* triphasées type ADU. Les contrastes de la conductivité thermique et de la source de chaleur locale entre cette troisième phase (amas uranifère) et la matrice sont très faibles sous irradiation (inférieurs à 1.5). Nous pouvons donc supposer que ces champs seront relativement homogènes.
2. Les propriétés élastiques sont également considérées comme homogènes au sein de la microstructure *MOX*. L'homogénéité a également été vérifiée (Cf. annexe A). Comme pour la thermique, uniquement des microstructures biphasées type AUC ont été considérées, il sera donc intéressant de vérifier aussi que cette hypothèse reste vraie sur des microstructures *MOX* triphasées type ADU.

2.4 Bilan du chapitre

Afin de développer une modélisation du combustible *MOX* par changement d'échelles (échelle des phases inclusionnaires : amas uranifères et plutonifères), nous avons recensé, à travers ce chapitre, l'ensemble des mécanismes qui induiraient, en régime de fonctionnement normal, des hétérogénéités du point de vue mécanique. D'un point de vue formel, **la loi de comportement proposée ici est de nature visco-élastique linéaire compressible vieillissante avec des déformations libres imposées.** Les déformations libres sont la densification et le gonflement solide. L'aspect visco-élastique linéaire incompressible vient du fluage induit par l'irradiation. Pour un matériau 100 % dense, ce fluage n'induirait que des déformations de cisaillement (pas de variation de volume). Cependant, l'apparition de bulles pressurisées sous irradiation, par le mécanisme de restructuration, est susceptible d'induire aussi une déformation volumique de fluage. Le terme «compressible» est issu de ce mécanisme. Le côté vieillissant vient du fait que les propriétés matériaux évoluent en fonction du temps d'irradiation. Il s'agit en réalité d'un vieillissement implicite en temps car ces propriétés évoluent, essentiellement, en fonction du taux de combustion et de la porosité. Le terme d'endommagement serait plus approprié pour qualifier la dégradation des propriétés mécaniques par la porosité.

La construction de notre modèle d'homogénéisation nécessite de présenter en amont la démarche générale de modélisation par changement d'échelles, les fondements de l'homogénéisation et les modèles d'homogénéisation, présents dans la littérature, qui sont susceptibles de remplir le cahier des charges défini au paragraphe 1.4 du chapitre 1 et en adéquation avec le comportement local établi au paragraphe 2.3 chapitre 2. C'est donc l'objectif du chapitre suivant.

Chapitre 3

Principe de la méthode de changement d'échelles et modèles d'homogénéisation en adéquation avec le comportement du combustible MOX en service

Objet du chapitre :

L'objectif de ce chapitre est de présenter la démarche générale pour construire un modèle d'homogénéisation ainsi que les modèles d'homogénéisation, présents dans la littérature, qui sont susceptibles de remplir le cahier des charges défini au paragraphe 1.4 du chapitre 1 et qui sont en adéquation avec le comportement local établi au paragraphe 2.3 chapitre 2. Après avoir rappelé, dans le premier paragraphe, la motivation et la méthodologie de la modélisation par changement d'échelles, notre analyse se décompose ensuite en trois parties :

1. dans le deuxième paragraphe nous présentons l'étape de représentation ;
2. puis, nous nous intéressons à l'étape de localisation dans le troisième paragraphe ;
3. enfin dans les deux derniers paragraphes, nous présentons les fondements de l'homogénéisation et des modèles d'homogénéisation répondant à nos exigences. Les modèles d'homogénéisation qui suscitent notre intérêt, à savoir NFTA (Cf. [MICHEL and SUQUET, 2003]) et Mori-Tanaka incrémental (Cf. [RICAUD and MASSON, 2009]), sont donc analysés dans ce dernier paragraphe.

Sommaire

3.1	Motivation et méthodologie	51
3.1.1	Motivation	51
3.1.2	Méthodologie	51
3.2	La représentation	51
3.2.1	Séparation des échelles	52
3.2.2	Représentation VER	53
3.2.3	Conclusion	53
3.3	La localisation	54
3.3.1	Principe	54
3.3.2	Conditions aux limites	54
3.3.3	Le tenseur de localisation	56
3.4	Les fondements de l'homogénéisation	56
3.4.1	Déformation homogène imposée au contour	57

3.4.2	Contrainte homogène imposée au contour	58
3.4.3	Approches moyennes par phase	59
3.4.4	Conclusion - Localisation et Homogénéisation	60
3.5	Modèles d'homogénéisation en adéquation avec le comportement local du combustible MOX	61
3.5.1	Matériaux standard généralisés	61
3.5.2	Mori-Tanaka incrémental biphasé [RICAUD and MASSON, 2009]	62
3.5.3	TFA [DVORAK and BENVENISTE, 1992]	71
3.5.4	NTFA [MICHEL et al., 2000]	75
3.6	Bilan du chapitre	80

Dans ce chapitre nous allons traiter uniquement de problème mécanique.

3.1 Motivation et méthodologie

3.1.1 Motivation

Le comportement macroscopique d'un matériau est lié à sa microstructure. Pour construire des modèles plus prédictifs, approches nommées «*déductives*» par Zaoui (Cf. [BORNERT *et al.*, 2001a]), des efforts ont été entrepris au cours des dernières décennies pour prendre en compte le caractère hétérogène de la matière à l'échelle microscopique dans la modélisation de son comportement à l'échelle macroscopique. Le passage du microscopique au macroscopique est en réalité un peu approximatif. Zaoui parle plutôt «*d'un aller retour de plus en plus efficace et complet entre différentes échelles d'appréhension des phénomènes et des propriétés, situées les unes par rapport aux autres par toute une gradation de qualificatifs allant du nano au méga en passant par le micro, le méso ou le macro...*» (Cf. [BORNERT *et al.*, 2001a]). La modélisation par changement d'échelles ou la démarche d'homogénéisation consiste à substituer un Milieu Homogène Équivalent (MHE) à un milieu hétérogène. L'objectif est de déterminer des propriétés homogènes du matériau, en fonction des paramètres microstructuraux et des différentes phases qui le caractérisent. En pratique, elles sont établies sur un Volume Élémentaire Représentatif (VER). L'intérêt d'une telle modélisation est qu'elle permet de simplifier la représentation du milieu hétérogène, d'estimer le comportement de matériaux hétérogènes à élaborer et d'améliorer le caractère prédictif des lois de comportement.

3.1.2 Méthodologie

La démarche d'homogénéisation se décompose en trois étapes (Cf. [BORNERT *et al.*, 2001a]) :

1. **La représentation** : il s'agit de définir le milieu hétérogène. A ce stade, il faut préciser la constitution de cet ensemble : on doit définir les constituants, la manière dont ils sont disposés, les propriétés mécaniques qu'on leur affecte... Dans notre cas, il s'agit du combustible MOX MIMAS ADU avec sa matrice (enrobage) et ses deux phases inclusionnaires : amas uranifères et plutonifères. Cette étape conduit (si c'est possible : notion de séparation d'échelle détaillée dans le paragraphe 3.2) à la définition d'un VER.
2. **La localisation** : elle permet de déterminer les champs mécaniques, à l'échelle microscopique, c'est à dire au sein du VER, induits par un chargement à l'échelle macroscopique (pastille nucléaire MOX). Cette étape établit les relations de passage de l'échelle macroscopique à celle microscopique (tenseur de localisation).
3. **L'homogénéisation** : elle consiste à synthétiser les résultats mécaniques précédents, obtenus au sein du VER, et à en déterminer la réponse moyenne. On établit, ainsi, les relations de passage de l'échelle microscopique à l'échelle macroscopique. Les propriétés effectives du VER, qui sont celles du MHE, constituent donc le résultat de cette étape d'homogénéisation.

Ces trois étapes, constitutives de la démarche de modélisation par changement d'échelles, sont abordées de manière plus détaillée dans les trois paragraphes suivants.

3.2 La représentation

Il s'agit de construire un VER représentatif du milieu hétérogène considéré (combustible MOX). Concrètement, il s'agit de définir ses constituants, de préciser leur répartition et leurs propriétés. La construction de ce VER doit dans un premier temps vérifier la notion de séparation des échelles.

3.2.1 Séparation des échelles

Pour pouvoir passer de l'échelle des hétérogénéités (échelle microscopique : dans notre cas les phases inclusionnaires plutonifères ou uranifères sont comprises entre 10 et 150 μm) à l'échelle du matériau (échelle macroscopique : dans notre cas il s'agit de la pastille combustible, rayon d'environ 4,0 mm, voir la figure 1.4 pour obtenir ses dimensions caractéristiques précises), on doit dans un premier temps établir les grandeurs caractéristiques, voir figure 3.1 (Cf. [BORNERT et al., 2001a]).

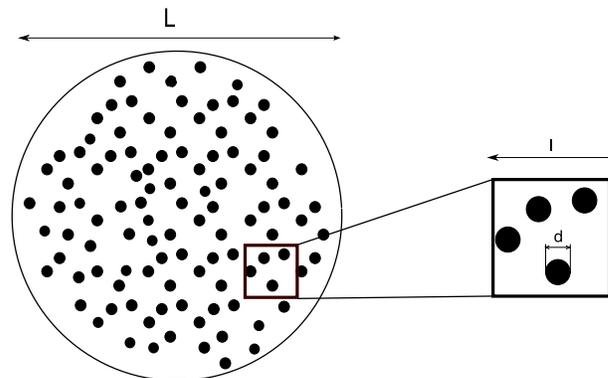


FIG. 3.1: Echelles d'analyse

La taille caractéristique de l'échelle microscopique d est celle des hétérogénéités. On doit veiller à ce que cette échelle soit pertinente : elle ne doit pas descendre inutilement à un niveau trop fin, et les outils de la mécanique des milieux continus doivent être encore applicables. Dans notre cas d'étude, les phases inclusionnaires uranifères et plutonifères ne descendent pas en dessous d'un diamètre de cercle équivalent de dix microns. Les outils de la mécanique des milieux continus s'appliquent. Il faut également déterminer l , la taille du volume sur lequel les calculs vont être effectués c'est à dire le VER, sachant que L est la dimension caractéristique de la structure (la pastille nucléaire *MOX* de rayon 4,0 mm) :

- $l \ll L$: la structure de dimension L doit pouvoir être traitée comme un milieu continu. Un volume de dimension l doit pouvoir être considéré comme un point à l'échelle de la structure. De plus, les relations entre les moyennes doivent rester les mêmes dans tous les volumes de la structure de dimension supérieure à l .
- $l \gg d$: sans cette condition, le comportement global résultant d'un matériau à microstructure aléatoire fluctuerait fortement d'une particule à une autre.

Ainsi si nous appliquons ces conditions à notre cas d'étude, nous avons par définition la taille du VER *MOX* qui doit être grande devant la taille des hétérogénéités (les amas uranifères ou plutonifères) et petite devant les dimensions de la structure considérée (la pastille nucléaire *MOX*) : les dimensions de la pastille restant petites (environ 4 mm de rayon), il faudra probablement compter un VER de volume de 250 μm , soit une quinzaine d'éléments finis radiaux sur un rayon, ce qui fera un rapport d'échelle acceptable et égal à 10 pour des amas de 25 μm de diamètre de cercle équivalent (ces affirmations seront bien évidemment vérifiées lors des calculs servant à la caractérisation du VER). Néanmoins, le rapport d'échelle restera relativement faible devant les plus gros amas plutonifères (actuellement pour certains lots de fabrication industrielle, ces amas peuvent atteindre 150 μm de diamètre de cercle équivalent) avec un facteur d'échelle de 1,7. Même si la fraction volumique de cette classe d'amas n'est pas très élevée, elle fait néanmoins partie intégrante de la microstructure. Il est donc important de noter que pour la suite nous toucherons les limites du cadre méthodologique général (la notion même de loi de comportement homogène pourra perdre de son sens dans ce cas) lorsqu'on

cherchera à représenter les effets de gros amas. Nous reviendrons sur ce point dans le chapitre 5. Si l'ensemble des conditions, citées ci-dessus (notions de séparation des échelles), sont respectées, nous avons la possibilité de définir un Volume Élémentaire Représentatif (VER) du matériau hétérogène considéré. On peut donc à présent passer à l'étape de représentation.

3.2.2 Représentation VER

C'est donc la phase de description du système à considérer à partir des échelles microscopique et macroscopique qu'on suppose fixées.

Milieu périodique - «Cellule unité» : Dans le cas de milieux périodiques, où le VER se réduit à une cellule de base de l'arrangement périodique, cette étape de représentation conduit à une **description déterministe** du milieu hétérogène (Cf. [BORNERT *et al.*, 2001a]).

Milieu aléatoire : Dans le cas de milieux aléatoires (cas du combustible MOX), la description mécanique et géométrique ne peut plus être déterministe. Deux VER voisins ne seront jamais superposables même si, macroscopiquement, leur comportement est le même. On ne peut donc en faire qu'une **description statistique** (Cf. [BORNERT *et al.*, 2001a]). Il faut donc identifier les différentes phases (caractéristiques mécaniques différentes) et leur comportement. L'identification du comportement à appliquer au sein de chacune des phases a été réalisée au chapitre 2. Puis, il faut extraire les différents paramètres géométriques pertinents, c'est à dire ceux qui peuvent influencer sur le comportement mécanique. On peut citer la fraction volumique de chaque phase ou bien encore la fraction volumique de chaque classe diamétrale au sein d'une phase. Dans le cadre de notre étude, cette étape sera présentée au chapitre 4.

3.2.3 Conclusion

Nous avons pu voir que **la définition du VER est difficile à appliquer *stricto sensu* dans le cas des milieux aléatoires.** En effet, la notion de représentativité est difficile à définir car elle est fonction, en particulier, de la propriété étudiée. **Différents critères sont fréquemment employés pour dimensionner le VER** dans le cas des propriétés thermo-mécaniques :

1. ses **propriétés effectives n'évoluent plus lorsque ses dimensions augmentent ;**
2. son **comportement effectif est indépendant des conditions aux limites appliquées ;**
3. son **comportement effectif est identique pour différentes réalisations.**

Cela conduit généralement à analyser l'évolution des propriétés effectives de VER de taille croissante et de tester différentes conditions aux limites. **Fixer la taille du VER en satisfaisant toutes ces conditions peut s'avérer difficile et conduire à des VER de grande dimension (Cf. [FOREST, 2004]).** Une **alternative** est de **mettre en oeuvre une approche statistique en réalisant plusieurs éléments de volume de plus petites dimensions en postulant que le comportement effectif du milieu hétérogène étudié est égal à la moyenne du comportement de l'ensemble de ces réalisations (Cf. [KANIT *et al.*, 2003]).** Finalement, la taille du VER est fonction du milieu étudié (fraction volumique, morphologie des différentes phases...), des propriétés de ses constituants ainsi que du contraste entre celles-ci et aussi de ce que l'on cherche à modéliser : comportement thermique, mécanique, linéaire ou non linéaire... Ce sont ces facteurs qui conditionnent le choix du critère permettant de statuer sur la notion de VER. Cette démarche sera présentée au chapitre 5.

Analysons maintenant les étapes de localisation et d'homogénéisation qui permettent non seulement, de caractériser la bonne dimension du ou des VER, mais aussi et surtout, de fournir les champs locaux au sein du VER ainsi que son comportement effectif.

3.3 La localisation

3.3.1 Principe

Il s'agit de la phase d'analyse de la réponse mécanique du VER de volume V , à diverses sollicitations.

Remarque sur les notations utilisées :

Dans la suite de nos études, nous désignerons toujours par \underline{x} le vecteur position au sein du VER, V le volume de ce VER, ∂V le contour de celui-ci et \underline{n} la normale extérieure à ∂V . Dans le cadre de la mécanique, les grandeurs $\underline{u}(\underline{x})$, $\underline{\sigma}(\underline{x})$ et $\underline{\varepsilon}(\underline{x}) = \frac{1}{2} \left(\underline{\text{grad}}(\underline{u}(\underline{x})) + {}^T \underline{\text{grad}}(\underline{u}(\underline{x})) \right)$ désigneront respectivement les champs microscopiques de déplacements, de contraintes et de déformations, tandis que \underline{U} et $\underline{\Sigma}$ et \underline{E} désigneront les champs macroscopiques.

Lors de la localisation, on cherche alors les champs microscopiques (locaux) de contraintes $\underline{\sigma}(\underline{x})$, de déformations $\underline{\varepsilon}(\underline{x})$ induits au sein du VER par le chargement macroscopique (global) de déformations \underline{E} , de contraintes $\underline{\Sigma}$.

Il est important de rappeler que la moyenne volumique $\langle f \rangle_V$ d'un champ $f(\underline{x})$, défini en tout point \underline{x} d'un volume V , est donnée par :

$$\langle f \rangle_V = \frac{1}{|V|} \int_V f(\underline{x}) dV \quad (3.1)$$

Si nous sommes uniquement sur le comportement mécanique, la seule relation dont nous disposons entre les grandeurs locales et globales est que la moyenne des déformations et celle des contraintes sur la microstructure doivent être égales, respectivement, à la déformation et à la contrainte macroscopique, soit :

$$\langle \underline{\varepsilon} \rangle_V = \underline{E} \quad \text{et} \quad \langle \underline{\sigma} \rangle_V = \underline{\Sigma} \quad (3.2)$$

La difficulté du problème de localisation est de déterminer le chargement à appliquer au VER pour satisfaire ces relations. Une solution est d'imposer un chargement homogène sur son contour ∂V . On vérifie l'égalité entre la moyenne $(\underline{E}; \underline{\Sigma})$ des champs locaux et le champ macroscopique imposé $(\underline{E}^0; \underline{\Sigma}^0)$ par application du théorème de Gauss. Ces conditions sont détaillées ci-après. On abordera, également, les conditions aux limites périodiques, qui satisfont les mêmes relations.

3.3.2 Conditions aux limites

Nous avons vu que les chargements appliqués au VER doivent correspondre aux sollicitations (champs de contraintes ou de déformations macroscopiques) que le VER subirait au sein de la structure globale étudiée. Des conditions homogènes au contour ou des conditions aux limites périodiques sont utilisées afin de simuler ces chargements.

3.3.2.1 Contraintes homogènes sur le contour (CH) :

On impose la condition $\underline{t}^d(\underline{x}) = \underline{\underline{\sigma}}(\underline{x}) \cdot \underline{n} = \underline{\underline{\Sigma}}^0 \cdot \underline{n}$ sur ∂V où $\underline{\underline{\Sigma}}^0$ est une contrainte macroscopique homogène, \underline{n} la normale extérieure au contour. On vérifie, si $\underline{\underline{\sigma}}$ est un champ de contrainte statistiquement admissible, que : $\underline{\underline{\Sigma}} = \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_V = \underline{\underline{\Sigma}}^0$. Ce résultat se retrouve par l'application du théorème de Gauss et de l'équation d'équilibre (en l'absence de forces de volume et en statique). La déformation macroscopique est alors par définition $\underline{\underline{E}} = \langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle_V$

3.3.2.2 Déformations homogènes sur le contour (DH) :

On impose la condition de déplacement $\underline{u}^d(\underline{x}) = \underline{\underline{E}}^0 \cdot \underline{x}$ sur ∂V où $\underline{\underline{E}}^0$ est une déformation macroscopique homogène. On vérifie, si $\underline{\underline{\varepsilon}}$ dérive du champ de déplacement \underline{u} cinématiquement admissible avec \underline{u}^d , que : $\underline{\underline{E}} = \langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle_V = \underline{\underline{E}}^0$. Ce résultat se retrouve par l'application du théorème de Gauss et la relation de compatibilité des déformations. La contrainte macroscopique est alors par définition $\underline{\underline{\Sigma}} = \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_V$

3.3.2.3 Conditions aux limites périodiques (CLP) :

$\underline{\underline{\sigma}}(\underline{x}) \cdot \underline{n}$ doit être anti-périodique (noté #-) sur ∂V . Soit $\underline{\underline{E}}^0$ une déformation macroscopique homogène. Les conditions aux limites périodiques consistent à imposer un vecteur de déplacement $\underline{u}(\underline{x}) = \underline{\underline{E}}^0 \cdot \underline{x} + \tilde{\underline{u}}(\underline{x})$ sur ∂V avec $\underline{u}(\underline{x})$ le déplacement du point \underline{x} et $\tilde{\underline{u}}(\underline{x})$ un déplacement périodique (noté #). Ce déplacement prend donc les mêmes valeurs en deux points homologues sur les côtés opposés de ∂V . On vérifie alors que : $\underline{\underline{E}} = \langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle_V = \underline{\underline{E}}^0$. La contrainte macroscopique est alors, par définition, $\underline{\underline{\Sigma}} = \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_V$.

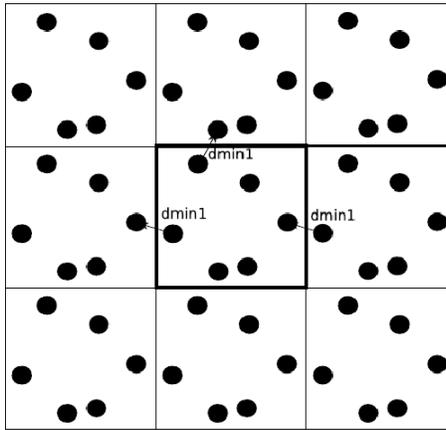


FIG. 3.2: Milieu périodique

En théorie, un VER est suffisamment grand pour que son comportement effectif ne dépende pas des conditions aux limites utilisées pour son chargement. En pratique, les résultats obtenus convergent pour différentes conditions aux limites lorsque la taille du VER augmente mais cette convergence peut être lente. Dans le cas particulier d'un composite il est montré (Cf. figure 2.3 [BORNERT et al., 2001b]) que les conditions aux limites homogènes CH et DH fournissent un encadrement du comportement effectif et que les conditions aux limites périodiques CLP donnent une meilleure estimation des propriétés effectives par rapport aux conditions homogènes. Ces conditions aux limites sont ainsi largement utilisées pour analyser le comportement de VER. Ces conditions sont souvent appliquées à un volume géométriquement périodique (figure 3.2 conditions de symétrie sur la frontière sur ∂V). Il est possible

3.4.1 Déformation homogène imposée au contour

3.4.1.1 Cas général :

Nous avons ici une déformation homogène $\underline{\underline{E}}^0$ qui est imposée sur le contour ∂V du VER.

1. Supposons que la loi de comportement locale s'écrive sous la forme fonctionnelle suivante (Cf. [BORNERT et al., 2001a]) :

$$\underline{\underline{\sigma}}(\underline{x}, t) = \underline{\underline{R}}_{\underline{\underline{x}}} \left[\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{x}, t') \right] \quad \underline{x} \in V \quad t' \leq t \quad (3.6)$$

2. Les déformations locales sont déterminées par la relation de localisation vue précédemment :

$$\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{x}, t') = \underline{\underline{A}}_{\underline{\underline{x}}} \left[\underline{\underline{E}}^0(t''), Y(\underline{x}', t'') \right] \quad \underline{x}' \in V \quad t'' \leq t' \quad (3.7)$$

3. La contrainte macroscopique est alors définie par la moyenne volumique des contraintes locales :

$$\underline{\underline{\Sigma}}(t) = \langle \underline{\underline{\sigma}}(\underline{x}, t) \rangle_V = \langle \underline{\underline{R}}_{\underline{\underline{x}}} \left[\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{x}, t') \right] \rangle_V \quad t' \leq t \quad (3.8)$$

$$\underline{\underline{\Sigma}}(t) = \langle \underline{\underline{R}}_{\underline{\underline{x}}} \left[\underline{\underline{A}}_{\underline{\underline{x}}} \left[\underline{\underline{E}}^0(t''), Y(\underline{x}', t'') \right] \right] \rangle_V \quad \underline{x}' \in V \quad t'' \leq t'$$

La relation établie entre la contrainte et la déformation macroscopique constitue le comportement effectif du matériau, que l'on peut noter :

$$\underline{\underline{\Sigma}}(t) = \tilde{\underline{\underline{R}}}^{dh} \left[\underline{\underline{E}}^0(t') \right] \quad t' \leq t \quad (3.9)$$

3.4.1.2 Cas particulier - Élasticité linéaire [BORNERT et al., 2001b] :

Dans le cas particulier de l'élasticité linéaire, la loi de comportement locale est écrite :

$$\underline{\underline{\sigma}}(\underline{x}) = \underline{\underline{C}}(\underline{x}) : \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{x}) \quad \underline{x} \in V \quad (3.10)$$

avec $\underline{\underline{C}}$ le tenseur de rigidité élastique local.

La contrainte macroscopique est alors définie par la moyenne volumique des contraintes locales :

$$\underline{\underline{\Sigma}} = \langle \underline{\underline{\sigma}}(\underline{x}) \rangle_V = \langle \underline{\underline{C}}(\underline{x}) : \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{x}) \rangle_V \quad \underline{x} \in V$$

Or les déformations locales sont déterminées par la relation de localisation :

$$\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{x}) = \underline{\underline{A}}(\underline{x}) : \underline{\underline{E}}^0 \quad \underline{x} \in V \quad (3.11)$$

D'où :

$$\underline{\underline{\Sigma}} = \langle \underline{\underline{C}}(\underline{x}) : \underline{\underline{A}}(\underline{x}) : \underline{\underline{E}}^0 \rangle_V = \langle \underline{\underline{C}}(\underline{x}) : \underline{\underline{A}}(\underline{x}) \rangle_V : \underline{\underline{E}}^0$$

D'où l'expression du tenseur des rigidités homogénéisé (en déformation imposée) :

$$\tilde{\underline{\underline{C}}}^{dh} = \langle \underline{\underline{C}}(\underline{x}) : \underline{\underline{A}}(\underline{x}) \rangle_V \quad (3.12)$$

3.4.2 Contrainte homogène imposée au contour

3.4.2.1 Cas général :

Nous notons $\underline{\underline{\Sigma}}^0$ la contrainte homogène qui est imposée sur le contour ∂V du VER.

- Supposons que la loi de comportement locale s'écrive sous la forme fonctionnelle suivante, avec $\underline{\underline{F}} = \underline{\underline{R}}^{-1}$ (Cf. [BORNERT et al., 2001a]) :

$$\underline{\underline{\epsilon}}(\underline{x}, t) = \underline{\underline{F}} \left[\underline{\underline{\sigma}}(\underline{x}, t') \right] \quad \underline{x} \in V \quad t' \leq t \quad (3.13)$$

- Les contraintes locales sont déterminées par la relation de localisation vue précédemment :

$$\underline{\underline{\sigma}}(\underline{x}, t') = \underline{\underline{B}} \left[\underline{\underline{\Sigma}}^0(t''), Y(\underline{x}', t'') \right] \quad \underline{x}' \in V \quad t'' \leq t' \quad (3.14)$$

- La déformation macroscopique est alors définie par la moyenne volumique des déformations locales :

$$\underline{\underline{E}}(t) = \langle \underline{\underline{\epsilon}}(\underline{x}, t) \rangle_V = \langle \underline{\underline{F}} \left[\underline{\underline{\sigma}}(\underline{x}, t') \right] \rangle_V \quad t' \leq t \quad (3.15)$$

$$\underline{\underline{E}}(t) = \langle \underline{\underline{F}} \left[\underline{\underline{B}} \left[\underline{\underline{\Sigma}}^0(t''), Y(\underline{x}', t'') \right] \right] \rangle_V \quad \underline{x}' \in V \quad t'' \leq t'$$

La relation établie entre la déformation et la contrainte macroscopique constitue le comportement effectif du matériau, que l'on peut noter :

$$\underline{\underline{E}}(t) = \underline{\underline{\tilde{F}}}^{ch} \left[\underline{\underline{\Sigma}}^0(t') \right] \quad t' \leq t \quad (3.16)$$

3.4.2.2 Cas particulier - Élasticité linéaire [BORNERT et al., 2001b] :

Dans le cas particulier de l'élasticité linéaire, la loi de comportement locale est écrite :

$$\underline{\underline{\epsilon}}(\underline{x}) = \underline{\underline{S}}(\underline{x}) : \underline{\underline{\sigma}}(\underline{x}) \quad \underline{x} \in V \quad (3.17)$$

avec $\underline{\underline{S}} = \underline{\underline{C}}^{-1}$ et qui correspond au tenseur de souplesse élastique local.

La déformation macroscopique est alors définie par la moyenne volumique des déformations locales :

$$\underline{\underline{E}} = \langle \underline{\underline{\epsilon}}(\underline{x}) \rangle_V = \langle \underline{\underline{S}}(\underline{x}) : \underline{\underline{\sigma}}(\underline{x}) \rangle_V \quad \underline{x} \in V$$

Or les contraintes locales sont déterminées par la relation de localisation :

$$\underline{\underline{\sigma}}(\underline{x}) = \underline{\underline{B}}(\underline{x}) : \underline{\underline{\Sigma}}^0 \quad \underline{x} \in V \quad (3.18)$$

D'où :

$$\underline{\underline{E}} = \langle \underline{\underline{S}}(\underline{x}) : \underline{\underline{B}}(\underline{x}) : \underline{\underline{\Sigma}}^0 \rangle_V = \langle \underline{\underline{S}}(\underline{x}) : \underline{\underline{B}}(\underline{x}) \rangle_V : \underline{\underline{\Sigma}}^0$$

D'où l'expression du tenseur des souplesses homogénéisé (en déformation imposée) :

$$\underline{\underline{\tilde{S}}}^{ch} = \langle \underline{\underline{S}}(\underline{x}) : \underline{\underline{B}}(\underline{x}) \rangle_V \quad (3.19)$$

On peut également exprimer cette relation en rigidité :

$$\underline{\underline{\tilde{C}}}^{ch} = \langle \underline{\underline{C}}^{-1}(\underline{x}) : \underline{\underline{B}}(\underline{x}) \rangle_V^{-1} \quad (3.20)$$

Zaoui souligne un point important (Cf. [BORNERT *et al.*, 2001a]) : en effet, a priori, rien ne garantit que les fonctionnelles $\underline{\underline{\tilde{R}}}^{dh}$ et $\underline{\underline{\tilde{F}}}^{ch}$ sont inverses l'une de l'autre, bien que cela soit le cas pour les fonctionnelles locales. Les résultats de l'homogénéisation dépendent des conditions aux limites imposées. Seule la condition de séparation des échelles $d \ll l$ permet de se rapprocher asymptotiquement de cette situation idéale.

Les conditions aux limites homogènes DH et CH fournissent un encadrement du comportement effectif (Cf. [BORNERT *et al.*, 2001b]) : si l'on recherche le tenseur de rigidité effectif $\underline{\underline{\tilde{C}}}$, les conditions aux limites en CH fournissent une sous-estimation alors que les conditions aux limites en DH fournissent une surestimation : $\underline{\underline{\tilde{C}}}^{ch} \leq \underline{\underline{\tilde{C}}} \leq \underline{\underline{\tilde{C}}}^{dh}$.

Dans beaucoup de modèles d'homogénéisation développés par la communauté scientifique, on ne peut déterminer, en localisation, que les champs moyens par phase. Nous illustrons dès lors, à titre d'exemple dans le paragraphe suivant, la façon dont le comportement effectif est évalué.

3.4.3 Approches moyennes par phase

Dans cette partie nous omettons volontairement le vecteur position \underline{x} dans la notation. L'objectif étant de faciliter la lisibilité.

En notant i l'indice de chaque phase du VER et V_i son volume, on définit les champs moyens par phase :

$$\underline{\underline{\varepsilon}}_i = \langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle_{V_i} \quad \text{et} \quad \underline{\underline{\sigma}}_i = \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_{V_i} \quad (3.21)$$

On associe à ces moyennes des tenseurs de localisation moyens par phase :

$$\underline{\underline{A}}_i = \langle \underline{\underline{A}} \rangle_{V_i} \quad \text{et} \quad \underline{\underline{B}}_i = \langle \underline{\underline{B}} \rangle_{V_i} \quad (3.22)$$

tels que :

$$\underline{\underline{\varepsilon}}_i = \underline{\underline{A}}_i : \underline{\underline{E}}^0 \quad \text{et} \quad \underline{\underline{\sigma}}_i = \underline{\underline{B}}_i : \underline{\underline{\Sigma}}^0 \quad (3.23)$$

Exemple en élasticité linéaire :

Le comportement effectif, en élasticité linéaire, (en appliquant des conditions de déformation ou de contrainte homogènes sur le contour) est obtenu grâce aux équations (3.12) et (3.19), qui donnent dans ce cas :

$$\underline{\underline{\tilde{C}}}^{dh} = \langle \underline{\underline{C}}_i : \underline{\underline{A}}_i \rangle_V \quad \text{et} \quad \underline{\underline{\tilde{S}}}^{ch} = \langle \underline{\underline{S}}_i : \underline{\underline{B}}_i \rangle_V \quad (3.24)$$

ou encore :

$$\underline{\underline{\tilde{C}}}^{dh} = \sum_{i=1}^n c_i \underline{\underline{C}}_i : \underline{\underline{A}}_i \quad \text{et} \quad \underline{\underline{\tilde{S}}}^{ch} = \sum_{i=1}^n c_i \underline{\underline{S}}_i : \underline{\underline{B}}_i \quad (3.25)$$

avec $\underline{\underline{C}}_i$ et $\underline{\underline{S}}_i$ les tenseurs de rigidité et de souplesse de la phase i , c_i la fraction volumique de la phase i et n le nombre de phases.

Enfin, dans le cas particulier d'un milieu hétérogène constitué d'une matrice connexe et d'autres phases en inclusion (cas du combustible *MOX* où $n = 3$), grâce à l'égalité sur la moyenne des tenseurs de localisation, on obtient en notant m l'indice de la phase constituant la matrice :

$$\underline{\underline{\tilde{C}}}^{dh} = \underline{\underline{C}}_m + \sum_{i=2}^n c_i (\underline{\underline{C}}_i - \underline{\underline{C}}_m) : \underline{\underline{A}}_i \quad \text{et} \quad \underline{\underline{\tilde{S}}}^{ch} = \underline{\underline{S}}_m + \sum_{i=2}^n c_i (\underline{\underline{S}}_i - \underline{\underline{S}}_m) : \underline{\underline{B}}_i \quad (3.26)$$

Exemple en thermo-élasticité linéaire :

Dans le cadre de la thermo-élasticité linéaire, il est possible de déterminer la dilatation thermique effective du milieu hétérogène à partir des relations de localisation établies en élasticité linéaire et la donnée des coefficients de dilatation thermique de chaque phase. En raisonnant sur les champs moyens par phase, la déformation thermique moyenne dans la phase i , induite par une variation de température ΔT_i supposée uniforme sur la phase i , est égale à :

$$\underline{\underline{\varepsilon}}_i^{th} = \underline{\underline{\alpha}}_i \Delta T_i \quad (3.27)$$

où $\underline{\underline{\alpha}}_i$ est le tenseur de dilatation thermique linéique de la phase i . La loi de comportement s'écrit alors :

$$\underline{\underline{\sigma}}_i = \underline{\underline{C}}_i : \underline{\underline{\varepsilon}}_i + \underline{\underline{k}}_i \Delta T_i \quad \text{ou} \quad \underline{\underline{\varepsilon}}_i = \underline{\underline{S}}_i : \underline{\underline{\sigma}}_i + \underline{\underline{\alpha}}_i \Delta T_i \quad (3.28)$$

avec $\underline{\underline{k}}_i = \underline{\underline{C}}_i : \underline{\underline{\alpha}}_i$.

Par analogie, la loi de comportement macroscopique prend la forme :

$$\underline{\underline{\Sigma}} = \underline{\underline{\tilde{C}}} : \underline{\underline{E}}^0 + \underline{\underline{\tilde{k}}} \Delta T \quad \text{ou} \quad \underline{\underline{E}} = \underline{\underline{\tilde{S}}} : \underline{\underline{\Sigma}}^0 + \underline{\underline{\tilde{\alpha}}} \Delta T \quad (3.29)$$

On montre alors que les tenseurs de rigidité et de souplesse effectifs ont la même expression que dans le cas de l'élasticité linéaire (3.24) :

$$\underline{\underline{\tilde{C}}} = \langle \underline{\underline{C}}_i : \underline{\underline{A}}_i \rangle_V \quad \text{et} \quad \underline{\underline{\tilde{S}}} = \langle \underline{\underline{S}}_i : \underline{\underline{B}}_i \rangle_V \quad (3.30)$$

et que les tenseurs du comportement dilatométrique homogénéisés ont pour expression :

$$\underline{\underline{\tilde{k}}} \Delta T = \langle \underline{\underline{k}}_i \Delta T_i : \underline{\underline{A}}_i \rangle_V \quad \text{et} \quad \underline{\underline{\tilde{\alpha}}} \Delta T = \langle \underline{\underline{\alpha}}_i \Delta T_i : \underline{\underline{B}}_i \rangle_V \quad (3.31)$$

En faisant l'hypothèse que le champ de température est uniforme dans le milieu hétérogène, les tenseurs $\underline{\underline{\tilde{k}}}$ et $\underline{\underline{\tilde{\alpha}}}$ s'écrivent :

$$\underline{\underline{\tilde{k}}} = \langle \underline{\underline{k}}_i : \underline{\underline{A}}_i \rangle_V \quad \text{et} \quad \underline{\underline{\tilde{\alpha}}} = \langle \underline{\underline{\alpha}}_i : \underline{\underline{B}}_i \rangle_V \quad (3.32)$$

3.4.4 Conclusion - Localisation et Homogénéisation

Enfin, nous avons pu voir que **la démarche d'homogénéisation**, envisagée dans le cadre de nos travaux de thèse, **est appliquée à la recherche d'estimation des caractéristiques effectives, associées à une modélisation ayant permis «d'estimer» les opérateurs de localisation. La démarche d'homogénéisation peut également intervenir dans la recherche de bornes encadrant ces caractéristiques effectives à partir de formulations variationnelles (Cf. annexe B).**

Nous venons de présenter la démarche générale pour construire un modèle d'homogénéisation. Nous allons maintenant nous intéresser aux modèles d'homogénéisation, présents dans la littérature, qui sont susceptibles de remplir le cahier des charges défini au paragraphe 1.4 du chapitre 1 et d'être en adéquation avec le comportement local établi au paragraphe 2.3 chapitre 2. C'est donc l'objet du paragraphe suivant.

3.5 Modèles d'homogénéisation en adéquation avec le comportement local du combustible MOX

3.5.1 Matériaux standard généralisés

Dans la suite de nos études, nous considérons que tous les matériaux sont standard généralisés. Il est donc important de rappeler cette notion. Pour ne pas surcharger les écritures nous omettrons, souvent volontairement, le vecteur espace \underline{x} ainsi que le temps t . La théorie des matériaux standard généralisés (Cf. [HALPHEN and NGUYEN, 1975],[MICHEL et al., 2000]) est basée sur deux concepts :

1. **La notion de variables internes** : ces variables $\underline{\alpha}$ sont supposées contenir, à l'instant t , toute l'information sur l'histoire du matériau avant le temps t . Le choix de ces variables dépend du matériau considéré.
2. **La notion de potentiels thermodynamiques convexes** : l'énergie libre et les potentiels de dissipation.

Les variables d'état locales du système sont la déformation microscopique $\underline{\underline{\varepsilon}}$, et les variables internes $\underline{\underline{\alpha}}$ qui décrivent les phénomènes irréversibles. L'énergie libre, w , permet de définir grâce aux lois d'état, le tenseur des contraintes $\underline{\underline{\sigma}}$ à partir de la déformation $\underline{\underline{\varepsilon}}$ et des forces thermodynamiques $\underline{\underline{A}}$ associées aux mécanismes dissipatifs $\underline{\underline{\alpha}}$ du système :

$$\text{Lois d'état : } \begin{cases} \underline{\underline{\sigma}} = \frac{\partial w}{\partial \underline{\underline{\varepsilon}}}(\underline{\underline{\varepsilon}}, \underline{\underline{\alpha}}) \\ \underline{\underline{A}} = -\frac{\partial w}{\partial \underline{\underline{\alpha}}}(\underline{\underline{\varepsilon}}, \underline{\underline{\alpha}}) \end{cases} \quad (3.33)$$

Le potentiel de dissipation, φ , relie les taux des mécanismes dissipatifs aux forces associées :

$$\text{Lois complémentaires : } \underline{\underline{A}} = \frac{\partial \varphi}{\partial \underline{\underline{\dot{\alpha}}}}(\underline{\underline{\dot{\alpha}}}) \quad (3.34)$$

Si on définit ψ comme étant le potentiel dual de φ , les lois complémentaires s'écrivent de la façon suivante :

$$\text{Lois complémentaires duales : } \underline{\underline{\dot{\alpha}}} = \frac{\partial \psi}{\partial \underline{\underline{A}}}(\underline{\underline{A}}) \quad (3.35)$$

Dans le cas d'un composite où le comportement des phases est de type matériau standard généralisé, il a été démontré par [SUQUET, 1987] que le composite a lui même un comportement standard généralisé. **Le changement d'échelles conserve donc le caractère standard généralisé, mais avec un nombre infini de variables internes.** Ce nombre infini de variables internes conduit à des modèles d'homogénéisation difficilement exploitables par les codes de calcul de structure (type code combustible $1D_{1/2}$).

D'où les intérêts suscités par la communauté scientifique depuis les années 70 à développer des modèles d'homogénéisation réduits (à faible nombre de variables internes). En élasticité linéaire, il est possible d'établir une expression analytique des tenseurs de localisation pour certains motifs simples. Plusieurs modèles analytiques ont été développés sur la base des travaux d'*Eshelby* [ESHELBY, 1957], qui a résolu ce qu'on appelle le «problème de l'inclusion» (Cf. annexe B).

Dans le cadre de notre étude, le comportement local des constituants du combustible MOX est de nature visco-élastique linéaire compressible vieillissant avec déformations libres imposées. Les modèles d'homogénéisation en élasticité linéaire (Cf. annexe B) ne peuvent donc, en l'état, être appliqués à ce comportement. Nous avons donc réalisé une étude bibliographique sur les modèles d'homogénéisation qui pourraient être en adéquation avec le comportement local des constituants du combustible MOX et avec le cahier des charges fixé au paragraphe 1.4 du chapitre 1. Les modèles d'homogénéisation qui suscitent notre intérêt, à savoir Mori-Tanaka incrémental (Cf. [RICAUD and MASSON, 2009]) et NFTA (Cf. [MICHEL and SUQUET, 2003]), sont analysés dans les deux paragraphes suivants.

3.5.2 Mori-Tanaka incrémental biphasé [RICAUD and MASSON, 2009]

Le modèle, récemment développé par [RICAUD and MASSON, 2009], a retenu notre attention. Ce modèle est basé sur un schéma d'homogénéisation *Mori-Tanaka* incrémental et particulièrement optimisé en temps de calcul (modèle avec un faible nombre de variables internes α). Ce modèle donne accès au comportement effectif et moyen par phase. Il ne remplit donc pas pleinement le cahier des charges fixé au paragraphe 1.4 du chapitre 1 (Rappel : on souhaite avoir accès également aux champs locaux). Néanmoins, nous ne faisons pas abstraction de ce modèle d'homogénéisation car nous avons tout d'abord, dans le cadre de cette thèse, réalisé une extension de celui-ci aux composites triphasés (Cf. partie 4). Ensuite nous l'avons confronté théoriquement à l'approche NTFA (Cf. partie 4) dans le but de donner un sens physique aux variables internes de ce modèle. Enfin nous avons comparé les prédictions effectives et moyennes par phase de celui-ci (Cf. partie 4) par rapport au modèle d'homogénéisation développé dans la partie 3 (modèle basé sur l'approche NTFA) et par rapport aux éléments finis. Ci-dessous, nous présentons donc le modèle Mori-Tanaka incrémental biphasé (Cf. [RICAUD and MASSON, 2009]).

3.5.2.1 Comportement retenu

Les propriétés élastiques des différentes phases, constituant le combustible MOX, sont considérées, par *Ricaud et Masson* [RICAUD and MASSON, 2008], comme homogènes. Comme dans le cadre de notre étude (Cf. paragraphe 2.3 chapitre 2), ils négligent en particulier les effets de l'épuisement, présentés au chapitre 2 paragraphe 2.3, sur ces caractéristiques. Également, ils ne considèrent que le fluage induit par l'irradiation ψ_{irr} en fonctionnement normal. La vitesse de fluage stationnaire dépend alors linéairement de la contrainte ainsi que du taux de fission (Cf. equation (2.4)). Ils considèrent cette déformation $\underline{\underline{\epsilon}}^{vpd}$ de façon purement déviatorique. Si pour un matériau dense, ce fluage d'irradiation n'induit que des déformations de cisaillement (pas de variation de volume), en réalité en présence de pores de fabrication dans le matériau (cas des combustibles MOX), ce fluage est susceptible d'induire aussi une déformation volumique de fluage. Mais, l'absence de données sur la pression de ces porosités fait qu'ils négligent ces modifications de volume par la suite. La vitesse de déformation isochore sera notée $\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^{vp}$. Dans leur approche, la température, au sein du combustible MOX, est considérée comme homogène (Cette hypothèse est en adéquation avec celle que nous avons posée au paragraphe 2.3 chapitre 2). Ainsi, *Ricaud et Masson* considèrent le champ de déformations thermiques $\underline{\underline{\epsilon}}^{therm}$

comme homogène au sein du combustible *MOX*. Ils réalisent, également, la même hypothèse pour le champ de déformations $\underline{\underline{\varepsilon}}^{dens}$ induit par le mécanisme de densification. Les déformations volumiques de gonflement (solide $\underline{\underline{\varepsilon}}^{gs}$ et induit par la restructuration $\underline{\underline{\varepsilon}}^{vpm}$) sont modélisées avec le modèle MARGARET. Le gonflement solide qui est une déformation libre et isotrope, est notée ε_m^{gs} (variable scalaire). Le gonflement induit par la restructuration, qui dépend de l'état de contrainte et qui est isotrope, est notée ε_m^{vp} (variable scalaire). Cette déformation de gonflement est notée ainsi car, formellement, elle est traitée comme une déformation viscoplastique. Ces gonflements, évalués par MARGARET, sont considérés comme homogène par phase.

La méthode d'homogénéisation adoptée est une méthode par «champs moyens» (*Mori-Tanaka* (Cf. annexe B paragraphe B.4)). *Ricaud et Masson* évaluent la moyenne spatiale des champs de déformations et de contraintes dans chaque phase. Ils estiment, en particulier, la pression moyenne dans les phases, laquelle leur permettra de calculer la déformation de gonflement (induite notamment par la restructuration) moyenne dans ces phases ε_m^{vp} (couplage avec MARGARET). De plus, ils considèrent le combustible *MOX* MIMAS ADU comme un milieu biphasé (hypothèse simplificatrice) : des amas plutonifères et une matrice représentant les amas uranifères et l'enrobage. La teneur en plutonium de cette matrice correspond à la teneur moyenne de ces deux phases. L'extension de ce modèle aux composites triphasés ne constitue en aucun cas un obstacle technique, c'est pourquoi dans la partie 4 nous présenterons ces développements. Les constituants (matrice et inclusions plutonifères) sont considérés comme isotropes et suivent le schéma rhéologique de *Maxwell* :

$$\left\{ \begin{array}{l} \dot{\varepsilon}_m(\underline{x}, t) = \frac{1}{3k(t)} \dot{\sigma}_m(\underline{x}, t) + \dot{\varepsilon}_m^{vp}(\underline{x}, t) + \dot{\varepsilon}_m^{gs}(\underline{x}, t) \\ \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}(\underline{x}, t) = \frac{1}{2\mu(t)} \underline{\underline{\dot{s}}}(\underline{x}, t) + \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^{vp}(\underline{x}, t) \\ \dot{\varepsilon}_m^{vp}(\underline{x}, t) = \sum_{r=1}^2 \frac{1}{3k_r^{vp}(t)} \sigma_m(\underline{x}, t) \chi_r(\underline{x}) \quad r \text{ l'indice de la phase (r=1 (matrice) ou 2 (inclusion))} \\ \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^{vp}(\underline{x}, t) = \sum_{r=1}^2 \frac{1}{2\mu_r^{vp}(t)} \underline{\underline{\dot{s}}}(\underline{x}, t) \chi_r(\underline{x}) \quad r \text{ l'indice de la phase (r=1 (matrice) ou 2 (inclusion))} \end{array} \right. \quad (3.36)$$

avec

1. \underline{x} le vecteur position au sein du VER de volume V et de contour ∂V , t le temps et $\chi_r(\underline{x})$ la fonction caractéristique.
2. $k(t)$ le module de compressibilité élastique homogène et $\mu(t)$ le module de cisaillement élastique homogène. Ils dépendent du temps t (aspect vieillissant).
3. $\sigma_m = \frac{1}{3} \sigma_{ii}$ la contrainte hydrostatique.
4. $\underline{\underline{\dot{s}}} = \underline{\underline{\dot{\sigma}}} - \sigma_m \underline{\underline{\delta}}$ le tenseur d'ordre 2 des contraintes déviatoriques où $\underline{\underline{\delta}}$ est le tenseur identité.
5. $\dot{\varepsilon}_m$ la vitesse de déformation hydrostatique.
6. $\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}$ la vitesse du tenseur des déformations déviatoriques.
7. $\dot{\varepsilon}_m^{vp}$ la vitesse de déformation viscoplastique hydrostatique due au gonflement induit par la restructuration. *Ricaud et Masson* suppose que, au premier ordre au moins, une relation linéaire lie le gonflement à la pression. Ils introduisent ainsi un module visqueux k_r^{vp} différents dans chacune des phases et dépendant du temps t . C'est le module MARGARET hétérogène qui

délivre au modèle mécanique non seulement le gonflement solide mais aussi le module de compressibilité associé au gonflement induit par la restructuration dans les deux phases. Tandis que le modèle mécanique doit fournir à MARGARET une estimation des pressions moyennes dans chaque phase. Il y a donc un couplage entre les modules de physico-chimie et de mécanique. En réalité, MARGARET ne délivre pas un module de compressibilité mais un incrément de déformation de gonflement induit par la restructuration. Connaissant cet incrément de déformation et l'incrément de contrainte appliqué, il sera cependant facile d'en déduire le module de compressibilité pour chacune des phases.

8. $\dot{\underline{\underline{\epsilon}}}_m^{gs}$ la vitesse de déformation hydrostatique due au gonflement solide. Cette vitesse est homogène par phase mais différente d'une phase à l'autre (Cf. chapitre 2 paragraphe 2.2.2).
9. $\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^{vp} = \frac{1}{2\mu_r^{vp}(t)}\underline{\underline{s}}$ la vitesse de fluage induit par l'irradiation, purement déviatorique et linéairement dépendant de la contrainte. μ_r^{vp} correspond au module de cisaillement visqueux associé à chacune des phases et il dépend du temps t (aspect vieillissant).

D'un point de vu formel, cette loi de comportement est de nature visco-élastique linéaire compressible vieillissante avec des déformations libres (gonflement solide) imposées. Elle est donc en parfaite adéquation avec celle qui a été établie au paragraphe 2.3 chapitre 2. La méthodologie, employée par Ricaud et Masson [RICAUD and MASSON, 2008], pour résoudre ce problème est présentée dans les paragraphes ci-dessous.

3.5.2.2 L'aspect visco-élastique linéaire compressible non vieillissant

Dans un premier temps, nous allons faire abstraction, ici, de la déformation libre de gonflement solide et de l'aspect vieillissant. Le système différentiel (3.36) s'écrit alors de la façon suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} \dot{\underline{\underline{\epsilon}}}_m(\underline{\underline{x}}, t) = \frac{1}{3k}\dot{\underline{\underline{\sigma}}}_m(\underline{\underline{x}}, t) + \dot{\underline{\underline{\epsilon}}}_m^{vp}(\underline{\underline{x}}, t) \\ \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\underline{\underline{x}}, t) = \frac{1}{2\mu}\underline{\underline{\dot{s}}}(\underline{\underline{x}}, t) + \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^{vp}(\underline{\underline{x}}, t) \\ \dot{\underline{\underline{\epsilon}}}_m^{vp}(\underline{\underline{x}}, t) = \sum_{r=1}^2 \frac{1}{3k_r^{vp}}\underline{\underline{\sigma}}_m(\underline{\underline{x}}, t)\chi_r(\underline{\underline{x}}) \\ \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^{vp}(\underline{\underline{x}}, t) = \sum_{r=1}^2 \frac{1}{2\mu_r^{vp}}\underline{\underline{s}}(\underline{\underline{x}}, t)\chi_r(\underline{\underline{x}}) \end{array} \right. \quad (3.37)$$

Comme il s'agit également d'une approche moyenne par phase on peut écrire le système de la façon suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} \dot{\underline{\underline{\epsilon}}}_{rm} = \frac{1}{3k}\dot{\underline{\underline{\sigma}}}_{rm} + \dot{\underline{\underline{\epsilon}}}_{rm}^{vp} \\ \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}_r = \frac{1}{2\mu}\underline{\underline{\dot{s}}}_r + \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}_r^{vp} \\ \dot{\underline{\underline{\epsilon}}}_{rm}^{vp} = \frac{1}{3k_r^{vp}}\underline{\underline{\sigma}}_{rm} \\ \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}_r^{vp} = \frac{1}{2\mu_r^{vp}}\underline{\underline{s}}_r \end{array} \right. \quad (3.38)$$

La méthodologie à adopter dans ce cas est bien connue. Les premiers travaux ont été réalisés par *Christensen (1969)* [CHRISTENSEN, 1969] en étendant l'assemblage composite de sphères de *Hashin (1962)* [HASHIN, 1962] au cas visco-élastique. Cette méthodologie s'appuie sur le principe de correspondance de *Mandel* [MANDEL, 1966] qui permet de ramener le problème différentiel (3.38) précédent à un problème pseudo-élastique par la transformée de Laplace-Carson. Nous rappelons que la transformée de *Laplace-Carson* d'une fonction f est définie par :

$$f^*(p) = p \int_0^\infty f(t) e^{-pt} dt \quad (3.39)$$

Nous appliquons donc cette transformée à notre système différentiel (3.38) :

$$\begin{cases} \sigma_{rm}^*(p) = 3k_r^*(p) \varepsilon_{rm}^*(p) \\ \underline{s}_r^*(p) = 2\mu_r^*(p) \underline{e}_r^*(p) \end{cases} \quad (3.40)$$

$$\text{avec } k_r^*(p) = \frac{1}{\frac{1}{k} + \frac{1}{pk_r^{vp}}} \text{ et } \mu_r^*(p) = \frac{1}{\frac{1}{\mu} + \frac{1}{p\mu_r^{vp}}}.$$

Le problème (3.40) est bien un problème élastique linéaire dans l'espace de *Laplace-Carson*. Nous pouvons donc appliquer les schémas d'homogénéisation analytiques linéaires présentés en annexe B. *Ricaud et Masson* [RICAUD and MASSON, 2008] ont choisi d'utiliser le schéma d'homogénéisation de *Mori-Tanaka* [MORI and TANAKA, 1973] pour évaluer les modules effectifs \tilde{k}_{MT}^* et $\tilde{\mu}_{MT}^*$:

$$\begin{cases} \tilde{k}_{MT}^*(p) = k_1^* + c_2 \left(\frac{k_2^* - k_1^*}{1 + c_1 \frac{k_2^* - k_1^*}{\hat{k}^* + k_1^*}} \right) \\ \tilde{\mu}_{MT}^*(p) = \mu_1^* + c_2 \left(\frac{\mu_2^* - \mu_1^*}{1 + c_1 \frac{\mu_2^* - \mu_1^*}{\hat{\mu}^* + \mu_1^*}} \right) \end{cases} \quad (3.41)$$

avec $\hat{k}^* = \frac{4}{3}\mu_1^*$ et $\hat{\mu}^* = \frac{\mu_1^* 9k_1^* + 8\mu_1^*}{6k_1^* + 2\mu_1^*}$. c_1 et c_2 étant les fractions volumiques respectives de chaque phase ($c_1 + c_2 = 1$). Le modèle de *Mori-Tanaka* est bien adapté aux composites pour lesquels une des phases joue clairement le rôle d'inclusion avec une fraction volumique inférieure à 20 %. C'est bien le cas des combustibles considérés, les amas plutonifères jouant ici le rôle des inclusions. L'inversion de *Laplace-Carson* est habituellement réalisée numériquement (méthode de Collocation de *Schaperly (1962)* [SCHAPERLY, 1962]). Mais, dans ce cas (schéma d'homogénéisation de *Mori-Tanaka*), il est possible de repasser dans l'espace réel sans «pertes d'informations». Pour cela, *Ricaud et Masson* réduisent, tout d'abord, les fractions rationnelles \tilde{k}_{MT}^* et $\tilde{\mu}_{MT}^*$, qui dépendent de p dans l'espace de *Laplace-Carson*, en une somme de fractions rationnelles simples :

$$\begin{cases} \tilde{k}_{MT}^*(p) = \sum_{i=1}^{N_{(MT)p}^m} k_{\tau_{(MT)i}^m} \frac{p}{p + \frac{1}{\tau_{(MT)i}^m}} \\ \tilde{\mu}_{MT}^*(p) = \sum_{i=1}^{N_{(MT)p}^d} \mu_{\tau_{(MT)i}^d} \frac{p}{p + \frac{1}{\tau_{(MT)i}^d}} \end{cases} \quad (3.42)$$

avec $N_{(MT)p}^m$ et $N_{(MT)p}^d$ le nombre de variables internes sphériques et déviatoriques, $(\bar{\tau}_{(MT)i}^m, \bar{\tau}_{(MT)i}^d)$ les temps de relaxations effectifs respectifs et $(k_{\bar{\tau}_{(MT)i}^m}, \mu_{\bar{\tau}_{(MT)i}^d})$ les amplitudes. Dans le cas du schéma d'homogénéisation de *Mori-Tanaka*, nous avons $N_{(MT)p}^m = 2$ et $N_{(MT)p}^d = 3$. Pour obtenir les différentes expressions des couples $(\bar{\tau}_{(MT)i}^m, \bar{\tau}_{(MT)i}^d)$ et $(k_{\bar{\tau}_{(MT)i}^m}, \mu_{\bar{\tau}_{(MT)i}^d})$ nous renvoyons le lecteur au tableau 1 de la référence [RICAUD and MASSON, 2009].

En appliquant la transformée inverse de *Laplace-Carson*, on obtient les modules effectifs dans l'espace temporel :

$$\begin{cases} \tilde{k}_{MT}(t) = \sum_{i=1}^{N_{(MT)}^m} k_{\bar{\tau}_{(MT)i}^m} e^{-\frac{t}{\bar{\tau}_{(MT)i}^m}} \\ \tilde{\mu}_{MT}(t) = \sum_{i=1}^{N_{(MT)}^d} \mu_{\bar{\tau}_{(MT)i}^d} e^{-\frac{t}{\bar{\tau}_{(MT)i}^d}} \end{cases} \quad (3.43)$$

On dit alors que les modules $\tilde{k}_{MT}(t)$ et $\tilde{\mu}_{MT}(t)$ ont été décomposés en une somme de série de *Prony-Dirichlet*. On a également $\sum_{i=1}^{N_{(MT)}^m} k_{\bar{\tau}_{(MT)i}^m} = k$ et $\sum_{i=1}^{N_{(MT)}^d} \mu_{\bar{\tau}_{(MT)i}^d} = \mu$. La contrainte macroscopique $\underline{\underline{\bar{\sigma}}}$ est obtenue par la relation suivante :

$$\underline{\underline{\bar{\sigma}}} = 3 \int_0^t \tilde{k}_{MT}(t-u) d\underline{\underline{\bar{\varepsilon}}}_m(u) \underline{\underline{\delta}} + 2 \int_0^t \tilde{\mu}_{MT}(t-u) d\underline{\underline{\bar{\varepsilon}}}(u) \quad (3.44)$$

Résoudre l'équation (3.44) revient (Principe de Correspondance de *Mandel* [MANDEL, 1966]) à résoudre le problème suivant car le nombre de termes dans le développement en séries de *Prony-Dirichlet* est fini :

$$\begin{cases} \underline{\underline{\bar{\sigma}}}_m = 3k \left(\underline{\underline{\bar{\varepsilon}}}_m(t) - \sum_{i=1}^{N_{(MT)}^m} \underline{\underline{\alpha}}_{\bar{\tau}_{(MT)i}^m}^m(t) \right) \\ \underline{\underline{\bar{\sigma}}} = 2\mu \left(\underline{\underline{\bar{\varepsilon}}}(t) - \sum_{i=1}^{N_{(MT)}^d} \underline{\underline{\alpha}}_{\bar{\tau}_{(MT)i}^d}^d(t) \right) \\ \text{avec } \dot{\underline{\underline{\alpha}}}_i(t) + \frac{1}{\bar{\tau}_{(MT)i}^m} \underline{\underline{\alpha}}_i(t) = \frac{1}{\bar{\tau}_{(MT)i}^m} \frac{k_{\bar{\tau}_{(MT)i}^m}}{k} \underline{\underline{\bar{\varepsilon}}}_m(t) \quad , \quad 1 \leq i \leq N_{(MT)}^m \quad , \quad \underline{\underline{\alpha}}_i(0) = 0 \\ \text{avec } \dot{\underline{\underline{\alpha}}}_i(t) + \frac{1}{\bar{\tau}_{(MT)i}^d} \underline{\underline{\alpha}}_i(t) = \frac{1}{\bar{\tau}_{(MT)i}^d} \frac{\mu_{\bar{\tau}_{(MT)i}^d}}{\mu} \underline{\underline{\bar{\varepsilon}}}(t) \quad , \quad 1 \leq i \leq N_{(MT)}^d \quad , \quad \underline{\underline{\alpha}}_i(0) = \underline{\underline{0}} \end{cases} \quad (3.45)$$

Ainsi, dans le cas isotrope, la réponse est donc réduite à une formulation incrémentale à variables internes au nombre de $N_{(MT)}^m + 5N_{(MT)}^d$, formulation nettement plus commode que la formulation intégrale (3.44) en vue d'une introduction dans un code aux éléments finis.

Étant dans le cadre d'un milieu biphasé, il est également possible d'obtenir les contraintes et déformations hydrostatiques moyennes par phase, en utilisant les relations suivantes (système à 4 équations

et 4 inconnues) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \sigma_{rm}^*(p) = 3k_r^*(p)\varepsilon_{rm}^*(p) \quad r \text{ l'indice de la phase (i=1 (matrice) ou 2 (inclusion))} \\ c_1\sigma_{1m}^*(p) + c_2\sigma_{2m}^*(p) = \bar{\sigma}_m^*(p) \\ c_1\varepsilon_{1m}^*(p) + c_2\varepsilon_{2m}^*(p) = \bar{\varepsilon}_m^*(p) \end{array} \right. \quad (3.46)$$

Les champs déviatoriques étant solution du système suivant (système à 4 équations et 4 inconnues) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \underline{s}_r^*(p) = 2\mu_r^*(p)\underline{e}_r^*(p) \quad r \text{ l'indice de la phase (r=1 (matrice) ou 2 (inclusion))} \\ c_1\underline{s}_{\underline{1}}^*(p) + c_2\underline{s}_{\underline{2}}^*(p) = \underline{\bar{s}}^*(p) \\ c_1\underline{e}_{\underline{1}}^*(p) + c_2\underline{e}_{\underline{2}}^*(p) = \underline{\bar{e}}^*(p) \end{array} \right. \quad (3.47)$$

Si on prend la phase 1, on obtient pour les contraintes, les expressions suivantes dans l'espace de Laplace-Carson :

$$\left\{ \begin{array}{l} \underline{s}_{\underline{1}}^*(p) = \frac{2}{c_1} \left(\frac{1}{\mu_1^*(p)} - \frac{1}{\mu_2^*(p)} \right)^{-1} \left(\underline{\bar{e}}^*(p) - \frac{1}{2\mu_2^*(p)} \underline{\bar{s}}^*(p) \right) \\ \sigma_{1m}^*(p) = \frac{3}{c_1} \left(\frac{1}{k_1^*(p)} - \frac{1}{k_2^*(p)} \right)^{-1} \left(\bar{\varepsilon}_m^*(p) - \frac{1}{3k_2^*(p)} \bar{\sigma}_m^*(p) \right) \end{array} \right. \quad (3.48)$$

Pour un comportement de Maxwell, une élasticité homogène et comme $\bar{\sigma}_m(0) = 3k\bar{\varepsilon}_m(0)$ et que $\underline{\bar{s}}(0) = 2\mu\underline{\bar{e}}(0)$, en passant dans l'espace temporel, on obtient :

$$\left\{ \begin{array}{l} \underline{s}_{\underline{1}}(t) = \frac{2}{c_1} \left(\frac{1}{\mu_1^{vp}} - \frac{1}{\mu_2^{vp}} \right)^{-1} \left(\dot{\underline{\bar{e}}}(t) - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\mu} \dot{\underline{\bar{s}}}(t) + \frac{1}{\mu_2^{vp}} \underline{\bar{s}}(t) \right) \right) \\ \sigma_{1m}(t) = \frac{3}{c_1} \left(\frac{1}{k_1^{vp}} - \frac{1}{k_2^{vp}} \right)^{-1} \left(\dot{\bar{\varepsilon}}_m(t) - \frac{1}{3} \left(\frac{1}{k} \dot{\bar{\sigma}}_m(t) + \frac{1}{k_2^{vp}} \bar{\sigma}_m(t) \right) \right) \end{array} \right. \quad (3.49)$$

La même approche peut être utilisée pour évaluer la contrainte moyenne dans la phase 2. Les déformations étant obtenues par l'équation (3.37).

Nous venons de voir comment le comportement visco-élastique linéaire compressible non vieillissant était traité dans ce modèle. Nous allons maintenant analyser la façon dont sont prises en compte des déformations libres dans ce modèle.

3.5.2.3 L'aspect visco-élastique linéaire compressible non vieillissant avec déformations libres

Parmi les déformations libres (densification et gonflement solide), nous avons vu que, seule la déformation de gonflement solide est considérée comme hétérogène par *Ricaud et Masson* (Cf. equation (3.36)). Ainsi, par rapport au cas (3.37), uniquement la partie hydrostatique est impactée.

Comme il s'agit d'une approche moyenne par phase on peut écrire le système (3.36) de la façon suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} \dot{\underline{\epsilon}}_{rm} = \frac{1}{3k} \dot{\underline{\sigma}}_{rm} + \dot{\underline{\epsilon}}_{rm}^{vp} + \dot{\underline{\epsilon}}_{rm}^{gs} \\ \dot{\underline{s}}_r = \frac{1}{2\mu} \dot{\underline{s}}_r + \dot{\underline{s}}_r^{vp} \\ \dot{\underline{\epsilon}}_{rm}^{vp} = \frac{1}{3k_r^{vp}} \underline{\sigma}_{rm} \\ \dot{\underline{s}}_r^{vp} = \frac{1}{2\mu_r^{vp}} \underline{s}_r \end{array} \right. \quad (3.50)$$

En appliquant la transformée de Laplace-Carson au système (3.50) on obtient :

$$\left\{ \begin{array}{l} \underline{\sigma}_{rm}^*(p) = 3k_r^*(p) (\underline{\epsilon}_{rm}^*(p) - \underline{\epsilon}_{rm}^{gs*}(p)) \\ \underline{s}_r^*(p) = 2\mu_r^*(p) \underline{s}_r^*(p) \end{array} \right. \quad (3.51)$$

$$\text{avec } k_r^*(p) = \frac{1}{\frac{1}{k} + \frac{1}{pk_r^{vp}}} \text{ et } \mu_r^*(p) = \frac{1}{\frac{1}{\mu} + \frac{1}{p\mu_r^{vp}}}.$$

Ainsi, en présence de gonflement solide dans les phases (gonflement uniforme), noté $\underline{\epsilon}_{1m}^{gs}(t)$ et $\underline{\epsilon}_{2m}^{gs}(t)$, la loi de comportement dans chacune d'elles s'écrit $\underline{\sigma}_{rm}^*(p) = 3k_r^*(p) (\underline{\epsilon}_{rm}^*(p) - \underline{\epsilon}_{rm}^{gs*}(p))$ dans l'espace de Laplace-Carson. Si on reporte ces deux expressions ($r = 1$ ou 2) dans le système suivant (3.52) :

$$\left\{ \begin{array}{l} c_1 \underline{\sigma}_{1m}^*(p) + c_2 \underline{\sigma}_{2m}^*(p) = \bar{\underline{\sigma}}_m^*(p) \\ c_1 \underline{\epsilon}_{1m}^*(p) + c_2 \underline{\epsilon}_{2m}^*(p) = \bar{\underline{\epsilon}}_m^*(p) \end{array} \right. \quad (3.52)$$

et que l'on cherche à évaluer la contrainte hydrostatique moyenne dans la phase 1, on obtient :

$$\left\{ \underline{\sigma}_{1m}^*(p) = \frac{3}{c_1} \left(\frac{1}{k_1^*(p)} - \frac{1}{k_2^*(p)} \right)^{-1} \left(\bar{\underline{\epsilon}}_m^*(p) - \langle \underline{\epsilon}_m^{gs*}(p) \rangle - \frac{1}{3k_2^*(p)} \bar{\underline{\sigma}}_m^*(p) \right) \right. \quad (3.53)$$

Puis, par transformée inverse de Laplace-Carson on a :

$$\left\{ \underline{\sigma}_{1m}(t) = \frac{3}{c_1} \left(\frac{1}{k_1^{vp}} - \frac{1}{k_2^{vp}} \right)^{-1} \left(\dot{\underline{\epsilon}}_m - \langle \dot{\underline{\epsilon}}_m^{gs}(t) \rangle - \frac{1}{3} \left(\frac{1}{k} \dot{\underline{\sigma}}_m(t) + \frac{1}{k_2^{vp}} \bar{\underline{\sigma}}_m(t) \right) \right) \right. \quad (3.54)$$

Il suffit d'échanger les indices (1) et (2) dans l'expression précédente pour dériver la relation équivalente dans la phase (2). Résoudre l'équation (3.44) revient (Principe de Correspondance de Mandel [MANDEL, 1966]) à résoudre le problème suivant car le nombre de termes dans le développement

en séries de *Prony-Dirichlet* est également fini dans ce cas :

$$\left\{ \begin{array}{l} \bar{\sigma}_m = 3k \left(\bar{\varepsilon}_m(t) - \bar{\varepsilon}_m^{gs}(t) - \sum_{i=1}^{N_{(MT)}^m} \alpha_{\tau_{(MT)i}^m}^m(t) \right) \\ \bar{s} = 2\mu \left(\bar{e}(t) - \sum_{i=1}^{N_{(MT)}^d} \alpha_{\tau_{(MT)i}^d}^d(t) \right) \\ \text{avec } \dot{\alpha}_i(t) + \frac{1}{\tau_{(MT)i}^m} \alpha_i(t) = \frac{1}{\tau_{(MT)i}^m} \frac{k_{\tau_{(MT)i}^m}}{k} (\bar{\varepsilon}_m(t) - \bar{\varepsilon}_m^{gs}(t)) \quad , \quad 1 \leq i \leq N_{(MT)}^m \quad , \quad \alpha_i(0) = 0 \\ \text{avec } \dot{\underline{\alpha}}_i(t) + \frac{1}{\tau_{(MT)i}^d} \underline{\alpha}_i(t) = \frac{1}{\tau_{(MT)i}^d} \frac{\mu_{\tau_{(MT)i}^d}}{\mu} \bar{e}(t) \quad , \quad 1 \leq i \leq N_{(MT)}^d \quad , \quad \underline{\alpha}_i(0) = \underline{0} \end{array} \right. \quad (3.55)$$

Les modules $\tilde{k}_{MT}(t)$ et $\tilde{\mu}_{MT}(t)$ étant identiques au problème précédent (visco-élasticité linéaire compressible non vieillissant). Mais, si l'on souhaite évaluer les contraintes macroscopiques exposées ci-dessus, il est nécessaire de calculer également la déformation de gonflement solide effective $\bar{\varepsilon}_m^{gs}(t)$. L'expression de la déformation de gonflement effective est obtenue en partant de la relation générale suivante [FRANCOIS et al., 1993] :

$$\bar{\varepsilon}_m^{gs}(t) = \left\langle {}^T B^*(p) \varepsilon_m^{gs}(p) \right\rangle \quad (3.56)$$

$B^*(p)$ désignant le tenseur de localisation des contraintes pour le problème pseudo-élastique considéré (pas de déformation libre imposée). Si nous nous limitons à l'étude des contraintes moyennes dans chacune des phases, ce tenseur de localisation se réduit à un scalaire noté $B_{rm}^*(p)$ avec ($r=1,2$).

Ce tenseur se déduit de la relation (3.53) en annulant le gonflement solide et en utilisant la loi de comportement effective $\bar{\sigma}^*(p) = 3\tilde{k}_{MT}^*(p) (\bar{\varepsilon}_m^*(p) - \bar{\varepsilon}_m^{gs*}(p))$ ce qui donne :

$$B_{1m}^*(p) = \frac{3}{c_1} \left(\frac{1}{k_1^*(p)} - \frac{1}{k_2^*(p)} \right)^{-1} \left(\frac{1}{3\tilde{k}_{MT}^*(p)} - \frac{1}{3k_2^*(p)} \right) \quad (3.57)$$

Sachant que $c_1 B_{1m}^*(p) + c_2 B_{2m}^*(p) = 1$ et compte tenu de l'équation (3.56) on obtient :

$$\bar{\varepsilon}_m^{gs*}(p) - \langle \varepsilon_m^{gs*}(p) \rangle = \langle (B_{1m}^*(p) - 1) \varepsilon_m^{gs*}(p) \rangle = c_1 (B_{1m}^*(p) - 1) [\varepsilon_{1m}^{gs*}(p) - \varepsilon_{2m}^{gs*}(p)] \quad (3.58)$$

ce qui conduit à :

$$\bar{\varepsilon}_m^{gs*}(p) - \langle \varepsilon_m^{gs*}(p) \rangle = \gamma^*(p) [\varepsilon_{1m}^{gs*}(p) - \varepsilon_{2m}^{gs*}(p)] \quad (3.59)$$

$$\text{avec } \gamma^*(p) = \left[3 \left(\frac{1}{k_1^*(p)} - \frac{1}{k_2^*(p)} \right)^{-1} \left(\frac{1}{3\tilde{k}_{MT}^*(p)} - \frac{1}{3k_2^*(p)} \right) - c_1 \right].$$

On constate que $\gamma^*(p)$ dépend de $\tilde{k}_{MT}^*(p)$ donc du schéma d'homogénéisation choisi. *Ricaud et Masson* utilisant le schéma de *Mori-Tanaka*, l'expression de $\gamma^*(p)$ peut se mettre sous la forme suivante :

$$\gamma^*(p) = \alpha_\gamma \frac{\frac{1}{\tau_\gamma}}{p + \frac{1}{\tau_\gamma}} \quad (3.60)$$

$$\text{avec } \tau_\gamma = \frac{\frac{1}{k} + \frac{3}{4\mu}}{\frac{c_1}{k_2^{vp}} + \frac{c_2}{k_1^{vp}} + \frac{3}{4\mu_1^{vp}}} \text{ et } \alpha_\gamma = \frac{c_1 c_2 \left(\frac{1}{k_2^{vp}} - \frac{1}{k_1^{vp}} \right)}{\frac{c_1}{k_2^{vp}} + \frac{c_2}{k_1^{vp}} + \frac{3}{4\mu_1^{vp}}}.$$

Finalement, la fonction du temps $y(t) = (\bar{\epsilon}_m^{gs}(t) - \langle \epsilon_m^{gs}(t) \rangle)$ est donc solution de l'équation différentielle :

$$\dot{y}(t) + \frac{1}{\tau_\gamma} y(t) = \frac{\alpha_\gamma}{\tau_\gamma} (\epsilon_{1m}^{gs}(t) - \epsilon_{2m}^{gs}(t)) \quad (3.61)$$

En résolvant les équations (3.61) et (3.55) on obtient donc le comportement effectif du combustible *MOX* pour un comportement visco-élastique linéaire compressible non vieillissant avec déformations libres imposées, type gonflement solide. En réalité, les modules k_r^{vp} et μ_r^{vp} ne sont pas constants mais ils dépendent implicitement du temps. En effet, μ_r^{vp} est inversement proportionnel à la densité de fission \bar{F} . Or, dans chacune des phases, cette densité de fission n'est pas constante en fonction du temps. D'autre part, au sein de chacune des phases, k_r^{vp} est dépendant de la fraction de bulles et de porosités. Or, cette fraction est elle même dépendante du temps. Nous pouvons donc considérer que les modules k_r^{vp} et μ_r^{vp} vieillissent. Nous allons donc analyser dans le paragraphe suivant la façon dont est abordé l'aspect vieillissant.

3.5.2.4 L'aspect visco-élastique linéaire compressible vieillissant avec déformation libre

L'aspect visco-élastique linéaire compressible vieillissant (Cf. Mandel 1974 [MANDEL, 1974]) est détaillé dans les travaux de Ricaud et Masson [RICAUD and MASSON, 2009]. L'expression proposée englobe les comportements pour lesquels le temps apparaît explicitement (par exemple : les procédés chimiques vieillissants dans le béton), ainsi que les comportements pour lesquels la dépendance au temps est le résultat du chargement. Ce dernier cas est aussi pratique quand on considère par exemple des chargements thermomécaniques : propriétés matériaux qui dépendent de la température. Similairement, le chargement peut aussi induire des changements physiques au travers d'une phase (défauts, processus de densification), tels que les paramètres constitutifs de la loi dépendant du temps (par exemple k_r^{vp}). C'est cette dernière situation qui est exposée dans [RICAUD and MASSON, 2009].

Les modules étant fonction du temps, nous ne pouvons pas appliquer la transformée de *Laplace-Carson* (produit de deux fonctions temporelles) comme précédemment. Le principe général, proposé par Ricaud et Masson [RICAUD and MASSON, 2009], est donc de considérer que le ou les modules sont constants par pas de temps (schéma explicite), afin de se ramener au problème précédent puis de construire les évaluations temporelles des variables internes par continuité. Nous renvoyons le lecteur à [RICAUD and MASSON, 2009] pour plus de détails.

Il est important de rappeler que ce modèle n'est pas seulement limité au comportement des combustibles *MOX* en fonctionnement normal. En effet, tous les matériaux ayant un comportement visco-élastique linéaire compressible vieillissant avec des déformations libres peuvent utiliser cette approche. Les lecteurs qui souhaiteraient étendre ce comportement au cas non linéaire doivent alors procéder par linéarisation à chaque pas de temps ou peuvent aussi utiliser une toute autre approche proposée par Lahellec et Suquet [LAHELLEC and SUQUET, 2007].

3.5.2.5 Conclusion

Une nouvelle loi de comportement a été proposée par *Ricaud et Masson* [RICAUD and MASSON, 2009] en vue de modéliser le comportement des combustibles MOX en irradiation de base : loi visco-élastique linéaire compressible vieillissante avec déformations libres imposées. Dans ce modèle, ils considèrent le combustible MOX comme homogène du point de vue thermique et élastique, conformément à notre cas d'étude (Cf. paragraphe 2.3 chapitre 2). L'approche, proposée, permet de déterminer des états mécaniques moyens par phase (matrice et inclusions plutonifères). Elle ne permet pas de capter les effets de localisation au sein d'une phase. Même si elle ne remplit pas parfaitement le cahier des charges (Cf. chapitre 1 et paragraphe 1.4), cette méthode, qui était limitée aux composites particuliers bi-phasés, a été étendue aux composites particuliers triphasés dans le cadre de cette thèse (Cf. partie 4).

Les approches TFA et surtout NTFA suscitent notre intérêt car elles fournissent la variation des champs locaux autour de leur valeur moyenne (conforme au cahier des charges fixé), contrairement aux approches exposées précédemment. De plus, contrairement aux EF2 (éléments finis au carré), ces approches en champs de transformation sont optimisées en temps de calculs (donc intégrables dans un code de calcul industriel). La variation locale des champs peut être très importante au sein d'une même phase, notamment dans la matrice (enrobage pour le combustible MOX). Or, les phénomènes non linéaires en comportement ou en endommagement (fissures amas) ne sont pas conditionnés par la valeur moyenne des contraintes locales mais bien par leurs valeurs extrémales. Ces approches sont donc exposées à travers les paragraphes suivants. L'objectif étant de sélectionner l'approche la plus appropriée à notre cas d'étude et de présenter les développements à envisager pour l'adapter au comportement du combustible MOX en service : comportement visco-élastique linéaire compressible vieillissant avec des déformations libres imposées.

3.5.3 TFA [DVORAK and BENVENISTE, 1992]

Les méthodes d'analyse par champs de transformation initialement développées par *Dvorak* permettent d'aborder des comportements dérivant de deux potentiels : aspect réversibles et irréversibles du comportement. Nous allons donc présenter dans le paragraphe suivant la méthode initiale développée par *Dvorak* (Cf. [DVORAK and BENVENISTE, 1992],[DVORAK, 1992]), et les méthodes proposées pour améliorer les résultats obtenus avec la version initiale (Cf. [CHABOCHE et al., 2001]).

3.5.3.1 Principe

Nous considérons que les matériaux ont un comportement de matériaux standard généralisés. Nous avons vu au chapitre 3 du paragraphe 3.5.1 que les matériaux homogénéisés ont alors une structure de matériaux standard généralisés, mais avec un nombre infini de variables internes qui sont les champs de variables internes locales. L'objectif est donc, via ces approches TFA ou NTFA, de réduire le nombre de variables internes. On considère, dans la suite, que les seules variables internes sont les champs de déformations inélastiques (conforme à notre cas d'étude). Dans la suite, on considère que le matériau hétérogène est composé de plusieurs phases distinctes, élastiques ou inélastiques, parfaitement collées aux interfaces et qu'il a un comportement homogène au niveau macroscopique. On admet que le choix d'un VER de volume V et de surface S a pu être réalisé. A l'échelle microscopique, V est découpé en M sous domaines V_r , ne contenant qu'une seule phase, mais une phase peut être sous divisée en plusieurs sous domaines considérés comme des phases différentes bien que leurs

propriétés matériaux soient identiques.

A ce stade, nous rappelons les définitions de moyenne d'un champ f sur V et sur V_r :

$$\langle f \rangle_V = \frac{1}{V} \int_V f(x) dx \quad \text{et} \quad \langle f \rangle_{V_r} = \frac{1}{V_r} \int_{V_r} f(x) dx \quad (3.62)$$

La moyenne sur V peut s'exprimer en fonction des moyennes sur V_r et de la fraction volumique de chaque phase ou sous domaine c_r :

$$\langle f \rangle_V = \sum_{i=1}^M c_r \langle f \rangle_{V_r} \quad (3.63)$$

On définit également la fonction caractéristique associée au sous domaine :

$$\chi^{(r)}(\underline{x}) = \begin{cases} 1 & \text{si } \underline{x} \in V_r, \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (3.64)$$

avec donc :

$$c_r = \langle \chi^{(r)} \rangle_V \quad (3.65)$$

Dvorak (Cf. [DVORAK and BENVENISTE, 1992],[DVORAK, 1992]) a développé cette méthode qu'il appelle Transformation Field Analysis (TFA). Les lois d'état et lois complémentaires définissant le comportement local des matériaux sont les suivantes :

$$\begin{cases} w(\underline{\underline{\epsilon}}, \underline{\underline{\epsilon}}^{vp}) = \frac{1}{2} (\underline{\underline{\epsilon}} - \underline{\underline{\epsilon}}^{vp}) : \underline{\underline{C}} : (\underline{\underline{\epsilon}} - \underline{\underline{\epsilon}}^{vp}) \\ \underline{\underline{\sigma}} = \frac{\partial w}{\partial \underline{\underline{\epsilon}}}(\underline{\underline{\epsilon}}, \underline{\underline{\epsilon}}^{vp}) \\ \underline{\underline{\epsilon}}^{vp} = \frac{\partial \psi}{\partial \underline{\underline{\sigma}}}(\underline{\underline{\sigma}}) \end{cases} \quad (3.66)$$

avec $w(\underline{\underline{\epsilon}}, \underline{\underline{\epsilon}}^{vp})$ le potentiel d'énergie libre, $\psi(\underline{\underline{\sigma}})$ le potentiel des forces dissipatives, $\underline{\underline{\epsilon}}$ (champ de déformations locales) et $\underline{\underline{\epsilon}}^{vp}$ (variables internes, champ de déformations visco-plastiques locales) les variables d'état du système, $\underline{\underline{\sigma}}$ le champ des contraintes locales et $\underline{\underline{C}}$ le tenseur d'élasticité.

On fixe les variables d'état : pas d'évolution du système. Les champs de contraintes $\underline{\underline{\sigma}}$ et de déformations $\underline{\underline{\epsilon}}$ dans le VER vérifient le problème élastique linéaire (3.67) :

$$\begin{cases} \text{div}(\underline{\underline{\sigma}}(\underline{x})) = 0 \\ \underline{\underline{\sigma}}(\underline{x}) = \underline{\underline{C}}(\underline{x}) : (\underline{\underline{\epsilon}}(\underline{x}) - \underline{\underline{\epsilon}}^{vp}(\underline{x})) \\ \langle \underline{\underline{\epsilon}} \rangle_V = \underline{\underline{E}} \end{cases} \quad (3.67)$$

avec des conditions de périodicité sur le VER. $\underline{\underline{E}}$ et $\underline{\underline{\epsilon}}^{vp}$ étant connus, le champ de déformations $\underline{\underline{\epsilon}}(\underline{x})$ peut s'écrire, grâce au principe de superposition, sous la forme suivante :

$$\underline{\underline{\epsilon}}(\underline{x}) = \underline{\underline{A}}(\underline{x}) : \underline{\underline{E}} + \frac{1}{|V|} \int_V \underline{\underline{D}}(\underline{x}, \underline{x}') : \underline{\underline{\epsilon}}^{vp}(\underline{x}') d\underline{x}' = \underline{\underline{A}}(\underline{x}) : \underline{\underline{E}} + \underline{\underline{D}} * \underline{\underline{\epsilon}}^{vp}(\underline{x}) \quad (3.68)$$

où $\underline{\underline{A}}(\underline{x})$ est le tenseur élastique de localisation de la déformation et $\underline{\underline{D}}(\underline{x}, \underline{x}')$ l'opérateur non local qui donne, à déformation moyenne nulle, la déformation au point \underline{x} créée par la prédéformation $\underline{\underline{\epsilon}}^{vp}(\underline{x}')$ au point \underline{x}' . $\underline{\underline{D}}(\underline{x}, \underline{x}')$ est défini par :

$$\underline{\underline{D}}(\underline{x}, \underline{x}') = \underline{\underline{\Gamma}}(\underline{x}, \underline{x}') : \underline{\underline{C}}(\underline{x}') \quad (3.69)$$

avec $\underline{\underline{\Gamma}}(\underline{x}, \underline{x}')$ est l'opérateur de Green élastique non local du milieu élastique hétérogène (nous renvoyons le lecteur à la référence suivante [BERVEILLER et al., 2001] pour de plus amples détails sur cet opérateur). Afin de réduire le nombre de variables internes, *Dvorak* (Cf. [DVORAK, 1992]) propose d'approcher les champs locaux réels par des **distributions uniformes par morceaux**. Le champ de déformation inélastique est donc approché par :

$$\underline{\underline{\epsilon}}^{vp}(\underline{x}) = \sum_{r=1}^M \underline{\underline{\epsilon}}_r^{vp} \chi^{(r)}(\underline{x}) \quad (3.70)$$

Avec cette approximation (Cf. equation (3.70)) et l'équation (3.68) on a :

$$\underline{\underline{\epsilon}}(\underline{x}) = \underline{\underline{A}}(\underline{x}) : \underline{\underline{E}} + \sum_{r=1}^M (\underline{\underline{D}} * \chi^{(r)})(\underline{x}) : \underline{\underline{\epsilon}}_r^{vp} \quad (3.71)$$

où $(\underline{\underline{D}} * \chi^{(r)})(\underline{x})$ vaut :

$$(\underline{\underline{D}} * \chi^{(r)})(\underline{x}) = \frac{1}{|V|} \int_V \underline{\underline{D}}(\underline{x}, \underline{x}') \chi^{(r)}(\underline{x}') d\underline{x}' \quad (3.72)$$

Pour résoudre le problème, nous avons besoin d'une hypothèse complémentaire sur l'évolution de la variable réduite $\underline{\underline{\epsilon}}_r^{vp}$. Celle-ci est donnée par le potentiel $\Psi^{(r)}$ de la phase r :

$$\underline{\underline{\epsilon}}_r^{vp} = \frac{\partial \Psi^{(r)}}{\partial \underline{\underline{\sigma}}}(\underline{\underline{\sigma}}_r) \quad (3.73)$$

avec :

$$\underline{\underline{\sigma}}_r = \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_{V_r} = \underline{\underline{C}}^{(r)} : (\underline{\underline{\bar{\epsilon}}}_r - \underline{\underline{\epsilon}}_r^{vp}) \quad (3.74)$$

$\underline{\underline{C}}^{(r)}$ est le tenseur d'élasticité uniforme sur chaque sous domaine r et $\underline{\underline{\bar{\epsilon}}}_r$ est définie en moyennant l'équation (3.71) sur le volume V_r , soit :

$$\underline{\underline{\bar{\epsilon}}}_r = \underline{\underline{A}}_r : \underline{\underline{E}} + \sum_{s=1}^M \underline{\underline{D}}_{rs} : \underline{\underline{\epsilon}}_s^{vp} \quad (3.75)$$

$\underline{\underline{A}}_r$ est le tenseur de localisation moyen de la phase r , $\underline{\underline{D}}_{rr}$ est le facteur d'influence de transformation auto-induite, tandis que les tenseurs $\underline{\underline{D}}_{rs}$ ($r \neq s$) sont les facteurs d'influence de transformations transmises. $\underline{\underline{A}}_r$ est donné par :

$$\underline{\underline{A}}_r = \frac{1}{c_r} \frac{1}{|V|} \int_V \underline{\underline{A}}(\underline{x}) \chi^{(r)}(\underline{x}) d\underline{x} = \langle \underline{\underline{A}} \rangle_{V_r} \quad (3.76)$$

et les facteurs d'influence $\underline{\underline{D}}_{rs}$ ont l'expression suivante :

$$\underline{\underline{D}}_{rs} = \frac{1}{c_r} \frac{1}{|V|} \frac{1}{|V|} \int_V \int_V \chi^{(r)}(\underline{x}) \underline{\underline{D}}(\underline{x}, \underline{x}') \chi^{(s)}(\underline{x}') d\underline{x} d\underline{x}' \quad (3.77)$$

Les tenseurs $\underline{\underline{D}}_{rs}$ et $\underline{\underline{A}}_r$ sont calculés grâce à la résolution de problèmes élastiques :

1. Pour obtenir les tenseurs $\underline{\underline{A}}_r$, nous résolvons une série de problèmes élastiques en imposant un champ de déformation macroscopique \underline{E} unitaire et dans une direction donnée (série de chargements élémentaires : traction, cisaillement) et $\underline{\underline{\epsilon}}_r^{vp}$ nul dans chaque phase. On obtient $\underline{\underline{A}}_r$ par la relation de Hooke : $\underline{\underline{\epsilon}}_r = \underline{\underline{A}}_r : \underline{E}$.
2. Pour obtenir les tenseurs $\underline{\underline{D}}_{rs}$, on résout une série de problèmes élastiques en imposant \underline{E} nul et $\underline{\underline{\epsilon}}_r^{vp}$ unitaire dans la phase ou le sous domaine V_r (précontrainte). On en déduit $\underline{\underline{D}}_{rs}$ par l'équation (3.75).

Dès lors on peut évaluer la contrainte macroscopique. Elle est estimée comme la moyenne sur V des contraintes de chaque phase ou sous domaine V_r (Cf. equation (3.74) avec $\underline{\underline{\epsilon}}_r$ remplacée par l'équation (3.75)) :

$$\underline{\underline{\Sigma}} = \underline{\underline{\tilde{C}}} : \underline{E} + \sum_{r=1}^M c_r \underline{\underline{C}}^{(r)} \left(\sum_{s=1}^M (\underline{\underline{D}}_{rs} - \underline{\underline{\delta}}_{rs}) : \underline{\underline{\epsilon}}_s^{vp} \right) \quad (3.78)$$

avec :

$$\underline{\underline{\tilde{C}}} = \sum_{r=1}^M c_r \underline{\underline{C}}^{(r)} : \underline{\underline{A}}_r \quad (3.79)$$

En résumé, si on suppose connu $\underline{\underline{A}}_r$ et les $\underline{\underline{D}}_{rs}$, le schéma d'intégration est donc défini par les équations : (3.73), (3.74), (3.75) et (3.78). En remplaçant $\underline{\underline{\epsilon}}_r$ par l'équation (3.75) dans (3.74). Puis en dérivant (3.74) et en remplaçant $\underline{\underline{\epsilon}}_r^{vp}$ par l'équation (3.73), on obtient un système d'équations différentielles d'ordre un couplées. La résolution de ce système nous permet d'évaluer les $\underline{\underline{\sigma}}_r$ et donc d'en déduire $\underline{\underline{\epsilon}}_r^{vp}$, $\underline{\underline{\epsilon}}_r$ et $\underline{\underline{\Sigma}}$.

L'inconvénient de cette méthode est que les prédictions sont trop raides. La raison vient des hétérogénéités de déformations intra-phases. En effet, approcher un champ de déformation non uniforme au sein d'une phase par des champs uniformes par morceaux ne suffit pas à reproduire le comportement effectif du matériau.

3.5.3.2 Correction de la méthode - augmentation du nombre de sous domaines

Une première correction a été proposée par *Dvorak et al* (Cf. [DVORAK et al., 1994]) en 1994. Elle consistait tout simplement à augmenter le nombre de sous domaines V_r . Pour vérifier cette proposition, un calcul 2D a été réalisé par *Michel et al* (Cf. [MICHEL et al., 2000]). Mais la TFA prédit toujours un comportement trop rigide même en augmentant de manière significative le nombre de sous domaines (Cf. [MICHEL et al., 2000]), suggestion proposée par *Dvorak* en 1994. Augmenter le nombre de sous domaines ferait perdre à la TFA la notion de modèle réduit. Par conséquent, cette première correction, proposée par *Dvorak* en 1994, ne constituait pas une solution alternative au comportement trop rigide de la TFA. Dès lors, une autre correction fut proposée en 2001 par *Chaboche et al* (Cf. [CHABOCHE et al., 2001]). Celle-ci est présentée dans le paragraphe suivant.

3.5.3.3 Correction de la méthode - tenseurs d'influence plastique

Dans [CHABOCHE et al., 2001], les auteurs proposent une correction de la TFA en utilisant des valeurs corrigées, $\underline{\underline{K}}_r : \underline{\underline{\epsilon}}_r^p$, pour les champs de transformation. L'équation (3.75) devient :

$$\underline{\underline{\epsilon}}_r = \underline{\underline{A}}_r : \underline{E} + \sum_{s=1}^M \underline{\underline{D}}_{rs} : \underline{\underline{K}}_s : \underline{\underline{\epsilon}}_s^p \quad (3.80)$$

Michel et Suquet (Cf. [MICHEL and SUQUET, 2003]) ont modifié la méthode en se basant, non plus sur des modes plastiques scalaires, mais sur des modes plastiques tensoriels. Dans ce cas, les variables internes ne sont plus tensoriels mais scalaires. Dans l'article de 2003 (Cf. [MICHEL and SUQUET, 2003]), la méthode est appliquée à des matériaux biphasés composés de fibres élastiques linéaires et d'une matrice élastoplastique non linéaire.

3.5.4.1 Principe

Dans ce paragraphe, nous proposons d'illustrer la méthode NTFA pour des matériaux élastovico-plastiques incompressibles. En effet, ce comportement est proche de celui du combustible *MOX*. Les constituants sont donc élastoviscoplastiques incompressibles. On suppose aussi que leur comportement est standard généralisé (Cf. [HALPHEN and NGUYEN, 1975]), les variables d'état étant le tenseur de déformation et les variables internes qui décrivent des phénomènes irréversibles en tout point matériel \underline{x} . Dans la suite, nous ne considérerons que les mécanismes dissipatifs décrits par la déformation viscoplastique $\underline{\underline{\varepsilon}}^{vp}$. Les relations constitutives des constituants sont donc données par l'équation (3.66). Pour simplifier nos expressions, notre attention se limitera aux constituants isotropes. Le tenseur élastique $\underline{\underline{C}}$ est par conséquent caractérisé par un module de compressibilité K et un module de cisaillement G , tandis que le potentiel de force $\psi(\underline{\underline{\sigma}})$ dépend de la contrainte seulement par son second invariant σ_{eq} . Sous cette dernière hypothèse on a :

$$\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^{vp} = \frac{3}{2} \frac{\partial \psi}{\partial \sigma_{eq}}(\sigma_{eq}) \frac{\underline{\underline{\sigma}}^{dev}}{\sigma_{eq}} \quad (3.85)$$

où $\underline{\underline{\sigma}}^{dev}$ est la partie déviatorique de $\underline{\underline{\sigma}}$ et σ_{eq} est définie par :

$$\sigma_{eq} = \left(\frac{3}{2} \underline{\underline{\sigma}}^{dev} : \underline{\underline{\sigma}}^{dev} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (3.86)$$

Comme précédemment pour la TFA, on fixe les variables d'état (pas d'évolution du système). Les champs de contraintes $\underline{\underline{\sigma}}$ et de déformations $\underline{\underline{\varepsilon}}$ dans le VER vérifient le problème élastique linéaire (3.67), avec des conditions de périodicité sur le VER. $\underline{\underline{E}}$ et $\underline{\underline{\varepsilon}}^{vp}$ étant connus, le champ de déformations $\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{x})$ peut s'écrire, grâce au principe de superposition, sous la forme de l'équation (3.68). Afin de réduire le nombre de variables internes et d'améliorer la TFA, [MICHEL and SUQUET, 2003] ont proposé de prendre en compte la non uniformité des champs locaux des variables internes en considérant des champs de transformation non uniformes. Plus précisément le champ de déformations viscoplastiques est décomposé en un ensemble de champs tensoriels appelés **modes plastiques**, $\underline{\underline{\mu}}^k(\underline{x})$:

$$\underline{\underline{\varepsilon}}^{vp}(\underline{x}) = \sum_{k=1}^M \varepsilon_k^{vp} \underline{\underline{\mu}}^k(\underline{x}) \quad (3.87)$$

Les variables internes sont alors des variables scalaires ε_k^{vp} , $k = 1, \dots, M$. Avec cette approximation (3.87), on passe d'un nombre infini de variables internes qui étaient tensorielles à un nombre fini M de variables scalaires. Les modes plastiques $\underline{\underline{\mu}}^k$ sont, eux, tensoriels, non uniformes car ils dépendent de la position \underline{x} . Il est important de remarquer que leur nombre M peut être différent du nombre de constituants N . D'autres hypothèses sont faites pour simplifier la théorie :

1. **Le support de chaque mode est entièrement contenu dans une seule phase du matériau.** Il suit de cette hypothèse que, pour un mode donné k , on peut définir sa fonction caractéristique χ^k , son énergie libre w^k , son module élastique $\underline{\underline{C}}^k$, son potentiel de force ψ^k comme ceux de la phase qui supporte ce mode.

2. **Pour un comportement incompressible, les modes sont des champs tensoriels à trace nulle.**
3. **Les modes sont orthogonaux**, c'est à dire que $\langle \underline{\underline{\mu}}^k : \underline{\underline{\mu}}^l \rangle = 0$ si $k \neq l$. Cette condition est évidemment vérifiée quand les modes ont leur support dans des phases différentes, mais doit être imposée pour les modes qui ont leur support dans la même phase.
4. Enfin, pour avoir les ε_k^{vp} homogènes à une déformation viscoplastique, **les modes sont norma-**

$$\text{lisés : } \langle \underline{\underline{\mu}}_{eq}^k \rangle = 1 \text{ où } \underline{\underline{\mu}}_{eq}^k = \left(\frac{2}{3} \underline{\underline{\mu}}^k : \underline{\underline{\mu}}^k \right)^{\frac{1}{2}}.$$

On constate donc que le choix des modes plastiques est un point-clé dans la précision de la méthode. Ce choix est laissé à l'appréciation de l'utilisateur. Les modes sont souvent choisis comme des champs de déformations viscoplastiques réels sous différents chargements élémentaires. On reviendra plus tard sur l'évaluation et la sélection des modes les plus pertinents. A ce stade on considère qu'ils ont été identifiés ainsi que les tenseurs d'influence.

Avec l'approximation (3.87), l'équation (3.68) devient :

$$\underline{\underline{\varepsilon}}(x) = \underline{\underline{A}}(x) : \underline{\underline{E}} + \sum_{l=1}^M (\underline{\underline{D}} * \underline{\underline{\mu}}^l)(x) : \varepsilon_l^{vp} \quad (3.88)$$

En contractant (9.4) par $\underline{\underline{\mu}}^k$ et en moyennant sur le VER, on obtient :

$$e_k = \underline{\underline{a}}_k : \underline{\underline{E}} + \sum_{l=1}^M D_{kl} : \varepsilon_l^{vp} \quad (3.89)$$

où la déformation réduite e_k , le tenseur de localisation réduit $\underline{\underline{a}}_k$ et les facteurs d'influence D_{kl} sont définis par :

$$e_k = \langle \underline{\underline{\varepsilon}} : \underline{\underline{\mu}}^k \rangle \quad \underline{\underline{a}}_k = \langle \underline{\underline{\mu}}^k : \underline{\underline{A}} \rangle \quad D_{kl} = \langle \underline{\underline{\mu}}^k : (\underline{\underline{D}} * \underline{\underline{\mu}}^l) \rangle \quad (3.90)$$

Par analogie avec l'équation définissant la déformation réduite e_k dans l'équation (3.90), on peut définir la déformation viscoplastique réduite e_k^{vp} et la contrainte réduite τ_k :

$$e_k^{vp} = \langle \underline{\underline{\varepsilon}}^{vp} : \underline{\underline{\mu}}^k \rangle \quad \tau_k = \langle \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\mu}}^k \rangle \quad (3.91)$$

On remarque que l'ensemble $\varepsilon_k^{vp}_{k=1,\dots,M}$ peut être remplacé par l'ensemble $e_k^{vp}_{k=1,\dots,M}$ puisque :

$$e_k^{vp} = \langle \underline{\underline{\mu}}^k : \underline{\underline{\mu}}^k \rangle \varepsilon_k^{vp} \quad (3.92)$$

Puisque les tenseurs élastiques des phases sont supposés isotropes et les modes incompressibles, la contrainte réduite τ_k , supportée par la phase r , est donnée par :

$$\tau_k = 2G^r (e_k - e_k^{vp}) \quad (3.93)$$

avec G^r le module de cisaillement de la phase r ($G^r = \mu^r$ (Cf. paragraphe 2.3 chapitre 2)), support du mode k . Pour solutionner le problème il nous reste donc à évaluer e_k^{vp} . L'équation d'évolution des e_k^{vp} est obtenue en double contractant l'équation (3.85) par $\underline{\underline{\mu}}^k$ et en moyennant sur le VER :

$$\dot{e}_k^{vp} = \langle \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^{vp} : \underline{\underline{\mu}}^k \rangle = \frac{3}{2} \left\langle \frac{\partial \Psi}{\partial \underline{\underline{\sigma}}_{eq}} (\underline{\underline{\sigma}}_{eq}) \frac{\underline{\underline{\sigma}}^{dev} : \underline{\underline{\mu}}^k}{\underline{\underline{\sigma}}_{eq}} \right\rangle \quad (3.94)$$

Enfin, pour obtenir une relation entre les variables internes réduites $\dot{\epsilon}_k^{vp}$ et τ_k , il est nécessaire de faire une approximation de σ_{eq} afin de simplifier l'équation (3.94). Une approximation possible est donnée par *Michel et Suquet* (Cf. [MICHEL and SUQUET, 2003]), qui estiment une contrainte réduite globale a_r pour la phase r et agissant sur l'ensemble des modes à support dans cette phase du fait qu'il soit attendu que l'ensemble des modes plastiques à support dans la phase r soient couplés. a_r est estimée de la façon suivante :

$$a_r = \left[\sum_{k=1}^{M(r)} (\tau_k)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (3.95)$$

où $M(r)$ est le nombre de modes à support dans la phase r . On remplace dans l'équation (3.94) σ_{eq} par a_r ce qui donne :

$$\dot{\epsilon}_k^{vp} = \frac{3}{2} \frac{\partial \psi^k}{\partial \sigma_{eq}} (a_r) \frac{\tau_k}{a_r} \quad (3.96)$$

Le système d'équation (3.89), (3.92), (3.93) et (3.96) constitue les relations constitutives effectives de composite : système d'équations différentielles couplées d'ordre 1. Ce système est donc résolu le long d'un chemin imposé, soit dans l'espace des contraintes macroscopiques soit dans l'espace des déformations macroscopiques, ce qui donne les variables internes ϵ_k^{vp} . Enfin, la contrainte macroscopique est obtenue en moyennant le champ de contrainte qui résulte des équations (3.66), (3.87), (9.4) :

$$\underline{\underline{\Sigma}} = \underline{\underline{\tilde{C}}} : \underline{\underline{E}} + \sum_{k=1}^M \left(\left\langle \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{D}} * \underline{\underline{\mu}}^k \right\rangle - \left\langle \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{\mu}}^k \right\rangle \right) \epsilon_k^{vp} \quad (3.97)$$

avec $\underline{\underline{\tilde{C}}} = \left\langle \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{A}} \right\rangle$.

A ce stade, nous avons supposé que les modes plastiques $\underline{\underline{\mu}}^k_{k=1, \dots, M}$ ainsi que les tenseurs d'influences $\underline{\underline{D}} * \underline{\underline{\mu}}^k_{k=1, \dots, M}$ ont été identifiés. Nous allons donc dans le paragraphe suivant exposer la démarche employée pour les identifier.

3.5.4.2 Identification des modes

Les modes sont choisis comme les champs de déformations viscoplastiques réels normalisés et obtenus sous différents chargements élémentaires : par exemple traction uniaxiale, cisaillement, etc. Ils sont déterminés numériquement en simulant la réponse du VER le long de chemins de chargement radiaux dans l'espace des contraintes macroscopiques. Il s'agit d'un chargement à direction de contrainte imposée (Cf. [BORNERT et al., 2001]). Par exemple, en traction uniaxiale on impose au VER la contrainte macroscopique suivante $\underline{\underline{\Sigma}} = \Sigma(t) \underline{\underline{\Sigma}}_0^1$ avec $\underline{\underline{\Sigma}}_0^1 = e_1 \otimes e_1$ ou en cisaillement $\underline{\underline{\Sigma}} = \Sigma(t) \underline{\underline{\Sigma}}_0^2$ avec $\underline{\underline{\Sigma}}_0^2 = e_1 \otimes e_2 + e_2 \otimes e_1$. Les modes $\underline{\underline{\mu}}^k$ sont calculés pour $\underline{\underline{E}} : \underline{\underline{\Sigma}}_0^k = x\%$. x étant fixé par l'utilisateur (choix souvent gouverné pour atteindre la contrainte d'écoulement) ainsi que la vitesse de chargement. *Roussette* a montré dans sa thèse (Cf. [ROUSETTE, 2005]) que le choix de la vitesse de chargement pour le calcul des modes influe peu sur le résultat final. Il arrive que ces deux chargements élémentaires ne soient pas suffisants. En effet, il peut être nécessaire d'ajouter des modes suivant le type de chargement appliqué à la structure. Les résultats obtenus dépendent fortement du choix des directions de chargement pour calculer les modes plastiques. Dans le cas où le VER est soumis à un chargement multiaxial, il est important que les directions de chargement choisies pour les modes plastiques correspondent aux composantes non nulles du chargement imposé. *Roussette* a également montré dans sa thèse (Cf. [ROUSETTE, 2005]) que la méthode NTFA donne des résultats excellents au niveau de la

zone de déformation choisie pour la détermination des modes, mais dans les gammes de déformations autres que celle utilisée pour le calcul des modes, les prédictions ne concordent pas toujours avec le calcul de référence. **Il était donc important de pouvoir prendre en compte les informations des champs de déformations viscoplastiques pour différents niveaux de déformation afin de modéliser au mieux le comportement d'un matériau, mais sans que le nombre de variables internes soit trop élevé.** Dans sa thèse une méthode a été mise en place. Celle-ci est présentée succinctement dans le paragraphe suivant.

3.5.4.3 Choix des modes plastiques par la transformation de Karhunen-Loève

Dans un premier temps, ils ont considéré les modes plastiques comme des champs de déformations viscoplastiques dans une même direction de chargement $\underline{\underline{\Sigma}}_0^k$, mais, cette fois-ci, pour différents niveaux de chargement $\underline{\underline{E}} : \underline{\underline{\Sigma}}_0^k$. Or on sait que les modes plastiques candidats pour la méthode NTFA doivent être orthogonaux deux à deux, ce que ne vérifie pas le choix de ces modes. Il a donc fallu trouver un procédé qui prenne en compte l'essentiel des informations contenues dans ces champs de déformations viscoplastiques obtenus à différents instants de chargement, et qui fournisse des modes orthogonaux deux à deux. Le procédé d'orthogonalisation de Schmidt semblait approprié. L'inconvénient de ce procédé était que le nombre de modes et donc de variables internes pouvait être élevé puisqu'on prenait plusieurs modes dans une même direction de chargement donné. De plus, avec ce procédé, on cumulait les informations des différents instants, alors qu'il fallait pouvoir les utiliser les unes après les autres. Un autre procédé, limitant le nombre de variables internes tout en prenant toute l'information sur la déformation viscoplastique au cours d'un chargement, devait être mis en place. La transformation de *Karhunen-Loève*, encore appelée décomposition orthogonale aux valeurs propres (Proper Orthogonal Decomposition : POD) a permis d'atteindre cet objectif, en réalisant un changement de base pour obtenir de nouveaux modes où l'information contenue est distribuée de façon optimale. L'avantage de cette méthode est qu'elle est utilisable dans les cas linéaires ou non linéaires puisque la méthode est basée sur le traitement de données. Nous verrons en détail l'application de cette méthode au chapitre 6 paragraphe 6.1.1.

3.5.4.4 Conclusion TFA - NTFA

A travers ces paragraphes, nous avons analysé les approches TFA et NTFA. Ces méthodes suscitent notre intérêt car elles fournissent la variation des champs locaux autour de leur valeur moyenne ce qui est conforme au cahier des charges fixé au chapitre 1 paragraphe 1.4, contrairement à l'approche semi-analytique (Mori-Tanaka incrémental biphasé) exposée au paragraphe 3.5.2.

L'analyse de **la TFA a révélé** que cette méthode pouvait avoir **un comportement trop raide**. Par conséquent, **dans le cadre de notre étude, nous avons décidé de développer notre modélisation du combustible MOX par changement d'échelles (échelle des phases inclusionnaires : amas uranifère et plutonifère) via l'approche NTFA**. En effet, **cette méthode remplit parfaitement le cahier des charges que nous nous sommes fixés :**

- Elle donne **accès aux champs locaux, moyens par phases et macroscopiques**.
- Elle est **peu consommatrice de temps de calcul (CPU) car elle a un faible nombre de variables internes (les modes plastiques)**.
- Elle a un **schéma d'intégration numérique «simple»**, c'est à dire cohérent avec les schémas que l'on trouve dans les codes $1D_{1/2}$, type CYRANO3 ou ALCYONE

3.6 Bilan du chapitre

Afin de développer une modélisation du combustible *MOX* par changement d'échelles (échelle des phases inclusionnaires : amas uranifère et plutonifère), nous avons, tout d'abord, rappelé la démarche générale pour construire un modèle d'homogénéisation.

Cette démarche se décompose classiquement en trois étapes (Cf. [BORNERT et al., 2001a]) :

1. **La représentation** : il s'agit de définir le milieu hétérogène. A ce stade, il faut préciser la constitution de cet ensemble : on doit définir les constituants, la manière dont ils sont disposés, les propriétés mécaniques qu'on leur affecte... Cette étape conduit (si c'est possible : notion de séparation d'échelle détaillée dans le paragraphe 3.2) à la définition d'un VER.
2. **La localisation** : elle permet de déterminer les champs mécaniques, à l'échelle microscopique, c'est à dire au sein du VER, induits par un chargement à l'échelle macroscopique (pastille nucléaire *MOX*). Cette étape établit les relations de passage de l'échelle macroscopique à celle microscopique (tenseur de localisation).
3. **L'homogénéisation** : elle consiste à synthétiser les résultats mécaniques précédents, obtenus au sein du VER, et à en déduire la réponse moyenne. On établit, ainsi, les relations de passage de l'échelle microscopique à l'échelle macroscopique. Les propriétés effectives du VER, qui sont celles du MHE, constituent donc le résultat de cette étape d'homogénéisation.

Nous avons ensuite réalisé un état de l'art sur les modèles d'homogénéisation qui seraient susceptibles d'être en adéquation avec le comportement local des constituants du combustible *MOX* en service, à savoir un comportement visco-élastique linéaire compressible vieillissant avec déformations libres imposées, et avec le cahier des charges fixé au paragraphe 1.4 du chapitre 1. Cette analyse nous a permis de dégager deux approches intéressantes :

1. Mori-Tanaka incrémental biphasé développé par [RICAUD and MASSON, 2009] : ce modèle est basé sur un schéma d'homogénéisation *Mori-Tanaka* incrémental et particulièrement optimisé en temps de calcul (modèle avec un faible nombre de variables internes α). Ce modèle donne accès au comportement effectif et moyen par phase. Il ne remplit donc pas pleinement le cahier des charges fixé au paragraphe 1.4 du chapitre 1 (Rappel : on souhaite avoir accès également aux champs locaux). Néanmoins, nous ne faisons pas abstraction de ce modèle d'homogénéisation car nous avons tout d'abord, dans le cadre de cette thèse, réalisé une extension de celui-ci aux composites triphasés (Cf. partie 4). Ensuite nous l'avons confronté théoriquement à l'approche NTFA (Cf. partie 4) dans le but de donner un sens physique aux variables internes de ce modèle. Enfin nous avons comparé les prédictions effectives et moyennes par phase de celui-ci (Cf. partie 4) par rapport au modèle d'homogénéisation développé dans la partie 3 (modèle basé sur l'approche NTFA) et par rapport aux éléments finis.
2. **La méthode NTFA** (Cf. [MICHEL and SUQUET, 2003]) **remplit parfaitement le cahier des charges que nous nous sommes fixés** :
 - Elle donne **accès aux champs locaux, aux comportements moyens par phases et macroscopique**.
 - Elle est **peu consommatrice de temps de calcul (CPU) car elle a un faible nombre de variables internes (les modes plastiques)**.
 - Elle a un **schéma d'intégration numérique «simple»**, c'est à dire cohérent avec les schémas que l'on trouve dans les codes $1D_{1/2}$, type CYRANO3 ou ALCYONE

Pour homogénéiser le problème local, présenté au paragraphe 2.3 chapitre 2, nous avons donc décidé d'utiliser l'approche NTFA.

BILAN PARTIE 1 :

Objectif de la thèse et approches d'homogénéisation retenues

Cette première partie nous a tout d'abord permis de préciser le cadre général dans lequel ces travaux de thèse s'inscrivent. L'exploitant EDF (Électricité De France) irradie actuellement dans ses **Réacteurs à Eau Pressurisée** deux types de combustible : un combustible fabriqué à partir de poudre de dioxyde d'uranium enrichie, nommé couramment l' UO_2 , et un autre fabriqué à partir de poudre de dioxyde d'uranium appauvrie et de poudre de dioxyde de plutonium enrichie, nommé le *MOX* (acronyme anglais : Mixed Oxide). Nous nous intéressons ici au **comportement du combustible MOX sous irradiation, en fonctionnement normal**.

L'intérêt porté au combustible *MOX* vient du fait que celui-ci diffère de l' UO_2 sur plusieurs points. Parmi ces points, nous pouvons citer l'**hétérogénéité de ce combustible en répartition de plutonium**. En effet, dans un combustible **MOX MIMAS ADU** (procédé de fabrication actuellement employé par l'usine MELOX), on observe **trois phases** : une phase inclusionnaire à forte concentration en plutonium (25 à 30 % de teneur massique moyenne en plutonium), nommée les **amas plutonifères**, une autre phase inclusionnaire à faible teneur en plutonium (inférieure à 1 % de teneur massique moyenne), nommée les **amas uranifères** et une phase d'**enrobage** à teneur modérée en plutonium (environ 6 à 10 % de teneur massique moyenne en plutonium). Hors irradiation, les caractéristiques mécaniques de ces différentes phases constitutives sont proches de sorte que ce matériau hétérogène du point de vue chimique présente des propriétés physiques (modules d'élasticité ...) homogènes. Par contre, **sous irradiation la réaction de fission dépend directement de la teneur en plutonium au sein de chacune de ces phases**. Par exemple, **celle-ci est deux à trois fois plus élevée dans les amas plutonifères, ce qui conduit à une accélération des mécanismes de déformation induits par l'irradiation au sein de cette phase**.

De cette analyse nous avons conclu que **la compréhension du comportement du combustible MOX, durant l'irradiation et en fonctionnement normal, passait par la construction de lois macroscopiques faisant intervenir les effets microstructuraux**. Cela correspond à l'**objectif de nos travaux de thèse**. Ces travaux suscitent un véritable intérêt industriel car les codes de simulation numérique du comportement de ce combustible, employés par l'industrie nucléaire, tiennent rarement compte de ces effets microstructuraux. Dans le cadre de nos travaux de thèse, nous avons décidé de nous limiter à l'**échelle des phases inclusionnaires : amas uranifères et plutonifères** (échelle de la dizaine à environ la centaine de microns). La porosité et les grains, se plaçant à une échelle inférieure (échelle inférieure à la dizaine de microns), seront intégrés, de façon implicite, à travers les propriétés matériaux et les lois de comportement appliquées à chaque phase inclusionnaire.

L'objectif, par la suite, est donc de développer une modélisation par changement d'échelles (échelle des phases inclusionnaires : amas uranifères et plutonifères et échelle de la pastille) permettant d'estimer plus précisément la distribution des champs mécaniques locaux au sein du combustible MOX et en régime de fonctionnement normal.

Pour être en adéquation avec les attentes industrielles, ce **modèle doit remplir le cahier des charges** suivant :

- **Un modèle donnant accès aux informations** (exemple : champ de contraintes....) :
 - **locales par phases ;**
 - **moyennes par phases ;**
 - **macroscopiques.**
- Un modèle peu consommateur de temps de calcul (CPU) :
 - cela implique donc **un modèle avec un faible nombre de variables internes.**
- **Un modèle devant avoir un schéma d'intégration numérique «simple», c'est à dire cohérent**

avec les schémas que l'on trouve dans les codes industriels.

Les intérêts industriels sont :

- **simuler correctement le comportement macroscopique du combustible MOX dans les codes industriels** (en fonctionnement normal) ;
- **analyser ce qui se passe dans chaque phase**, afin de **progresser dans la compréhension de l'apparition de certains mécanismes locaux** : par exemple l'amorçage de micro-fissures au sein d'une phase (phénomène déjà observé sur un lot de fabrication de combustibles MOX) ;
- **prévoir le comportement numérique, macroscopique et local, du combustible MOX dès sa conception** afin d'**orienter les choix de microstructures à la fabrication**.

Pour définir le comportement local que nous allons appliquer, au sein de chacune des phases constitutives du combustible *MOX*, nous avons analysé, dans un deuxième temps, l'ensemble des mécanismes qui pouvaient apparaître sous les effets de l'irradiation et toujours dans des conditions de fonctionnement normal. Ces mécanismes dépendent implicitement ou explicitement de la densité de fission qui est hétérogène dans un combustible *MOX* (effet de la répartition du plutonium). Ils se produisent donc avec une cinétique plus ou moins importante. Ces mécanismes sont :

- **Déformations indépendantes du champ de contraintes et de la température** :
 - la densification ;
 - le gonflement solide ;
- **Déformations dépendantes du champ de contraintes et de la température** :
 - la restructuration du combustible qui induit du gonflement ;
- **Déformations dépendantes du champ de contraintes** :
 - le fluage athermique induit par l'irradiation ;

Parmi ces mécanismes, certains n'apparaissent qu'au sein d'une phase : la restructuration et son gonflement se produisent essentiellement dans les amas plutonifères (fin de premier cycle d'irradiation).

D'un point de vue formel, **la loi de comportement locale, proposée ici, est de nature visco-élastique linéaire compressible vieillissante avec des déformations libres imposées**.

Dans un troisième temps, nous avons rappelé la démarche générale pour construire un modèle d'homogénéisation. Cette démarche se décompose classiquement en trois étapes (Cf. [BORNERT et al., 2001a]) :

1. **La représentation** : il s'agit de définir le milieu hétérogène. A ce stade, il faut préciser la constitution de cet ensemble : on doit définir les constituants, la manière dont ils sont disposés, les propriétés mécaniques qu'on leur affecte... Cette étape conduit (si c'est possible : notion de séparation d'échelle détaillée dans le paragraphe 3.2) à la définition d'un VER.
2. **La localisation** : elle permet de déterminer les champs mécaniques, à l'échelle microscopique, c'est à dire au sein du VER, induits par un chargement à l'échelle macroscopique (pastille nucléaire *MOX*). Cette étape établit les relations de passage de l'échelle macroscopique à celle microscopique (tenseur de localisation).
3. **L'homogénéisation** : elle consiste à synthétiser les résultats mécaniques précédents, obtenus au sein du VER, et à en déduire la réponse moyenne. On établit, ainsi, les relations de passage de l'échelle microscopique à l'échelle macroscopique. Les propriétés effectives du VER, qui sont celles du MHE, constituent donc le résultat de cette étape d'homogénéisation.

Nous avons ensuite réalisé un état de l'art sur les modèles d'homogénéisation qui seraient susceptibles d'être en adéquation avec le comportement local des constituants du combustible MOX en

service, à savoir un comportement visco-élastique linéaire compressible vieillissant avec déformations libres imposées, et avec le cahier des charges fixé au paragraphe 1.4 du chapitre 1. Cette analyse nous a permis de dégager deux approches intéressantes :

1. Mori-Tanaka incrémental biphasé développé par [RICAUD and MASSON, 2009] : ce modèle est basé sur un schéma d'homogénéisation *Mori-Tanaka* incrémental et particulièrement optimisé en temps de calcul (modèle avec un faible nombre de variables internes α). Ce modèle donne accès au comportement effectif et moyen par phase. Il ne remplit donc pas pleinement le cahier des charges fixé au paragraphe 1.4 du chapitre 1 (Rappel : on souhaite avoir accès également aux champs locaux). Néanmoins, nous ne faisons pas abstraction de ce modèle d'homogénéisation car nous avons tout d'abord, dans le cadre de cette thèse, réalisé une extension de celui-ci aux composites triphasés (Cf. partie 4). Ensuite nous l'avons confronté théoriquement à l'approche NTFA (Cf. partie 4) dans le but de donner un sens physique aux variables internes de ce modèle. Enfin nous avons comparé les prédictions effectives et moyennes par phase de celui-ci (Cf. partie 4) par rapport au modèle d'homogénéisation développé dans la partie 3 (modèle basé sur l'approche NTFA) et par rapport aux éléments finis.
2. La méthode NTFA (Cf. [MICHEL and SUQUET, 2003]) a tenu toutes ses promesses. En effet, **cette méthode remplit parfaitement le cahier des charges que nous nous sommes fixés** :
 - Elle donne **accès aux champs locaux, aux comportements moyens par phases et macroscopique**.
 - Elle est **peu consommatrice de temps de calcul (CPU) car elle a un faible nombre de variables internes (les modes plastiques)**.
 - Elle a un **schéma d'intégration numérique «simple»**, c'est à dire cohérent avec les schémas que l'on trouve dans les codes $1D_{1/2}$, type CYRANO3 ou ALCYONE

Pour homogénéiser le problème local, présenté au paragraphe 2.3 chapitre 2, nous avons donc décidé d'utiliser l'approche NTFA. **En l'état, la méthode NTFA n'est pas applicable au comportement local des constituants du combustible MOX en service : visco-élasticité linéaire compressible vieillissant avec déformations libres imposées**. En effet, **les aspects déformations libres et vieillissant** sont des **axes d'études** qui n'ont **jamais été abordés jusqu'à présent**. De plus, la majorité des études NTFA (Cf. [MICHEL and SUQUET, 2003], [ROUSETTE, 2005]) ont été réalisées en 2D, pour des composites biphasés avec des inclusions ayant souvent un comportement élastique, et pour des essais à vitesse de déformation et à direction de contrainte imposées. **Nous proposons donc dans le cadre de cette thèse (Cf. partie 3) d'étendre la NTFA aux aspects déformations libres et vieillissant pour un composite particulaire tridimensionnel (3D) et triphasé** (inclusions ayant un comportement visqueux). **Plusieurs types d'essais seront réalisés pour valider le modèle** : vitesse et direction de contrainte imposées, fluage, relaxation, essais tournants. Et **les comparaisons qualitatives et quantitatives entre le modèle NTFA et les éléments finis (FEM) porteront aussi bien sur les champs locaux que sur les comportements moyens par phase et effectif**.

Pour réaliser ces développements, **la représentation et la localisation constituent donc la première étape de notre travail de thèse (Cf. partie 2)**. Cette analyse permettra, non seulement d'établir le comportement local des constituants du VER pour le développement de la méthode NTFA ((Cf. partie 3)), mais aussi de déterminer le VER retenu pour ces études. C'est donc l'objectif de la deuxième partie de ce mémoire de thèse.

Deuxième partie

REPRÉSENTATION ET ANALYSE EN CHAMPS COMPLETS DU COMBUSTIBLE MOX

Chapitre 4

Représentation 3D de la microstructure - méthodologie et outils développés

Objet du chapitre :

L'objectif de ce chapitre est de présenter la méthodologie et les outils développés, dans le cadre de cette thèse, pour représenter et discrétiser un composite multiphasé particulaire (type *MOX*) en trois dimensions (3D). Ce chapitre se décompose en trois parties :

1. Dans un premier temps, nous présentons l'acquisition et le traitement (segmentation) des images expérimentales bi-dimensionnelles (2D) d'une microstructure représentative d'un combustible *MOX*. Il s'agit donc de présenter et d'exploiter des outils existants, LANTINUM et ANACONDA, développés par *Oudinet* (Cf. [OUDINET, 2003]).
2. Dans un deuxième temps, nous réalisons une étude bibliographique sur les méthodes stéréologiques qui permettent l'extrapolation des informations bi-dimensionnelles (obtenues sur les images expérimentales 2D précédentes et segmentées) aux tri-dimensionnelles. Puis, nous mettons en application la méthode stéréologique sélectionnée : méthode nommée *Saltykov* (Cf. [SALTYKOV, 1967]).
3. Enfin, dans un troisième temps, nous exposons les deux outils numériques développés dans le cadre de cette thèse, pour d'une part, représenter la géométrie du composite en trois dimensions et, ensuite, la mailler périodiquement. La génération de ce milieu aléatoire s'appuie sur un schéma de type RSA. Pour valider notre représentation géométrique, nous avons également confronté nos courbes de covariance obtenues sur les images expérimentales bi-dimensionnelles à celles des images numériques bi-dimensionnelles (coupes successives réalisées dans le VER 3D).

Sommaire

4.1	Acquisition et traitement des images	93
4.1.1	Acquisition	93
4.1.2	Traitement	94
4.1.3	Conclusion	96
4.2	Stéréologie	96
4.2.1	La problématique	96
4.2.2	Bibliographie des méthodes stéréologiques	98
4.2.3	Application de la méthode stéréologique de Saltykov	105
4.2.4	Conclusion	106
4.3	Représentation 3D de la microstructure	106

4.3.1	Représentation géométrique : algorithme et outil développés	106
4.3.2	Validation géométrique : définition et confrontation des covariances	108
4.3.3	Maillage : algorithme et outil développés	113
4.3.4	Conclusion	114
4.4	Bilan du chapitre	114

Ce chapitre a fait l'objet d'une publication dans le congrès CIMTEC «5th Forum on New Material June 13-18, 2010» (Cf. [LARGENTON et al., 2010]).

4.1 Acquisition et traitement des images

4.1.1 Acquisition

L'acquisition des images à la microsonde est effectuée sur une coupe longitudinale et une coupe transversale sur une pastille MOX ADU du lot que nous nommerons A. Sur chaque coupe (Cf. figures 4.1 et 4.2), trois champs de 1 mm^2 choisis aléatoirement sont analysés (sur chaque champ on réalise une acquisition tous les $1 \mu\text{m}^2$) en mode déplacement platine. La surface totale analysée sur chaque échantillon est donc de 6 mm^2 . Les mesures sont réalisées sur les pics U (Uranium), Pu (Plutonium), O (Oxygène) sans soustraction du bruit de fond du spectre (Cf. [AUFORE, 2004]).

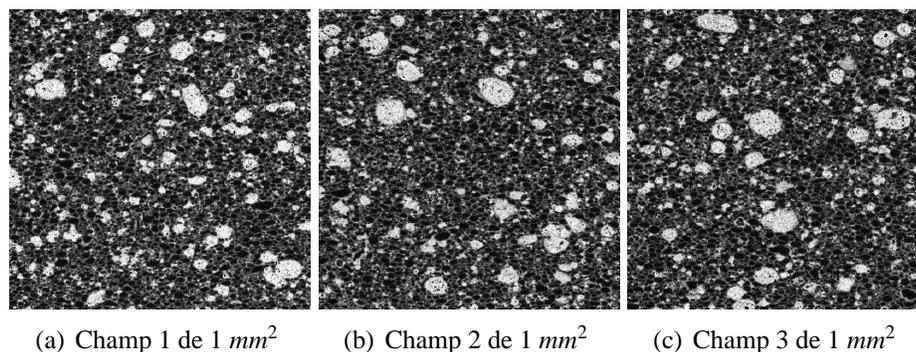


FIG. 4.1: Analyse μ sonde : cartographie X en plutonium - MOX MIMAS ADU lot A - Section Longitudinale

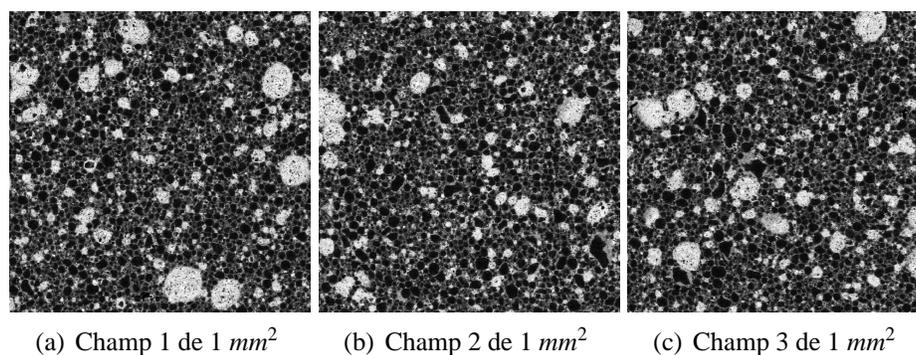


FIG. 4.2: Analyse μ sonde : cartographie X en plutonium - MOX MIMAS ADU lot A - Section Transversale

4.1.2 Traitement

1. Traitement avec le logiciel LANTINUM : sur chaque image (trois longitudinales (Cf. figure 4.1) et trois transversales (Cf. figure 4.2)) un profil quantitatif d'au moins 300 points, acquis par pas de $1 \mu\text{m}$, est effectué, avec prise en compte du fond continu (Cf. [AUFORÉ, 2004]). Cela permet le calcul de droites d'étalonnage : teneur en plutonium en fonction du niveaux de gris calculés par la corrélation proposée dans [OUDINET, 2003] et [OUDINET et al., 2000]. Une droite représentative est appliquée pour chaque image et génère une image ré-échantillonnée en niveaux de gris en intégrant le profil quantitatif enregistré sur l'image mais aussi et surtout une image semi-quantitative colorisée (Cf. figures 4.3 et 4.4) en concentration massique de plutonium (pourcentage).

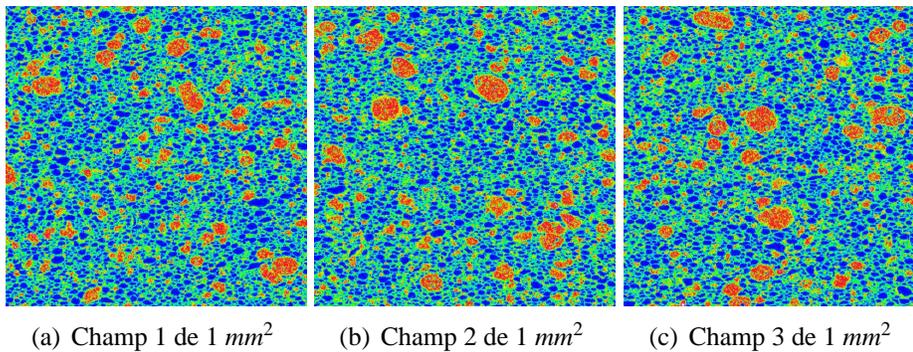


FIG. 4.3: LANTINUM concentration en plutonium - MOX MIMAS ADU lot A - Section Longitudinale

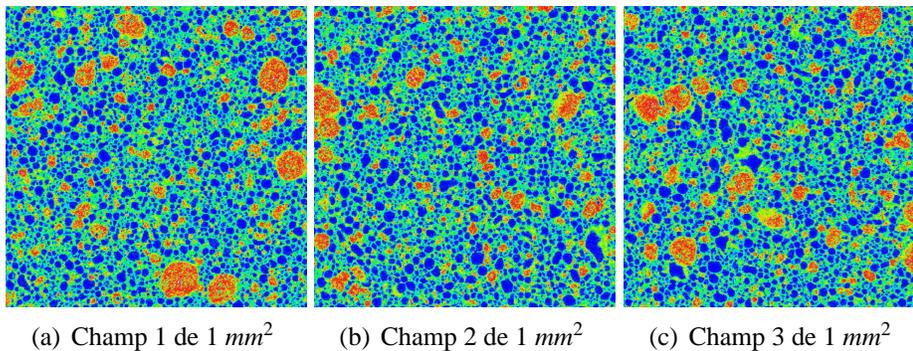


FIG. 4.4: LANTINUM concentration en plutonium - MOX MIMAS ADU lot A - Section Transversale

Pour des raisons de confidentialité nous n'avons pas indiqué l'échelle de concentration en plutonium. En l'état, ces images restent inexploitable pour représenter numériquement une microstructure du combustible *MOX*. En effet, dans le cadre de notre étude nous aurions besoin de :

- la fraction surfacique moyenne de chacune des phases ;
- la teneur moyenne en plutonium au sein de chaque phase ;
- la granulométrie (les différentes classes diamétrales) au sein des phases inclusionnaires.

2. Traitement avec le logiciel ANACONDA : nous avons (Cf. [AUFORE, 2004]) donc appliqué le logiciel, développé par Oudinet (Cf. [OUDINET, 2003]), nommé ANACONDA, qui permet de détecter les différentes phases constitutives d'un combustible MOX en s'appuyant sur la compatibilité statistique en teneur des différents points de la cartographie LANTINUM (Cf. figures 4.3 et 4.4). Nous renvoyons le lecteur à [OUDINET, 2003] pour obtenir de plus amples informations sur la façon dont sont détectées les phases. Ce traitement conduit à une image de répartition des trois phases : en rouge la phase plutonifère où les teneurs massiques en plutonium sont proches de celle du mélange mère, en bleu la phase uranifère dépourvue à l'état vierge (non irradié) de plutonium, en vert la phase d'enrobage couvrant une large plage de teneurs massiques en plutonium entre les deux valeurs extrêmes de teneurs dans les amas plutonifères et dans les amas uranifères (Cf. figures 4.5 et 4.6).

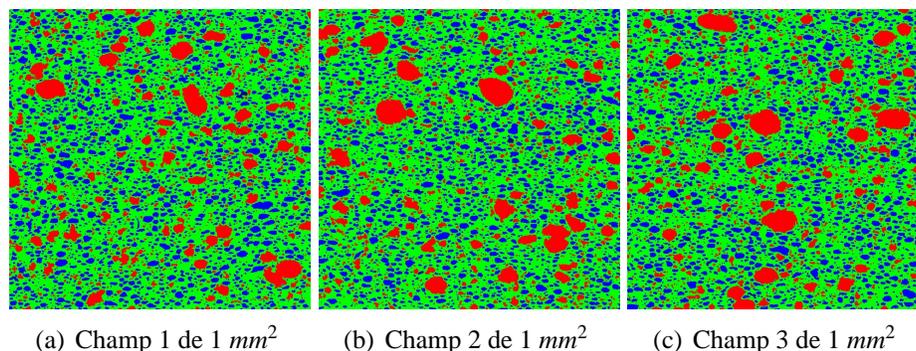


FIG. 4.5: ANACONDA phases segmentées - MOX MIMAS ADU lot A - Section Longitudinale

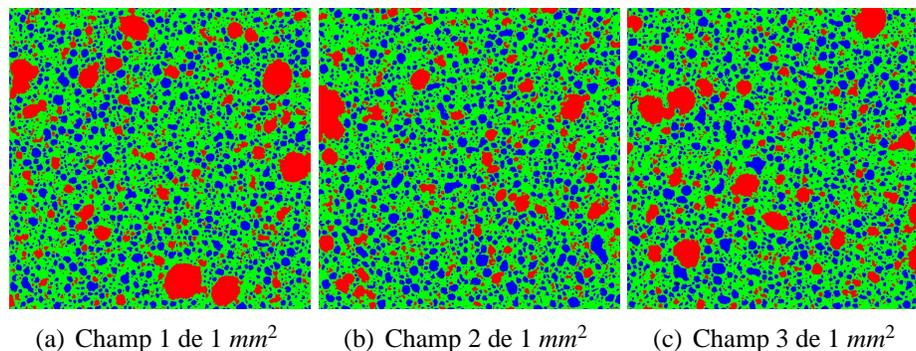


FIG. 4.6: ANACONDA phases segmentées - MOX MIMAS ADU lot A - Section Transversale

A partir des traitements effectués (Cf. figures 4.5 et 4.6), les grandeurs caractéristiques bi-dimensionnelles suivantes ont été acquises :

1. la **fraction surfacique relative de chaque phase** ;
2. la **granulométrie des phases**, voir figure 4.7 (hypothèse prise : pour chaque inclusion le logiciel ANACONDA cherche un diamètre de cercle équivalent et range les inclusions par classe diamétrale tous les 10 μm à partir de la première classe diamétrale [0 μm ; 10 μm]) ;

Ces points 1 et 2 sont des éléments indispensables pour la représentation géométrique de notre VER MOX. Pour des raisons de confidentialité, l'échelle de l'axe des ordonnées a été omise volontairement.

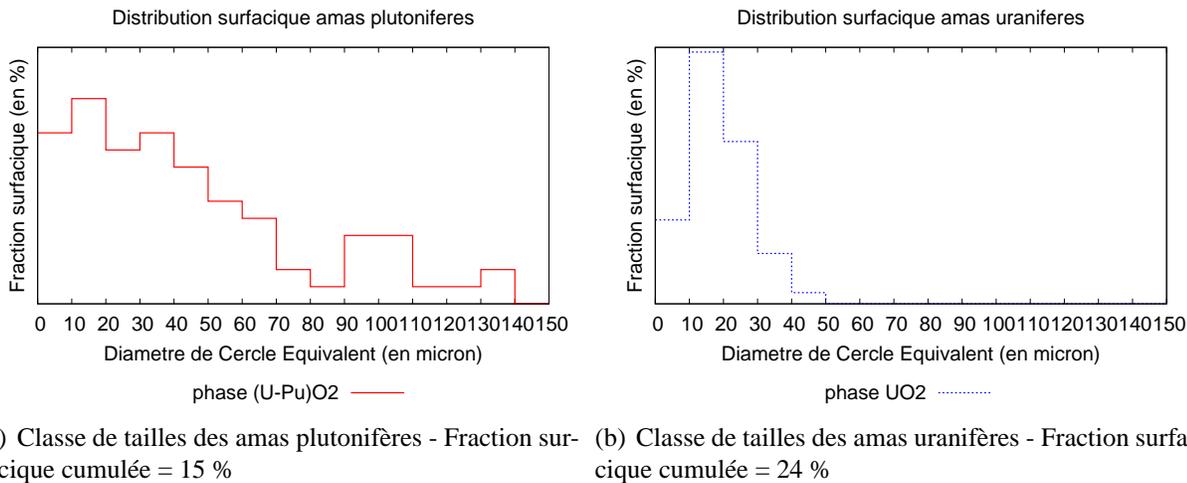


FIG. 4.7: Distributions surfaciques des phases inclusionnaires - MOX MIMAS ADU

4.1.3 Conclusion

Les deux logiciels développés par *Oudinet* (Cf. [OUDINET, 2003]) nous ont **permis de traiter les six images expérimentales bi-dimensionnelles de la microstructure MOX, acquises à la micro-sonde électronique et retenues dans le cadre de notre étude** : microstructure que nous avons nommée A.

Cependant, nous souhaitons représenter notre milieu hétérogène en trois dimensions. Or, les grandeurs caractéristiques, fournies par le logiciel ANACONDA, sont bi-dimensionnelles. Pour ce faire, il est nécessaire de pouvoir générer les informations des objets 3D (trois dimensions) à partir des d'informations obtenues en 2D (Cf. figures 4.7(a) et 4.7(b)). Nous abordons ici le domaine de la stéréologie qui est exposé au paragraphe suivant.

4.2 Stéréologie

4.2.1 La problématique

4.2.1.1 Biais de sous estimation introduit par les coupes :

Il est parfois possible d'étudier de manière précise et performante une céramique au microscope optique, lorsque celle-ci est transparente (Cf. [ZHANG *et al.*, 1999]). Des porosités sphériques peuvent par exemple être vues par projection, et le diamètre du disque projeté est alors égal au diamètre de la porosité qui l'a généré. La taille initiale de l'objet est obtenue directement, sans avoir à faire de correction. Cependant, **les pastilles de combustible MOX sont opaques**, et l'obtention de fines plaques de ce combustible est économiquement irréalisable. **L'acquisition d'images passe donc par la réalisation d'une coupe métallographique**. Les objets identifiables présents dans la masse du matériau sont tronçonnés et vus en coupe. **Les informations obtenues sont ainsi les intersections du plan avec une partie des objets**. Il est alors **nécessaire de retrouver les informations tri-dimensionnelles globales à partir d'informations bi-dimensionnelles partielles**.

Les relations pour passer d'informations mesurées sur des disques, par exemple, aux dimensions des sphères intersectées les ayant générés sont connues et très utilisées (voir paragraphe 4.2.2). Cette correction est nécessaire car les disques ont des diamètres au plus égaux à celui de la sphère intersectée : un calcul de taille moyenne sous estime alors systématiquement la taille des objets réels. **La possession d'un outil de passage d'informations 2D à des informations 3D est indispensable pour une estimation sans biais de nombreuses caractéristiques d'objets.**

4.2.1.2 Biais de sur-estimation des grandes classes :

Si l'on échantillonne un volume de manière uniformément aléatoire, le plan d'intersection choisi possède une certaine probabilité de rentrer en contact avec une particule. Plus généralement, l'échantillonnage à l'aide d'un outil bi-dimensionnel d'un volume tri-dimensionnel laisse un degrés de liberté. **Plus un objet occupe un espace important dans cette dimension résiduelle sur un segment donné, plus sa probabilité d'être intersecté est grande. Un biais est ainsi introduit en faveur des objets de forte taille (Cf. [WATSON, 1971]).** Il est donc **nécessaire de corriger les histogrammes de répartition en taille** (exemple pour les MOX : granulométrie bi-dimensionnelle au sein d'une phase inclusionnaire, amas uranifères UO_2 ou plutonifères $(U - Pu)O_2$) **en fonction des probabilités d'apparition relatives associées à la taille moyenne de chaque classe.**

4.2.1.3 Représentativité statistique :

Une analyse visant à caractériser une population entière à partir d'un nombre limité d'individus suppose que ceux-ci sont statistiquement représentatifs de la population. **Cela signifie que les champs bi-dimensionnels examinés doivent présenter un nombre d'objets intersectés suffisamment important pour assurer une représentativité statistique satisfaisante (Cf. [CHERMANT, 1999]). Les dimensions des champs d'analyse devront être choisies en fonction de la taille de ces spécimens (Cf. [CRUZ-ORIVE, 1983]).** Dans le cas du combustible MOX, nous avons vu que le champ d'analyse est de 1024 par 1024 μm . La plus grande des particules (taille du plus grand amas plutonifère) fait environ 150 μm pour les lots de fabrication actuels. Nous avons donc un facteur d'échelle d'environ 7 ce qui reste acceptable.

Ajoutons qu'une particule de taille donnée a d'autant plus de chances d'être tronquée en bord de champ que sa taille est importante. **On peut préférer ne comptabiliser que les objets en plein champ, pour éviter de commettre une erreur difficile à estimer sur leur partie manquante.** Il est alors possible d'appliquer la correction de Miles et Lantuéjoul (Cf. [LANTUEJOL, 1980],[MILES, 1974]) pour obtenir une évaluation correcte de la population de chaque classe de taille.

L'analyse et la modélisation en trois dimensions d'un volume nécessitent principalement de respecter trois conditions :

1. que les champs acquis soient correctement représentatifs du volume étudié, afin d'obtenir des données numériques bi-dimensionnelles (fournies par LANTINUM et ANACONDA) qui puissent être extrapolées en confiance aux tri-dimensionnelles ;
2. que les quantités relatives d'objets mesurés soient corrigés en fonction de la probabilité plus ou moins élevée d'échantillonnage associée à chaque taille ;
3. que les tailles d'objet soient corrigées relativement à la morphologie de l'objet et à la méthode de coupe utilisée.

De nombreux travaux ont été effectués depuis plus d'un siècle établissant des liens entre les paramètres d'objets tri-dimensionnels et les paramètres bi-dimensionnels obtenus. L'étude de ces liens a délimité un domaine, la stéréologie, utilisant principalement des méthodes probabilistes. Nous allons présenter, ci-dessous, les méthodes les plus appropriées à notre cas d'étude.

4.2.2 Bibliographie des méthodes stéréologiques

4.2.2.1 Méthodes stéréologiques classiques :

Parmi les premiers résultats mettant en évidence les relations entre les informations surfaciques et volumiques, on peut mentionner Cauchy (Cf. [A.CAUCHY, 1850]), qui dès 1850 stipule, dans ses travaux sur l'intégration, que la surface projetée moyenne d'une particule convexe vaut le quart de sa surface totale. DeHoff et Rhines (Cf. [R.DEHOFF and RHINES, 1961]) citent des travaux d'esprit similaire qui relient la probabilité d'intersecter une courbe gauche et quelconque dans l'espace par un plan aléatoire à son demi périmètre. D'autres informations moyennes et globales sont relativement simples à obtenir. Par exemple, le nombre de particules de taille et de forme données par unité de volume est fonction du nombre d'intersections recensées sur un plan de coupe aléatoire qui coupe ces particules. La relation entre densité volumique et densité surfacique est alors relativement évidente (Cf. [R.DEHOFF and RHINES, 1961]).

De nombreuses méthodes existent pour obtenir la taille moyenne de particules à partir de quelques sections, que ce soit à l'aide de droites, de courbes ou de surfaces. De telles méthodes montrent vite leurs limites lorsque les distributions sont multimodales (Cf. [KARLSSON and CRUZ-ORIVE, 1997]). Le mode d'échantillonnage est une préoccupation majeure de la stéréologie. S'il est possible de réaliser de nombreuses coupes dans un matériau, une autre approche peut donner des résultats appréciables (Cf. [GUNDERSEN and JENSEN, 1987],[KARLSSON and CRUZ-ORIVE,],[R.MICHEL and L.CRUZ-ORIVE, 1988]) : réaliser des coupes parallèles régulièrement espacées conduit à l'obtention d'un échantillonnage systématique du volume. Si l'espace entre les coupes est très inférieur à la taille des particules, il est possible d'opérer une reconstruction informatique du matériau (Cf. [KARLSSON and CRUZ-ORIVE, 1992]).

L'approche probabiliste s'impose cependant afin de pouvoir exploiter un nombre faible mais représentatif d'informations (cas des combustibles MOX : 6 champs bi-dimensionnels seulement sont analysés par lot de fabrication pour des raisons économiques). Parmi les approches probabilistes, le modèle sphérique reste le plus connu et utilisé.

4.2.2.2 Méthodes «analytiques» - modèle sphérique :

Le modèle sphérique s'applique notamment aux fines porosités, à des inclusions métalliques calibrées... Il donne souvent d'excellents résultats permettant de calculer ensuite un certain nombre de caractéristiques granulométriques.

1. La sphère unité :

Les premiers pas dans le domaine ont été réalisés par Scheil en 1931 (Cf. [SCHEIL, 1931],[SCHEIL, 1935]). Ils sont basés sur le fait que l'intersection d'une sphère et d'un plan est un disque dont le rayon $r_i = \frac{d_i}{2}$ est relié à la distance x_i entre le plan de coupe et le centre de la sphère de rayon $R = \frac{D}{2}$ (Cf. figure 4.8)

par :

$$r_i = \frac{d_i}{2} = \sqrt{(R^2 - x_i^2)} \quad (4.1)$$

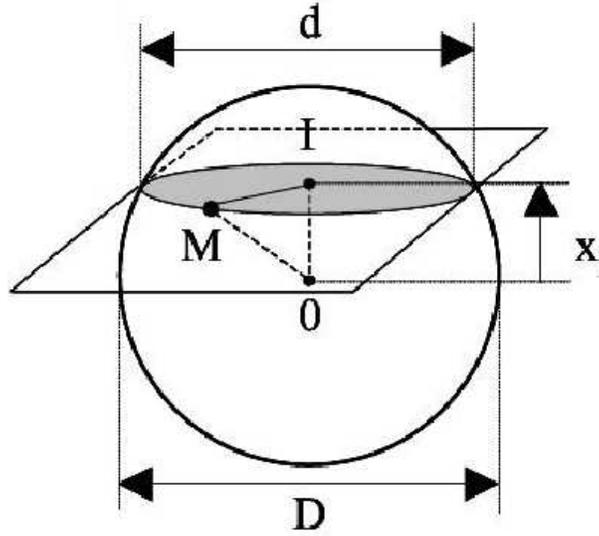


FIG. 4.8: Diamètre d'un disque : intersection entre un plan et une sphère

La densité de probabilité d'obtenir un disque de rayon r_i situé entre $r_{i-1} = \frac{d_{i-1}}{2}$ et $r_{i+1} = \frac{d_{i+1}}{2}$ est en fait proportionnelle à la distance entre les deux disques :

$$dP(r_{i-1} \leq r_i \leq r_{i+1}) = \frac{|x_{i+1} - x_{i-1}|}{R} \quad (4.2)$$

Remarque : $i = n$ au centre 0 de la sphère de rayon R , et $i = 1$ au bord de la sphère.

Si on pose $d_h = |x_{i+1} - x_{i-1}|$ et $h = R - x_i$, alors on a d_h qui est donné par :

$$d_h = \frac{r_i}{R - h} d_{r_i} = \frac{r_i}{\sqrt{R^2 - r_i^2}} d_{r_i} \quad (4.3)$$

La probabilité d'obtenir un disque de rayon r_i est donc définie par :

$$P(i) = P(r_{i-1} \leq r_i \leq r_{i+1}) = \int_{r_{i-1}}^{r_{i+1}} \frac{r_i}{R\sqrt{R^2 - r_i^2}} d_{r_i} \quad (4.4)$$

Nous pouvons remarquer sur la figure 4.9, où le diamètre de la sphère est normalisée à un, que la probabilité d'obtenir un disque de rayon proche de celui de la sphère est relativement importante.

La méthode de Scheil prend en compte cette remarque. Sur une image de coupe d'un matériau, ergodique et stationnaire, contenant des particules sphériques, la classe supérieure des tailles des disques ne peut avoir été peuplée que par des sphères de diamètre égal. Il n'est donc pas nécessaire de la corriger. La classe immédiatement inférieure aura été peuplée par des sphères de diamètre égal, mais aussi par des sphères appartenant à la classe supérieure. Il convient donc de corriger leur nombre à la baisse, en tenant compte de l'influence potentielle de la classe supérieure. Le processus est répété itérativement jusqu'à la classe inférieure.

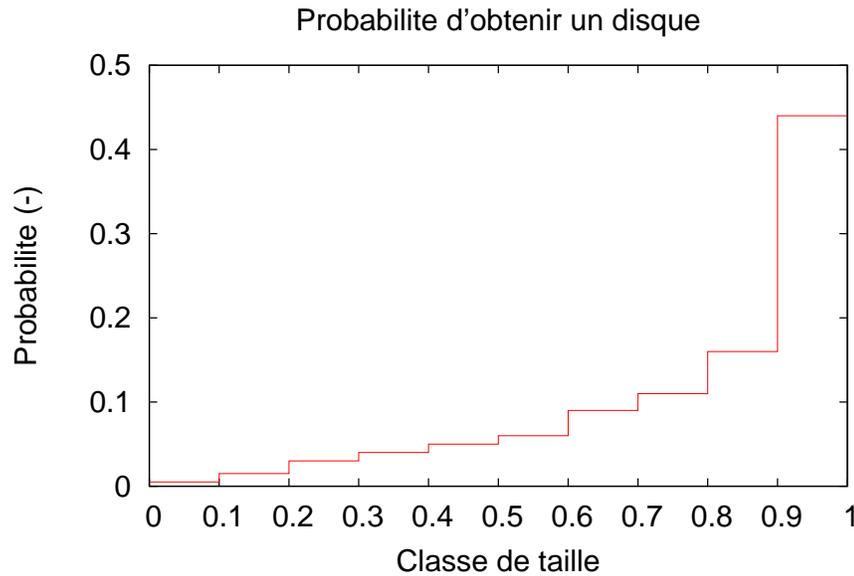


FIG. 4.9: Probabilité d'obtenir un disque dans une classe de taille donnée d'une sphère de diamètre unité

Des évolutions de ce concept de base ont été réalisées par la suite. Les méthodes les plus utilisées, lorsqu'un faible nombre de coupes est disponible, sont issues des **travaux de Saltykov** (Cf. [SALTYKOV, 1967]), avec une préférence pour celles travaillant sur des informations surfaciques au lieu d'informations linéiques. En effet, s'il est possible de réaliser aussi bien un passage 1D/3D qu'un passage 2D/3D (Cf. [MATHERON, 1967]), la deuxième option permet d'obtenir une précision de mesure augmentant de manière quadratique avec la taille des objets, plutôt que linéairement (Cf. [CRUZ-ORIVE, 1983]).

Saltykov (Cf. [SALTYKOV, 1967]) montre qu'il n'est pas nécessaire d'effectuer des corrections itératives. Bien que le vocabulaire du calcul matriciel fût peu usité à l'époque de la rédaction de l'article, son utilisation facilite la compréhension des travaux en question. **Le passage d'une distribution de tailles de sphères à une distribution de tailles de disques se fait donc en appliquant au vecteur de la distribution en taille des sphères une transformation représentée par une matrice dont les coefficients s'interprètent en termes probabilistes. Appliquer la matrice inverse au vecteur de la distribution des disques permet d'obtenir le vecteur de la distribution des sphères, à condition que la matrice soit correctement conditionnée.** L'évaluation de cette matrice est présentée ci-dessous pour un milieu hétérogène constitué de sphères de tailles identiques : milieu nommé «monodispersé».

2. Application au milieu monodispersé (Cf. [MATHERON, 1967]) :

Considérons un milieu «monodispersé» où N_v représente le nombre de sphères de rayon R par unité de volume, distribuées de manière aléatoire. Les sphères sont intersectées par une surface plane de section A . Uniquement les sphères dont le centre est situé de part et d'autre de la section dans l'intervalle plus ou moins R peuvent être intersectées (voir figure 4.10).

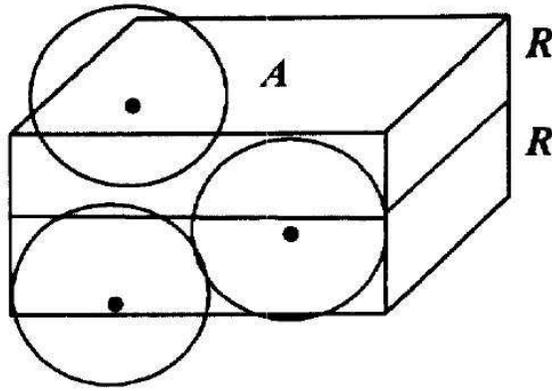


FIG. 4.10: Schéma illustrant les différentes tailles de disques créées par intersection de la surface plane A avec les sphères de rayon R dont le centre est situé de part et d'autre de la section dans l'intervalle $[-R; +R]$

En faisant l'hypothèse que la section A analysée est ergodique et stationnaire, alors la première relation que nous avons est :

$$N_A.A = 2N_V.A.R \text{ ou } N_A = 2N_V.R \quad (4.5)$$

où N_A est le nombre de disques par unité de surface. Cette relation traduit le fait que la fraction surfacique des disques est égale à la fraction volumique des sphères (sphères de rayon R dont le centre est situé de part et d'autre de la section A dans l'intervalle $[-R; +R]$). Nous pouvons noter que les disques ont un rayon qui varie sur un intervalle $[0; +R]$ (fonction continue). Par conséquent, si les disques sont classés en groupe de rayon r_i , le nombre total de disques par unité de surface peut être défini par la relation suivante :

$$N_A = \int_0^R N_A(i) dr_i \quad (4.6)$$

où $N_A(i)$ est le nombre de disques dans un groupe i de rayon r_i .

Expérimentalement, il est pratiquement impossible d'avoir une distribution continue de ces disques. Les distributions observées sont souvent représentées avec un histogramme. Si $N_A(i)$ représente le nombre de disque dont le rayon r_i est compris entre r_{i-1} et r_{i+1} , l'équation (4.6) peut être remplacée par la relation suivante :

$$N_A = \sum_i N_A(i) \quad (4.7)$$

Nous avons vu (Cf. figure 4.8 et équation (4.4)) que la probabilité qu'une section crée un disque de rayon r_i à partir d'une sphère de rayon R est identique à la probabilité géométrique d'obtenir une épaisseur d_h à partir d'une sphère de rayon R :

$$P(i) = P(r_{i-1} \leq r_i \leq r_{i+1}) = \frac{N_A(i)}{\sum_i N_A(i)} = \int_{r_{i-1}}^{r_{i+1}} \frac{r_i}{R\sqrt{R^2 - r_i^2}} dr_i \quad (4.8)$$

En combinant les équations (4.8), (4.7) et (4.5) on obtient la relation qui lie le vecteur de la distribution en taille des disques aux sphères «monodispersées» :

$$N_A(i) = P(i) \left[\sum_i N_A(i) \right] = P(i).N_A = 2P(i).N_V.R \quad (4.9)$$

Connaissant $N_A(i)$ nous sommes donc capables d'évaluer N_V puisque les $P(i)$ sont déterminées par l'équation (4.4). Les travaux de Saltykov stipulent que les particules tri-dimensionnelles analysées peuvent aussi avoir une taille quelconque : milieu nommé «polydispersé». Dans le cas du milieu «polydispersé», nous allons donc décrire la relation qui lie le vecteur de la distribution en taille des disques au vecteur de la distribution en taille des sphères : vecteur inconnu de notre problème (ce problème est représentatif de celui des combustibles *MOX*). C'est donc l'objet du point 3 ci-dessous.

3. Application au milieu polydispersé :

Considérons un milieu «polydispersé» constitué de sphères de différentes tailles dispersées aléatoirement. Soit $N_V(j)$ le nombre de sphères de rayon R_j par unité de volume. Les sphères sont intersectées par une surface plane de section A . On note $\sum_{i=1}^j N_A(i, j)$ les disques de rayons r_i par unité de surface générés par les sphères de rayon R_j . Il est important de noter que les disques de rayon r_i peuvent être générés par des sphères de rayon $R_j \geq r_i$.

La relation (4.5) peut alors être appliquée au milieu «polydispersé», ce qui donne :

$$\sum_{i=1}^j N_A(i, j) = 2N_V(j).R_j \quad (4.10)$$

La probabilité d'obtenir un disque de rayon r_i à partir d'une sphère de rayon R_j sera notée $P_j(i)$. Nous pouvons donc l'évaluer à partir de (4.8) :

$$P_j(i) = \frac{N_A(i, j)}{\sum_{i=1}^j N_A(i, j)} = \int_{r_{i-1}}^{r_{i+1}} \frac{r_i}{R_j \sqrt{R_j^2 - r_i^2}} d r_i \quad (4.11)$$

En combinant (4.10) et (4.11) nous obtenons :

$$N_A(i, j) = 2P_j(i).N_V(j).R_j \quad (4.12)$$

Mais, les données obtenues de la microsonde électronique sont seulement le nombre de disques de rayon r_i notés $N_A(i)$ qui proviennent d'une sphère de rayon égale ou supérieur à r_i . Les $N_A(i)$ sont donc définies par :

$$N_A(i) = \sum_{j=i}^m N_A(i, j) \quad (4.13)$$

avec m l'indice du plus grand disque et donc de la plus grande sphère. Par conséquent, en combinant (4.12) et (4.13) nous obtenons la relation qui lie le vecteur de la distribution en taille des disques au vecteur de la distribution en taille des sphères :

$$N_A(i) = \sum_{j=i}^m 2P_j(i).N_V(j).R_j \quad (4.14)$$

L'équation (4.14) est donc une relation matricielle qui peut être résolue si nous connaissons $N_A(i)$ et $P_j(i)$. En effet, en inversant le problème nous obtenons donc $N_V(j)$: le vecteur de la distribution des sphères que nous cherchions à évaluer.

Si on pose :

$$k_{ij} = 2P_j(i).R_j \quad (4.15)$$

les coefficients de cette matrice dépendent de la méthode employée pour discrétiser les classes. Nous illustrons sur la figure 4.11 quatre méthodes typiques pour discrétiser les tailles des disques et des sphères en intervalles réguliers.

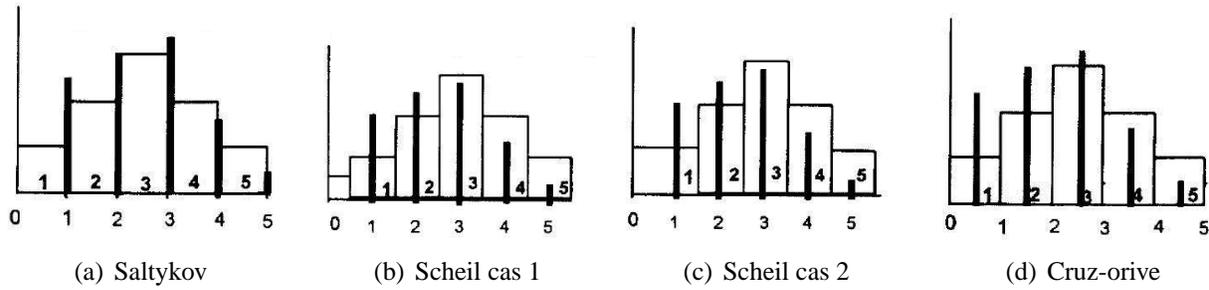


FIG. 4.11: Distributions schématiques des sphères (lignes verticales en gras) et des disques (histogrammes) - Illustration de différentes méthodes de discrétisation en 5 groupes. Un nombre en gras au dessus de l'axe des abscisses représente le numéro du groupe et un nombre en dessous représente le rayon du groupe

L'hypothèse fondamentale, retenue pour ces quatre méthodes, est de dire que si le nombre de disques dans une section donnée est suffisamment important, alors le plus grand rayon des disques correspondra au plus grand rayon des sphères (ergodicité de l'image analysée). Classer les disques et les sphères en groupes, avec des intervalles réguliers, nécessite de connaître le nombre de groupes. Supposons que les objets sont classés en m groupes. L'intervalle pour les sphères et les disques sera :

$$\Delta = \frac{R_{max}}{m} \quad (4.16)$$

où R_{max} est le rayon maximum des sphères ou des disques. Il est évident que la distribution des sphères est discontinue et exacte tandis que celle des disques est continue et peut être approximée par des histogrammes. En d'autres termes, les sphères ont le même rayon dans un groupe tandis que le rayon des disques dans un groupe varie de manière continue au sein de l'intervalle. Nous allons décrire brièvement la méthode employée par Saltykov (Cf. [SALTYKOV, 1967]). Nous renvoyons le lecteur à [CRUZ-ORIVE, 1978, SCHEIL, 1935] pour les méthodes développées par Cruz-Orive et Scheil.

Saltykov (Cf. [SALTYKOV, 1967]) classe les disques et les sphères en m groupes avec un intervalle de classe de $\Delta = \frac{R_{max}}{m}$ comme sur la figure 4.11(a) : le rayon R_j du j^{me} groupe de sphères est égale à $j.\Delta$ tandis que le i^{me} groupe de disques est compris entre $(i-1).\Delta$ et $i.\Delta$. Par conséquent, en utilisant l'équation (4.11) nous pouvons évaluer chaque terme de la matrice :

$$K_{ij} = \begin{cases} 2.\Delta \left[\sqrt{j^2 - (i-1)^2} - \sqrt{j^2 - i^2} \right] & \text{pour } j \geq i \\ 0 & \text{pour } j < i \end{cases} \quad (4.17)$$

pour trouver $N_V(j)$ par la méthode de Saltykov, il suffit donc d'inverser la matrice (4.17).

Les travaux de Saltykov stipulent que les particules analysées peuvent avoir «une taille quelconque (milieu polydispersé), être distribuées de manière uniforme et orientées aléatoirement dans l'espace, mais doivent avoir la même forme et être telles qu'un plan ne peut les couper qu'une seule fois». Les

études portant sur les sphères sont majoritaires : Verwerft (Cf. [VERWERFT, 2000]) utilise une de ces méthodes pour l'analyse des bulles de gaz. Charollais et al (Cf. [CHAROLAIS et al., 1997]) font de même sur du combustible nucléaire pour alimenter un modèle booléen. Enfin, Harayama (Cf. [HARAYAMA, 1985]) s'intéresse à la détermination en taille de particules sphériques dans le cadre d'une étude sur UO_2 et PuO_2 .

4.2.2.3 Méthodes «numériques»

Parmi les méthodes numériques existantes, nous pouvons citer celles basées sur un algorithme génétique (Cf. [Holland, 1975],[MITCHELL, 1996],[OUDINET et al., 2001]). Le principe de la méthode est le suivant : connaissant la distribution surfacique bi-dimensionnelles des disques, l'algorithme génétique calcule une distribution de sphères en minimisant l'écart à la distribution surfacique expérimentale. Les résultats de ce calcul ont été comparés aux résultats obtenus par la méthode de Saltykov. Il en ressort que l'approche par le problème inverse et sa résolution par un algorithme génétique fournissent des résultats comparables à la méthode de Saltykov. De plus, la méthode génétique de résolution ne dépend pas du choix des objets à modéliser : les objets d'études peuvent être des ellipsoïdes ou d'autres formes qui peuvent même être concaves.

4.2.2.4 Conclusion

Cette revue bibliographique nous a permis de montrer que :

1. les coupes sériées peuvent être extrêmement efficaces, mais uniquement sur des matériaux aisés à tronçonner avec précision, ce qui n'est généralement pas le cas avec des combustibles nucléaires radiotoxiques comme le combustible *MOX* ;
2. les méthodes analytiques, initiées par Scheil et améliorées par Saltykov, restent les méthodes de référence mais on ne connaît de solution analytique que pour la sphère, les ellipsoïdes de révolution, les particules cylindriques, ainsi que quelques autre formes approchantes ;
3. enfin les méthodes de résolution numériques, comme celle proposée par [OUDINET et al., 2001], ne dépendent pas du choix des objets à modéliser : les objets d'études peuvent être des ellipsoïdes ou d'autres formes qui peuvent même être concaves. Mais certaines précautions doivent être prises.

Dans le cadre de nos travaux de thèse, nous avons décidé d'utiliser la méthode analytique de Saltykov pour extrapoler les distributions bi-dimensionnelles en tailles des phases inclusionnaires aux tri-dimensionnelles. Nous supposons que nos inclusions sont sphériques, aussi bien pour la phase uranifère que plutonifère. Certes, l'hypothèse n'est pas totalement satisfaisante pour les combustibles *MOX* (raisons morphologiques) mais, dans un premier temps, ce choix semble opportun.

L'application de cette méthode est présentée au paragraphe suivant.

4.2.3 Application de la méthode stéréologique de Saltykov

La relation matricielle, établie par Saltykov (Cf. [SALTYKOV, 1967]), correspond à l'équation (4.14) établie au paragraphe 4.2. Pour chaque phase, le problème matriciel peut donc s'écrire :

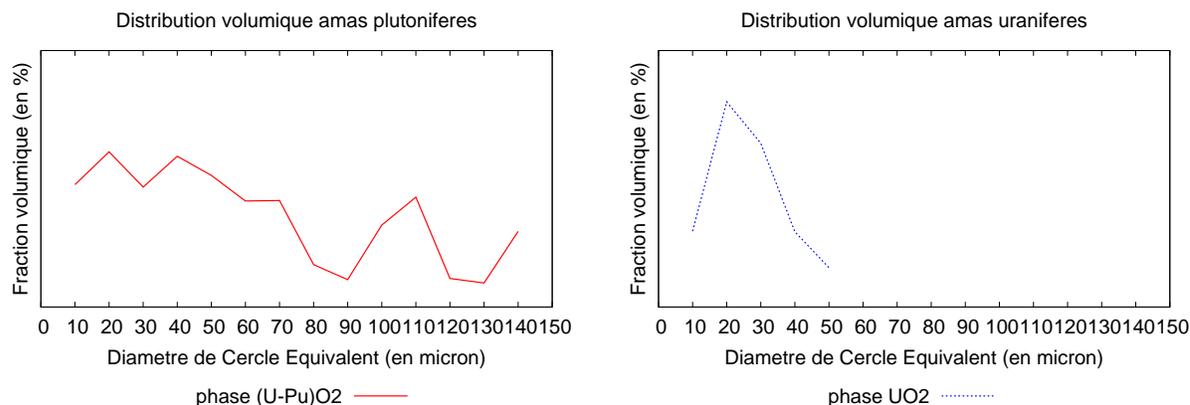
$$\left[M_{Saltykov} \right] \begin{pmatrix} N_V(1) \\ N_V(2) \\ \vdots \\ \vdots \\ N_V(n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} N_A(1) \\ N_A(2) \\ \vdots \\ \vdots \\ N_A(n) \end{pmatrix} \quad (4.18)$$

avec $M_{Saltykov}$ la matrice de Saltykov évaluée pour la phase concernée. Cette équation peut être résolue si nous connaissons $N_A(i)$ et $P_j(i)$. En effet, en inversant le problème nous obtenons donc $N_V(j)$: le vecteur de la distribution des sphères que nous cherchons à évaluer pour chaque phase. Or, pour chaque phase inclusionnaire (les amas plutonifères ou uranifères) les $N_A(i)$ (Cf. figures 4.7(a) et 4.7(b)) sont connues. Les termes $P_j(i)$ des deux matrices diagonale supérieure (matrice cinq par cinq pour la phase uranifère et quatorze par quatorze pour la phase plutonifère) sont connues aussi. Par exemple nous présentons la matrice de Saltykov évaluée pour la phase uranifère (Cf. (4.19)). Les composantes de cette matrice sont obtenues via les relations (4.11) et (4.17).

$$\begin{pmatrix} 1.0 & 0.26795 & 0.17157 & 0.12702 & 0.10102 \\ 0.0 & 1.73205 & 0.59236 & 0.40889 & 0.31640 \\ 0.0 & 0.00000 & 2.23607 & 0.81835 & 0.58258 \\ 0.0 & 0.00000 & 0.00000 & 2.64575 & 1.00000 \\ 0.0 & 0.00000 & 0.00000 & 0.00000 & 3.00000 \end{pmatrix} \quad (4.19)$$

Matrice de Saltykov phase UO_2

Nous avons donc évalué les $N_V(j)$ de la phase plutonifère (Cf. figure 4.12(a)) et ceux de la phase uranifère (Cf. figure 4.12(b)).



(a) Classe de tailles des amas plutonifères - Fraction volumique cumulée = 15 % (b) Classe de tailles des amas uranifères - Fraction volumique cumulée = 24 %

FIG. 4.12: Distributions volumiques des phases inclusionnaires - MOX MIMAS ADU

Comme prévu, nous avons remarqué que la fraction volumique cumulée de chaque phase était égale à la fraction surfacique cumulée de celle-ci. Mais pour des raisons de confidentialité nous avons volontairement omis l'échelle de l'axe des ordonnées.

4.2.4 Conclusion

La méthode de Saltykov (Cf. [SALTYKOV, 1967]) nous a permis d'extrapoler les informations bi-dimensionnelles (Cf. figures 4.7(b) et 4.7(a)), obtenues avec le logiciel ANACONDA, aux tri-dimensionnelles (Cf. figures 4.12(b) et 4.12(a)).

L'aboutissement de toute cette chaîne d'exploitation et d'interprétation d'images est donc l'obtention d'une représentation numérique tri-dimensionnelle du composite particulaire multiphasé (type *MOX*), sur lequel il serait idéalement possible de réaliser nos calculs de localisation (Cf. chapitre 5) et développer notre modèle d'homogénéisation (Cf. partie 3). C'est donc l'objet du paragraphe suivant.

4.3 Représentation 3D de la microstructure

Nous rappelons au lecteur que par représentation on entend deux choses :

1. Positionner les particules de manière aléatoire dans le volume de l'échantillon numérique. Il s'agit, pour chaque phase, de tirer aléatoirement les coordonnées des centres des particules dans un cube élémentaire avec, comme paramètres, le nombre de particules souhaité, leur rayon et une fraction volumique cible. Pour cela, nous allons utiliser, en entrée du logiciel que nous avons développé dans le cadre de cette thèse, les courbes 4.12(b) et 4.12(a) obtenues par la méthode de *Saltykov*. Cette opération définit la géométrie tri-dimensionnelle de l'échantillon numérique et est exposée au paragraphe 4.3.1.
2. Discrétiser cette géométrie tri-dimensionnelle. Dans le cadre de notre étude, nous avons décidé de mailler cette géométrie pour réaliser des calculs aux éléments finis. L'outil de maillage, développé dans le cadre de cette thèse, est exposé au paragraphe 4.3.3.

4.3.1 Représentation géométrique : algorithme et outil développés

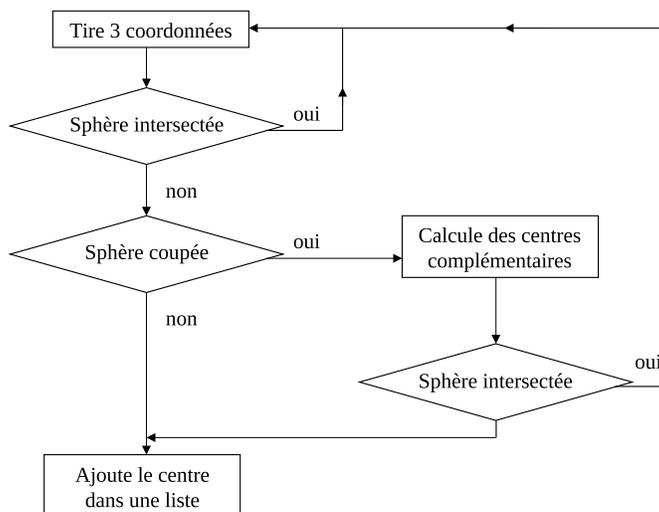
Dans le cadre de notre étude, nous avons décidé de nous appuyer sur le modèle d'absorption séquentielle aléatoire (RSA). Le modèle d'absorption séquentielle aléatoire (RSA) est un processus stochastique, permettant de représenter l'évolution d'un domaine de dimension n dans lequel sont insérées des particules de manière séquentielle et aléatoire. Cette méthode de génération d'un ensemble aléatoire de particules a été utilisée dans de nombreux domaines scientifiques. Il s'agit d'une méthode de type Monte-Carlo, qui consiste à placer les particules de rayon R_i les unes après les autres dans un volume fixe de côté l , jusqu'à obtenir la concentration de particules souhaitée et en imposant aux particules de ne pas s'interpénétrer. Les coordonnées des centres des particules sont tirées de manière aléatoire et uniforme. A chaque tirage, il est nécessaire de vérifier la condition de non interpénétration avec les particules précédemment placées. En cas d'interpénétration, le tirage de la particule est annulé et réitéré. Chaque particule placée correctement, est définitivement acceptée et sa position est fixée. Nous renvoyons le lecteur aux références suivantes pour plus de détails sur le modèle RSA (Cf.

[FEDER, 1980], [HINRICHSEN et al., 1986], [RINTOUL and TORQUATO, 1997], [WIDOM, 1966]).

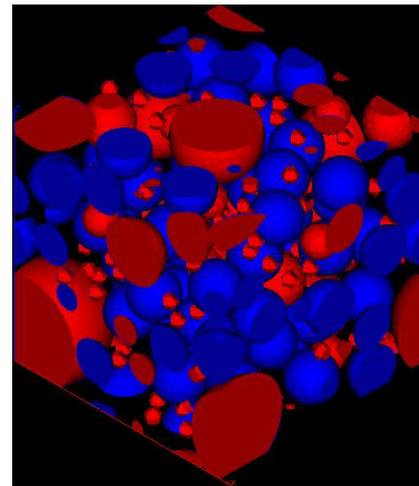
La fraction volumique maximale de particules que l'on peut atteindre avec cette méthode reste un problème ouvert en 2D et en 3D (Cf. [EVANS, 1993],[TORQUATO, 2002]). La recherche de cette valeur limite a été faite en 1D (génération aléatoire de segments de taille R dans un segment plus grand de taille l), 2D (génération de disques de rayon R dans un carré de côté l) et 3D (génération de sphères de rayon R dans un cube de côté l). En 3D, cas de notre étude, les fractions volumiques limites estimées ne dépassent pas 40 %. Quelques exemples de calculs donnent des limites de concentration de 38.5 % (Cf. [COOPER, 1988]), 38.2 % (Cf. [SHERWOOD, 1997]), 38.1 % (Cf. [TANEMURA, 1981],[TANEMURA, 1988a],[TANEMURA, 1988b]). En imposant des conditions supplémentaires sur les distances entre particules, et entre les particules et les bords du cube, Segurado et Llorca (Cf. [SEGURADO and LLORCA, 2002]) ont atteint une concentration limite de l'ordre de 30 %.

Cette méthode permet juste d'atteindre la fraction volumique totale des inclusions souhaitée pour nos échantillons numériques MOX. En effet, la fraction volumique totale de particules dans un MOX est de l'ordre de 30 à 40 % : 10 à 15 % d'inclusions de type amas plutonifères $(U - Pu)O_2$ et 20 à 25 % d'inclusions de type amas uranifères UO_2 . Cette méthode assure une distribution statistiquement isotrope des particules (Cf. [RINTOUL and TORQUATO, 1997]).

Notre algorithme a été développé en PYTHON (Cf. [<http://www.python.org>]). Pour les besoins de la modélisation (homogénéisation (Cf. partie 3)), nous avons également ajouté une condition supplémentaire à notre algorithme : la périodicité géométrique de notre microstructure. Cela implique donc de vérifier que les particules coupées par les bords du cube ainsi que les parties reproduites par périodicité n'intersectent aucune autre sphère. Il est donc nécessaire de calculer les centres complémentaires de ces sphères reproduites par périodicité. L'algorithme est résumé par la figure 4.13(a) et la représentation géométrique de la microstructure MOX (lot A) par la figure 4.13(b).



(a) Algorithme RSA périodique



(b) Représentation géométrique périodique de la microstructure MOX lot A - Rouge = amas plutonifères $(U - Pu)O_2$ et Bleu = amas Uranifères UO_2

FIG. 4.13: Module développé permettant une représentation géométrique périodique du MOX en 3D

Pour valider cette représentation géométrique nous avons eu recours à un outil de caractérisation morphologique qui est la covariance. La définition de la covariance et la démarche de validation sont exposées dans le paragraphe suivant.

4.3.2 Validation géométrique : définition et confrontation des covariances

4.3.2.1 Définition de la covariance

La caractérisation morphologique des échantillons a pour but :

- Tout d’abord, de vérifier que les échantillons réalisés respectent nos hypothèses sur la fraction surfacique cumulée des inclusions, sur la fraction surfacique par classe diamétrale au sein d’une phase inclusionnaire et sur la distribution spatiale des inclusions, notamment l’isotropie.
- Ensuite, d’essayer d’établir des liens entre microstructure et comportement mécanique local en analysant d’éventuelles corrélations entre ses caractéristiques morphologiques et des caractéristiques statistiques des champs locaux.
- Enfin, d’alimenter le modèle de changement d’échelles de paramètres morphologiques plus fins que la fraction volumique.

Avant de rentrer dans les détails de la covariance, il est nécessaire de rappeler quatre propriétés essentielles pour la suite, à savoir la notion de loi spatiale, de stationnarité, d’ergodicité et de moments fonctionnels :

1. **Loi spatiale (fonction caractéristique)** : soit un ensemble aléatoire A de complémentaire A^c , la fonction caractéristique $I_A(\underline{x})$ de l’ensemble aléatoire A associée à chaque point de l’espace défini par la variable \underline{x} la valeur un lorsque celui-ci appartient à A et zéro lorsqu’il appartient à A^c :

$$\begin{cases} I_A(\underline{x}) = 1 & \text{si } \underline{x} \in A \\ I_A(\underline{x}) = 0 & \text{si } \underline{x} \notin A \end{cases} \quad (4.20)$$

Soient $(\underline{x}_1, \dots, \underline{x}_k)$ et $(\underline{z}_1, \dots, \underline{z}_{k'})$ deux groupes de k et k' points de l’espace \mathfrak{R}^d où d est la dimension. Soit $P(\underline{x}_1, \dots, \underline{x}_k; \underline{z}_1, \dots, \underline{z}_{k'})$ la probabilité pour que l’ensemble des points \underline{x}_i appartiennent à A et \underline{z}_j appartiennent à A^c . La loi spatiale de l’ensemble A est l’ensemble de toutes les fonctions P pour tous les entiers k et k' et tous les systèmes de points $\underline{x}_1, \dots, \underline{x}_k$ et $\underline{z}_1, \dots, \underline{z}_{k'}$:

$$P(\underline{x}_1, \dots, \underline{x}_k; \underline{z}_1, \dots, \underline{z}_{k'}) = P(\underline{x}_1, \dots, \underline{x}_k \in A; \underline{z}_1, \dots, \underline{z}_{k'} \notin A) \quad (4.21)$$

On considère que l’ensemble aléatoire A est entièrement défini par la donnée de sa loi spatiale (Cf. [MATHERON, 1967]).

2. **Stationnarité** : l’ensemble A est dit **stationnaire** si la loi spatiale est invariante par translation, c’est à dire si pour tout vecteur \underline{h} et tout groupe $(\underline{x}_1, \dots, \underline{x}_k)$ et $(\underline{z}_1, \dots, \underline{z}_{k'})$, on a :

$$P(\underline{x}_1 + \underline{h}, \dots, \underline{x}_k + \underline{h}; \underline{z}_1 + \underline{h}, \dots, \underline{z}_{k'} + \underline{h}) = P(\underline{x}_1, \dots, \underline{x}_k; \underline{z}_1, \dots, \underline{z}_{k'}) \quad (4.22)$$

3. **Ergodicité** : l’ensemble A est dit **ergodique** s’il y a égalité entre moyenne d’ensemble (l’espérance mathématique) et moyenne d’espace. En notant V_A la mesure de A dans un domaine D et V la mesure de D , on a :

$$E(I_A(\underline{x})) = \lim_{V_A, V \rightarrow \infty} \frac{V_A}{V} = \langle I_A(\underline{x}) \rangle_D \quad (4.23)$$

L'ergodicité traduit le fait que les propriétés moyennes d'un milieu ne dépendent pas de la taille de l'échantillon considéré.

4. **Moments fonctionnels** : le moment fonctionnel d'ordre k de l'ensemble aléatoire A correspond à la probabilité pour que les k points de l'espace tirés aléatoirement se trouvent dans la phase A , ce qui correspond à l'espérance mathématique du produit $I_A(\underline{x}_1) \dots I_A(\underline{x}_k)$:

$$P(\underline{x}_1, \dots, \underline{x}_k) = P(\underline{x}_1, \dots, \underline{x}_k \in A) = E(I_A(\underline{x}_1) \dots I_A(\underline{x}_k)) \quad (4.24)$$

Pour un ensemble A ergodique dans \mathfrak{R}^3 , le moment fonctionnel d'ordre un correspond d'après l'équation (4.23) à la fraction volumique de A dans D :

$$P(\underline{x}) = P(\underline{x} \in A) = E(I_A(\underline{x}_1)) = \langle I_A(\underline{x}) \rangle_D = \frac{V_A}{V} \quad (4.25)$$

Si A est stationnaire, alors le moment d'ordre un est constant :

$$\forall \underline{h} \in \mathfrak{R}^d, \quad P(\underline{x} + \underline{h}) = P(\underline{x}) = f_{V_A} \quad (4.26)$$

Le moment d'ordre deux correspond à la covariance, que nous allons détailler dans le paragraphe suivant.

Nous pouvons donc maintenant définir la covariance.

Définition de la covariance :

Soit un ensemble A stationnaire, inclus dans D , son moment d'ordre deux est donné par :

$$P(\underline{x}_1, \underline{x}_2) = \langle I_A(\underline{x}_1) I_A(\underline{x}_2) \rangle_D = \frac{1}{V} \int_D I_A(\underline{x}_1 + \underline{u}) I_A(\underline{x}_2 + \underline{u}) d\underline{u} \quad (4.27)$$

A étant stationnaire, cette fonction ne dépend que du vecteur $\underline{x}_2 - \underline{x}_1$, que l'on note \underline{h} pour la suite. La covariance $C(\underline{h})$ de A dans une direction de \underline{h} est donc donnée par :

$$\forall \underline{x} \in D, \quad A \subset D, \quad \underline{h} \in \mathfrak{R}^d : \quad C(\underline{h}) = P(\underline{x}, \underline{x} + \underline{h}) \quad (4.28)$$

Si A est ergodique, on peut remplacer les probabilités dans l'équation précédente par la mesure de l'intersection de A et de son translaté $A_{+\underline{h}}$:

$$\forall \underline{x} \in D, \quad A \subset D, \quad \underline{h} \in \mathfrak{R}^d : \quad C(\underline{h}) = \frac{\text{Mes}(A \cap A_{+\underline{h}})}{\text{Mes}(D)} \quad (4.29)$$

Dans le cas d'une phase A répartie dans la structure D selon une fonction aléatoire stationnaire, la covariance ne dépend pas de la position considérée dans la structure et se note $C(\underline{h})$.

Le covariogramme $K(\underline{h})$ est une notion très proche de la covariance, il correspond à la mesure de l'intersection de A avec $A_{+\underline{h}}$ pour toutes les valeurs de \underline{h} :

$$A \subset D, \quad \underline{h} \in \mathfrak{R}^{d+} : \quad K(\underline{h}) = \text{Mes}(A \cap A_{+\underline{h}}) \quad (4.30)$$

Covariance et covariogramme sont donc liés par la relation suivante :

$$C(\underline{h}) = \frac{K(\underline{h})}{\text{Mes}(D)} \quad (4.31)$$

La covariance est un outil morphologique qui a de multiples applications, en analyse d'images, en géostatistique ou en homogénéisation. Il est important de noter que la covariance, ainsi que le covariogramme, s'appliquent aux structures stationnaires (Cf. [MATHERON, 1967]). Elle possède les propriétés suivantes :

1. La covariance de l'ensemble A pour un vecteur \underline{h} nul est égale à la fraction volumique de A :

$$C(0) = P(\underline{x}, \underline{x}) = f_{V_A} \quad (4.32)$$

avec f_{V_A} la fraction volumique de A dans D .

2. La covariance d'un ensemble A non fini dans l'espace tend vers le carré de sa fraction volumique :

$$\lim_{\|\underline{h}\| \rightarrow \infty} C(\underline{h}) = \lim_{\|\underline{h}\| \rightarrow \infty} P(\underline{x}, \underline{x} + \underline{h}) = P(\underline{x})P(\underline{x}) = f_{V_A}^2 \quad (4.33)$$

Quand le vecteur \underline{h} est très grand, les points \underline{x} et $\underline{x} + \underline{h}$ ne sont plus corrélés. La probabilité que ces deux points appartiennent simultanément à A correspond donc au produit des probabilités, qui est égal à la fraction volumique au carré.

3. Dans le cas où A est fini, il existe un réel L tel que pour $\|\underline{h}\|$ supérieure à L la covariance $C(\underline{h})$ soit nulle :

$$\exists L \in \mathfrak{R}^+ \quad / \quad \forall \underline{h} \in \mathfrak{R}^{d^+}, \quad \|\underline{h}\| > L \Rightarrow C(\underline{h}) = 0 \quad (4.34)$$

L est alors la distance maximale séparant deux points appartenant à la phase A dans la direction du vecteur de translation.

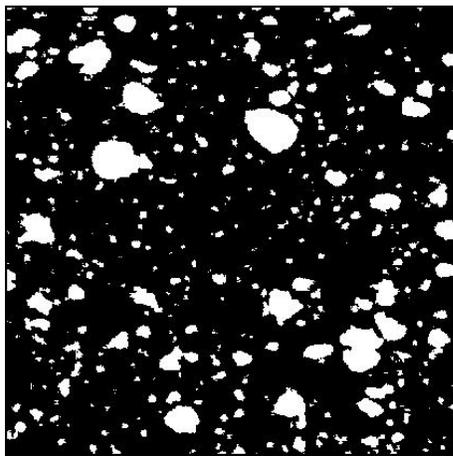
4. La covariance est une fonction paire :

$$\text{Mes}(A \cap A_{+\underline{h}}) = \text{Mes}(A_{-\underline{h}} \cap A) \Leftrightarrow C(\underline{h}) = C(-\underline{h}) \quad (4.35)$$

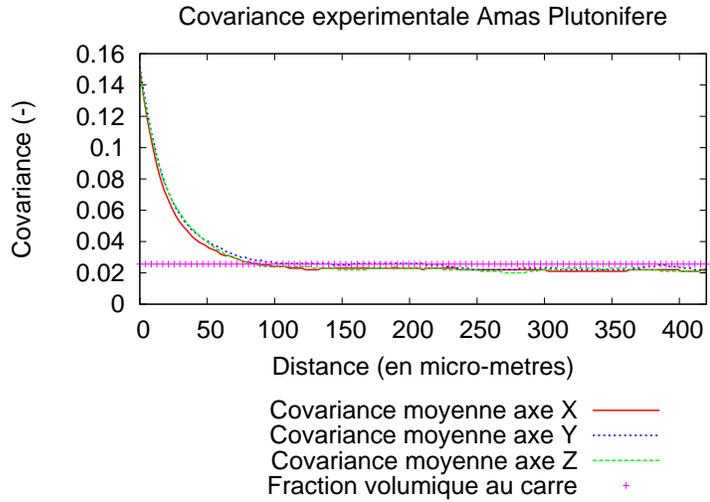
5. Les inflexions de la courbe de covariance témoignent de la présence de plusieurs échelles au sein de la phase A .
6. La périodicité de la covariance témoigne d'une structure périodique dans la direction considérée. La période de la covariance est celle de la structure.
7. L'anisotropie de la répartition de la phase peut être observée en comparant les courbes de covariance mesurées dans différentes directions du vecteur \underline{h} .

4.3.2.2 Confrontation covariance expérimentale et numérique

Dans un premier temps, nous avons appliqué la covariance aux images expérimentales bidimensionnelles obtenues avec ANACONDA (Cf. figures 4.5 et 4.6), d'abord pour la phase plutonifère et ensuite pour la phase uranifère. La figure 4.14(a) illustre un exemple d'image expérimentale traitée avec le logiciel NEMO [STAWIASKI, 2005] pour ne retenir que la phase plutonifère ($(U - Pu)O_2$). L'objectif étant ensuite d'appliquer la covariance. Possédant trois images transversales et trois longitudinales 2D nous avons pu obtenir les courbes moyennes expérimentales de covariance suivant les trois directions de l'espace. En effet, nous avons calculé la covariance suivant les deux directions de chacune des ces images 2D. La figure 4.14(b) illustre les résultats. Dans un second temps, nous avons appliqué la covariance aux images numériques bi-dimensionnelles. Pour réaliser cela, nous avons «sectionné» (coupe 2D) notre VER géométrique (Cf. figure 4.13(b)), d'abord la phase plutonifère et ensuite la phase uranifère. Cinq coupes ont été réalisées par direction. La figure 4.15(a) illustre une de ces coupes pour la phase plutonifère. Puis, nous avons estimé les courbes moyennes numériques de covariance suivant les trois directions de l'espace 4.15(b).

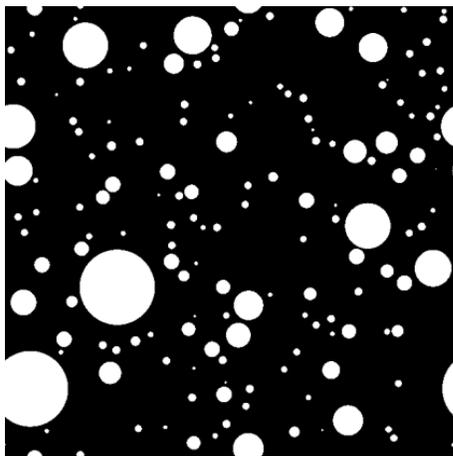


(a) Image longitudinale 2 - MOX MIMAS ADU lot A - traitée avec NEMO

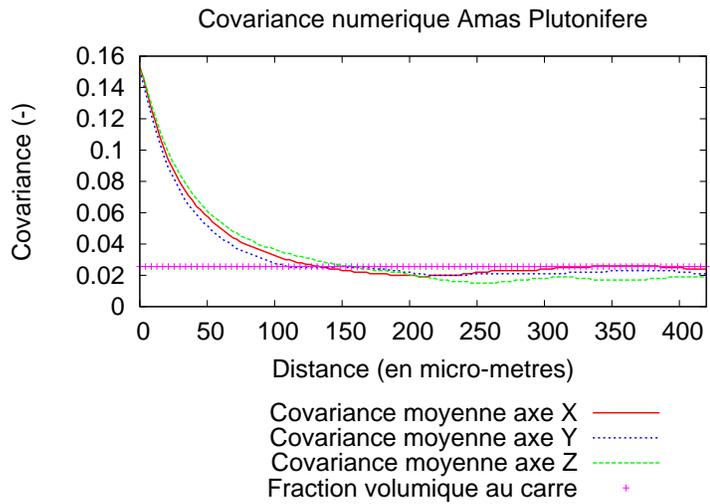


(b) Courbes moyennes expérimentales de covariance suivant les trois directions de l'espace

FIG. 4.14: Covariance expérimentale : phase plutonifère $(U - Pu)O_2$



(a) Image numérique MOX MIMAS ADU lot A obtenue par une coupe du VER



(b) Courbes moyennes numériques de covariance suivant les trois directions de l'espace

FIG. 4.15: Covariance numérique : phase plutonifère $(U - Pu)O_2$

Les courbes de covariance ont également été évaluées expérimentalement et numériquement pour la phase uranifère UO_2 . Pour les deux phases (plutonifère $(U - Pu)O_2$ et uranifère UO_2), les comparaisons entre les courbes de covariance expérimentales et numériques aboutissent aux mêmes conclusions :

1. A distance nulle, la valeur fournie par la covariance numérique est en très bonne adéquation avec celle expérimentale. Rappelons qu'à distance nulle la covariance correspond à la fraction surfacique de la phase inclusionnaire analysée (Cf. paragraphe 4.3.2.1). Ces deux valeurs sont d'ailleurs en cohérence avec celle fournie par le logiciel ANACONDA.
2. Nous remarquons également une isotropie géométrique aussi bien pour les images expérimentales ou numériques. En effet, dans les trois directions, les courbes de covariance sont proches de la superposition.
3. Nous notons aussi aucune inflexion des courbes de covariance. Cela confirme probablement l'absence de plusieurs échelles, c'est à dire l'absence d'amas plutonifères ou uranifères regroupés en amas. Néanmoins, pour vérifier cette affirmation, il serait judicieux, en perspective de cette thèse, d'appliquer la fonction radiale de distribution (un autre outil de caractérisation morphologique).
4. Enfin, nous constatons, pour la phase plutonifère, que l'intersection des courbes expérimentales de covariance avec l'asymptote correspondant au carré de la fraction volumique se fait à une distance moyenne de l'ordre de 90 à 100 μm (Cf. figure 4.14(b)), tandis que numériquement celle-ci se réalise à une distance moyenne de l'ordre de 120 à 140 μm (Cf. figure 4.15(b)). Les portées de la covariance sont donc différentes. Cette différence peut provenir :
 - tout d'abord de notre hypothèse morphologique. En effet, la morphologie des inclusions $(U - Pu)O_2$ (amas plutonifères) est très éloignée d'une sphère (Cf. figure 4.14(a)). Pour la phase uranifère, nous constatons le même biais mais avec une amplitude moins importante. La morphologie des amas uranifères, qui ressemble plutôt à des ellipsoïdes, est en effet plus proche de la sphère, ce qui pourrait expliquer cette amplitude moins élevée. Il sera donc intéressant, en perspective de cette thèse, de tester des morphologies plus complexes.
 - Nous pouvons également nous interroger sur l'impact de la méthode stéréologique utilisée (Cf. figure 4.11) pour discrétiser les classes. Dans le cadre de cette thèse, nous n'avons utilisé la méthode de *Saltykov*, mais il serait également intéressant, à l'avenir, de tester les autres méthodes.
 - Nous pouvons également nous interroger sur le schéma de distribution RSA choisi (Cf. paragraphe 4.3.1). On peut se poser la question suivante : est ce que les inclusions ne sont pas regroupées en amas ? Si c'est le cas, le schéma RSA n'est plus du tout approprié. D'autres schémas (Cf. [BORNERT et al., 2000]) existent dans la littérature et devront être mis en oeuvre. Pour répondre à cette question, nous suggérons, en perspective de cette thèse, d'appliquer un nouvel outil de caractérisation morphologique, nommé la fonction distance (Cf. paragraphe 4.1.4.2 de [BORNERT et al., 2000]), sur les images expérimentales bi-dimensionnelles.

Malgré ces écarts sur la portée de la covariance (de l'ordre de 30 μm pour la phase plutonifère et de 20 μm pour la phase uranifère), nous avons décidé, dans la suite de cette thèse, de conserver cette représentation géométrique du combustible *MOX*.

La représentation géométrique de notre échantillon *MOX* étant réalisée et «validée», la dernière étape de notre travail a consisté à discrétiser cette géométrie tri-dimensionnelle par un maillage afin de réaliser des calculs aux éléments finis. Un outil de maillage, récemment développé dans la thèse de *Blanc* [BLANC, 2009] pour les combustibles à particules des réacteurs HTR¹, a été adapté pour

¹High Temperature Reactor

les combustibles *MOX*. Les adaptations et les résultats sont exposés dans le paragraphe suivant.

4.3.3 Maillage : algorithme et outil développés

Une technique de maillage a été mise en place par les différents concepteurs de la plate-forme SALOME [<http://www.salome-plaform.fr>,] (Cf. paragraphe 4.3.2 de [BLANC, 2009]). Ces concepteurs ont inclus dans la procédure d'appel à NETGEN² [<http://www.hpfem.jku.at/netgen/>,] la possibilité d'imposer la périodicité du maillage.

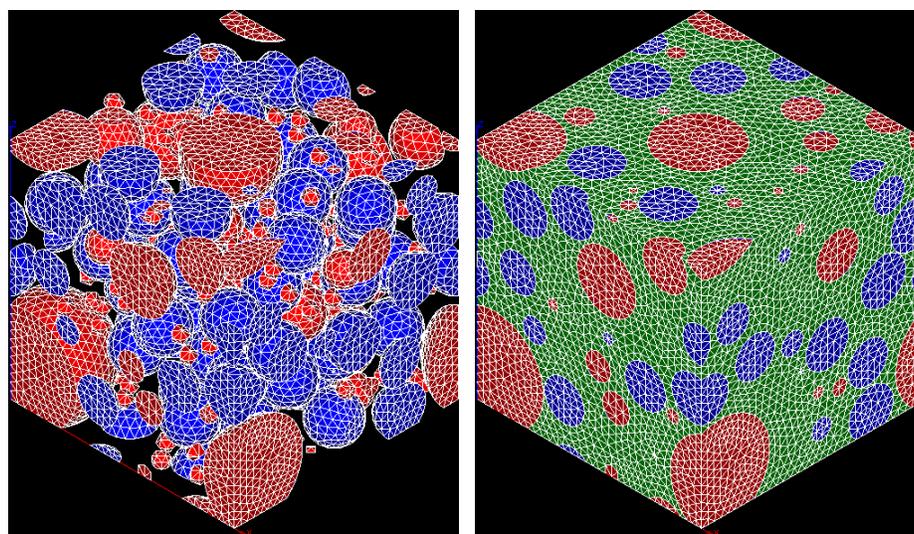
Cette procédure, dédiée aux combustibles à particules, imposait les conditions suivantes :

1. les particules avaient le même rayon R ;
2. il y avait seulement une seule phase inclusionnaire ;
3. les particules avaient un noyau plus des couches supplémentaires maillées différemment.

La procédure ne pouvait donc, en l'état, être utilisée pour les combustibles *MOX*. Nous avons donc réalisé les adaptations suivantes :

1. les particules peuvent avoir des rayons R_i différents ;
2. on peut mailler une ou deux phases inclusionnaires ;
3. les couches des particules sont inexistantes pour le combustible *MOX*. Les inclusions (amas uranifères et plutonifères) et la matrice sont maillées avec le même type d'élément. Dans toute la suite de nos études, elles sont maillées avec des tétraèdres à quatre noeuds.

L'ensemble de ces travaux peut être illustré par les figures 4.16(a) et 4.16(b).



(a) Maillage des inclusions - amas plutonifères (rouges) et uranifères (bleus)

(b) Maillage VER - matrice en vert

FIG. 4.16: Maillage périodique du combustible MOX en 3D - Tétraèdres à 4 noeuds

Il est important de souligner que ce maillage est également périodique (condition nécessaire pour nos modélisations).

²mailleur sous la plate-forme SALOME

4.3.4 Conclusion

Pour représenter géométriquement et numériquement notre composite particulaire multiphasé (type MOX) en 3D nous avons, tout d’abord, développé un outil de génération du milieu hétérogène basé sur un schéma RSA et respectant les conditions de périodicité, puis, nous avons discrétisé cette géométrie à l’aide d’un mailleur récemment développé dans la thèse de Blanc [BLANC, 2009]. Nous avons été contraints d’adapter ce mailleur à notre cas d’étude : extension à deux phases inclusionnaires avec des particules de tailles différentes. La validation de notre représentation géométrique a été réalisée à l’aide de la covariance appliquée sur les images bi-dimensionnelles numériques et expérimentales. Hormis le biais sur la portée de la covariance, les résultats sont plutôt satisfaisants compte tenu de l’hypothèse morphologique retenue pour nos inclusions (sphère).

4.4 Bilan du chapitre

Pour construire notre modèle d’homogénéisation, basé sur l’approche NTFA, la première étape de notre travail de thèse était la représentation de la microstructure. Dans ce chapitre, nous avons donc présenté la méthodologie et les outils développés pour représenter géométriquement et numériquement le combustible *MOX* en 3D.

Trois étapes ont été réalisées :

1. **Acquisition et traitement de l’image expérimentale bi-dimensionnelle *MOX*** à l’aide des logiciels développés par Oudinet dans le cadre de sa thèse (Cf. [OUDINET, 2003]), à savoir **LANTINUM** et **ANACONDA**.
2. **Stéréologie** : dans le cadre de notre étude, nous souhaitons représenter notre milieu hétérogène en trois dimensions. Or, les grandeurs caractéristiques fournies par les logiciels LANTINUM et ANACONDA sont bi-dimensionnelles. Pour ce faire, il était nécessaire de pouvoir générer des informations sur des objets 3D (trois dimensions) à partir d’un certain nombre d’informations en 2D. **Dans le cadre de ces travaux, nous avons utilisé la méthode analytique de Saltykov (Cf. [SALTYKOV, 1967]) pour remonter les distributions bi-dimensionnelles en tailles des phases inclusionnaires en tri-dimensionnelles. Nous supposons, donc, que nos inclusions sont sphériques, aussi bien pour la phase uranifère que plutonifère.**
3. **Génération du milieu - Validation - Discrétisation** : pour représenter géométriquement le milieu hétérogène et le discrétiser, les travaux effectués sont les suivants :
 - **Côté représentation géométrique, nous avons développé un outil de génération du milieu hétérogène, basé sur un schéma RSA et respectant les conditions de périodicité.**
 - **Côté discrétisation, nous avons discrétisé cette géométrie à l’aide d’un mailleur récemment développé dans la thèse de Blanc (Cf. [BLANC, 2009]). Nous avons été contraints d’adapter ce mailleur à notre cas d’étude : extension à deux phases inclusionnaires avec des particules de tailles différentes.**
 - **La validation de notre représentation géométrique a été réalisée à l’aide de la covariance appliquée sur les images bi-dimensionnelles numériques et expérimentales. Hormis le biais sur la portée de la covariance, les résultats sont plutôt satisfaisants compte tenu de l’hypothèse morphologique (sphère).**

La seconde étape est la localisation (Cf. paragraphe 3.6). Celle-ci est exposée dans la chapitre suivant.

Chapitre 5

Analyse en champs complets de composites particulaires multiphasés

Objet du chapitre :

L'objectif de ce chapitre est de présenter plusieurs réalisations de microstructures aléatoires (représentatives du combustible *MOX*) qui vont être soumises à des analyses en champs complets. Ces analyses permettront, non seulement d'établir les résultats de référence pour le développement de la méthode NTFA (*Cf. partie 3*), mais aussi et surtout de déterminer le VER (dimension, phases retenues) retenu pour ces études. Toutes les études de localisation, réalisées dans le cadre de thèse, ne sont pas exposées dans ce chapitre car elles sont ensuite régulièrement présentées dans la partie 3. Nous présentons, ici (premier paragraphe), essentiellement l'étude de localisation qui nous a permis de démontrer l'importance de prendre en compte la troisième phase (amas uranifères) dans le combustible *MOX* et, dans le second paragraphe, celle qui nous a permis de déterminer la taille caractéristique de ce VER.

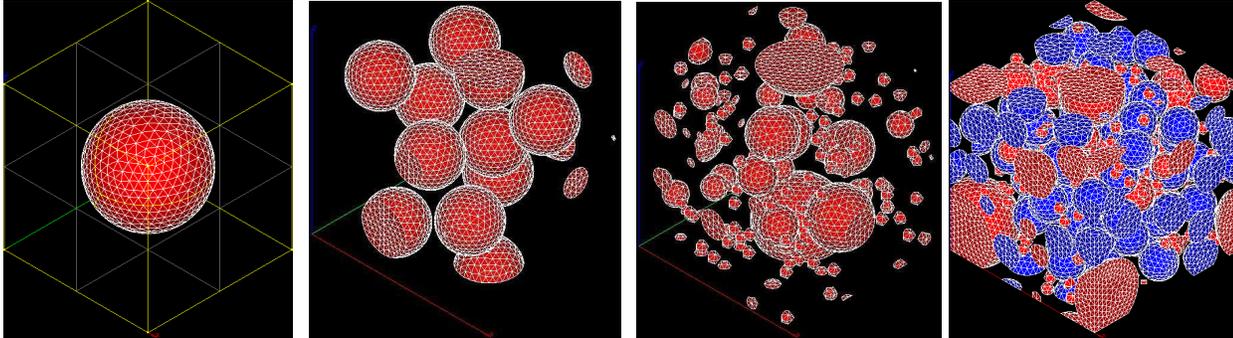
Sommaire

5.1	Détermination des constituants du VER	116
5.1.1	Les microstructures étudiées	116
5.1.2	Comportement local - propriétés matériaux	117
5.1.3	Résultats	118
5.1.4	Conclusion	120
5.2	Détermination de la taille caractéristique du VER	120
5.2.1	Les différentes réalisations	120
5.2.2	Comportement local - propriétés matériaux	121
5.2.3	Résultats	122
5.2.4	Conclusion	125
5.3	Bilan du chapitre	125

5.1 Détermination des constituants du VER

5.1.1 Les microstructures étudiées

Les combustibles *MOX* (MIMAS ADU), actuellement irradiés dans les REP français, sont des composites particulaires triphasés (Cf. paragraphe 1.2.2). Néanmoins, dans ce paragraphe nous avons testé différentes microstructures *MOX* (Cf. figure 5.1) et (Cf. tableau 5.1) :



(a) $Cellule_2$ unitaire (2 phases) (b) VER_2 «monodispersé» (2 phases) (c) VER_2 «polydispersé» (2 phases) (d) VER_3 «polydispersé» (3 phases)

FIG. 5.1: Maillage des VER étudiés - Tétraèdres à 4 noeuds

	l	R_{Pu}	R_U	n_{Pu}	n_U	nbno	nbel	Fv_{Pu}	Fv_U
	μm	μm	μm	(-)	(-)	(-)	(-)	(%)	(%)
$Cellule_2$ unitaire	1	0.33	—	1	—	6255	28406	15%	—
VER_2 «monodispersé»	200	30.0	—	10	—	21631	104254	15%	—
VER_2 «polydispersé»	150	[10, 70]	—	121	—	20503	99257	15%	—
VER_3 «polydispersé»	150	[10, 70]	30.0	121	57	26608	135996	15%	24%

TAB. 5.1: Propriétés géométriques des VER étudiés

Légende du tableau :

- R = rayon des particules et l = longueur caractéristique du VER ;
- Fv = fraction volumique et n = nombre de particules ;
- nbno = nombre de noeuds et nbel = nombre d'éléments ;
- Indice 2 pour microstructure biphasée et indice 3 pour microstructure triphasée ;
- Indice Pu = phase amas Pu (plutonifère) et indice U = phase amas U (uranifère).

L'objectif, ici, est de tester si la troisième phase (la phase uranifère en bleu) a un impact sur la réponse effective du composite particulaire triphasé (Cf. figure 5.1(d)). Le fait de ne retenir que la phase inclusionnaire plutonifère dans les trois premiers VER (Cf. figures 5.1(a), 5.1(b) et 5.1(c)) n'est pas anodin car c'est, par définition, la phase qui subit le taux de combustion le plus élevé et voit donc l'ensemble des mécanismes, présentés au chapitre 2, être exacerbés. La phase inclusionnaire uranifère UO_2 (amas U) fera donc partie intégrante de la matrice pour ces VER. Ces études vont également nous permettre d'étudier l'influence de la distribution et de la taille des inclusions sur le comportement local et effectif du combustible *MOX*, puisque dans le cas des VER biphasés nous pouvons comparer des

microstructures «monodispersées» correspondant à un arrangement périodique (Cf. figure 5.1(a)) ou aléatoire (Cf. figure 5.1(b)) des particules et une microstructure «polydispersée» (Cf. figure 5.1(c)).

5.1.2 Comportement local - propriétés matériaux

Nous appliquons ici des conditions aux limites périodiques (conditions aux limites détaillées au chapitre 3). Le problème local à résoudre est le suivant (version simplifié du problème local établi au paragraphe 2.3) :

$$(P_{meca}) \left\{ \begin{array}{l} \underline{\text{div}} \underline{\underline{\sigma}}(\underline{x}, t) = 0 \text{ avec } \underline{\underline{\sigma}}(\underline{x}, t) = \underline{\underline{C}}(E, \nu) : \left(\underline{\underline{\epsilon}}(\underline{x}, t) - \underline{\underline{\epsilon}}^{vp}(\underline{x}, t) \right) , \\ \underline{\underline{\epsilon}}(\underline{x}, t) = \frac{1}{2} \left(\underline{\underline{\text{grad}}}(\underline{u}(\underline{x}, t)) + {}^T \underline{\underline{\text{grad}}}(\underline{u}(\underline{x}, t)) \right) , \\ \underline{\underline{\epsilon}}^{vp}(\underline{x}, t) = \sum_{r=1}^N \chi^{(r)}(\underline{x}) \frac{\partial \Psi_r}{\partial \underline{\underline{\sigma}}}(\underline{\sigma}_{eq}(\underline{x}, t)) \text{ avec } \Psi_r(\underline{\sigma}_{eq}) = \frac{1}{6\mu_r^{vp}} \underline{\sigma}_{eq}^2 , \\ \underline{u}(\underline{x}, t) = \underline{E}(t) \cdot \underline{x} + \tilde{u}(\underline{x}, t) , \tilde{u}(\underline{x}, t) \# \text{ et } \underline{\underline{\sigma}}(\underline{x}, t) \cdot \underline{n}(\underline{x}) \# . \end{array} \right. \quad (5.1)$$

D'un point de vue formel, la loi de comportement testée ici est de nature visco-élastique incompressible linéaire. Les propriétés matériaux utilisées pour les trois VER biphasés (Cf. figures 5.1(a), 5.1(b) et 5.1(c)) sont résumées dans le tableau 5.2.

VER Biphasé	E (GPa)	ν (-)	μ_r^{vp} (GPa.s)
Amas Pu	200	0.3	21.43
Matrice	200	0.3	64.30

TAB. 5.2: Propriétés inclusions Pu et matrice

On constate donc que les inclusions Pu fluent environ trois fois plus vite que la matrice. Ce contraste est représentatif des MOX AUC biphasés. Les propriétés matériaux utilisées pour le VER triphasé sont quant à elles synthétisées dans le tableau 5.3.

VER Triphasé	E (GPa)	ν (-)	μ_r^{vp} (GPa.s)
Amas Pu	200	0.3	21.43
Matrice	200	0.3	52.94
Amas U	200	0.3	158.83

TAB. 5.3: Propriétés inclusions Pu, U et de la matrice

On remarque que les inclusions Pu fluent environ 2.5 fois plus vite que la matrice, tandis que les inclusions U fluent trois fois moins vite. Ces contrastes sont représentatifs des MOX ADU triphasés (Rappel : ce sont les microstructures actuellement utilisées en réacteur).

5.1.3 Résultats

5.1.3.1 Résultats effectifs

Les réponses effectives des VER sont déterminées numériquement par éléments finis (code Cast3M (Cf. [<http://www.cast3m.cea.fr>])) en simulant la réponse du composite le long de trajets de chargement radiaux dans l'espace des contraintes macroscopiques $\underline{\underline{\Sigma}}(t) = \lambda(t)\underline{\underline{\Sigma}}_0^k$ (pilotage dit à direction de contrainte imposée : voir chapitre 3 paragraphe 3.8.3 de la référence [BORNERT et al., 2001]). k étant l'indice de l'essai. Deux essais sont réalisés ici, $k = 8$ et $k = 9$. Ces essais sont calculés jusqu'à $\underline{\underline{E}} : \underline{\underline{\Sigma}}_0^k = 10\%$ et, dans le cadre de cette étude, $\underline{\underline{E}} : \underline{\underline{\Sigma}}_0^k$ est fixée à $10^{-2}s^{-1}$. Les essais 8 et 9 sont des essais dont la direction de contrainte est une combinaison linéaire de $\underline{\underline{\Sigma}}_0^1$ (traction uniaxiale suivant la direction 11) et $\underline{\underline{\Sigma}}_0^2$ (cisaillement pur suivant la direction 12) :

$$\underline{\underline{\Sigma}}_0^8 = \underline{\underline{\Sigma}}_0^1 + \frac{1}{2}\underline{\underline{\Sigma}}_0^2 \quad \text{et} \quad \underline{\underline{\Sigma}}_0^9 = \underline{\underline{\Sigma}}_0^1 + \underline{\underline{\Sigma}}_0^2 \quad (5.2)$$

Sur la figure 5.2, nous présentons les réponses effectives de ces deux essais :

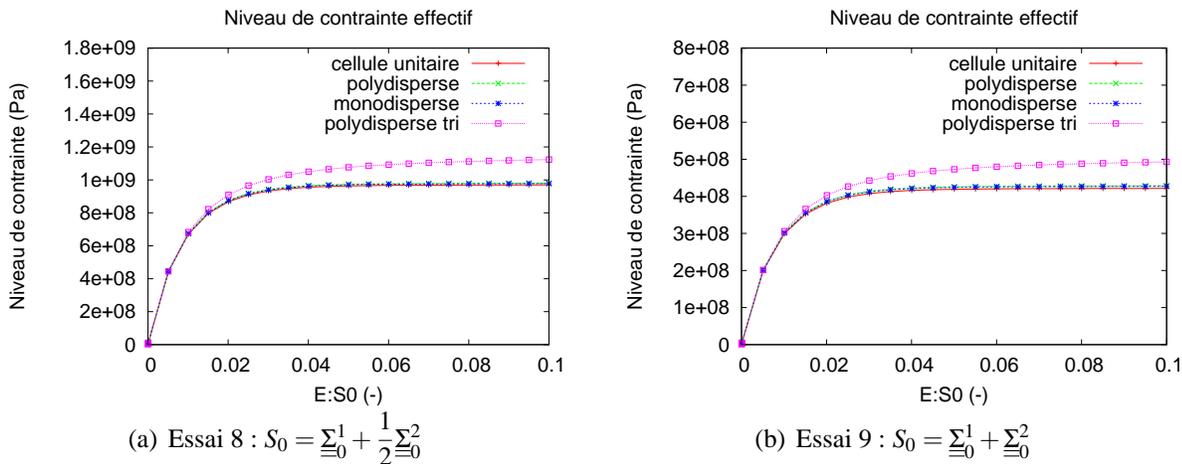


FIG. 5.2: Essai à vitesse de déformation et direction de contrainte imposées sur les différentes microstructures

Dans le cas des combustibles *MOX* biphasé (*MOX* AUC), nous constatons une très faible différence (inférieure à 1%) du comportement effectif entre une modélisation type *cellule*₂ unitaire, *VER*₂ «monodispersé» et *VER*₂ «polydispersé», aussi bien pour l'essai 8 que 9. Pour le comportement local étudié ici, les contrastes choisis et les fractions volumiques retenues (matrice et amas Pu), nous pouvons donc affirmer que la distribution et la taille des inclusions ont peu d'impact sur la réponse effective d'un *MOX* biphasé. Néanmoins, nous remarquons que la réponse effective du VER «polydispersé» triphasé (*VER*₃ «polydispersé») se distingue très nettement de celle des autres VER, aussi bien pour l'essai 8 que 9. Pourtant, nous rappelons au lecteur que, les déformations libres (gonflement solide et densification) et l'aspect compressible (mécanisme de restructuration) n'ont pas été abordés dans le cadre de cette étude. Ces déformations accentueraient probablement l'écart entre la réponse effective du VER polydispersé triphasé et celles des autres VER. Nous pouvons donc penser que la troisième phase, la phase uranifère, a une importance non négligeable sur la réponse effective des microstructures *MOX* actuellement irradiées dans les réacteurs français (*MOX* ADU). Ce résultat est tout de même à prendre avec précaution car les niveaux de contraintes atteints dans ces essais sont peu

réalistes par rapport à ce que l'on peut avoir en réacteur. Dans la suite de l'étude, nous retenons donc ce VER (Cf. figure 5.1(d)) pour le développement de notre modèle d'homogénéisation (Cf. partie 3). La phase uranifère ne peut, a priori, pas être négligée. Dans le paragraphe suivant, nous avons également analysé l'hétérogénéité du champ de contrainte équivalente dans les phases respectives de ce VER. L'objectif étant de vérifier si le développement d'un modèle d'homogénéisation (Cf. partie 3), basé sur une approche NTFA (Cf. [MICHEL and SUQUET, 2003]), est vraiment indispensable.

5.1.3.2 Résultats locaux

Les figures 5.3(a) et 5.3(b) illustrent la distribution qualitative du champ de contrainte équivalente, au sens de *von Mises*, dans les phases respectives pour l'essai précédent numéro 8 à $t = 10s$:

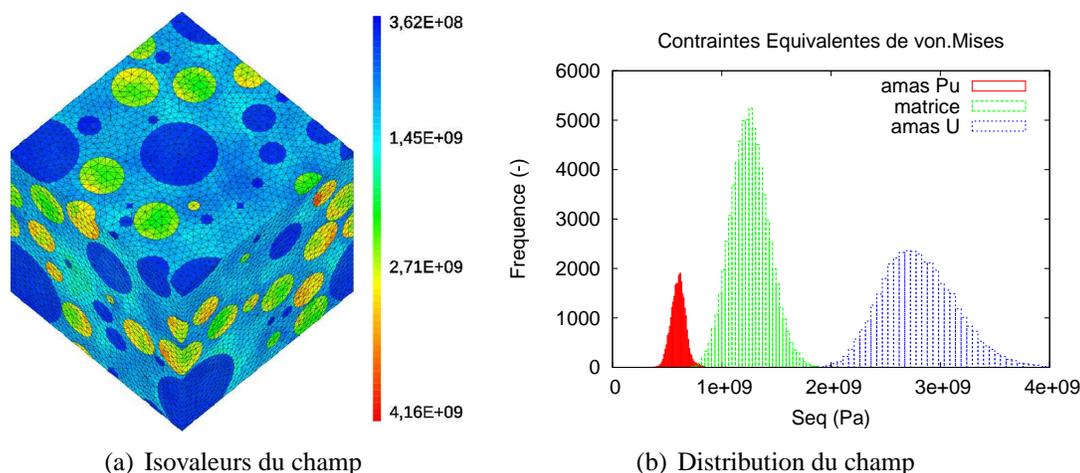


FIG. 5.3: Essai 8 $t=10s$ Champ de contrainte équivalent VER «polydispersé» triphasé 5.1(d)

Qualitativement, on remarque une hétérogénéité du champ particulièrement prononcée dans la phase uranifère et matricielle. Le tableau (Cf. tableau 5.4) illustre quantitativement le premier moment et l'écart type de ce champ dans chacune des phases :

VER Triphasé	1^{er} moment (Pa)	ecart type (Pa)	ecart type (%)
Amas Pu	$6.05E + 08$	$5.95E + 07$	9.83
Matrice	$1.26E + 09$	$1.62E + 08$	12.85
Amas U	$2.77E + 09$	$3.39E + 08$	12.26

TAB. 5.4: Moment d'ordre un et écart type - Contraintes équivalentes

L'écart type dans la phase uranifère et matricielle est de l'ordre de 13%. On ne peut donc pas négliger la non uniformité du champ dans ces phases. Celui dans la phase plutonifère est, certes, moins important mais il est loin d'être négligeable. De plus, ces résultats ont été établis sans prendre en compte la résolution du problème complet exposé au chapitre 2 paragraphe 2.3 (absence des déformations libres qui risquent d'accentuer l'hétérogénéité au sein des phases et omission également de

l'aspect compressible). On comprend donc l'importance de développer une méthode d'homogénéisation, basée sur une approche en champs de transformation non uniformes, type NTFA (Cf. partie 3).

5.1.4 Conclusion

Nous venons de voir, à travers le paragraphe 5.1, l'**importance de prendre en compte la troisième phase**, les amas uranifères, dans la représentation numérique de notre VER *MOX*. Mais nous avons également pu démontrer la **non uniformité des champs intra-phase** et donc la **nécessité de développer un modèle d'homogénéisation basé sur une approche type NTFA** (Cf. partie 3).

De cette analyse, nous avons donc retenu le VER présenté sur la figure 5.1(d) pour la suite de nos études. Néanmoins, avant de développer notre modèle d'homogénéisation NTFA pour le comportement local établi au chapitre 2 paragraphe 2.3, nous avons également vérifié que les comportements effectifs, moyens par phase et locaux étaient identiques pour différentes réalisations de microstructures. C'est donc l'objet du paragraphe suivant.

5.2 Détermination de la taille caractéristique du VER

5.2.1 Les différentes réalisations

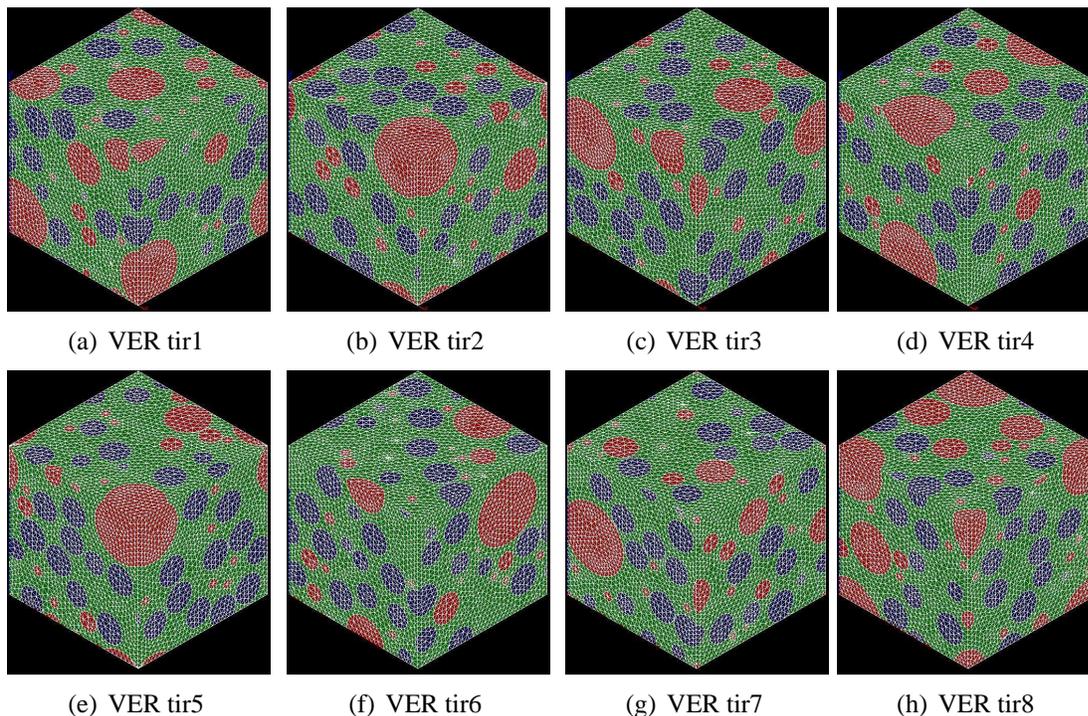


FIG. 5.4: 8 VER «polydispersés» triphasés. Maillage périodique en 3D - Tétraèdres à 4 noeuds

Nous avons donc généré sept tirages supplémentaires respectant les conditions du VER présenté sur la figure 5.1(d) et exposées dans le tableau 5.1. Sur les huit tirages, uniquement le positionnement des particules est différent d'un VER à l'autre (Cf. figures 5.4).

5.2.2 Comportement local - propriétés matériaux

Nous appliquons également des conditions aux limites périodiques (conditions aux limites détaillées au chapitre 3). Le problème local à résoudre est une version simplifiée du problème local établi au paragraphe 2.3 :

$$(P_{meca}) \left\{ \begin{array}{l} \underline{\text{div}} \underline{\underline{\sigma}}(\underline{x}, t) = 0 \quad \forall \underline{x} \in V, \\ \underline{\underline{\sigma}}(\underline{x}, t) = \underline{\underline{C}}(E, \nu) : \left(\underline{\underline{\epsilon}}(\underline{x}, t) - \underline{\underline{\epsilon}}^{\text{in}}(\underline{x}, t) \right) \text{ avec } \underline{\underline{\epsilon}}^{\text{in}}(\underline{x}, t) = \underline{\underline{\epsilon}}^{\text{gs}}(\underline{x}, t) + \underline{\underline{\epsilon}}^{\text{vp}}(\underline{x}, t), \\ \underline{\underline{\epsilon}}(\underline{x}, t) = \frac{1}{2} \left(\underline{\underline{\text{grad}}}(\underline{u}(\underline{x}, t)) + {}^{\text{T}}\underline{\underline{\text{grad}}}(\underline{u}(\underline{x}, t)) \right), \\ \underline{\underline{\epsilon}}^{\text{gs}}(\underline{x}, t) = \sum_{r=1}^N \chi^{(r)}(\underline{x}) \underline{\underline{\epsilon}}_r^{\text{gs}}(t) \underline{\underline{i}}, \\ \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^{\text{vp}}(\underline{x}, t) = \sum_{r=1}^N \chi^{(r)}(\underline{x}) \frac{\partial \Psi_r}{\partial \underline{\underline{\sigma}}}(\underline{\sigma}_{eq}(\underline{x}, t), \underline{\sigma}_m(\underline{x}, t)) \text{ où } \Psi_r(\underline{\sigma}_{eq}, \underline{\sigma}_m, t) = \frac{1}{6\mu_r^{\text{vp}}} \underline{\sigma}_{eq}^2 + \frac{1}{2k_r^{\text{vp}}} \underline{\sigma}_m^2, \\ \underline{u}(\underline{x}, t) = \underline{E}(t) \cdot \underline{x} + \underline{\tilde{u}}(\underline{x}, t) \quad \text{avec } \underline{E} \text{ déformation macroscopique,} \\ \underline{\tilde{u}}(\underline{x}, t) \cdot \underline{n} \text{ et } \underline{\underline{\sigma}}(\underline{x}, t) \cdot \underline{n}(\underline{x}) \cdot \underline{n} = 0, \quad \forall \underline{x} \in \partial V \end{array} \right. \quad (5.3)$$

En effet, il s'agit bien d'une version simplifiée puisque nous ne prenons pas en compte l'aspect vieillissant ainsi que la déformation libre de densification $\underline{\underline{\epsilon}}^{\text{dens}}$. L'aspect vieillissant a été volontairement omis car, sous irradiation, il a tendance à réduire les contrastes entre les propriétés matériaux des phases et donc à homogénéiser le comportement du combustible *MOX*. Par conséquent, si on veut vérifier que le comportement effectif est identique d'une réalisation à l'autre, il est primordial de réaliser cette étude avec les contrastes les plus élevés. Quant à la déformation libre de densification, celle-ci crée du retrait tandis que la déformation libre de gonflement solide crée du gonflement. En combinant les deux déformations, nous minimisons le retrait ou le gonflement. Or à travers cette étude, nous souhaitons réaliser un calcul conservatif. C'est la raison pour laquelle nous avons sélectionné que le gonflement solide. La démarche inverse aurait pu être réalisée.

La déformation de gonflement solide $\underline{\underline{\epsilon}}_r^{\text{gs}}(t)$ dans chaque phase r sera une fonction linéaire en fonction du temps t . On notera $\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}_r^{\text{gs}}$ la vitesse de gonflement solide de la phase r . D'un point de vue formel, la loi de comportement testée ici est de nature viscoélastique compressible linéaire avec déformation libre imposée. Les propriétés matériaux utilisées pour les VER (Cf. figures 5.4) sont résumées dans le tableau 5.5.

VER Triphasé	E (GPa)	ν (-)	μ_r^{vp} (GPa.s)	k_r^{vp} (GPa.s)	$\dot{\epsilon}_r^{gs}$ (s^{-1})
Amas Pu	200	0.3	21.43	2.381	$2.10E - 02$
Matrice	200	0.3	52.94	8.824	$7.00E - 05$
Amas U	200	0.3	158.83	52.94	$2.84E - 05$

TAB. 5.5: Propriétés inclusions Pu, U et de la matrice

On remarque que les inclusions Pu gonflent (déformation libre imposée) 300 fois plus vite que la matrice, tandis que les inclusions U gonflent 2.5 fois moins vite. Ce contraste de gonflement de 300 n'est pas représentatif des MOX ADU triphasés. La réalité se situe plutôt à 3. Ce contraste a été volontairement amplifié dans le but de démontrer que les comportements effectifs, moyens par phase et locaux (écart type du champ étudié) sont identiques pour les différentes réalisations et ce en dépit de cette hypothèse très conservative.

5.2.3 Résultats

5.2.3.1 Résultats effectifs

Les réponses effectives des VER sont également déterminés numériquement par éléments finis (code Cast3M (Cf. [<http://www.cast3m.cea.fr>])) en simulant la réponse du composite le long de trajets de chargement radiaux dans l'espace des contraintes macroscopiques $\underline{\underline{\Sigma}}(t) = \lambda(t)\underline{\underline{\Sigma}}_0^k$ avec $k = 8$ comme précédemment (Cf. paragraphe 5.1.3.1). Nous appliquons les mêmes conditions de chargements. Sur la figure 5.5, nous présentons les réponses effectives des différents tirages (Cf. paragraphe 5.2.1) :

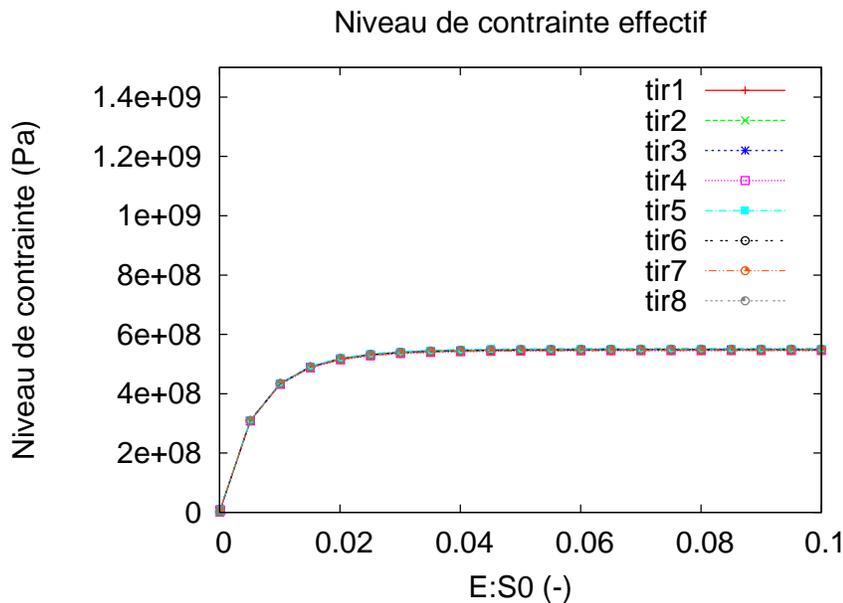


FIG. 5.5: Essai 8 appliqué aux 8 VER - Niveau de contrainte effectif

Malgré les déformations libres très élevées dans les amas plutonifères (déformations libres très conservatives par rapport à celles qui peuvent se produire en réacteur), nous constatons que la réponse effective des 8 VER est très proche. En effet, quantitativement, l'écart à la moyenne du niveau de contrainte effectif de ces 8 VER ne dépasse pas 0.1 %. Nous pouvons donc considérer que notre VER (Cf. figure 5.4(a) qui correspond aussi à la figure 5.1(d)) respecte l'ensemble des conditions présentées et établies au chapitre 3 paragraphe 3.2.1.

Du point de vue du comportement effectif, nous avons donc déterminé l ($150\mu\text{m}$), la taille du Volume Élémentaire Représentatif sur lequel nos calculs NTFA vont être effectués. Sachant que L , la dimension caractéristique de la structure (la pastille nucléaire MOX), est égale à 4.0 mm (rayon). Le rapport d'échelle entre la dimension de la structure, L , et le VER, l , est égal à 26.7 ce qui est donc acceptable. Néanmoins le rapport d'échelle entre la dimension du VER, l , et la plus grande des inclusions, d (le diamètre du plus grand amas plutonifère est égal à $70\mu\text{m}$), reste relativement faible : facteur d'échelle de 2.14. Même si la fraction volumique de cette classe d'amas n'est pas très élevée, elle fait néanmoins partie intégrante de la microstructure. Il est donc important de noter que par la suite nous touchons les limites du cadre méthodologique général surtout si l'on cherche à représenter les effets de gros amas.

Dans la mesure où le modèle NTFA est appelé à nous donner accès aux comportements moyens par phase et aux champs locaux, nous devons également vérifier que le premier moment de la variable analysée ainsi que son écart type soient invariants d'un tirage à l'autre. C'est donc l'objet du paragraphe suivant.

5.2.3.2 Comportement moyen par phase et champs locaux

Sur la figure 5.6, nous présentons les réponses moyennes des 8 VER exposés au paragraphe 5.2.1. Il s'agit de l'essai 8 exposé au paragraphe précédent :

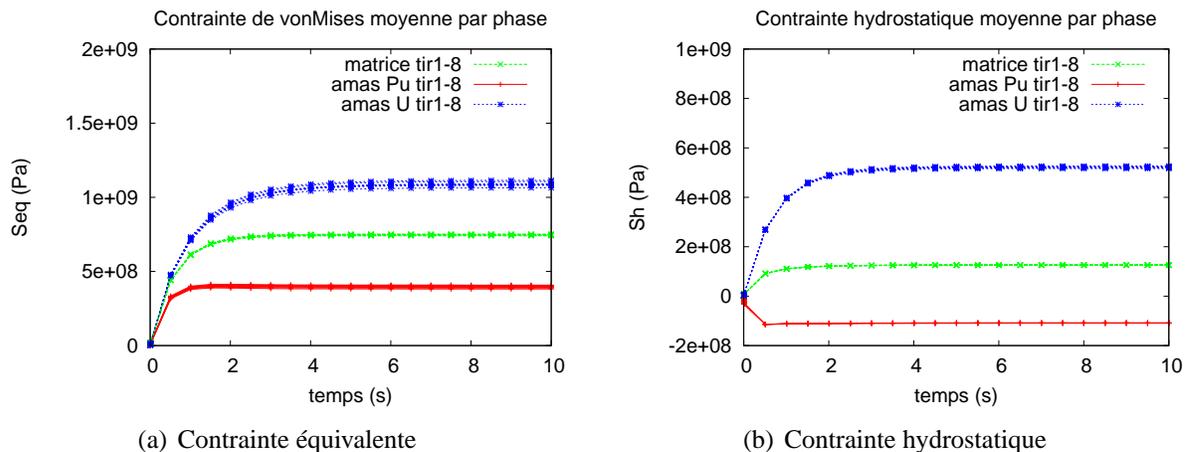


FIG. 5.6: Réponse des 8 VER - Essai 8 - Contrainte équivalente et hydrostatique moyenne par phase

Qualitativement, nous remarquons que les contraintes équivalentes et hydrostatiques moyennes par phase sont très proches d'une microstructure à l'autre. Quantitativement, nous observons (Cf. tableaux 5.6 et 5.7) que les écarts minimum et maximum par rapport à la moyenne des 8 tirages sont faibles. En effet, l'écart absolu le plus important concerne le tableau 5.6 et se situe dans la phase plutonifère (amas Pu) : 4.03 %.

$\langle \sigma \rangle_{eq}$	1	2	3	4	5	6	7	8	moy	min	max
matrice	7.50	7.47	7.48	7.40	7.51	7.46	7.48	7.44	7.47	0.93	0.53
amas Pu	3.88	3.96	3.93	4.08	3.81	4.02	4.05	4.01	3.97	4.03	2.77
amas U	10.80	10.88	10.87	10.85	11.15	10.90	10.64	11.06	10.89	2.30	2.39

TAB. 5.6: 1er moment contrainte équivalente de vonMises des 8 tirages et moyenne (moy) des 8 tirages (en $Pa.10^8$) - Minimum (min) et maximum (max) des 8 tirages par rapport à la moyenne (en %)

$\langle \sigma \rangle_h$	1	2	3	4	5	6	7	8	moy	min	max
matrice	1.26	1.26	1.26	1.26	1.26	1.26	1.25	1.25	1.26	0.79	0.00
amas Pu (négatif)	1.09	1.09	1.09	1.08	1.09	1.09	1.09	1.09	1.09	0.92	0.00
amas U	5.20	5.21	5.22	5.22	5.27	5.21	5.16	5.25	5.22	1.15	0.96

TAB. 5.7: 1er moment contrainte hydrostatique des 8 tirages et moyenne (moy) des 8 tirages (en $Pa.10^8$) - Minimum (min) et maximum (max) des 8 tirages par rapport à la moyenne (en %)

Nous pouvons donc affirmer que les premiers moments de la contrainte équivalente et de la contrainte hydrostatique sont quasi invariants d'une microstructure à l'autre. Cette affirmation est donc encourageante pour le développement de notre modèle d'homogénéisation basé sur l'approche NTFA. Nous avons également analysé, pour l'essai 8 à $t = 10s$, la variation de l'écart type de la contrainte équivalente et de la contrainte hydrostatique au sein de chacune des phases. Les résultats quantitatifs sont exposés dans les tableaux 5.8 et 5.9.

STD_{eq}	1	2	3	4	5	6	7	8	moy	min	max
matrice	32.49	32.49	32.71	33.36	31.87	32.39	32.34	32.64	32.54	2.06	2.52
amas Pu	14.55	14.88	13.96	13.52	14.74	14.49	13.97	13.66	14.22	4.92	4.64
amas U	17.83	20.66	20.66	21.75	17.52	17.75	18.84	19.98	19.37	9.55	12.29

TAB. 5.8: Ecart type contrainte équivalente de vonMises des 8 tirages et moyenne (moy) des 8 tirages (en % par rapport au 1er moment) - Minimum (min) et maximum (max) des 8 tirages par rapport à la moyenne (en %)

STD_h	1	2	3	4	5	6	7	8	moy	min	max
matrice	13.44	13.66	13.36	13.37	13.15	13.38	13.68	13.23	13.41	1.94	2.01
amas Pu	1.75	1.93	1.85	1.89	1.77	1.84	1.86	1.86	1.84	4.89	4.89
amas U	6.35	7.62	7.08	7.18	6.33	6.66	7.10	7.02	6.92	8.53	10.12

TAB. 5.9: Ecart type contrainte hydrostatique des 8 tirages et moyenne (moy) des 8 tirages (en % par rapport au 1er moment) - Minimum (min) et maximum (max) des 8 tirages par rapport à la moyenne (en %)

Quantitativement, nous observons que les écarts minimum et maximum par rapport à la moyenne des 8 écarts types ne dépassent pas 12.29%. L'écart absolu le plus important concerne le tableau 5.8 et se situe dans la phase uranifère (amas U). Les écarts types de la contrainte équivalente et de la contrainte hydrostatique sont beaucoup moins invariants d'une microstructure à l'autre. Néanmoins, nous supposons, à ce stade, que cela reste acceptable. Cette hypothèse sera bien évidemment vérifiée dans la partie 3 lors du développement de notre modèle d'homogénéisation basé sur l'approche NTFA.

En effet, à travers les différents chapitres de cette partie, nous tâcherons régulièrement de positionner notre modèle NTFA par rapport à ces 8 tirages, notamment du point de vue des champs locaux.

5.2.4 Conclusion

Nous venons de voir, à travers le paragraphe 5.2 que la taille caractéristique de notre VER, $l = 150 \mu\text{m}$, était suffisamment importante pour respecter les conditions établies au chapitre 3 paragraphe 3.2.1. En plus du comportement effectif, nous avons également montré que le premier moment et l'écart type de la variable analysée (contrainte équivalent par exemple) étaient quasi invariants d'une microstructure à l'autre. **Pour le développement de notre modèle d'homogénéisation (Cf. partie 3), basé sur l'approche NTFA, nous retenons donc le VER exposé sur la figure 5.4(a).**

5.3 Bilan du chapitre

A travers ce chapitre nous avons présenté deux études de localisation :

1. La première étude de localisation nous a permis de montrer l'importance de prendre en compte la troisième phase, les amas uranifères, dans un Volume Élémentaire représentatif de la microstructure *MOX*.
2. Par le biais de la deuxième étude de localisation nous avons montré que la taille caractéristique de notre VER (Cf. figure 5.4(a)) respectait suffisamment les notions de séparation des échelles exposées au chapitre 3 paragraphe 3.2.1.

Pour la suite de nos études et notamment le développement du modèle d'homogénéisation (Cf. partie 3), nous retenons donc le VER (Cf. figure 5.4(a)). De nombreuses autres études de localisation ont été réalisées tout au long de cette thèse, notamment pour constituer les résultats de référence au développement de notre modèle NTFA (Cf. partie 3). Nous ne les avons pas exposées dans ce chapitre car elles seront régulièrement présentées dans la partie 3 et également dans la partie 4.

BILAN PARTIE 2 :
VER et comportement local retenus

L'objectif de cette deuxième partie était de présenter les travaux réalisés, dans le cadre de cette thèse, pour développer les deux premières étapes nécessaires au développement de notre modèle d'homogénéisation (basé sur l'approche NTFA (Cf. partie 3)), à savoir l'étape de représentation (Cf. chapitre 4) et celle de localisation (Cf. chapitre 5).

A travers le chapitre 4, nous avons donc présenté la méthodologie et les outils développés pour représenter géométriquement et numériquement le combustible *MOX* en 3D, composite particulière multiphasé. La méthode NTFA se nourrit (identification des modes) de calculs de microstructure, ce qui est cohérent avec la méthodologie présentée dans ce chapitre. Trois étapes ont été réalisées :

1. **Acquisition et traitement de l'image expérimentale bi-dimensionnelle *MOX*** à l'aide des logiciels développés par *Oudinet* (Cf. [OUDINET, 2003]) dans le cadre de sa thèse, à savoir **LANTINUM** et **ANACONDA**.
2. **Stéréologie** : dans le cadre de notre étude, nous souhaitons représenter notre milieu hétérogène en trois dimensions. Or, les grandeurs caractéristiques fournies par les logiciels LANTINUM et ANACONDA sont bi-dimensionnelles. Pour ce faire, il était nécessaire de pouvoir générer des informations sur des objets 3D (trois dimensions) à partir d'un certain nombre d'informations en 2D. **Dans le cadre de nos travaux de thèse, nous avons utilisé la méthode analytique de Saltykov** (Cf. [SALTYKOV, 1967]) pour extrapoler les distributions bi-dimensionnelles en tailles des phases inclusionnaires aux tri-dimensionnelles. **Nous supposons, donc, que nos inclusions sont sphériques, aussi bien pour la phase uranifère que plutonifère.**
3. **Génération du milieu - Validation - Discrétisation** : pour représenter géométriquement le milieu hétérogène et le discrétiser, les travaux suivants furent réalisés :
 - **Côté représentation géométrique, nous avons développé un outil de génération du milieu hétérogène, type *MOX*, basé sur un schéma RSA et respectant les conditions de périodicité.**
 - **Côté discrétisation, nous avons discrétisé cette géométrie à l'aide d'un mailleur récemment développé dans la thèse de Blanc** [BLANC, 2009] pour les combustibles à particules des réacteurs HTR. **Nous avons été contraints d'adapter ce mailleur à notre cas d'étude : extension à deux phases inclusionnaires avec des particules de tailles différentes.**
 - **La validation de notre représentation géométrique a été réalisée à l'aide la covariance appliquée sur les images bi-dimensionnelles numériques et expérimentales. Hormis le biais sur la portée de la covariance, les résultats sont plutôt satisfaisants compte tenu de l'hypothèse morphologique (sphère).**

A travers le chapitre 5, nous nous sommes interrogés sur la représentativité d'un VER, type *MOX*. L'objectif de ce chapitre était de présenter plusieurs réalisations de microstructures aléatoires (représentatives du combustible *MOX*) qui ont été soumises à des analyses en champs complets. Ces analyses ont permis, non seulement d'établir les résultats de référence pour le développement de la méthode NTFA (Cf. partie 3), mais aussi et surtout de déterminer le VER (dimension, phases ...) retenu pour ces études. Toutes les études de localisation, réalisées dans le cadre de thèse, n'ont pas été exposées dans ce chapitre car elles sont ensuite régulièrement présentées dans la partie 3. Mais, dans le premier paragraphe de ce chapitre, nous avons présenté l'étude de localisation qui nous a permis de démontrer l'importance de prendre en compte la troisième phase (les amas uranifères) dans les microstructures *MOX* actuelles et, dans le second paragraphe, celle qui nous a permis de déterminer si la taille caractéristique de notre VER respectait les conditions exposées au chapitre 3 paragraphe 3.2.1. En plus du comportement effectif, nous avons également montré que le premier moment et

l'écart type de la variable analysée (contrainte équivalent par exemple) étaient quasi invariants d'une microstructure à l'autre.

Le VER retenu, pour réaliser l'ensemble des développements théoriques et numériques sur l'approche NTFA (Cf. partie 3), est donc le suivant (amas U en bleu, amas Pu en rouge et matrice en vert) :

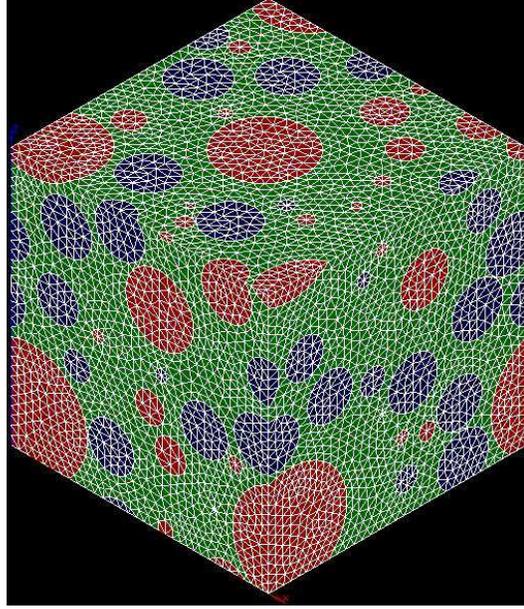


FIG. 5.7: VER retenu pour les études NTFA

Le problème local à résoudre est celui établi au chapitre 2 paragraphe 2.3 et que nous rappelons ci-dessous :

$$\left(P_{meca} \right) \left\{ \begin{array}{l}
 \underline{\text{div}} \underline{\underline{\sigma}}(\underline{x}, t) = 0 \quad \forall \underline{x} \in V, \\
 \underline{\underline{\sigma}}(\underline{x}, t) = \underline{\underline{C}}(t) : \left(\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{x}, t) - \underline{\underline{\varepsilon}}^{\text{in}}(\underline{x}, t) \right) \text{ avec } \underline{\underline{\varepsilon}}^{\text{in}}(\underline{x}, t) = \underline{\underline{\varepsilon}}^{\text{dens}}(\underline{x}, t) + \underline{\underline{\varepsilon}}^{\text{gs}}(\underline{x}, t) + \underline{\underline{\varepsilon}}^{\text{vp}}(\underline{x}, t), \\
 \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{x}, t) = \frac{1}{2} \left(\underline{\underline{\text{grad}}}(\underline{u}(\underline{x}, t)) + {}^{\text{T}}\underline{\underline{\text{grad}}}(\underline{u}(\underline{x}, t)) \right), \\
 \underline{\underline{\varepsilon}}^{\text{dens}}(\underline{x}, t) = \sum_{r=1}^N \chi^{(r)}(\underline{x}) \underline{\underline{\varepsilon}}_r^{\text{dens}}(t) \quad \text{et} \quad \underline{\underline{\varepsilon}}^{\text{gs}}(\underline{x}, t) = \sum_{r=1}^N \chi^{(r)}(\underline{x}) \underline{\underline{\varepsilon}}_r^{\text{gs}}(t), \\
 \underline{\underline{\varepsilon}}^{\text{vp}}(\underline{x}, t) = \sum_{r=1}^N \chi^{(r)}(\underline{x}) \frac{\partial \psi_r}{\partial \underline{\underline{\sigma}}}(\underline{\sigma}_{eq}(\underline{x}, t), \underline{\sigma}_m(\underline{x}, t)) \quad \text{où} \quad \psi_r(\underline{\sigma}_{eq}, \underline{\sigma}_m, t) = \frac{1}{6\mu_r^{\text{vp}}(t)} \underline{\sigma}_{eq}^2 + \frac{1}{2k_r^{\text{vp}}(t)} \underline{\sigma}_m^2, \\
 \underline{u}(\underline{x}, t) = \underline{E}(t) \cdot \underline{x} + \tilde{u}(\underline{x}, t) \quad \text{avec } \underline{E} \text{ déformation macroscopique}, \\
 \tilde{u}(\underline{x}, t) \cdot \underline{n} \text{ et } \underline{\underline{\sigma}}(\underline{x}, t) \cdot \underline{n}(\underline{x}) \cdot \underline{n} = 0, \quad \forall \underline{x} \in \partial V
 \end{array} \right. \tag{5.4}$$

D'un point de vue formel, **la loi de comportement locale proposée ici est de nature visco-élastique linéaire compressible vieillissante avec des déformations libres imposées**. Rappel : pour homogénéiser ce problème local, la méthode NTFA (Cf. [MICHEL and SUQUET, 2003]) a été choisie. L'aspect 3D et vieillissant, les déformations libres ainsi que l'optimisation de la méthode, sont des axes d'études qui n'ont jamais été abordés jusqu'à présent. L'ensemble de ces développements théoriques et numériques, réalisés dans le cadre de cette thèse, sont donc exposés dans la partie suivante.

Troisième partie

EXTENSION DE L'APPROCHE NTFA AUX ASPECTS 3D, DÉFORMATIONS LIBRES, VIEILLISSANT ET OPTIMISATION

Chapitre 6

NTFA 3D - comportement visco-élastique linéaire incompressible

Objet du chapitre :

Dans ce chapitre nous présentons les développements que nous avons réalisés, dans le cadre de cette thèse, pour étendre la NTFA au 3D (tridimensionnel). Cette extension est réalisée sur le composite particulière triphasé retenu dans la partie 2 et pour le comportement local suivant : visco-élasticité linéaire incompressible (version «simplifiée» du problème local établi au chapitre 2 paragraphe 2.3. Le comportement local complet sera progressivement pris en compte dans les équations constitutives du modèle NTFA tout au long de cette partie 3). Dans le premier paragraphe, nous présentons succinctement les équations constitutives du modèle : principe de la méthode et choix des modes plastiques. Puis, dans le second paragraphe, nous abordons la mise en oeuvre de ce modèle : calcul des modes plastiques et calculs des paramètres de la NTFA. Ensuite, dans le troisième paragraphe, les prédictions de celui-ci par rapport à des calculs de référence en champs complets sont exposées. Ces analyses sont menées aussi bien sur le comportement effectif que sur les champs locaux et pour différents types d'essais (essais à vitesse de déformation et à direction de contrainte imposées, de fluage, de relaxation). Des études de sensibilité à la microstructure considérée sont également présentées dans ce paragraphe.

Sommaire

6.1	Principe de la méthode	136
6.1.1	Choix des modes plastiques - Transformation de <i>Karhunen-Loève</i>	136
6.1.2	Rappel des équations du modèle NTFA pour la visco-élasticité linéaire incompressible	138
6.1.3	Conclusion	138
6.2	Mise en oeuvre du modèle NTFA	138
6.2.1	VER et propriétés matériaux	138
6.2.2	Calcul des modes plastiques en 3D	139
6.2.3	Calculs des paramètres de la NTFA	142
6.2.4	Conclusion	144
6.3	Résultats - essais non vieillissants	144
6.3.1	Comportement effectif	144
6.3.2	Comportement moyen par phase	148
6.3.3	Champs locaux	151
6.4	Bilan du chapitre	156

Jusqu'à présent les approches NTFA abordées (Cf. [MICHEL and SUQUET, 2003],[ROUSETTE, 2005]) traitaient de nombreux comportements locaux mais toujours en deux dimensions (2D). Dans ce chapitre, nous allons étudier la capacité prédictive des approches NTFA en trois dimensions (3D) (Cf. VER retenu figure 5.7) et pour le comportement local suivant des constituants : visco-élastique linéaire incompressible.

6.1 Principe de la méthode

Le problème local à résoudre est le problème 5.3 présenté au paragraphe 5.1.2 chapitre 5. Les constituants considérés dans ce chapitre sont donc visco-élastiques linéaires incompressibles. Ils ont un comportement de matériaux standard généralisés. Nous avons déjà présenté au chapitre 3 paragraphe 3.5.4 l'approche NTFA appliqué à ce type de comportement. Par conséquent, nous ne revenons pas sur le principe de la méthode ainsi que sur l'établissement des équations constitutives (variables réduites, relations constitutives).

La seule différence porte sur la relation constitutive entre \dot{e}_k^{vp} et τ_k . En effet, pour obtenir une relation entre les variables internes réduites \dot{e}_k^{vp} et τ_k , il n'est pas nécessaire de faire une approximation de σ_{eq} afin de simplifier l'équation (3.94) (comme présenté au chapitre 3 (Cf. equation 3.95)), car le comportement des constituants est ici visco-élastique linéaire. Le potentiel de dissipation associé à la phase r et agissant sur l'ensemble des modes à support dans cette phase est donné par la relation suivante :

$$\Psi_r(\sigma_{eq}) = \frac{1}{6G_r^{vp}} \sigma_{eq}^2 \quad (6.1)$$

avec G_r^{vp} ($G_r^{vp} = \mu_r^{vp}$ (Cf. paragraphe 2.3 chapitre 2)) le module de cisaillement visqueux associé à la phase r . On remplace (6.1) dans l'équation (3.94) ce qui donne :

$$\dot{e}_k^{vp} = \frac{1}{2G_r^{vp}} \tau_k \quad (6.2)$$

Les équations constitutives du modèle NTFA seront exposées et synthétisées au paragraphe 6.1.2. A ce stade, nous avons supposé que les modes plastiques $\mu_{k=1,\dots,M}^k$ ont été identifiés. Nous allons donc dans le paragraphe suivant exposer la démarche employée pour les identifier.

6.1.1 Choix des modes plastiques - Transformation de Karhunen-Loève

Nous avons vu au paragraphe 3.5.4.3 chapitre 3 que la transformation de *Karhunen-Loève*, encore appelée décomposition orthogonale aux valeurs propres (Proper Orthogonal Decomposition : POD), est non seulement capable d'orthogonaliser les modes deux à deux mais également capable de sélectionner les modes où l'information est distribuée de façon optimale. Nous présentons donc ci-dessous cette méthode.

La transformée de *Karhunen-Loève* consiste à construire une matrice de corrélation à partir des données numériques (ou expérimentales) et à en extraire les vecteurs propres et les valeurs propres afin d'obtenir une nouvelle base de vecteurs appelés modes. Afin d'améliorer les modes plastiques utilisés dans la méthode NTFA, on détermine numériquement $M_T(r)$ champs de déformations viscoplastiques normalisés pour chaque phase r du composite, déterminés à différents instants de déformation macroscopique en résolvant le problème local complet sur le VER. En pratique, le VER est soumis à

des chemins de chargement donnés (par exemple en 3D et pour le comportement local étudié dans ce chapitre, nous aurons six trajets de chargements élémentaires (Cf. paragraphe 6.2.2)). Les champs de déformations viscoplastiques sont extraits régulièrement durant le chargement.

Soit $\underline{\underline{\theta}}^k(\underline{x}), k = 1, \dots, M_T(r)$, ces $M_T(r)$ champs de déformations viscoplastiques normalisés. A partir de ces champs on calcule la matrice de corrélation, notée g :

$$g_{ij} = \left\langle \underline{\underline{\theta}}^i(\underline{x}) : \underline{\underline{\theta}}^j(\underline{x}) \right\rangle, \quad i, j = 1, \dots, M_T(r) \quad (6.3)$$

On peut donc calculer les vecteurs propres \underline{v}^k et les valeurs propres λ_k avec $k = 1, \dots, M_T(r)$, et on a :

$$\sum_{j=1}^{M_T(r)} g_{ij} v_j^k = \lambda_k v_i^k, \quad i, k = 1, \dots, M_T(r) \quad (6.4)$$

A partir de ces vecteurs propres, on construit les vecteurs de la nouvelle base, les modes, qu'on appelle dans la NTFA les modes plastiques $\underline{\underline{\mu}}^k(\underline{x}), k = 1, \dots, M_T(r)$:

$$\underline{\underline{\mu}}^k(\underline{x}) = \sum_{l=1}^{M_T(r)} v_l^k \underline{\underline{\theta}}^l(\underline{x}) \quad (6.5)$$

Une des propriétés majeures de la transformation de *Karhunen-Loève* est la totale décorrélation des nouvelles données. Il est donc facile de vérifier que les nouveaux modes $\underline{\underline{\mu}}^k$ sont orthogonaux. Pour le démontrer, on calcule d'abord la moyenne du produit doublement contracté d'un mode plastique $\underline{\underline{\mu}}^k$ avec un champ de déformation anélastique $\underline{\underline{\theta}}^l$:

$$\left\langle \underline{\underline{\mu}}^k : \underline{\underline{\theta}}^l \right\rangle = \sum_i v_i^k \left\langle \underline{\underline{\theta}}^i : \underline{\underline{\theta}}^l \right\rangle = \sum_i g_{il} v_i^k = \lambda_k v_l^k \quad (6.6)$$

Ensuite, on calcule le produit de deux modes :

$$\left\langle \underline{\underline{\mu}}^k : \underline{\underline{\mu}}^r \right\rangle = \sum_l v_l^r \left\langle \underline{\underline{\mu}}^k : \underline{\underline{\theta}}^l \right\rangle = \lambda_k \sum_l v_l^k v_l^r = \begin{cases} \lambda_k & \text{si } k = r \\ 0 & \text{si } k \neq r \end{cases} \quad (6.7)$$

On a donc trouvé ce qu'il fallait démontrer. Un autre intérêt de la transformée de *Karhunen-Loève* réside dans le fait que la magnitude d'une valeur propre correspond à la quantité d'information contenue dans le vecteur propre associé. En d'autres termes plus le rapport $\lambda_l / \sum_{k=1}^{M_T(r)} \lambda_k$ est proche de 1, plus le vecteur propre \underline{v}_l associé à λ_l contient d'informations issues des données initiales (dans notre cas, les champs de déformations viscoplastiques $\underline{\underline{\theta}}^k(\underline{x}), k = 1, \dots, M_T(r)$). En supposant que les valeurs propres sont ordonnées de manière décroissante $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_{M_T(r)}$ et en prenant en compte la propriété précédente, seuls les $M(r)$ premiers modes correspondant aux plus grandes valeurs propres et vérifiant le critère (6.8) peuvent être considérés :

$$\sum_{k=1}^{M(r)} \lambda_k / \sum_{k=1}^{M_T(r)} \lambda_k \geq \alpha \quad (6.8)$$

La valeur du seuil α est laissé au choix de l'utilisateur et dépend de la précision désirée. La méthode de *Karhunen-Loève*, mise au point dans la thèse de *Rousette* (Cf. [ROUSETTE, 2005]), permet donc de rendre les modes orthogonaux et de sélectionner les modes prépondérants, ce qui est en adéquation avec le développement d'un «modèle réduit» (un nombre faible de variables internes). On remarque que seuls les $M(r)$ premiers modes correspondant aux plus grandes valeurs propres et vérifiant le critère (6.8) peuvent être considérés.

6.1.2 Rappel des équations du modèle NTFA pour la visco-élasticité linéaire incompressible

$$\left\{ \begin{array}{l} \tau_k = 2G^r(e_k - e_k^{vp}) , \\ \dot{e}_k^{vp} = \frac{1}{2G_r^{vp}}\tau_k , \quad \varepsilon_k^{vp} = e_k^{vp} \langle \underline{\underline{\mu}}^k : \underline{\underline{\mu}}^k \rangle^{-1} , \\ e_k = \underline{\underline{a}}_k : \underline{\underline{E}} + \sum_{l=1}^M D_{kl} \varepsilon_l^{vp} , \\ \underline{\underline{\Sigma}} = \underline{\underline{\tilde{C}}} : \underline{\underline{E}} + \sum_{k=1}^M \underline{\underline{\rho}}^k \varepsilon_k^{vp} . \end{array} \right. \quad (6.9)$$

La solution de ce problème est obtenue en résolvant le **système différentiel en τ_k couplé d'ordre 1 résolu le long d'un trajet imposé** :

$$\dot{\tau}_k = 2G^r(\dot{e}_k - \dot{e}_k^{vp}) \quad (6.10)$$

6.1.3 Conclusion

Dans ce paragraphe nous venons de voir succinctement **la théorie et les équations constitutives du modèle NTFA pour un comportement local des constituants : visco-élastique linéaire incompressible**. Nous avons également vu **la démarche que nous allons employer pour identifier les modes plastiques**.

A partir de ces équations, nous allons consacrer le paragraphe suivant à la mise en oeuvre du modèle NTFA, ainsi qu'au détail du calcul des modes plastiques en 3D.

6.2 Mise en oeuvre du modèle NTFA

6.2.1 VER et propriétés matériaux

Le Volume Élémentaire Représentatif est donc celui retenu en fin de partie 2 :

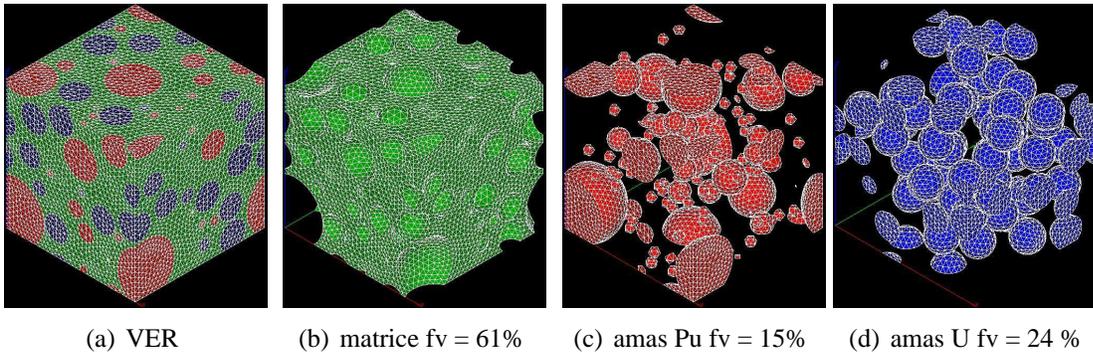


FIG. 6.1: VER «polydispersés» triphasés Maillage périodique en 3D - Tétraèdres à 4 noeuds

Les propriétés matériaux utilisées pour l'identification des modes plastiques ainsi que le calcul des tenseurs d'influence sont les suivantes :

VER Triphasé	E (GPa)	ν (-)	G_r^{vp} (GPa.s)
Amas Pu	200	0.3	21.43
Matrice	200	0.3	52.94
Amas U	200	0.3	158.83

TAB. 6.1: Propriétés inclusions Pu, U et de la matrice

On constate donc que les inclusions Pu (phase rouge) fluent environ 2.5 fois plus vite que la matrice (phase verte), tandis que les inclusions U (phase bleue) fluent trois fois moins vite. Ces contrastes sont représentatifs des *MOX* ADU triphasés (Rappel : ce sont les microstructures actuellement utilisées en réacteur). Il existe différentes étapes pour mettre en oeuvre l'analyse par champs de transformation non uniformes :

1. La première étape consiste à calculer les modes plastiques, les tenseurs de localisation des déformations élastiques (cas des propriétés élastiques hétérogènes) et les facteurs d'influence.
2. La deuxième étape est l'intégration de la loi de comportement. Pour le détail de cette étape nous renvoyons le lecteur à [MICHEL and SUQUET, 2004].

6.2.2 Calcul des modes plastiques en 3D

Pour calculer les modes plastiques, on applique la méthode présentée au paragraphe 6.1.1 et les paramètres matériaux définis au paragraphe 6.2.1. En pratique, il existe 3 grandes étapes :

1. La première étape consiste à calculer les données numériques indispensables à la détermination des modes et à l'application de la transformée de *Karhunen-Loève*. Le choix de ces données est très important puisque ce choix dépend de la pertinence des résultats de la méthode NTFA. Notre choix s'est porté sur les champs de déformations viscoplastiques **dans chaque phase**, pour **différentes valeurs de $\underline{\underline{E}} : \underline{\underline{\Sigma}}_0^k$** , et pour **plusieurs directions de contraintes $\underline{\underline{\Sigma}}_0^k$** . Ces champs sont donc déterminés numériquement en simulant la réponse du composite le long de trajets de chargement radiaux dans l'espace des contraintes macroscopiques. Dans notre étude, ces champs de déformations viscoplastiques, nommés $\underline{\underline{\theta}}^k$ (Important : pour chaque phase, ce champ s'applique sur tout le VER mais à des zéro en dehors de la phase considérée), sont calculés jusqu'à $\underline{\underline{E}} : \underline{\underline{\Sigma}}_0^k = 10\%$. De plus, la vitesse de déformation imposée $\underline{\underline{\dot{E}}} : \underline{\underline{\Sigma}}_0^k$ est fixée à $10^{-2} s^{-1}$. En 3D et pour le comportement modélisé ici, 6 directions de contraintes $\underline{\underline{\Sigma}}_0^k$ différentes ont été choisies : 3 tractions uniaxiales (k=1 direction 11, k=4 direction 22, et k=6 direction 33) et 3 cisaillements purs (k=2 direction 12, k=3 direction 13 et k=5 direction 23) :

$$\underline{\underline{\Sigma}}_0^k = \underline{e}_i \otimes_s \underline{e}_j \text{ avec } k = 1, \dots, 6, \quad i = 1, \dots, 3 \text{ et } j = 1, \dots, 3, \quad (6.11)$$

Les champs $\underline{\underline{\theta}}^k$ sont normalisés via $\langle \theta_{eq}^k \rangle$ au sens de *von Mises*. Dans notre cas, les champs ont été calculés toutes les 0.4 secondes. Au final, nous avons donc $M_T(r)$ champs (25 dans le cadre de cette étude) par trajet de chargement et par phase r .

2. La deuxième étape impose (Cf. paragraphe 6.1.1) à ces champs candidats pour la méthode NTFA d'être orthogonaux deux à deux par la transformation de *Karhunen-Loève*, mise en oeuvre dans [ROUSETTE, 2005], encore appelée décomposition orthogonale aux valeurs propres (Proper Orthogonal Decomposition : POD). Pour cela, on réalise un changement de base afin d'obtenir de nouveaux modes où l'information contenue est distribuée de façon optimale. Nous rappelons au lecteur (Cf. paragraphe 6.1.1) que la transformée de *Karhunen-Loève* consiste à construire, par trajet de chargement et par phase, une matrice de corrélation $g_{ij} = \langle \underline{\underline{\theta}}^i(\underline{x}) : \underline{\underline{\theta}}^j(\underline{x}) \rangle_{i,j=1,\dots,M_T(r)}$ à partir des données numériques et à en extraire les vecteurs propres \underline{v}^k et les valeurs propres λ_k afin d'obtenir une nouvelle base de vecteurs appelés modes. A partir de ces vecteurs propres, on construit les vecteurs de la nouvelle base, qu'on appelle dans la NTFA les modes plastiques $\underline{\underline{\mu}}^k(\underline{x})$ ($k=1,\dots,M_T(r)$) :

$$\underline{\underline{\mu}}^k(\underline{x}) = \sum_{l=1}^{M_T(r)} v_l^k \underline{\underline{\theta}}^l(\underline{x}) . \quad (6.12)$$

3. La troisième étape réside dans l'autre intérêt de la transformée de *Karhunen-Loève* à savoir le fait que la magnitude d'une valeur propre correspond à la quantité d'information contenue dans le vecteur propre associé. En supposant que les valeurs propres sont ordonnées de manière décroissante et en prenant en compte la propriété précédente, seuls les $M(r)$ premiers modes correspondant aux plus grandes valeurs propres et vérifiant le critère $(\sum_{k=1}^{M(r)} \lambda_k) / (\sum_{k=1}^{M_T(r)} \lambda_k) \geq \alpha$ peuvent être considérés ($\alpha = 0.9999$). La méthode permet donc de rendre les modes orthogonaux et de sélectionner les modes prépondérants, ce qui est en adéquation avec le développement d'un «modèle réduit» (un nombre faible de variables internes).

NB : par cette méthode, l'orthogonalité des modes à support dans une phase r et pour un même trajet de chargement $\underline{\underline{\Sigma}}_0^k$ est assurée. Par contre, pour assurer l'orthogonalité des modes plastiques à support dans une phase r mais entre les différents trajets chargements $\underline{\underline{\Sigma}}_0^k$ ($k = 1, \dots, 6$), nous sommes contraints de reconstruire une matrice de corrélation avec l'ensemble des modes plastiques sélectionnés une première fois par la méthode de *Karhunen-Loève* et de refaire la méthode de *Karhunen-Loève*.

L'ensemble de ces calculs ont été réalisés à l'aide du code de calcul aux éléments finis Cast3m (Cf. [<http://www.cast3m.cea.fr/>]). Pour illustrer ces propos, les figures 6.2, 6.3 et 6.4 montrent les normes équivalentes des modes $\underline{\underline{\mu}}_{eq}^1(\underline{x})$, identifiés par phase et pour le premier trajet de chargement élémentaire, à savoir $\underline{\underline{\Sigma}}_0^1$ (traction uniaxiale suivant la direction 11).

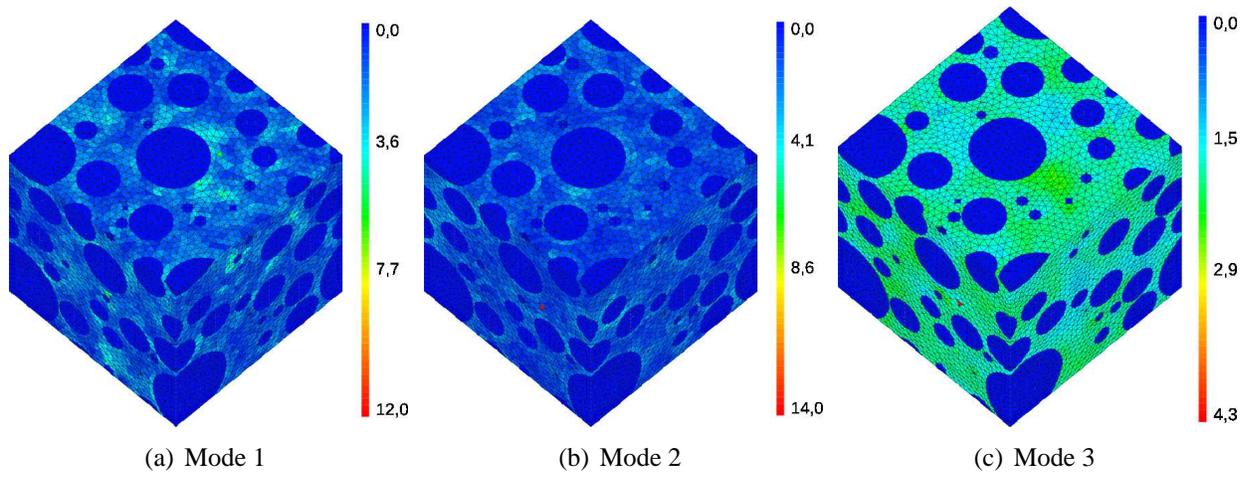


FIG. 6.2: Matrice - Norme équivalente des modes plastiques pour le chargement $\underline{\Sigma}_0^1$

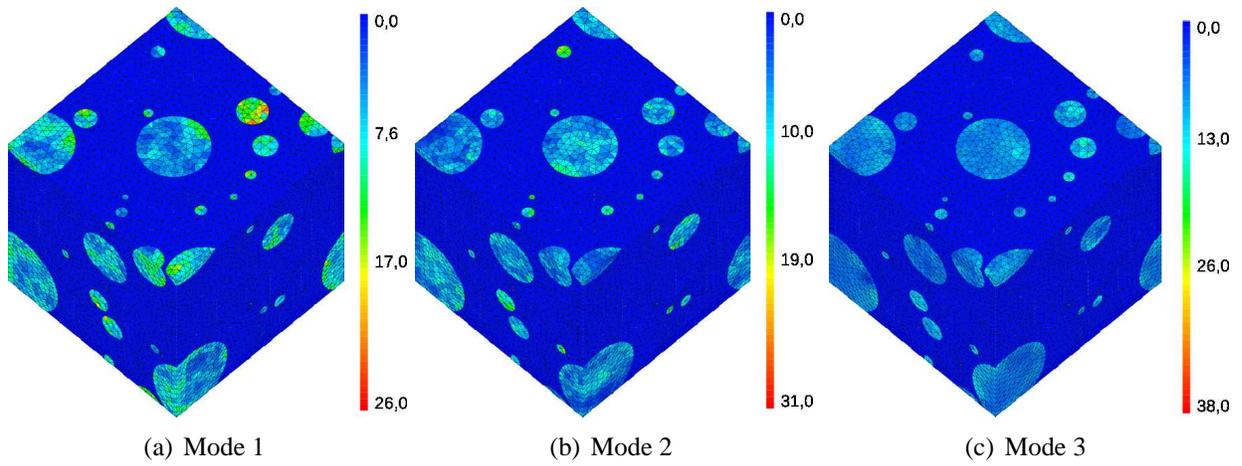


FIG. 6.3: Amas Pu - Norme équivalente des modes plastiques pour le chargement $\underline{\Sigma}_0^1$

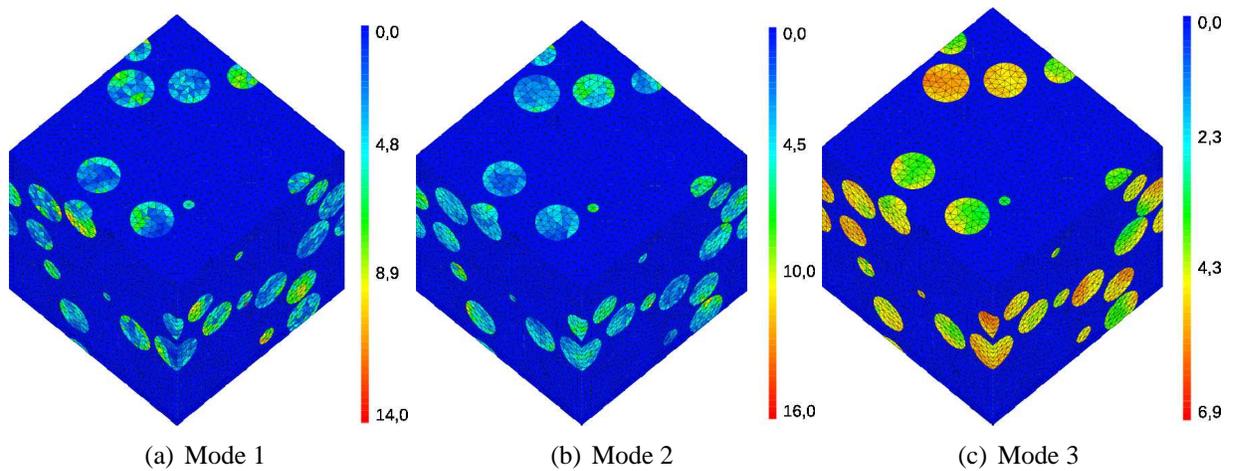


FIG. 6.4: Amas U - Norme équivalente des modes plastiques pour le chargement $\underline{\Sigma}_0^1$

Pour ce trajet de chargement $\underline{\underline{\Sigma}}_0^1$, nous constatons que trois modes par phase ont été sélectionnés via la méthode de *Karhunen-Loève*. La figure 6.5 illustre ces propos. Nous rappelons au lecteur que le critère α a été fixé à 1.10^{-4} . Pour l'ensemble des trajets de chargements (6 au total), la méthode de *Karhunen-Loève* nous a donc sélectionné 54 modes plastiques dont 18 modes dans la matrice, 18 dans les amas Pu et 18 dans les amas U. Ces modes sont bien orthogonaux entre eux. **Notre modèle NTFA sera donc constitué de 54 variables internes ε_k^{vp} ce qui est cohérent avec l'objectif de construire un modèle réduit.**

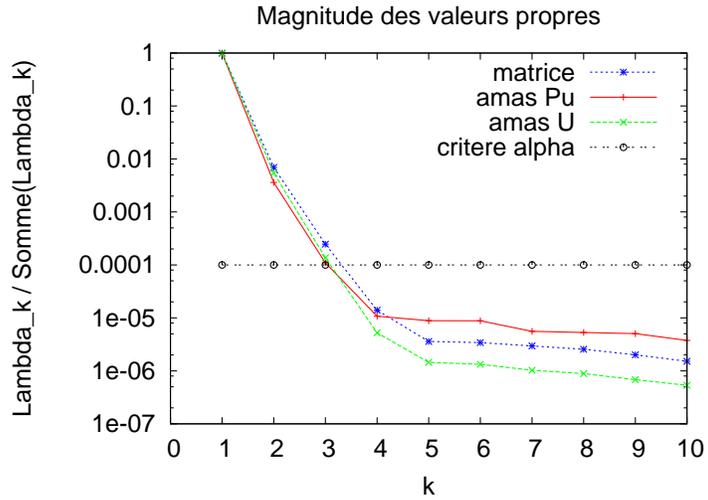


FIG. 6.5: Chargement $\underline{\underline{\Sigma}}_0^1$ - VER 3D

Nous rappelons au lecteur qu'au départ, c'est à dire avant la transformée de *Karhunen-Loève*, nous avons 25 champs $\underline{\underline{\theta}}^k$ par phase et par trajet de chargement. Soit un modèle à 450 variables internes. Nous étions donc très loin d'un modèle réduit. D'autre part, ce modèle, en l'état, était inexploitable car les champs $\underline{\underline{\theta}}^k$ n'étaient pas orthogonaux deux à deux. Les modes plastiques de notre modèle NTFA étant évalués, nous devons maintenant calculer l'ensemble des paramètres indispensables à celui-ci. C'est donc l'objet du paragraphe suivant.

6.2.3 Calculs des paramètres de la NTFA

Avec l'approximation 3.87, on a vu que :

$$\underline{\underline{\varepsilon}}(x) = \underline{\underline{A}}(x) : \underline{\underline{E}} + \sum_{l=1}^M (\underline{\underline{D}} * \underline{\underline{\mu}}^l)(x) : \varepsilon_l^{vp} \quad (6.13)$$

Dans cette expression, plusieurs paramètres doivent être déterminés pour pouvoir ensuite intégrer le modèle NTFA. La première étape consiste à évaluer le tenseur de localisation des déformations élastiques $\underline{\underline{A}}(x)$.

1^{ère} étape : calcul du tenseur de localisation des déformations élastiques :

Dans notre cas, nous avons supposé que les propriétés élastiques étaient homogènes, nous avons donc $\underline{\underline{A}}(x) = \underline{\underline{I}}$ avec $\underline{\underline{I}}$ le tenseur identité. Néanmoins, pour les personnes qui souhaiteraient utiliser des propriétés élastiques hétérogènes, nous illustrons ci-dessous la démarche pour évaluer ce tenseur de localisation. Celui-ci est obtenu en résolvant, par exemple par éléments finis, successivement six

problèmes d'élasticité linéaire 6.14 sur le VER retenu (Cf. figure 6.1) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{div} \left(\underline{\underline{\underline{\sigma}}}(x) \right) = 0 \ , \\ \underline{\underline{\underline{\sigma}}}(x) = \underline{\underline{\underline{C}}}(x) : \underline{\underline{\underline{\varepsilon}}}(x) \ , \\ \left\langle \underline{\underline{\underline{\varepsilon}}} \right\rangle_V = \underline{\underline{\underline{E}}} \ . \end{array} \right. \quad (6.14)$$

où $\underline{\underline{\underline{E}}} = \underline{\underline{\underline{i}}}^{(ij)}$ avec $\underline{\underline{\underline{i}}}^{(ij)} = \frac{1}{2} (\delta_{ik}\delta_{jh} + \delta_{ih}\delta_{jk})$ (δ le symbole de *Kronecker*), et des conditions aux limites périodiques sur le VER. Soit $\underline{\underline{\underline{u}}}^{(ij)}$ et $\underline{\underline{\underline{\sigma}}}^{(ij)}$ le champ de déplacements et le champ de contraintes solutions du problème 6.14 avec $\underline{\underline{\underline{E}}} = \underline{\underline{\underline{i}}}^{(ij)}$. Le tenseur de localisation des déformations élastiques $\underline{\underline{\underline{A}}}$ est obtenu classiquement par :

$$A_{ijkl}(x) = \varepsilon_{ij}(u^{(kl)}(x)) \quad (6.15)$$

On obtient également le tenseur de rigidité effectif par la relation suivante $\underline{\underline{\underline{\tilde{C}}}} = \left\langle \underline{\underline{\underline{C}}} : \underline{\underline{\underline{A}}} \right\rangle$. Connaissant le tenseur de localisation des déformations élastiques $\underline{\underline{\underline{A}}}$, on peut donc évaluer le tenseur de localisation des déformations réduites en appliquant la relation suivante $\underline{\underline{\underline{a}}}_k = \left\langle \underline{\underline{\underline{\mu}}}^k : \underline{\underline{\underline{A}}} \right\rangle$. Dans notre cas, élasticité homogène, nous avons donc $\underline{\underline{\underline{\tilde{C}}}} = \underline{\underline{\underline{C}}}$ et $\underline{\underline{\underline{a}}}_k = \left\langle \underline{\underline{\underline{\mu}}}^k \right\rangle$. La deuxième étape consiste à évaluer les tenseurs ainsi que les facteurs d'influence du modèle NTFA.

2^{ème} étape : calcul des tenseurs d'influence et des facteurs d'influence :

Pour les obtenir, on doit résoudre, par exemple par éléments finis (dans notre cas nous avons utilisé le code Cast3m (Cf. [<http://www.cast3m.cea.fr>]]), les M problèmes d'élasticité linéaire 6.16 (M étant le nombre de modes, soit ici $M = 54$) sur le VER retenu (Cf. figure 6.1) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{div} \left(\underline{\underline{\underline{\sigma}}}(x) \right) = 0 \ , \\ \underline{\underline{\underline{\sigma}}}(x) = \underline{\underline{\underline{C}}}(x) : \left(\underline{\underline{\underline{\varepsilon}}}(x) - \underline{\underline{\underline{\mu}}}(x) \right) \ , \\ \left\langle \underline{\underline{\underline{\varepsilon}}} \right\rangle = 0 \ . \end{array} \right. \quad (6.16)$$

avec $\underline{\underline{\underline{\mu}}} = \underline{\underline{\underline{\mu}}}^k$, où $k = 1, \dots, M(r)$. Le tenseur d'influence $\underline{\underline{\underline{D}}} * \underline{\underline{\underline{\mu}}}^k(x)$ correspond donc au champ de déformations solution du $k^{\text{ième}}$ problème de 6.16. On peut donc ensuite évaluer les facteurs d'influence D_{kl} par la relation suivante $D_{kl} = \left\langle \underline{\underline{\underline{\mu}}}^k : \underline{\underline{\underline{D}}} * \underline{\underline{\underline{\mu}}}^l \right\rangle$, ainsi que les coefficients $\underline{\underline{\underline{\rho}}}^k$ par la relation suivante $\underline{\underline{\underline{\rho}}}^k = \left(\left\langle \underline{\underline{\underline{C}}} : \underline{\underline{\underline{D}}} * \underline{\underline{\underline{\mu}}}^k \right\rangle - \left\langle \underline{\underline{\underline{C}}} : \underline{\underline{\underline{\mu}}}^k \right\rangle \right)$.

Les modes plastiques étant connus ainsi que les différents paramètres de notre modèle NTFA, la dernière étape est donc l'intégration de notre loi de comportement (modèle NTFA). Pour le détail de cette étape nous renvoyons le lecteur à [MICHEL and SUQUET, 2004].

6.2.4 Conclusion

Nous avons présenté dans ce paragraphe la **mise en oeuvre du modèle NTFA pour un composite particulaire triphasé et tridimensionnel (3D) ayant un comportement local visco-élastique linéaire incompressible**. La **première étape importante** de mise en oeuvre du modèle est la **détermination des modes plastiques**. En 3D et pour le comportement local étudié ici, **6 trajets de chargements ont été considérés pour identifier ces modes plastiques**. La transformée de *Karhunen-Loève* nous a permis de sélectionner les modes prépondérants et de les orthogonaliser deux à deux : **54 modes ont été retenus dont 18 par phase**. L'objectif d'un modèle réduit (à faible nombre de variables internes) a donc été atteint. La **deuxième étape** est le **calcul des paramètres du modèle NTFA** : les tenseurs de localisation réduits, d'influence, les facteurs d'influence ainsi que les tenseurs entrant dans l'équation donnant la contrainte macroscopique. La **troisième étape importante** est **l'intégration des relations constitutives du modèle** (Cf. [MICHEL and SUQUET, 2004]).

Cette mise en oeuvre va nous permettre, dans le paragraphe suivant, de présenter les prédictions effectives et locales de ce modèle par rapport à des calculs de référence.

6.3 Résultats - essais non vieillissants

Nous allons donc tout au long de ce paragraphe comparer la prédiction du modèle NTFA (modèle développé dans les paragraphes précédents) par rapport à des calculs de référence que nous avons réalisés avec le code aux éléments finis Cast3m (Cf. [<http://www.cast3m.cea.fr>,]). Les calculs de référence seront notés FEM tandis que les calculs réalisés avec le modèle NTFA seront notés NTFA. L'ensemble des calculs, présentés ci-dessous, utilisent les propriétés matériaux (Cf. *tableau 6.1*) qui ont servi à identifier les modes et le comportement local présenté dans les paragraphes précédents.

6.3.1 Comportement effectif

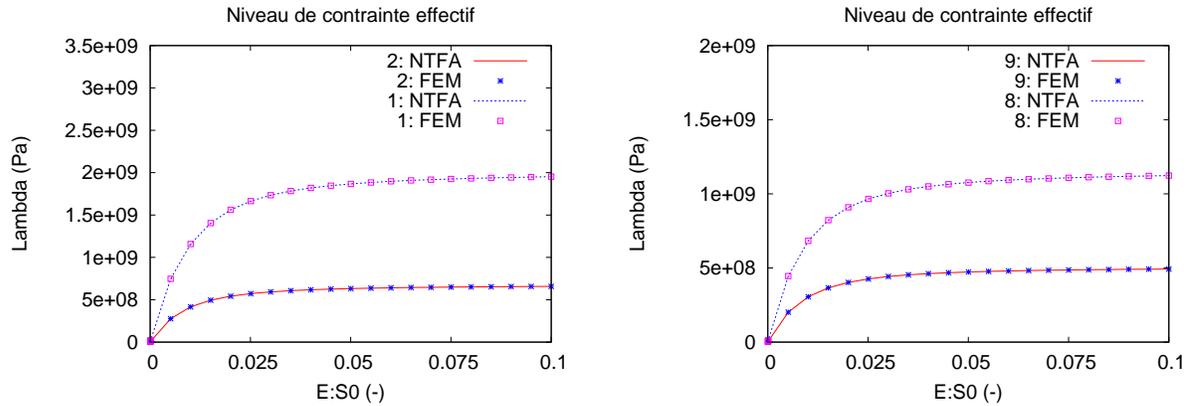
6.3.1.1 Essais d'«écrouissage»

Les réponses effectives (FEM et NTFA) sont déterminés numériquement en simulant la réponse du composite (Cf. *figure 6.1*) le long de trajets de chargement radiaux dans l'espace des contraintes macroscopiques $\underline{\underline{\Sigma}}(t) = \lambda(t)\underline{\underline{\Sigma}}_0^k$ (piloteage dit à direction de contrainte et à vitesse de déformation imposées : voir chapitre 3 paragraphe 3.8.3 de la référence [BORNERT et al., 2001]).

Nos essais k sont réalisés jusqu'à $\underline{\underline{E}} : \underline{\underline{\Sigma}}_0^k = 10\%$ avec $\underline{\underline{E}} : \underline{\underline{\Sigma}}_0^k$ fixée à $10^{-2}s^{-1}$ (vitesse qui a servi à identifier les modes). Nous avons évalué le niveau de contrainte macroscopique $\lambda(t)$ pour quatre cas de trajet de chargement $\underline{\underline{\Sigma}}(t) = \lambda(t)\underline{\underline{\Sigma}}_0^{(k)}$:

1. $\underline{\underline{\Sigma}}_0^{(1)}$ correspondant au chargement de traction uniaxiale qui a servi à identifier les modes.
2. $\underline{\underline{\Sigma}}_0^{(2)}$ correspondant au chargement en cisaillement qui a servi à identifier les modes.
3. $\underline{\underline{\Sigma}}_0^{(8)}$ correspondant au chargement suivant $\underline{\underline{\Sigma}}_0^{(8)} = \underline{\underline{\Sigma}}_0^{(1)} + \frac{1}{2}\underline{\underline{\Sigma}}_0^{(2)}$. Celui-ci n'a pas été utilisé dans l'identification des modes.
4. $\underline{\underline{\Sigma}}_0^{(9)}$ correspondant au chargement suivant $\underline{\underline{\Sigma}}_0^{(9)} = \underline{\underline{\Sigma}}_0^{(1)} + \underline{\underline{\Sigma}}_0^{(2)}$. Celui-ci n'a pas été utilisé dans l'identification des modes.

La figure 6.6(a) présente les prédictions macroscopiques du modèle NTFA par rapport aux éléments finis FEM, pour deux des six trajets de chargements élémentaires qui ont servi à identifier les modes, à savoir $\underline{\underline{\Sigma}}_0^1$, nommé 1 sur la figure 6.6(a), et $\underline{\underline{\Sigma}}_0^2$, nommé 2 sur la figure 6.6(a). Pour ces deux trajets, nous constatons une très bonne prédiction du modèle NTFA par rapport aux éléments finis. Cette conclusion n'est pas surprenante puisque il s'agit de trajets ayant servi à identifier les modes.



(a) Chargements pour l'identification des modes

- 1 : $S_0 = \underline{\underline{\Sigma}}_0^1$ traction uniaxiale 11

- 2 : $S_0 = \underline{\underline{\Sigma}}_0^2$ cisaillement pur 12

(b) Chargements hors identification des modes

- 8 : $S_0 = \underline{\underline{\Sigma}}_0^1 + \frac{1}{2}\underline{\underline{\Sigma}}_0^2$

- 9 : $S_0 = \underline{\underline{\Sigma}}_0^1 + \underline{\underline{\Sigma}}_0^2$

FIG. 6.6: Essai d'«écrouissage» $\underline{\underline{\dot{E}}} : \underline{\underline{\Sigma}}_0^k$ est fixée à $10^{-2}s^{-1}$

Néanmoins, sur la figure 6.6(b), nous présentons également les prédictions du modèle NTFA par rapport aux éléments finis FEM, pour les essais nommés 8 et 9. Nous rappelons que ces essais n'ont pas servi à identifier les modes. Pour ces deux essais, nous constatons également une très bonne prédiction du modèle NTFA. Du fait de la linéarité du problème ce résultat n'est pas très surprenant. Par contre, il est important de souligner que le calcul aux éléments finis nécessite un temps de calcul de 2 heures tandis que le modèle NTFA nécessite moins de 1 seconde.

L'ensemble de ces essais ont été réalisés avec une vitesse de déformation imposée de $10^{-2}s^{-1}$. Cette vitesse est celle qui a servi à identifier les modes. Nous avons donc voulu tester la prédiction de notre modèle NTFA si nous changions cette vitesse de déformation. Par conséquent, deux essais de traction uniaxiale $\underline{\underline{\Sigma}}_0^{(1)}$ ont été réalisés, pendant 10 secondes, avec $\underline{\underline{\dot{E}}} : \underline{\underline{\Sigma}}_0^k$ fixée à $10^{-1}s^{-1}$ et l'autre fixée à $5.10^{-2}s^{-1}$. Les résultats sont exposés sur la figure 6.7.

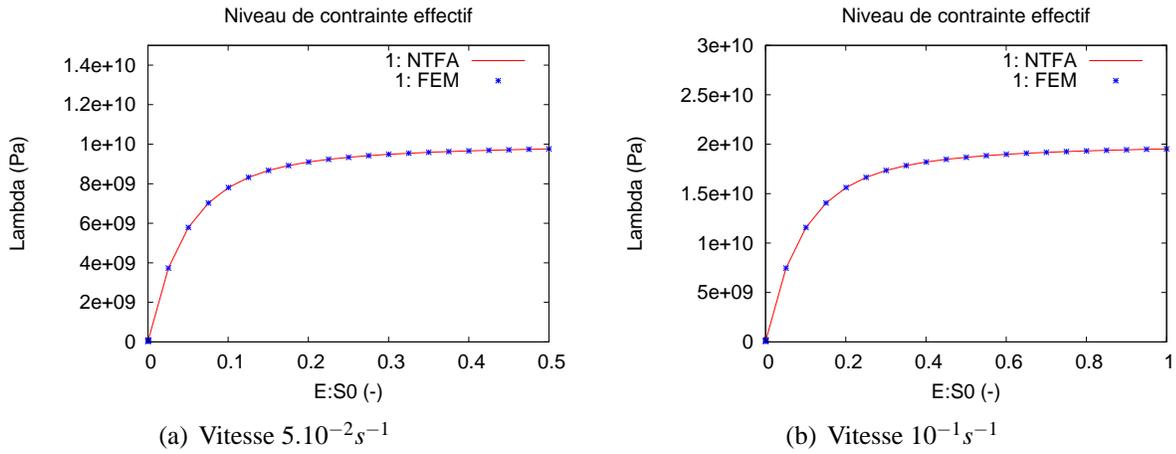


FIG. 6.7: Essai d'«écrouissage» - traction uniaxiale $\underline{\underline{\Sigma}}_0^{(1)}$

Quelle que soit la vitesse, nous constatons une bonne prédiction du modèle. Pour la loi de comportement utilisée, nous pouvons donc affirmer que la vitesse de déformation, ayant servi à identifier les modes, n'a pas d'impact sur la prédiction effective du modèle. Ces résultats sont cohérents avec [ROUSETTE, 2005]. Les modes de notre modèle ont été identifiés pour des essais dits d'«écrouissage». Par conséquent, nous avons également analysé la prédiction effective du modèle pour des essais de fluage et de relaxation. C'est donc l'objet du paragraphe suivant.

6.3.1.2 Essais de fluage et de relaxation

La figure 6.8(a) présente la prédiction macroscopique du modèle NTFA pour un essai de fluage à contrainte uniaxiale (direction 33 - $\Sigma_{33} = 100MPa$), tandis que la figure 6.8(b) présente la prédiction macroscopique du modèle pour un essai de relaxation uniaxiale (direction 33 - $E_{33} = 2\%$). Bien que les modes aient été identifiés pour des essais d'écrouissage, nous constatons toujours une très bonne prédiction effective du modèle NTFA.

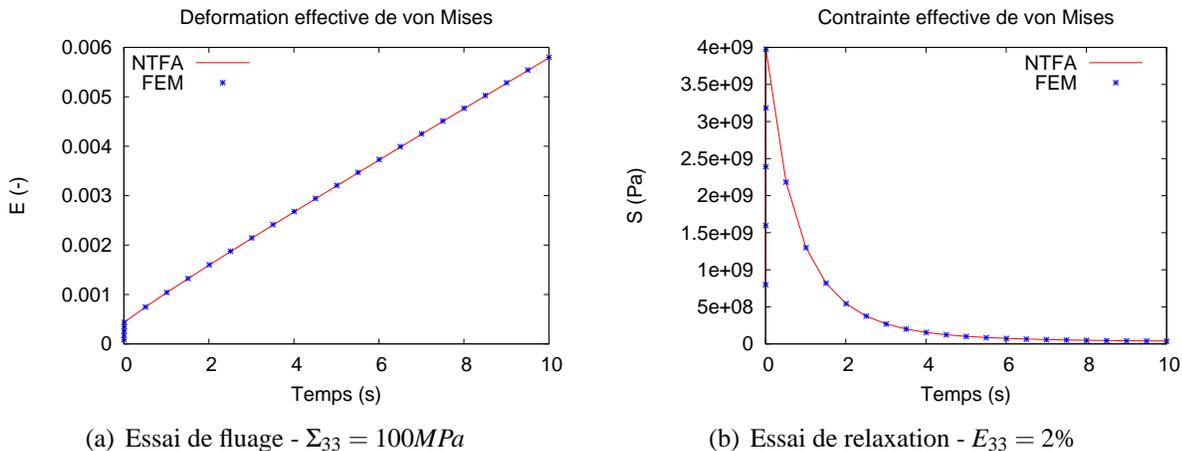


FIG. 6.8: Essais de fluage et de relaxation

Notre modèle NTFA a été identifié pour une microstructure donnée (Cf. figure 6.1). Il est donc à priori dépendant de celle-ci. Cette microstructure correspond à celle présentée au chapitre 5 paragraphe 5.2.1 figure 5.4(a) : nous l'appellerons tirage 1. Au chapitre 5 paragraphe 5.2.4 nous avons montré une quasi indépendance du comportement effectif, du premier moment et de l'écart type de la variable analysée, à la microstructure considérée (Rappel : huit tirages de microstructures (Cf. figure 5.4)). Nous avons donc voulu analyser, ci-dessous, la prédiction effective de notre modèle NTFA par rapport à ces sept autres tirages supplémentaires (tirages de 2 à 8) présentés au chapitre 5 paragraphe 5.2.1 figure 5.4.

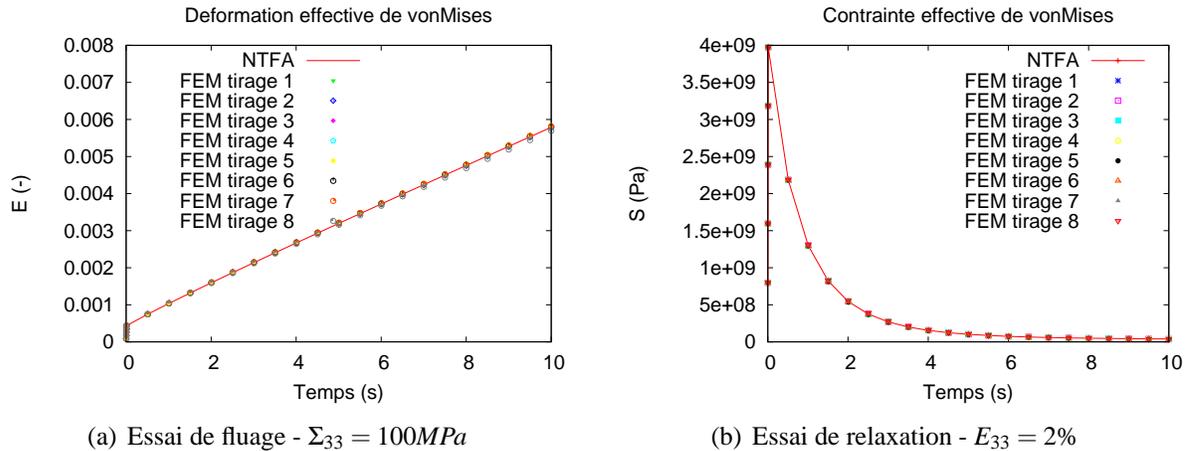


FIG. 6.9: Essais de fluage et de relaxation

Rappel : ces tirages (Cf. figure 5.4) respectent les mêmes conditions géométriques et morphologiques (fractions volumiques, nombre d'inclusions, fuseau diamétral des inclusions) que le tirage numéro 1, la seule différence réside dans le fait que les particules sont disposées différemment dans le VER et que le modèle NTFA n'a pas été identifié sur ces microstructures.

Pour réaliser cette analyse, les deux essais précédents, fluage et relaxation, ont été reconduits sur les 8 VER. La figure 6.9(a) présente la prédiction macroscopique du modèle NTFA pour l'essai de fluage à contrainte uniaxiale (direction 33 - $\Sigma_{33} = 100MPa$) par rapport aux 8 calculs de références aux éléments finis, tandis que la figure 6.9(b) présente la prédiction macroscopique du modèle pour l'essai de relaxation uniaxiale (direction 33 - $E_{33} = 2\%$). Tout d'abord, nous constatons que les réponses effectives des 8 VER, obtenues par éléments finis, sont très proches, aussi bien en fluage qu'en relaxation. En effet, l'écart par rapport à la valeur moyenne est inférieure à 0.1 %. Cela consolide donc les conclusions établies au chapitre 5 paragraphe 5.2.4 : la taille caractéristique de nos VER, $l = 150 \mu m$, est suffisamment importante pour respecter les conditions établies au chapitre 3 paragraphe 3.2.1. Ensuite, nous remarquons que la réponse effective du modèle NTFA s'inscrit parfaitement dans la moyenne des 8 réponses effectives obtenues par éléments finis. Par conséquent, pour le comportement étudié (visco-élasticité linéaire incompressible) et les contrastes entre les propriétés matériaux utilisés ici, nous pouvons donc affirmer que la réponse effective de notre modèle NTFA est indépendante de la microstructure sur laquelle il a été identifié.

6.3.1.3 Conclusion

Nous avons présenté dans ce paragraphe la prédiction effective de notre modèle NTFA par rapport à des calculs de référence (calculs réalisés par éléments finis : FEM). Tout d'abord, **pour des essais à vitesse de déformation et à direction de contrainte imposées (essais d'«écrouissage»)**, nous avons constaté une très bonne prédiction effective du modèle. Cette prédiction est excellente (erreur inférieure à 0.1 %) aussi bien pour des trajets de chargement qui ont servi ou qui n'ont pas servi à identifier les modes. Nous avons également démontré que la vitesse de déformation, ayant servi à identifier les modes, n'a pas ou peu d'impact sur la prédiction effective du modèle. Cette remarque est à prendre avec précaution car elle est a priori fortement dépendante de la loi de comportement locale utilisée. Ensuite, nous avons également démontré une prédiction effective excellente du modèle NTFA pour des essais de fluage et de relaxation, bien que les modes aient été identifiés sur des essais à vitesse de déformation et à direction de contrainte imposées. L'erreur étant toujours inférieure à 0.1 %. Nous avons aussi montré que la réponse effective de notre modèle NTFA était indépendante de la microstructure sur laquelle il avait été identifié, du moins pour le comportement étudié (visco-élasticité linéaire incompressible) et les contrastes entre les propriétés matériaux utilisés ici. Enfin, il est important de souligner que le calcul aux éléments finis nécessite un temps de calcul de 2 heures tandis que le modèle NTFA nécessite moins de 1 seconde, et ce pour le même degré de précision sur le comportement effectif.

La méthode NTFA est donc particulièrement attrayante pour sa rapidité d'exécution et sa qualité de prédiction du comportement effectif. Mais, la prédiction des comportements moyens par phase est elle aussi excellente ? Nous allons donc répondre à cette question dans le paragraphe suivant.

6.3.2 Comportement moyen par phase

6.3.2.1 Essais d'«écrouissage»

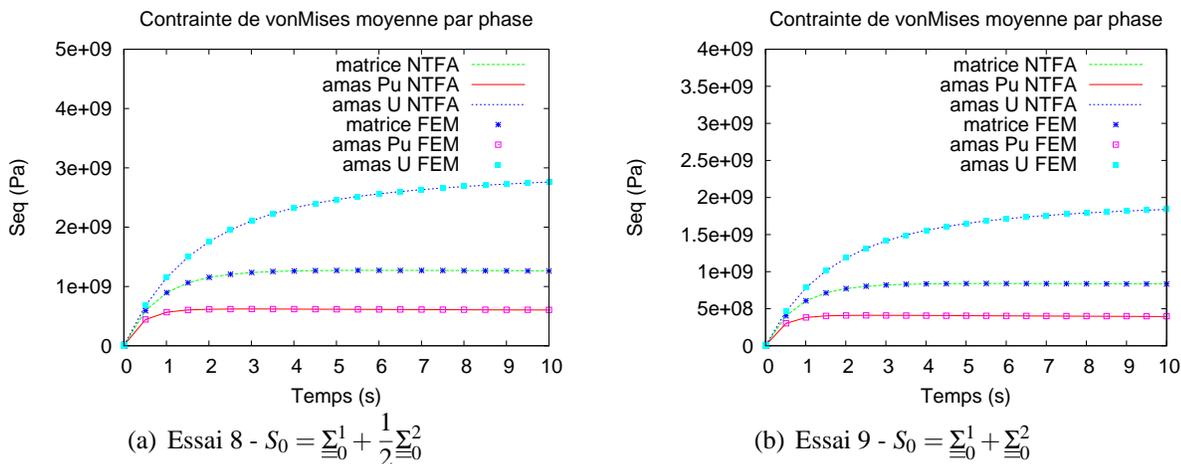


FIG. 6.10: Essai d'«écrouissage» $\underline{\underline{\dot{E}}} : \underline{\underline{\Sigma}}_0^k$ est fixée à $10^{-2}s^{-1}$

Sur la figure 6.10 nous comparons la prédiction de la contrainte équivalente (au sens de *von Mises*) moyenne par phase entre le modèle NTFA et les éléments finis (FEM). Les essais 8 et 9 étant les essais présentés au paragraphe 6.3.1.1. Pour ces deux essais, nous constatons également une très bonne prédiction des comportements moyens par phase. Nous avons également voulu tester la prédiction des comportements moyens par phase de notre modèle NTFA si nous changions la vitesse de déformation imposée. Par conséquent, nous avons repris les deux essais de traction uniaxiale $\underline{\underline{\Sigma}}_0^{(1)}$ qui ont été présentés au paragraphe 6.3.1.1. Les résultats sont exposés sur la figure 6.11.

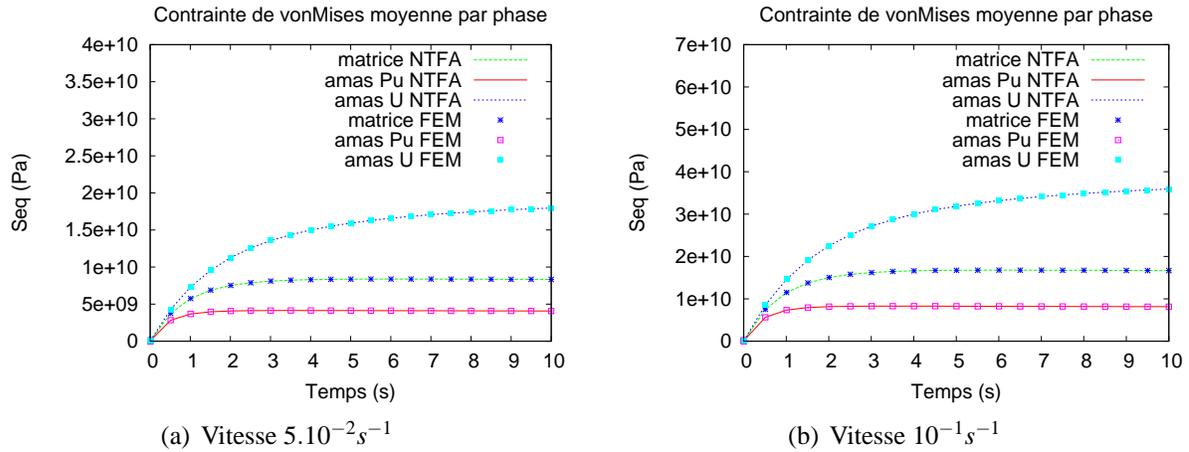


FIG. 6.11: Essai d'écrouissage - traction uniaxiale $\underline{\underline{\Sigma}}_0^{(1)}$

Quelle que soit la vitesse, nous constatons une très bonne prédiction des comportements moyens par phase. Nous avons également analysé la prédiction des comportements moyens par phase du modèle pour les essais de fluage et de relaxation exposés au paragraphe 6.3.1.2. C'est donc l'objet du paragraphe suivant.

6.3.2.2 Essais de fluage et de relaxation

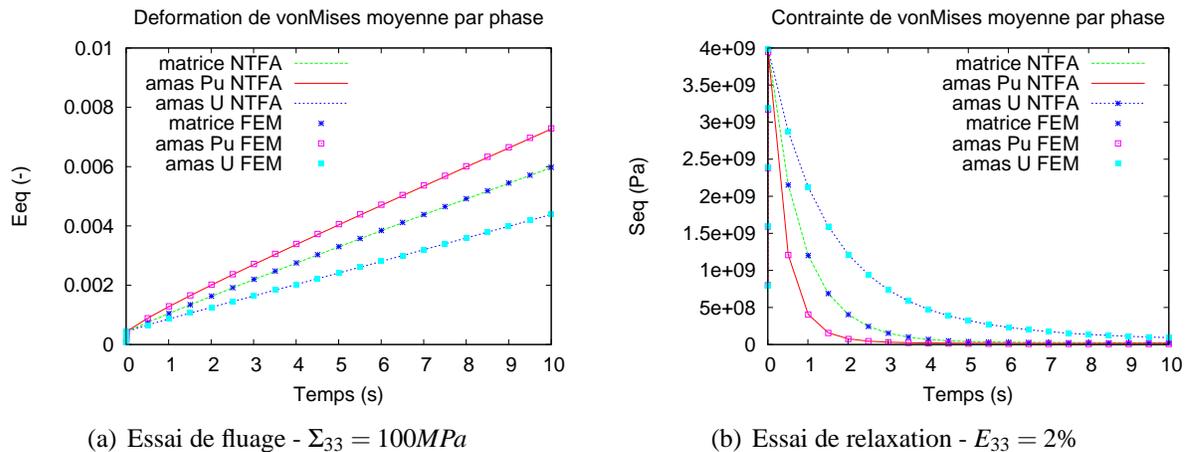


FIG. 6.12: Essais de fluage et de relaxation

La figure 6.12 présente la prédiction des comportements moyens par phase du modèle NTFA pour l'essai de fluage à contrainte uniaxiale (direction 33 - $\Sigma_{33} = 100MPa$) et l'essai de relaxation uniaxiale (direction 33 - $E_{33} = 2\%$). Bien que les modes aient été identifiés pour des essais d'écroutissage, nous constatons toujours une très bonne prédiction des comportements moyens par phase du modèle NTFA.

Comme au paragraphe 6.3.1.2, nous avons analysé, ci-dessous, la prédiction des comportements moyens par phase de notre modèle NTFA par rapport aux sept autres tirages supplémentaires (tirages de 2 à 8). Nous rappelons que le modèle NTFA a été identifié sur le tirage 1. La figure 6.13 présente la prédiction qualitative de la déformation équivalente moyenne par phase du modèle NTFA pour l'essai de fluage à contrainte uniaxiale (direction 33 - $\Sigma_{33} = 100MPa$) par rapport aux 8 calculs de références aux éléments finis, tandis que le tableau 6.2 présente quant à lui, à la fin de l'essai ($t=10s$), les premiers moments de la déformation équivalente de chaque tirage (FEM), la moyenne de ces huit premiers moments (FEM) et l'écart entre cette moyenne et le premier moment estimé par notre modèle NTFA (**NB** : les valeurs de ce tableau sont à multiplier par (10^{-03}) sauf pour la colonne indiquant l'erreur en pourcentage entre NTFA et FEM).

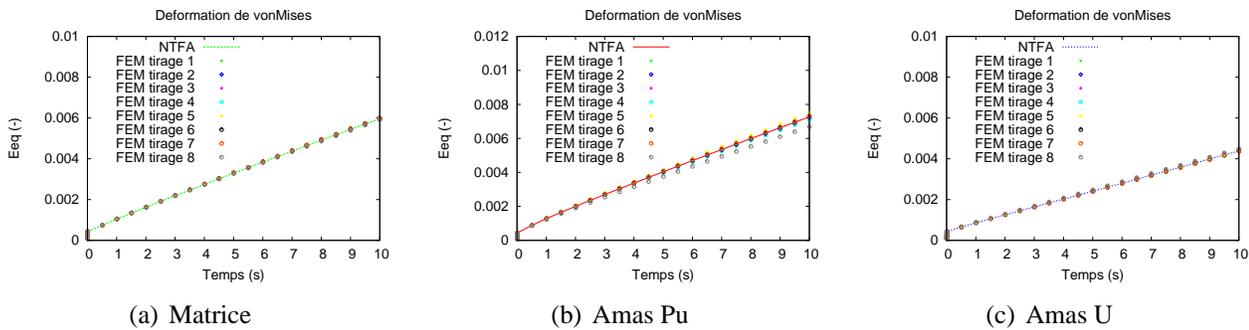


FIG. 6.13: Essais de fluage $\Sigma_{33} = 100MPa$

$\langle E \rangle_{eq}$	FEM (-)									NTFA (-)	err (%)
	1	2	3	4	5	6	7	8	moy		
matrice	5.98	5.94	5.95	5.97	6.03	5.99	5.99	5.91	5.97	5.97	+0.00
amas Pu	7.29	7.16	7.24	7.11	7.52	7.27	7.32	6.68	7.20	7.27	+0.97
amas U	4.39	4.44	4.42	4.40	4.33	4.37	4.38	4.49	4.40	4.39	-0.23

TAB. 6.2: 1er moment NTFA et FEM 8 tirages (moy=moyenne, err=erreur NTFA vs FEM)

Tout d'abord, nous remarquons sur les figures 6.13(a) et 6.13(c) que la déformation moyenne équivalente, obtenue par éléments finis, oscille très peu entre les 8 VER, que ce soit dans la phase matricielle ou dans la phase uranifère (amas U). En effet, quantitativement, l'écart à la moyenne est dans l'intervalle $[-1.1\% ; +1.1\%]$ dans la matrice et dans l'intervalle $[-1.6\% ; +2.1\%]$ dans la phase inclusionnaire amas U. Ces faibles écarts expliquent la raison pour laquelle le modèle NTFA prédit correctement la moyenne des déformations moyennes équivalentes des 8 tirages dans ces phases, bien que celui-ci ait été identifié sur le tirage 1. En effet, dans le tableau 6.2, on remarque que l'erreur sur la déformation moyenne équivalente entre le modèle NTFA et la réponse moyenne par éléments finis des 8 VER est inférieure à 0.23%. Dans la phase inclusionnaire amas Pu, nous constatons qualitativement (Cf. figure 6.13(b)) une oscillation plus importante de la déformation équivalente entre les réponses des

8 VER. Quantitativement, l'écart à la moyenne est dans l'intervalle [-7.2% ;4.4%]. Ces écarts plus importants pourraient s'expliquer par la présence de grosses particules et les positionnements différents de celles-ci d'un tirage à l'autre. Néanmoins, le modèle NTFA, identifié sur le tirage 1, prédit correctement la moyenne des déformations équivalentes des 8 tirages de cette phase. En effet, dans le tableau 6.2, on remarque que l'erreur sur le déformation moyenne équivalente entre le modèle NTFA et la réponse moyenne par éléments finis des 8 VER est égale à +0.97%. Pour cette phase aussi, la réponse du modèle NTFA s'inscrit parfaitement dans la moyenne des 8 VER. Par conséquent, pour le comportement étudié (visco-élasticité linéaire incompressible) et les contrastes entre les propriétés matériaux utilisés ici, nous pouvons donc affirmer que le comportement moyen (premier moment) par phase de notre modèle NTFA est également indépendant de la microstructure sur laquelle il a été identifié. Pour l'essai de relaxation uniaxiale (direction 33 - $E_{33} = 2\%$) des résultats similaires ont été observés. Ces observations consolident donc les conclusions établies au chapitre 5 paragraphe 5.2.4.

6.3.2.3 Conclusion

Nous avons présenté dans ce paragraphe la prédiction des comportements moyens par phase de notre modèle NTFA par rapport à des calculs de référence (calculs réalisés par élément finis : FEM). Tout d'abord, **pour des essais à vitesse de déformation et à direction de contrainte imposées (essais d'«écrouissage»), nous avons constaté une très bonne prédiction du modèle. Cette prédiction est excellente (erreur inférieure à 0.5 %) aussi bien pour des trajets de chargement qui ont servi ou qui n'ont pas servi à identifier les modes.** Nous avons également démontré que la vitesse de déformation, ayant servi à identifier les modes, n'a pas ou peu d'impact sur la prédiction du modèle. Comme pour le comportement effectif, cette remarque est à prendre avec beaucoup de précaution car elle est à priori fortement dépendante de la loi de comportement locale utilisée. Ensuite, **nous avons également démontré une prédiction excellente des comportements moyens par phase du modèle NTFA pour des essais de fluage et de relaxation, bien que les modes aient été identifiés sur des essais à vitesse de déformation et à direction de contrainte imposées. L'erreur étant toujours inférieure à 0.5 %. Nous avons aussi montré que le comportement moyen par phase de notre modèle NTFA était indépendant de la microstructure sur laquelle il avait été identifié.**

Non seulement la méthode NTFA est particulièrement attrayante pour sa rapidité d'exécution et sa qualité prédictive des comportements effectif et moyens par phase, mais elle est surtout très intéressante pour sa capacité à prédire également les champs locaux, contrairement à la plupart des méthodes d'homogénéisation analytiques ou semi-analytiques. Par conséquent, dans le paragraphe suivant, nous comparons les champs locaux estimés par la méthode NTFA à ceux estimés par la méthode des éléments finis (calculs de référence).

6.3.3 Champs locaux

6.3.3.1 Essais d'«écrouissage», fluage et relaxation

Sur les figures 6.14, 6.15, 6.16 nous comparons qualitativement la prédiction de la contrainte équivalente (au sens de *von Mises*) locale, par phase, entre le modèle NTFA et les éléments finis (FEM). Il s'agit de l'essai 8 présenté au paragraphe 6.3.1.1. Pour cet essai, à $t=10s$, nous constatons une bonne prédiction qualitative des champs locaux (contrainte équivalente). Le tableau 6.3 nous donne, dans chaque phase, l'écart type estimé avec le modèle NTFA et les éléments finis, ainsi que l'erreur

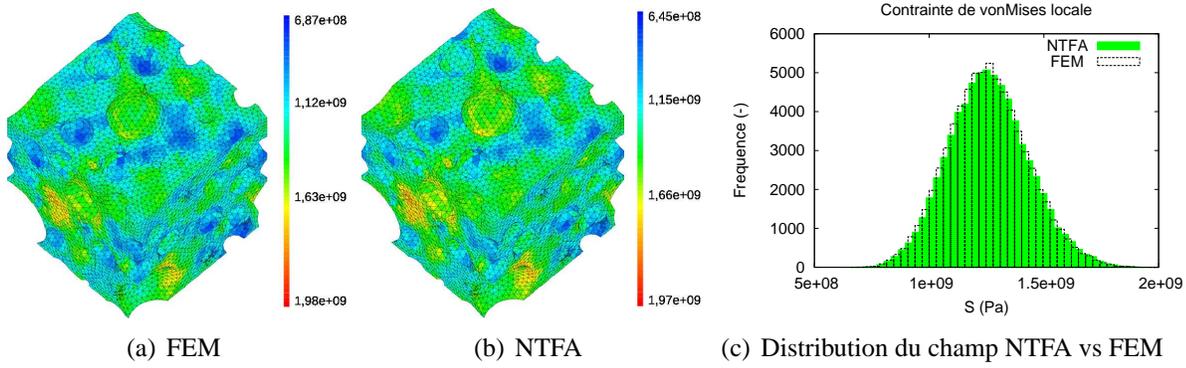


FIG. 6.14: $\sigma_{eq}(x)$ - Essai d'«écrouissage» $\underline{\underline{\dot{E}}} : \underline{\underline{\Sigma}}_0^k = 10^{-2} s^{-1}$ - Essai 8 t=10s $S_0 = \underline{\underline{\Sigma}}_0^1 + \frac{1}{2} \underline{\underline{\Sigma}}_0^2$ - Phase matrice

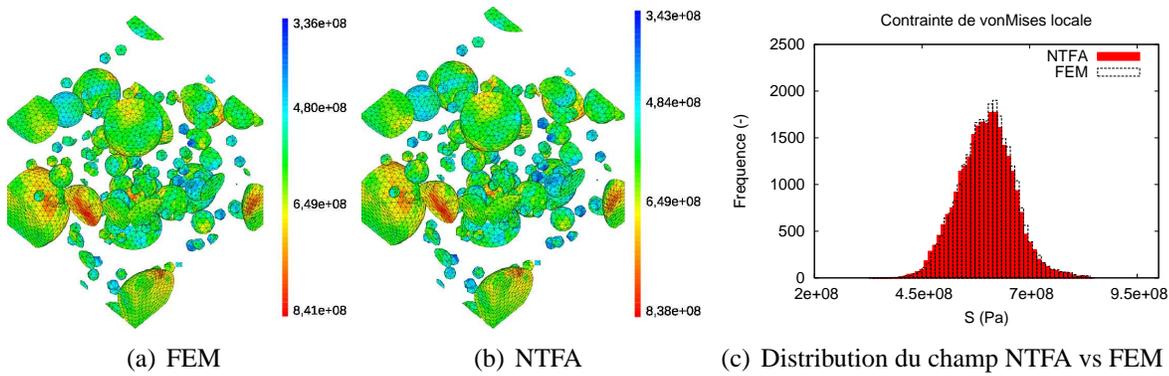


FIG. 6.15: $\sigma_{eq}(x)$ - Essai d'«écrouissage» $\underline{\underline{\dot{E}}} : \underline{\underline{\Sigma}}_0^k = 10^{-2} s^{-1}$ - Essai 8 t=10s $S_0 = \underline{\underline{\Sigma}}_0^1 + \frac{1}{2} \underline{\underline{\Sigma}}_0^2$ - Phase amas Pu

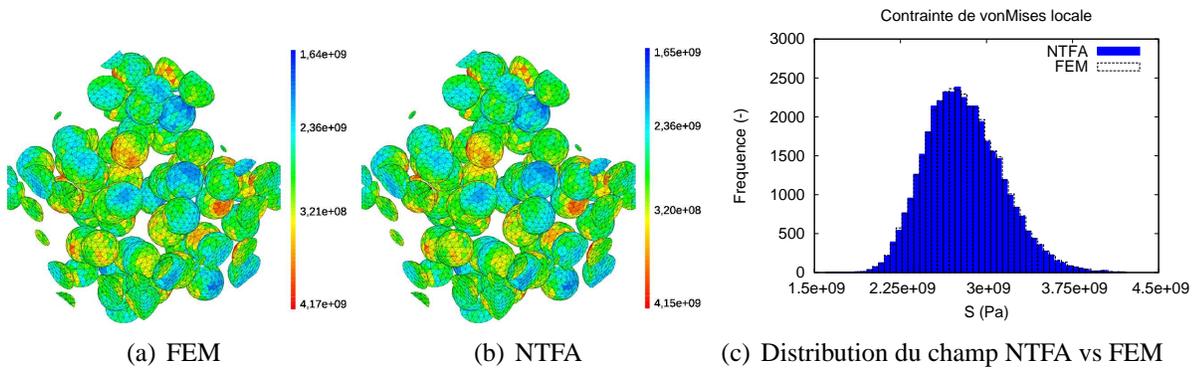


FIG. 6.16: $\sigma_{eq}(x)$ - Essai d'«écrouissage» $\underline{\underline{\dot{E}}} : \underline{\underline{\Sigma}}_0^k = 10^{-2} s^{-1}$ - Essai 8 t=10s $S_0 = \underline{\underline{\Sigma}}_0^1 + \frac{1}{2} \underline{\underline{\Sigma}}_0^2$ - Phase amas U

commise par le modèle. L'erreur la plus importante est de l'ordre de 1% dans la phase plutonifère.

Quantitativement, nous pouvons donc affirmer que l'approche NTFA prédit avec une très bonne précision l'écart type du champ local analysé et ce pour un essai d'«écrouissage» (essai 8) qui n'a pas servi à identifier les modes.

	FEM en Pa	NTFA en Pa	Erreur en %
Matrice	$1.62E + 08$	$1.63E + 08$	+0.62
Amas Pu	$5.95E + 07$	$6.01E + 07$	+1.01
Amas U	$3.39E + 08$	$3.36E + 08$	-0.88

TAB. 6.3: Écart type contrainte équivalente - NTFA vs FEM (Essai 8 t=10s)

Nous avons également testé la prédiction des champs locaux par phase de notre modèle NTFA si nous changions la vitesse de déformation imposée. Nous avons donc repris les deux essais de traction uniaxiale $\underline{\underline{\Sigma}}_0^{(1)}$ qui ont été présentés au paragraphe 6.3.1.1. Nous ne présentons pas les résultats dans ce document, mais les conclusions sont identiques à celles tirées au paragraphe 6.3.2.3 à savoir : la vitesse de déformation, ayant servi à identifier les modes, n'a pas ou peu d'impact sur la prédiction locale du modèle. Mais, comme pour les comportements effectif et moyens par phase, cette remarque est à prendre avec beaucoup de précaution car elle est à priori fortement dépendante de la loi de comportement locale utilisée.

Ensuite, nous avons analysé la prédiction des champs locaux par phase du modèle pour les essais de fluage et de relaxation présentés au paragraphe 6.3.2.2. Sur les figures 6.17, 6.18, 6.19 nous comparons qualitativement la prédiction de la déformation équivalente (au sens de *von Mises*) locale, par phase et à t=10s, entre le modèle NTFA et les éléments finis (FEM). Il s'agit de l'essai de fluage à contrainte uniaxiale (direction 33 - $\Sigma_{33} = 100MPa$). Pour cet essai, à t=10s, nous constatons également une très bonne prédiction qualitative des champs locaux (déformation équivalente). Le tableau 6.4 nous donne, pour chaque phase, l'écart type estimé avec le modèle NTFA et les éléments finis, ainsi que l'erreur commise par l'approche NTFA. L'erreur la plus importante est de l'ordre de 1.4% dans la phase plutonifère. Quantitativement, nous pouvons donc affirmer que l'approche NTFA prédit avec une très bonne précision l'écart type du champ local analysé et ce pour un essai de fluage. Nous rappelons au lecteur que les modes ont été identifiés sur des essais d'«écrouissage». Des résultats similaires ont été obtenus pour l'essai de relaxation uniaxiale (direction 33 - $E_{33} = 2\%$).

	FEM en %	NTFA en %	Erreur en %
Matrice	13.99	13.91	-0.57
Amas Pu	11.47	11.31	-1.39
Amas U	19.05	18.90	-0.79

TAB. 6.4: Écart type déformation équivalente - NTFA vs FEM (Fluage t=10s)

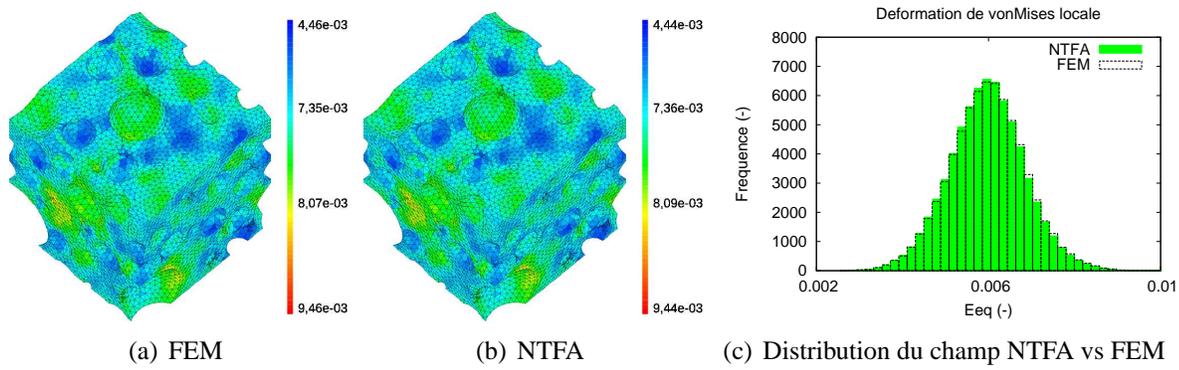


FIG. 6.17: $E_{eq}(x)$ - Essai de fluage $\Sigma_{33} = 100MPa$ - $t=10s$ - Phase matrice

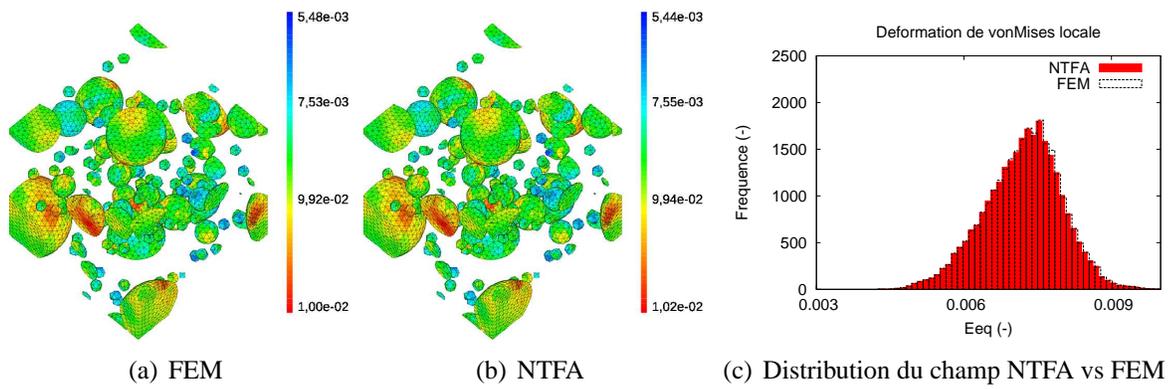


FIG. 6.18: $E_{eq}(x)$ - Essai de fluage $\Sigma_{33} = 100MPa$ - $t=10s$ - Phase amas Pu

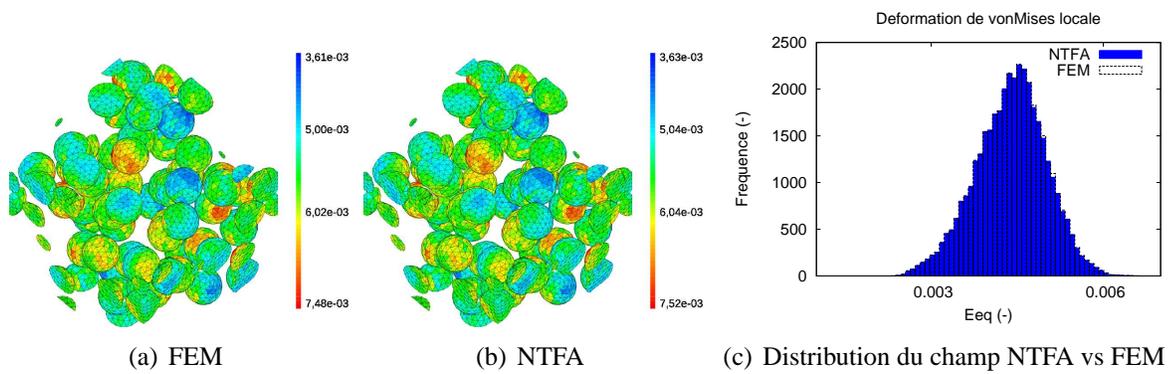


FIG. 6.19: $E_{eq}(x)$ - Essai de fluage $\Sigma_{33} = 100MPa$ - $t=10s$ - Phase amas U

Comme au paragraphe 6.3.2.2, nous avons analysé, ci-dessous, la prédiction des comportements locaux par phase de notre modèle NTFA par rapport aux sept autres tirages supplémentaires (tirages de 2 à 8). Nous rappelons que le modèle NTFA a été identifié sur le tirage 1. Le tableau 6.5 présente, pour l'essai de fluage à contrainte uniaxiale (direction 33 - $\Sigma_{33} = 100MPa$) et à la fin de l'essai ($t=10s$), les écarts types de la déformation équivalente de chaque tirage (FEM), la moyenne de ces 8 écarts types (FEM) et l'erreur (err) entre cette moyenne et l'écart type estimé par notre modèle NTFA.

STD_{eq}	FEM									NTFA	err
	1	2	3	4	5	6	7	8	moy	1	(%)
matrice	13.99	12.94	13.76	13.92	14.27	13.87	14.23	12.26	13.66	13.91	+1.83
amas Pu	11.47	10.75	11.31	11.69	11.43	11.42	11.64	10.85	11.32	10.81	-4.50
amas U	19.05	17.33	18.55	18.87	19.87	19.03	19.02	19.47	18.90	19.35	+2.38

TAB. 6.5: Écart type déformation équivalente vonMises des 8 tirages et moyenne (moy) des 8 tirages (en % par rapport au 1er moment) - Comparaison avec l'approche NTFA (en %)

Dans le tableau 6.5, on remarque que l'erreur la plus importante commise sur l'écart type de la déformation équivalente, entre le modèle NTFA et la réponse moyenne par éléments finis des 8 VER, est égale à -4.50% . Par conséquent, pour le comportement étudié (visco-élasticité linéaire incompressible) et les contrastes entre les propriétés matériaux utilisés ici, nous pouvons donc affirmer que l'écart type de la variable analysée estimé par le modèle NTFA est également indépendant de la microstructure sur laquelle il a été identifié. Pour l'essai de relaxation uniaxiale (direction 33 - $E_{33} = 2\%$) des résultats similaires ont été observés. Ces observations consolident donc les conclusions établies au chapitre 5 paragraphe 5.2.4.

6.3.3.2 Conclusion

Nous avons présenté dans ce paragraphe la prédiction des champs locaux par phase de notre modèle NTFA par rapport à des calculs de référence (calculs réalisés par élément finis : FEM). Tout d'abord, **pour des essais à vitesse de déformation et à direction de contrainte imposées (essais d'«écrouissage»), nous avons constaté une très bonne prédiction du modèle. Cette prédiction est excellente (erreur inférieure à 1.01 % sur l'écart type de la variable analysée) aussi bien pour des trajets de chargement qui ont servi ou qui n'ont pas servi à identifier les modes.** Nous avons également démontré que la vitesse de déformation, ayant servi à identifier les modes, n'a pas ou peu d'impact sur la prédiction du modèle. Comme pour les comportements effectif et moyens par phase, cette remarque est à prendre avec beaucoup de précaution car elle est à priori fortement dépendante de la loi de comportement locale utilisée. Ensuite, **nous avons également démontré une prédiction excellente des champs locaux par phase du modèle NTFA pour des essais de fluage et de relaxation, bien que les modes aient été identifiés sur des essais à vitesse de déformation et à direction de contrainte imposées. L'erreur commise sur l'écart type de la variable analysée étant inférieure à 1.39 %.** Enfin nous avons montré que l'écart type de la variable analysée, estimé par le modèle NTFA dans chacune des phases, était indépendant de la microstructure sur laquelle il avait été identifié. Ces observations consolident donc les conclusions établies au chapitre 5 paragraphe 5.2.4.

6.4 Bilan du chapitre

Dans ce chapitre, nous avons présenté les développements réalisés pour étendre la NTFA au 3D (tridimensionnel). Cette extension a été réalisée sur le composite particulaire triphasé retenus dans la partie 2 et pour le comportement local suivant : visco-élasticité linéaire incompressible.

Dans le premier paragraphe, nous avons présenté succinctement les équations constitutives du modèle. Puis, dans le second paragraphe, nous avons abordé la mise en oeuvre de ce modèle. Pour calculer les modes, **nous avons vu qu'en 3D et pour le comportement local étudié nous considérons 6 trajets de chargements élémentaires. L'orthogonalisation et la sélection des modes prépondérants ont été réalisées par la transformée de Karhunen-Loève. Nous avons donc abouti à un modèle à 54 variables internes.** Ensuite, dans le troisième paragraphe, les prédictions de celui-ci par rapport à des calculs de référence en champs complets ont été exposées. Ces analyses ont été menées aussi bien sur le comportement effectif que sur les comportements moyens par phase et locaux, et ce pour différents types d'essais et de chargements (essais d'«écrouissage», essais de fluage, essais de relaxation). Pour la microstructure ayant servi à identifier les modes, **les résultats furent très satisfaisants : l'erreur commise par le modèle sur le comportement effectif et moyen par phase était inférieure à 0.5%. Concernant les champs locaux dans chaque phase, l'erreur la plus importante commise sur l'écart type de la variable analysée était égale à 1.39 %.** Nous avons également démontré que la vitesse de déformation, ayant servi à identifier les modes, n'avait pas ou peu d'impact sur la prédiction du modèle. Cette remarque est à prendre avec beaucoup de précaution car elle est à priori fortement dépendante de la loi de comportement locale utilisée. **Des études de sensibilité à la microstructure considérée ont également été présentées. Nous avons montré que la réponse effective, les comportements moyens par phase et les écarts type de la variable analysée localement dans chaque phase étaient indépendants de la microstructure sur laquelle le modèle NTFA avait été identifié.** Finalement, **nous pouvons donc affirmer que l'extension de la NTFA au 3D a été validée avec succès pour le comportement local suivant : visco-élasticité linéaire incompressible.** Ces résultats sont cohérents avec les études menées par [FRITZEN and BOHLKE, 2010] et [FRITZEN and BOHLKE, 2011] (études réalisées en parallèle de cette thèse).

Le problème local complet à résoudre est celui établi au chapitre 2 paragraphe 2.3. D'un point de vue formel, **la loi de comportement locale proposée est de nature visco-élastique linéaire compressible vieillissante avec des déformations libres imposées.** Dans le chapitre suivant, nous allons donc présenter les développements théoriques et numériques, menés dans le cadre de cette thèse, pour prendre en compte l'aspect **déformation libre et vieillissant** pour le comportement local suivant : visco-élastique linéaire compressible.

Chapitre 7

NTFA 3D avec déformations libres - comportement visco-élastique linéaire compressible vieillissant

Objet du chapitre :

Dans ce chapitre nous présentons les développements que nous avons réalisés, dans le cadre de cette thèse, pour étendre la NTFA 3D (tridimensionnel) aux déformations libres imposées et à l'aspect compressible, que ce soit pour des études vieillissantes ou non vieillissantes. Cette extension est toujours réalisée sur le composite particulière triphasé retenu dans la partie 2 et pour le comportement local suivant : visco-élasticité linéaire compressible vieillissant avec déformations libres imposées (version complète du problème local établi au chapitre 2 paragraphe 2.3. Comportement du *MOX* en fonctionnement normal). Dans le premier paragraphe, nous présentons les équations constitutives du modèle : principe de la méthode et choix des modes plastiques. Puis, dans le second paragraphe, nous abordons la mise en oeuvre de ce modèle : calcul des modes plastiques, calculs des paramètres de la NTFA et intégration de la loi de comportement. Ensuite, dans le troisième paragraphe, les prédictions de celui-ci par rapport à des calculs de référence en champs complets sont exposées. Ces analyses sont menées aussi bien sur le comportement effectif que sur les champs locaux et pour différents types d'essais et de chargements (essais d'«écrouissage», de fluage, de relaxation mais également tournant). Des études de sensibilité à la microstructure considérée sont également présentées dans ce paragraphe. Enfin, dans le dernier paragraphe, nous présentons la prédiction du modèle NTFA dans le cadre d'essais vieillissants.

Sommaire

7.1	Principe de la méthode	159
7.1.1	Relations constitutives pour les constituants	159
7.1.2	Champs de transformation non-uniformes	161
7.1.3	Variables réduites	161
7.1.4	Relations constitutives pour les variables réduites	162
7.1.5	Choix des modes plastiques - Transformation de <i>Karhunen-Loève</i>	163
7.1.6	Récapitulatif des équations du modèle NTFA pour la visco-élasticité linéaire compressible avec déformations libres imposées	166
7.2	Mise en oeuvre du modèle NTFA	167
7.2.1	VER et propriétés matériaux	167
7.2.2	Calcul des modes plastiques en 3D	168

7.2.3	Calculs des paramètres de la NTFA	170
7.2.4	Intégration de la loi de comportement	172
7.2.5	Conclusion	174
7.3	Résultats - essais non vieillissants	174
7.3.1	Comportement effectif	174
7.3.2	Comportement moyen par phase	179
7.3.3	Champs locaux	183
7.4	Résultats - essais vieillissants d'«écrouissage»	186
7.4.1	Comportement effectif	187
7.4.2	Comportement moyen par phase	187
7.4.3	Champs locaux	188
7.4.4	Conclusion	190
7.5	Bilan du chapitre	190

Jusqu'à présent les approches NTFA n'abordaient pas les aspects **déformations libres** et **vieillissant**. Dans ce chapitre, nous allons donc présenter les développements théoriques et numériques menés sur ces axes d'étude. Ces développements vont être réalisés sur le VER 3D retenu en partie 2 (Cf. figure 5.7)). Le comportement local des constituants sera donc celui établi au chapitre 2 paragraphe 2.3. D'un point de vue formel, la loi de comportement est visco-élastique linéaire compressible vieillissante avec déformations libres imposées. Comme dans le chapitre précédent nous étudierons également la capacité prédictive de ce modèle.

Dans le cadre de cette thèse, la prise en compte des déformations libres a également été étudiée sur une loi de comportement visco-élastique linéaire incompressible. Comme il s'agit d'une version simplifiée de l'aspect compressible nous avons décidé de ne pas présenter l'aspect incompressible dans ce document. Néanmoins, nous renvoyons les lecteurs intéressés aux publications que nous avons réalisées dans le cadre de cette thèse (Cf. [LARGENTON et al., 2011a], [LARGENTON et al., 2011b] et [LARGENTON et al., 2011c]).

7.1 Principe de la méthode

7.1.1 Relations constitutives pour les constituants

Le comportement local des constituants est donc celui établi au chapitre 2 paragraphe 2.3. Nous ne considérons que la déformation libre de gonflement solide $\underline{\underline{\epsilon}}^{gs}$. La prise en compte de la déformation de densification $\underline{\underline{\epsilon}}^{dens}$, dans l'approche NTFA, est identique à celle de la déformation de gonflement solide. L'objectif étant d'alléger les équations. Les constituants ont un comportement de matériaux standard généralisés (Cf. [HALPHEN and NGUYEN, 1975]), les variables d'état étant le tenseur de déformation et les variables internes qui décrivent des phénomènes irréversibles en tout point matériel \underline{x} . Nous avons vu au chapitre 3 du paragraphe 3.5.1 que les matériaux homogénéisés ont alors une structure de matériaux standard généralisés, mais avec un nombre infini de variables internes qui sont les champs de variables internes locales. Dans la suite, nous ne considérerons que les mécanismes dissipatifs décrits par la déformation viscoplastique $\underline{\underline{\epsilon}}^{vp}$.

Les lois d'état et lois complémentaires définissant le comportement local des constituants sont les suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} w(\underline{\underline{\epsilon}}, \underline{\underline{\epsilon}}^{vp}, \underline{\underline{\epsilon}}^{gs}) = \frac{1}{2} \left(\underline{\underline{\epsilon}} - \underline{\underline{\epsilon}}^{vp} - \underline{\underline{\epsilon}}^{gs} \right) : \underline{\underline{C}} : \left(\underline{\underline{\epsilon}} - \underline{\underline{\epsilon}}^{vp} - \underline{\underline{\epsilon}}^{gs} \right) \\ \underline{\underline{\sigma}} = \frac{\partial w}{\partial \underline{\underline{\epsilon}}}(\underline{\underline{\epsilon}}, \underline{\underline{\epsilon}}^{vp}, \underline{\underline{\epsilon}}^{gs}) \\ \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^{vp} = \frac{\partial \psi}{\partial \underline{\underline{\sigma}}}(\underline{\underline{\sigma}}) \\ \underline{\underline{\epsilon}}^{gs}(\underline{x}, t) = \sum_{r=1}^N \chi^{(r)}(\underline{x}) \underline{\underline{\epsilon}}_r^{gs}(t) \quad \underline{i} \end{array} \right. \quad (7.1)$$

avec $w(\underline{\underline{\epsilon}}, \underline{\underline{\epsilon}}^{vp}, \underline{\underline{\epsilon}}^{gs})$ le potentiel d'énergie libre, $\psi(\underline{\underline{\sigma}})$ le potentiel des forces dissipatives, $\underline{\underline{\epsilon}}$ (champ de déformations locales), $\underline{\underline{\epsilon}}^{gs}$ (champ de déformations libres de type gonflement solide (Cf. chapitre 2 paragraphe 2.3)), et $\underline{\underline{\epsilon}}^{vp}$ (variables internes, champ de déformations visco-plastiques locales) les variables

d'état du système, $\underline{\underline{\underline{\sigma}}}$ le champ des contraintes locales et $\underline{\underline{\underline{C}}}$ le tenseur d'élasticité. On désigne par $\underline{\underline{\underline{i}}}$ le tenseur d'identité, $\chi^{(r)}(\underline{x})$ la fonction caractéristique de la phase r , N le nombre de constituants ($N = 3$ dans notre cas) et $\varepsilon_r^{gs}(t)$ la déformation libre (gonflement solide) scalaire associée à la phase r . Dans toute la suite de cette étude, on supposera que cette déformation $\varepsilon_r^{gs}(t)$ est linéaire en fonction du temps. On notera $\dot{\varepsilon}_r^{gs}$ la vitesse de déformation libre imposée dans la phase r .

Pour simplifier nos expressions, notre attention se limitera aux constituants isotropes. Le tenseur élastique $\underline{\underline{\underline{C}}}$ est par conséquent caractérisé par un module de compressibilité K et un module de cisaillement G , tandis que le potentiel $\psi(\underline{\underline{\underline{\sigma}}})$ dépend alors de $\underline{\underline{\underline{\sigma}}}$ uniquement à travers ses trois invariants. Mais en pratique, la dépendance au troisième invariant $det(\underline{\underline{\underline{\sigma}}})$ ($det =$ déterminant de $\underline{\underline{\underline{\sigma}}}$) est négligeable

par rapport à la dépendance à $\sigma_{eq} = \left(\frac{3}{2}\underline{\underline{\underline{\tilde{\sigma}}}} : \underline{\underline{\underline{\tilde{\sigma}}}}\right)^{\frac{1}{2}}$ ($\underline{\underline{\underline{\tilde{\sigma}}}}$ partie déviatorique de $\underline{\underline{\underline{\sigma}}}$) et à $\sigma_m = \frac{1}{3}tr(\underline{\underline{\underline{\sigma}}})$ ($tr =$ trace de $\underline{\underline{\underline{\sigma}}}$). On peut donc écrire la loi d'évolution de la variable interne $\underline{\underline{\underline{\varepsilon}}}^{vp}$ de la façon suivante :

$$\underline{\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}}^{vp} = \frac{3}{2} \frac{\partial \psi}{\partial \sigma_{eq}}(\sigma_{eq}, \sigma_m) \frac{\underline{\underline{\underline{\tilde{\sigma}}}}}{\sigma_{eq}} + \frac{1}{3} \frac{\partial \psi}{\partial \sigma_m}(\sigma_{eq}, \sigma_m) \underline{\underline{\underline{\delta}}} \quad (7.2)$$

avec $\underline{\underline{\underline{\delta}}}$ le symbole de Kronecker.

On fixe les variables d'état : pas d'évolution du système. Les champs de contraintes $\underline{\underline{\underline{\sigma}}}$ et de déformations $\underline{\underline{\underline{\varepsilon}}}$ dans le VER vérifient le problème élastique linéaire (7.3) :

$$\begin{cases} \operatorname{div}(\underline{\underline{\underline{\sigma}}}(x)) = 0 \\ \underline{\underline{\underline{\sigma}}}(x) = \underline{\underline{\underline{C}}}(x) : (\underline{\underline{\underline{\varepsilon}}}(x) - \underline{\underline{\underline{\varepsilon}}}^{vp}(x) - \underline{\underline{\underline{\varepsilon}}}^{gs}(x)) \\ \langle \underline{\underline{\underline{\varepsilon}}}(x) \rangle_V = \underline{\underline{\underline{E}}} \end{cases} \quad (7.3)$$

avec des conditions de périodicité sur le VER. $\underline{\underline{\underline{E}}}$, $\underline{\underline{\underline{\varepsilon}}}^{vp}$ et $\underline{\underline{\underline{\varepsilon}}}^{gs}$ étant connus, le champ de déformations $\underline{\underline{\underline{\varepsilon}}}(x)$ peut s'écrire, grâce au principe de superposition, sous la forme suivante :

$$\begin{cases} \underline{\underline{\underline{\varepsilon}}}(x) = \underline{\underline{\underline{A}}}(x) : \underline{\underline{\underline{E}}} + \frac{1}{|V|} \int_V \underline{\underline{\underline{D}}}(x, x') : \underline{\underline{\underline{\varepsilon}}}^{vp}(x') dx' + \frac{1}{|V|} \int_V \underline{\underline{\underline{D}}}(x, x') \chi^{(r)}(x') \underline{\underline{\underline{i}}} \varepsilon_r^{gs} dx' \\ = \underline{\underline{\underline{A}}}(x) : \underline{\underline{\underline{E}}} + \underline{\underline{\underline{D}}} * \underline{\underline{\underline{\varepsilon}}}^{vp}(x) + \sum_{r=1}^N (\underline{\underline{\underline{D}}} * \chi^{(r)} \underline{\underline{\underline{i}}})(x) \varepsilon_r^{gs} \end{cases} \quad (7.4)$$

où $\underline{\underline{\underline{A}}}(x)$ est le tenseur élastique de localisation de la déformation et $\underline{\underline{\underline{D}}}(x, x')$ l'opérateur non local qui donne, à déformation moyenne nulle, la déformation au point x créée par la prédéformation $\underline{\underline{\underline{\varepsilon}}}^{vp}(x')$ au point x' ou par la prédéformation $\chi^{(r)}(x') \underline{\underline{\underline{i}}}$. $\underline{\underline{\underline{D}}}(x, x')$ est défini par :

$$\underline{\underline{\underline{D}}}(x, x') = \underline{\underline{\underline{\Gamma}}}(x, x') : \underline{\underline{\underline{C}}}(x') \quad (7.5)$$

avec $\underline{\underline{\underline{\Gamma}}}(x, x')$ est l'opérateur de Green élastique non local du milieu élastique hétérogène (nous renvoyons le lecteur à la référence suivante [BERVEILLER et al., 2001] pour de plus amples détails sur cet opérateur).

7.1.2 Champs de transformation non-uniformes

Dans le cas des constituants visco-élastique compressible, le champ de déformations visco-plastiques se décompose alors en une partie déviatorique et une sphérique :

$$\underline{\underline{\varepsilon}}^{vp}(\underline{x}) = \underline{\underline{\tilde{\varepsilon}}}^{vp}(\underline{x}) + \underline{\underline{\hat{\varepsilon}}}^{vp}(\underline{x}) \quad (7.6)$$

On définit ainsi $\underline{\underline{\hat{\varepsilon}}}^{vp}(\underline{x})$ et $\underline{\underline{\tilde{\varepsilon}}}^{vp}(\underline{x})$ à partir de l'équation (7.2) :

$$\begin{cases} \underline{\underline{\dot{\tilde{\varepsilon}}}}^{vp} = \frac{3}{2} \frac{\partial \Psi}{\partial \sigma_{eq}}(\sigma_{eq}, \sigma_m) \frac{\underline{\underline{\tilde{\sigma}}}}{\sigma_{eq}} \\ \underline{\underline{\dot{\hat{\varepsilon}}}}^{vp} = \frac{1}{3} \frac{\partial \Psi}{\partial \sigma_m}(\sigma_{eq}, \sigma_m) \underline{\underline{\delta}} \end{cases} \quad (7.7)$$

Afin de réduire le nombre de variables internes, nous rappelons que *Michel et Suquet* (Cf. chapitre 3 paragraphe 3.5.4) ont proposé de prendre en compte la non uniformité des champs locaux des variables internes en considérant des champs de transformation non uniformes. Plus précisément le champ de déformations viscoplastiques est décomposé en un ensemble de champs tensoriels appelés **modes plastiques**. Chaque partie de l'équation (7.6) est donc décomposée sur un ensemble de modes plastiques : un ensemble de champs tensoriels déviatoriques $\{\underline{\underline{\tilde{\mu}}}\}_{k=1, \dots, M}$ pour la partie déviatorique du champ de déformations viscoplastiques et un ensemble de champs tensoriels sphériques $\{\underline{\underline{\hat{\mu}}}\}_{l=1, \dots, P}$ pour la partie sphérique.

$$\underline{\underline{\varepsilon}}^{vp}(\underline{x}) = \sum_{k=1}^M \underline{\underline{\tilde{\mu}}}^k(\underline{x}) \underline{\underline{\tilde{\varepsilon}}}_k^{vp} + \sum_{l=1}^P \underline{\underline{\hat{\mu}}}^l(\underline{x}) \underline{\underline{\hat{\varepsilon}}}_l^{vp} . \quad (7.8)$$

On définit certaines propriétés pour chaque ensemble de modes :

1. **Le support de chaque mode est entièrement contenu dans une seule phase du matériau.**
2. **Les modes sont orthogonaux.**
3. **Les modes sont non-uniformes.**
4. **Les modes sont normalisés.** Pour les modes déviatoriques, comme dans le cas incompressible, on prend $\langle \underline{\underline{\tilde{\mu}}}^k \rangle = 1$ où $\underline{\underline{\tilde{\mu}}}^k = \left(\frac{2}{3} \underline{\underline{\tilde{\mu}}}^k : \underline{\underline{\tilde{\mu}}}^k \right)^{\frac{1}{2}}$. Dans le cas des modes sphériques, on prend

$$\left\langle \left| \text{tr}(\underline{\underline{\hat{\mu}}}^l) \right| \right\rangle = 1$$

Avec l'approximation (7.8), l'équation (7.4) devient :

$$\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{x}) = \underline{\underline{A}}(\underline{x}) : \underline{\underline{E}} + \sum_{l=1}^M (\underline{\underline{D}} * \underline{\underline{\tilde{\mu}}}^l)(\underline{x}) \underline{\underline{\tilde{\varepsilon}}}_l^{vp} + \sum_{p=1}^P (\underline{\underline{D}} * \underline{\underline{\hat{\mu}}}^p)(\underline{x}) \underline{\underline{\hat{\varepsilon}}}_p^{vp} + \sum_{r=1}^N (\underline{\underline{D}} * \chi^{(r)} \underline{\underline{i}})(\underline{x}) \underline{\underline{\varepsilon}}_r^{gs} . \quad (7.9)$$

NB : on notera dorénavant \tilde{X} toutes les variables qui se rapportent à la partie déviatorique des modes, et \hat{X} les variables qui se rapportent à la partie sphérique des modes.

7.1.3 Variables réduites

De la même façon que dans le cas incompressible (Cf. paragraphe 3.5.4 chapitre 3), on définit une déformation réduite déviatorique \tilde{e}_k mais aussi ici une déformation réduite sphérique \hat{e}_k . On double

contracte l'équation (7.9) par $\underline{\underline{\tilde{\mu}}}^k$ puis on prend la moyenne sur tout le VER pour obtenir \tilde{e}_k :

$$\tilde{e}_k = \underline{\underline{\tilde{a}}}_k : \underline{\underline{E}} + \sum_{l=1}^M \underline{\underline{\tilde{D}}}_{kl} \tilde{\varepsilon}_l^{vp} + \sum_{p=1}^P \underline{\underline{\tilde{F}}}_{kp} \tilde{\varepsilon}_p^{vp} + \sum_{r=1}^N \underline{\underline{\tilde{H}}}_{kr} \varepsilon_r^{gs} , \quad (7.10)$$

avec $\tilde{e}_k = \langle \underline{\underline{\varepsilon}} : \underline{\underline{\tilde{\mu}}}^k \rangle$ la déformation réduite déviatorique, $\underline{\underline{\tilde{a}}}_k = \langle \underline{\underline{\tilde{\mu}}}^k : \underline{\underline{A}} \rangle$ le tenseur de localisation déviatorique réduit des déformations élastiques, $\underline{\underline{\tilde{D}}}_{kl} = \langle \underline{\underline{\tilde{\mu}}}^k : (\underline{\underline{D}} * \underline{\underline{\tilde{\mu}}}^l) \rangle$, $\underline{\underline{\tilde{F}}}_{kp} = \langle \underline{\underline{\tilde{\mu}}}^k : (\underline{\underline{D}} * \underline{\underline{\hat{\mu}}}^p) \rangle$ et $\underline{\underline{\tilde{H}}}_{kr} = \langle \underline{\underline{\tilde{\mu}}}^k : (\underline{\underline{D}} * \chi^{(r)} \underline{\underline{i}}) \rangle$ les facteurs d'influences déviatoriques réduits.

On double contracte (7.9) par $\underline{\underline{\hat{\mu}}}^k$ puis on prend la moyenne sur tout le VER pour obtenir \hat{e}_k :

$$\hat{e}_k = \underline{\underline{\hat{a}}}_k : \underline{\underline{E}} + \sum_{l=1}^M \underline{\underline{\hat{F}}}_{kl} \tilde{\varepsilon}_l^{vp} + \sum_{p=1}^P \underline{\underline{\hat{D}}}_{kp} \hat{\varepsilon}_p^{vp} + \sum_{r=1}^N \underline{\underline{\hat{H}}}_{kr} \varepsilon_r^{gs} , \quad (7.11)$$

avec $\hat{e}_k = \langle \underline{\underline{\varepsilon}} : \underline{\underline{\hat{\mu}}}^k \rangle$ la déformation réduite sphérique, $\underline{\underline{\hat{a}}}_k = \langle \underline{\underline{\hat{\mu}}}^k : \underline{\underline{A}} \rangle$ le tenseur de localisation sphérique réduit des déformations élastiques, $\underline{\underline{\hat{D}}}_{kp} = \langle \underline{\underline{\hat{\mu}}}^k : (\underline{\underline{D}} * \underline{\underline{\hat{\mu}}}^p) \rangle$, $\underline{\underline{\hat{F}}}_{kl} = \langle \underline{\underline{\hat{\mu}}}^k : (\underline{\underline{D}} * \underline{\underline{\tilde{\mu}}}^l) \rangle$ et $\underline{\underline{\hat{H}}}_{kr} = \langle \underline{\underline{\hat{\mu}}}^k : (\underline{\underline{D}} * \chi^{(r)} \underline{\underline{i}}) \rangle$ les facteurs d'influences sphériques réduits.

Par analogie avec les déformations réduites \tilde{e}_k et \hat{e}_k , on définit les deux (déviatorique et sphérique) contraintes réduites $\tilde{\tau}_k = \langle \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\tilde{\mu}}}^k \rangle$ et $\hat{\sigma}_k = \langle \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\hat{\mu}}}^k \rangle$, ainsi que les déformations viscoplastiques réduites $\tilde{e}_k^{vp} = \langle \underline{\underline{\varepsilon}}^{vp} : \underline{\underline{\tilde{\mu}}}^k \rangle$ et $\hat{e}_k^{vp} = \langle \underline{\underline{\varepsilon}}^{vp} : \underline{\underline{\hat{\mu}}}^k \rangle$.

Il est important de noter que l'ensemble $\{\tilde{\varepsilon}_l^{vp}\}_{l=1,\dots,M}$ peut être remplacé par $\{\hat{e}_l^{vp}\}_{l=1,\dots,M}$ ainsi que $\{\hat{\varepsilon}_p^{vp}\}_{p=1,\dots,P}$ par $\{\hat{e}_p^{vp}\}_{p=1,\dots,P}$ car :

$$\begin{cases} \tilde{e}_l^{vp} = \langle \underline{\underline{\tilde{\mu}}}^l : \underline{\underline{\tilde{\mu}}}^l \rangle \tilde{\varepsilon}_l^{vp} , \\ \hat{e}_p^{vp} = \langle \underline{\underline{\hat{\mu}}}^p : \underline{\underline{\hat{\mu}}}^p \rangle \hat{\varepsilon}_p^{vp} . \end{cases} \quad (7.12)$$

7.1.4 Relations constitutives pour les variables réduites

Dans le cas compressible avec des constituants isotropes, la contrainte locale s'écrit :

$$\underline{\underline{\sigma}} = 2G(\tilde{\varepsilon} - \tilde{\varepsilon}^{vp}) + K \operatorname{tr}(\varepsilon - \varepsilon^{vp} - \varepsilon^{gs}) \underline{\underline{\delta}} , \quad (7.13)$$

avec K le module de compressibilité élastique ($K = \frac{E}{3(1-2\nu)}$), E le module d'Young et ν le coefficient de Poisson) et G le module de cisaillement élastique ($G = \frac{E}{2(1+\nu)}$). Les deux contraintes réduites $\tilde{\tau}_k$ et $\hat{\sigma}_k$ s'écrivent de la façon suivante :

$$\begin{cases} \tilde{\tau}_k = 2G^r(\tilde{e}_k - \tilde{e}_k^{vp}) , \\ \hat{\sigma}_k = 3K^r(\hat{e}_k - \hat{e}_k^{vp} - \hat{e}_k^{gs}) \text{ avec } \hat{e}_k^{gs} = \langle \underline{\underline{\varepsilon}}^{gs} : \underline{\underline{\hat{\mu}}}^k \rangle = \sum_{r=1}^N \langle \underline{\underline{\hat{\mu}}}^k : \chi^{(r)} \underline{\underline{i}} \rangle \varepsilon_r^{gs} , \end{cases} \quad (7.14)$$

avec K^r et G^r les modules de compressibilité et de cisaillement élastiques de la phase r à laquelle est associé le mode k (NB : dans notre cas $K^r = K$ et $G^r = G$ car nous considérons des propriétés élastiques homogènes).

A partir des lois d'évolution (7.7), on obtient les lois d'évolution des variables internes réduites :

$$\left\{ \dot{\underline{\underline{\hat{\epsilon}}}}_k^{vp} = \left\langle \underline{\underline{\hat{\epsilon}}}_k^{vp} : \underline{\underline{\tilde{\mu}}}^k \right\rangle = \left\langle \frac{3}{2} \frac{\partial \Psi_r}{\partial \underline{\underline{\sigma}}_{eq}} (\underline{\underline{\sigma}}_{eq}, \underline{\underline{\sigma}}_m) \frac{\underline{\underline{\tilde{\sigma}}} : \underline{\underline{\tilde{\mu}}}^k}{\underline{\underline{\sigma}}_{eq}} \right\rangle , \quad (7.15)$$

$$\left\{ \dot{\underline{\underline{\hat{\epsilon}}}}_k^{vp} = \left\langle \underline{\underline{\hat{\epsilon}}}_k^{vp} : \underline{\underline{\hat{\mu}}}^k \right\rangle = \left\langle \frac{1}{3} \frac{\partial \Psi_r}{\partial \underline{\underline{\sigma}}_m} (\underline{\underline{\sigma}}_{eq}, \underline{\underline{\sigma}}_m) \underline{\underline{\delta}} : \underline{\underline{\hat{\mu}}}^k \right\rangle , \quad (7.16)$$

avec Ψ_r le potentiel de dissipation associé à la phase r et au mode k . Nous rappelons au lecteur que Ψ_r est défini par $\Psi_r(\underline{\underline{\sigma}}_{eq}, \underline{\underline{\sigma}}_m) = \frac{1}{6G_r^{vp}} \underline{\underline{\sigma}}_{eq}^2 + \frac{1}{2K_r^{vp}} \underline{\underline{\sigma}}_m^2$ (Cf. paragraphe 2.3 chapitre 2). Du fait de la linéarité du problème, on peut calculer explicitement les moyennes des relations (7.15) et (7.16) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \dot{\underline{\underline{\hat{\epsilon}}}}_k^{vp} = \frac{1}{2G_r^v} \tilde{\tau}_k , \\ \dot{\underline{\underline{\hat{\epsilon}}}}_k^{vp} = \frac{1}{3K_r^v} \hat{\sigma}_k . \end{array} \right. \quad (7.17)$$

Enfin, on calcule la contrainte macroscopique en moyennant la contrainte microscopique résultant des équations (7.1), (7.8) et (7.9) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \underline{\underline{\Sigma}} = \tilde{\underline{\underline{C}}} : \underline{\underline{E}} + \sum_{k=1}^M \left(\left\langle \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{D}} * \underline{\underline{\tilde{\mu}}}^k \right\rangle - \left\langle \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{\tilde{\mu}}}^k \right\rangle \right) \tilde{\underline{\underline{\epsilon}}}_k^{vp} + \sum_{k=1}^P \left(\left\langle \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{D}} * \underline{\underline{\hat{\mu}}}^k \right\rangle - \left\langle \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{\hat{\mu}}}^k \right\rangle \right) \hat{\underline{\underline{\epsilon}}}_k^{vp} \\ + \sum_{r=1}^N \left(\left\langle \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{D}} * \underline{\underline{\chi}}^{(r)} \right\rangle - \left\langle \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{\chi}}^{(r)} \right\rangle \right) \underline{\underline{\epsilon}}_r^{gs} , \quad \tilde{\underline{\underline{C}}} = \left\langle \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{A}} \right\rangle , \\ = \tilde{\underline{\underline{C}}} : \underline{\underline{E}} + \sum_{k=1}^M \tilde{\underline{\underline{\rho}}}^k \tilde{\underline{\underline{\epsilon}}}_k^{vp} + \sum_{k=1}^P \hat{\underline{\underline{\rho}}}^k \hat{\underline{\underline{\epsilon}}}_k^{vp} + \sum_{r=1}^N \underline{\underline{\rho}}^r \underline{\underline{\epsilon}}_r^{gs} \end{array} \right. \quad (7.18)$$

Les tenseurs $\tilde{\underline{\underline{\rho}}}^k = \left\langle \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{D}} * \underline{\underline{\tilde{\mu}}}^k \right\rangle - \left\langle \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{\tilde{\mu}}}^k \right\rangle$, $\hat{\underline{\underline{\rho}}}^k = \left\langle \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{D}} * \underline{\underline{\hat{\mu}}}^k \right\rangle - \left\langle \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{\hat{\mu}}}^k \right\rangle$ et $\underline{\underline{\rho}}^r = \left\langle \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{D}} * \underline{\underline{\chi}}^{(r)} \right\rangle - \left\langle \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{\chi}}^{(r)} \right\rangle$ sont calculés une fois pour toutes. On verra dans le paragraphe 7.2 la mise en oeuvre du modèle.

7.1.5 Choix des modes plastiques - Transformation de Karhunen-Loève

Dans le cas des matériaux compressibles, les différents champs caractérisant le comportement des matériaux ne sont pas à trace nulle, c'est à dire qu'il existe une partie hydrostatique. La décomposition du champ de déformation viscoplastique donnée au paragraphe 7.1.2 relation (7.8) nécessite la construction de deux ensembles de modes : un ensemble de champs tensoriels déviatoriques $\left\{ \underline{\underline{\tilde{\mu}}} \right\}_{k=1, \dots, M}$ pour la partie déviatorique du champ de déformations viscoplastiques et un ensemble de champs tensoriels sphériques $\left\{ \underline{\underline{\hat{\mu}}} \right\}_{l=1, \dots, P}$ pour la partie sphérique.

On détermine tout d'abord les données numériques nécessaires à la construction de ces modes en résolvant le problème local sur le VER. Le choix des modes plastiques est un point-clé dans la précision de la méthode. Ils sont déterminés numériquement en simulant la réponse du composite le long de trajets de chargement radiaux dans l'espace des contraintes macroscopiques $\underline{\underline{\Sigma}}(t) = \lambda(t)\underline{\underline{\Sigma}}_0$. Les champs $\underline{\underline{\theta}}^l$ sont calculés jusqu'à $\underline{\underline{E}} : \underline{\underline{\Sigma}}_0^l = 10\%$. Dans le cadre de cette étude, $\underline{\underline{E}} : \underline{\underline{\Sigma}}_0^l$ est fixée à $10^{-2}s^{-1}$.

En 3D et pour le comportement modélisé ici, 7 directions de contraintes $\underline{\underline{\Sigma}}_0^l$ différentes ont été choisies : 3 tractions uniaxiales en résolvant le problème local mais sans le gonflement solide (l=1 direction 11, l=4 direction 22, et l=6 direction 33), 3 cisaillements purs en résolvant le problème local mais sans le gonflement solide (l=2 direction 12, l=3 direction 13 et l=5 direction 23), et un essai à contrainte macroscopique nulle mais en résolvant le problème complet c'est à dire avec du gonflement solide (l=7) :

$$\begin{cases} \underline{\underline{\Sigma}}_0^l = \underline{e}_i \otimes_s \underline{e}_j \text{ avec } l = 1, \dots, 6, \quad i = 1, \dots, 3 \text{ et } j = 1, \dots, 3, \\ \underline{\underline{\Sigma}}_0^7 = \underline{0} \text{ et } \underline{\underline{\varepsilon}}_r^{gs} \text{ appliquée dans chaque phase.} \end{cases} \quad (7.19)$$

Les paramètres matériaux qui ont été choisis pour les six premiers états de contraintes sont résumés dans le tableau 7.1. Pour le septième trajet de chargement, les paramètres élastiques et visqueux précédents (Cf. tableau 7.1) ont été reconduits mais, en plus, nous avons rajouté le contraste de vitesse de déformation libre entre les phases. Ces paramètres sont présentés dans le tableau 7.2. Ce septième trajet de chargement est très important car c'est lui qui nous donnera les modes plastiques induits par les déformations libres (superposition des chargements).

Pour chaque trajet de chargement (7 trajets de chargements) et pour chaque phase r du VER, on extrait pour différents instants (tous les 0.4 secondes dans notre cas d'étude) de chargements des champs de déformations viscoplastiques. Soit $\underline{\underline{\theta}}^l(\underline{x}), l = 1, \dots, M_T(r)$, ces $M_T(r)$ ($M_T(r) = 25$ dans notre cas d'étude) champs de déformations viscoplastiques obtenus par trajet de chargement et par phase r .

Les différents champs caractérisant le comportement du matériau ne sont pas à trace nulle donc on décompose ces champs en une partie déviatorique qu'on notera $\underline{\underline{\tilde{\theta}}}^l(\underline{x})$, et une partie sphérique notée $\underline{\underline{\hat{\theta}}}^l(\underline{x})$:

$$\underline{\underline{\theta}}^l(\underline{x}) = \underline{\underline{\tilde{\theta}}}^l(\underline{x}) + \underline{\underline{\hat{\theta}}}^l(\underline{x}) \quad (7.20)$$

Les champs $\underline{\underline{\tilde{\theta}}}^l$ sont normalisés via $\langle \underline{\underline{\tilde{\theta}}}^l_{eq} \rangle$ (von Mises) et les $\underline{\underline{\hat{\theta}}}^l$ sont normalisés via $\langle \left| \text{tr} \left(\underline{\underline{\hat{\theta}}}^l \right) \right| \rangle$.

On applique la transformation de *Karhunen-Loève* sur chaque partie afin de conserver les propriétés d'orthogonalité de la partie sphérique et de la partie déviatorique. On calcule donc les matrices de corrélation \tilde{g} et \hat{g} telles que :

$$\tilde{g}_{ij} = \langle \underline{\underline{\tilde{\theta}}}^i(\underline{x}) : \underline{\underline{\tilde{\theta}}}^j(\underline{x}) \rangle \quad i, j = 1, \dots, M_T(r), \quad \hat{g}_{ij} = \langle \underline{\underline{\hat{\theta}}}^i(\underline{x}) : \underline{\underline{\hat{\theta}}}^j(\underline{x}) \rangle \quad i, j = 1, \dots, M_T(r). \quad (7.21)$$

On extrait les vecteurs propres \tilde{v}^k et les valeurs propres $\tilde{\lambda}_k$ de la matrice \tilde{g} ainsi que les vecteurs propres \hat{v}^k et les valeurs propres $\hat{\lambda}_k$ de la matrice \hat{g} . Ces données vérifient les relations suivantes :

$$\sum_{j=1}^{M_T(r)} \tilde{g}_{ij} \tilde{v}_j^k = \tilde{\lambda}_k \tilde{v}_i^k, \quad \sum_{j=1}^{M_T(r)} \hat{g}_{ij} \hat{v}_j^k = \hat{\lambda}_k \hat{v}_i^k. \quad (7.22)$$

Les deux ensembles de modes déviatoriques et sphériques sont construits à partir de ces données :

$$\underline{\underline{\tilde{\mu}}}^k(\underline{x}) = \sum_{l=1}^{M_T(r)} \tilde{v}_l^k \underline{\underline{\tilde{\theta}}}^l(\underline{x}) , \quad \underline{\underline{\hat{\mu}}}^k(\underline{x}) = \sum_{l=1}^{M_T(r)} \hat{v}_l^k \underline{\underline{\hat{\theta}}}^l(\underline{x}) . \quad (7.23)$$

Les modes $\underline{\underline{\tilde{\mu}}}^k$ sont normalisés via $\langle \underline{\underline{\tilde{\mu}}}^k \rangle$ (*von Mises*) et les $\underline{\underline{\hat{\mu}}}^k$ sont normalisés via $\langle \left| \text{tr} \left(\underline{\underline{\hat{\mu}}}^k \right) \right| \rangle$. Comme au chapitre 6 paragraphe 6.1.1 on montre que les modes sont bien orthogonaux.

De plus, on sait que, grâce à la transformation de *Karhunen-Loève*, la magnitude d'une valeur propre correspond à la quantité d'information contenue dans le vecteur propre associé. Dit autrement, plus le rapport $\tilde{\lambda}_l / \left(\sum_{k=1}^{M_T(r)} \tilde{\lambda}_k \right)$ est proche de 1, plus le vecteur propre \tilde{v}_l associé à $\tilde{\lambda}_l$ contient d'informations issues des données initiales (ici, les parties déviatoriques $\underline{\underline{\tilde{\theta}}}^l(\underline{x}), l = 1, \dots, M_T(r)$ des champs de déformations viscoplastiques $\underline{\underline{\theta}}^l(\underline{x}), l = 1, \dots, M_T(r)$). Cette propriété est également valable pour les valeurs propres «sphériques». Donc en supposant que toutes les valeurs propres sont classées par ordre décroissant, c'est à dire que $\tilde{\lambda}_1 \geq \tilde{\lambda}_2 \geq \dots \geq \tilde{\lambda}_{M_T(r)}$ et que $\hat{\lambda}_1 \geq \hat{\lambda}_2 \geq \dots \geq \hat{\lambda}_{M_T(r)}$, seuls les $M(r)$ ($M(r) \leq M_T(r)$) premiers modes déviatoriques et les $P(r)$ ($P(r) \leq M_T(r)$) premiers modes sphériques correspondant aux plus grandes valeurs propres peuvent être considérés. Nous retenons les $M(r)$ modes principaux déviatoriques et les $P(r)$ modes principaux sphériques dans chaque phase r tels que les critères suivants soient satisfaits :

$$\frac{\sum_{k=1}^{M(r)} \tilde{\lambda}_k}{\sum_{k=1}^{M_T(r)} \tilde{\lambda}_k} \geq \alpha , \quad \frac{\sum_{k=1}^{P(r)} \hat{\lambda}_k}{\sum_{k=1}^{M_T(r)} \hat{\lambda}_k} \geq \beta \quad (7.24)$$

Les seuils α et β sont choisis en fonction de la précision voulue par l'utilisateur. Dans notre cas d'étude nous avons fixés α à 0.9999 et β à 0.99.

NB : par cette méthode, l'orthogonalité des modes à support dans une phase r et pour un même trajet de chargement $\underline{\underline{\Sigma}}_0^l$ est assurée. Par contre, pour assurer l'orthogonalité des modes plastiques à support dans une phase r mais entre les différents trajets chargements $\underline{\underline{\Sigma}}_0^l$ ($l = 1, \dots, 7$), nous sommes contraints de reconstruire une matrice de corrélation avec l'ensemble des modes plastiques sélectionnés une première fois par la méthode de *Karhunen-Loève* et de refaire la méthode de *Karhunen-Loève*.

7.1.6 Récapitulatif des équations du modèle NTFA pour la visco-élasticité linéaire compressible avec déformations libres imposées

$$\left\{ \begin{array}{l}
 \left\{ \begin{array}{l}
 \tilde{\tau}_k = 2G^r(\tilde{e}_k - \tilde{e}_k^{vp}) \text{ avec } \tilde{\tau}_k = \langle \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\tilde{\mu}}}^k \rangle , \\
 \hat{\sigma}_k = 3K^r(\hat{e}_k - \hat{e}_k^{vp} - \hat{e}_k^{gs}) \text{ avec } \hat{\sigma}_k = \langle \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\hat{\mu}}}^k \rangle
 \end{array} \right. \\
 \\
 \left\{ \begin{array}{l}
 \tilde{e}_k = \underline{\underline{\tilde{a}}}_k : \underline{\underline{E}} + \sum_{l=1}^M \tilde{D}_{kl} \tilde{\epsilon}_l^{vp} + \sum_{p=1}^P \tilde{F}_{kp} \tilde{\epsilon}_p^{vp} + \sum_{r=1}^N \tilde{H}_{kr} \epsilon_r^{gs} , \\
 \tilde{e}_k^{vp} = \langle \underline{\underline{\epsilon}}^{vp} : \underline{\underline{\tilde{\mu}}}^k \rangle \text{ NB } \tilde{\epsilon}_k^{vp} = \tilde{e}_k^{vp} \langle \underline{\underline{\tilde{\mu}}}^k : \underline{\underline{\tilde{\mu}}}^k \rangle^{-1}
 \end{array} \right. \\
 \\
 \left\{ \begin{array}{l}
 \hat{e}_k = \underline{\underline{\hat{a}}}_k : \underline{\underline{E}} + \sum_{l=1}^M \hat{F}_{kl} \hat{\epsilon}_l^{vp} + \sum_{p=1}^P \hat{D}_{kp} \hat{\epsilon}_p^{vp} + \sum_{r=1}^N \hat{H}_{kr} \epsilon_r^{gs} , \\
 \hat{e}_k^{vp} = \langle \underline{\underline{\epsilon}}^{vp} : \underline{\underline{\hat{\mu}}}^k \rangle \text{ NB } \hat{\epsilon}_k^{vp} = \hat{e}_k^{vp} \langle \underline{\underline{\hat{\mu}}}^k : \underline{\underline{\hat{\mu}}}^k \rangle^{-1}
 \end{array} \right. \tag{7.25} \\
 \\
 \left\{ \begin{array}{l}
 \hat{e}_k^{gs} = \langle \underline{\underline{\epsilon}}^{gs} : \underline{\underline{\hat{\mu}}}^k \rangle = \sum_{r=1}^N \langle \underline{\underline{\hat{\mu}}}^k : \chi^{(r)} \underline{\underline{i}} \rangle \epsilon_r^{gs}
 \end{array} \right. \\
 \\
 \left\{ \begin{array}{l}
 \dot{\tilde{e}}_k^{vp} = \frac{1}{2G_r^v} \tilde{\tau}_k \text{ avec } \dot{\tilde{e}}_k^{vp} = \langle \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^{vp} : \underline{\underline{\tilde{\mu}}}^k \rangle , \\
 \dot{\hat{e}}_k^{vp} = \frac{1}{3K_r^v} \hat{\sigma}_k \text{ avec } \dot{\hat{e}}_k^{vp} = \langle \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^{vp} : \underline{\underline{\hat{\mu}}}^k \rangle ,
 \end{array} \right. \\
 \\
 \underline{\underline{\Sigma}} = \underline{\underline{\tilde{C}}} : \underline{\underline{E}} + \sum_{k=1}^M \underline{\underline{\tilde{\rho}}}^k \tilde{\epsilon}_k^{vp} + \sum_{k=1}^P \underline{\underline{\hat{\rho}}}^k \hat{\epsilon}_k^{vp} + \sum_{r=1}^N \underline{\underline{\rho}}^r \epsilon_r^{gs}
 \end{array} \right.$$

La solution de ce problème est obtenue en résolvant le système différentiel en $\tilde{\tau}_k$ et en $\hat{\sigma}_k$ couplé d'ordre 1 résolu le long d'un trajet imposé :

$$\left\{ \begin{array}{l}
 \dot{\tilde{\tau}}_k = 2G^r(\dot{\tilde{e}}_k - \dot{\tilde{e}}_k^{vp}) \\
 \dot{\hat{\sigma}}_k = 3K^r(\dot{\hat{e}}_k - \dot{\hat{e}}_k^{vp} - \dot{\hat{e}}_k^{fs})
 \end{array} \right. \tag{7.26}$$

A partir de ces équations, nous allons consacrer le paragraphe suivant à la mise en oeuvre du modèle NTFA, ainsi qu'au détail du calcul des modes plastiques.

7.2 Mise en oeuvre du modèle NTFA

7.2.1 VER et propriétés matériaux

Le Volume Élémentaire Représentatif est donc celui retenu en fin de partie 2 :

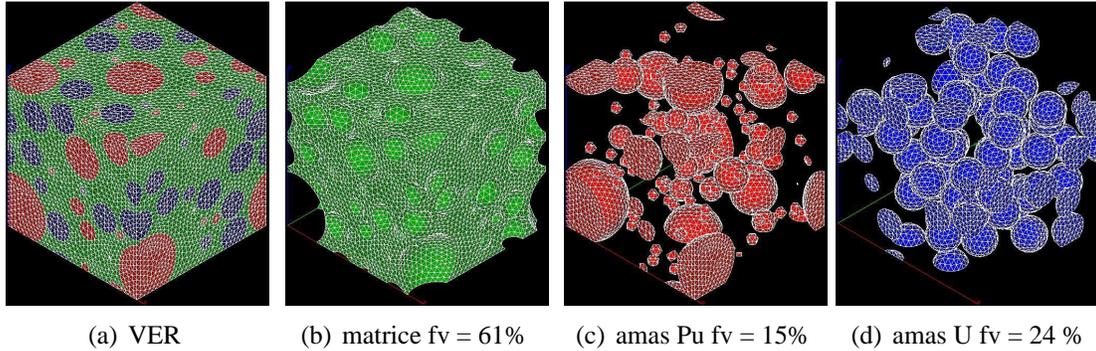


FIG. 7.1: VER «polydispersés» triphasés Maillage périodique en 3D - Tétraèdres à 4 noeuds

Les propriétés matériaux utilisées pour l'identification des modes plastiques ainsi que le calcul des tenseurs d'influence sont les suivantes :

VER Triphasé	E (GPa)	ν (-)	G_r^v (GPa.s)	K_r^v (GPa.s)	$\dot{\epsilon}_r^{gs}$ (s^{-1})
Amas Pu	200	0.3	21.43	2.381	0.0
Matrice	200	0.3	52.94	8.824	0.0
Amas U	200	0.3	158.83	52.94	0.0

TAB. 7.1: Propriétés inclusions Pu, U et de la matrice pour les six premiers trajets de chargements

VER Triphasé	E (GPa)	ν (-)	G_r^v (GPa.s)	K_r^v (GPa.s)	$\dot{\epsilon}_r^{gs}$ (s^{-1})
Amas Pu	200	0.3	21.43	2.381	$2.10E - 02$
Matrice	200	0.3	52.94	8.824	$7.00E - 05$
Amas U	200	0.3	158.83	52.94	$2.84E - 05$

TAB. 7.2: Propriétés inclusions Pu, U et de la matrice pour le septième trajet de chargement

On remarque que les inclusions Pu gonflent (déformation libre imposée) 300 fois plus vite que la matrice, tandis que les inclusions U gonflent 2.5 fois moins vite. Ce contraste de gonflement de 300 n'est pas représentatif des MOX ADU triphasés. La réalité se situe plutôt à 3. Ce contraste a été volontairement amplifié dans le but de démontrer la faisabilité de prendre en compte les déformations libres dans l'approche NTFA et ce quel que soit le contraste entre les phases. Il existe différentes étapes pour mettre en oeuvre l'analyse par champs de transformation non uniformes :

1. La première étape consiste à calculer les modes plastiques, les tenseurs de localisation des déformations élastiques (cas des propriétés élastiques hétérogènes) et les facteurs d'influence.
2. La deuxième étape est l'intégration de la loi de comportement.

7.2.2 Calcul des modes plastiques en 3D

Pour calculer les modes plastiques, on applique la méthode, les paramètres et les trajets et de chargements présentés au paragraphe 7.1.5. Nous utilisons les paramètres matériaux définis au paragraphe 7.2.1 et le comportement local défini dans les paragraphes précédents. L'ensemble de ces calculs ont été réalisés à l'aide du code de calcul aux éléments finis Cast3m (Cf. [<http://www.cast3m.cea.fr/>]). Pour illustrer ces propos, les figures 7.2, 7.3 et 7.4 montrent les normes équivalentes (Rappel : la norme est $\langle \tilde{\mu}_{eq}^k \rangle$) des modes $\tilde{\mu}_{eq}^1(x)$ et la figure 7.5 montre les normes «hydrostatiques» (Rappel : la norme est $\langle \left| \text{tr} \left(\hat{\mu}_{h}^k \right) \right| \rangle$) des modes $\hat{\mu}_{h}^1(x)$, identifiés par phase et pour le premier trajet de chargement élémentaire, à savoir $\underline{\Sigma}_0^1$.

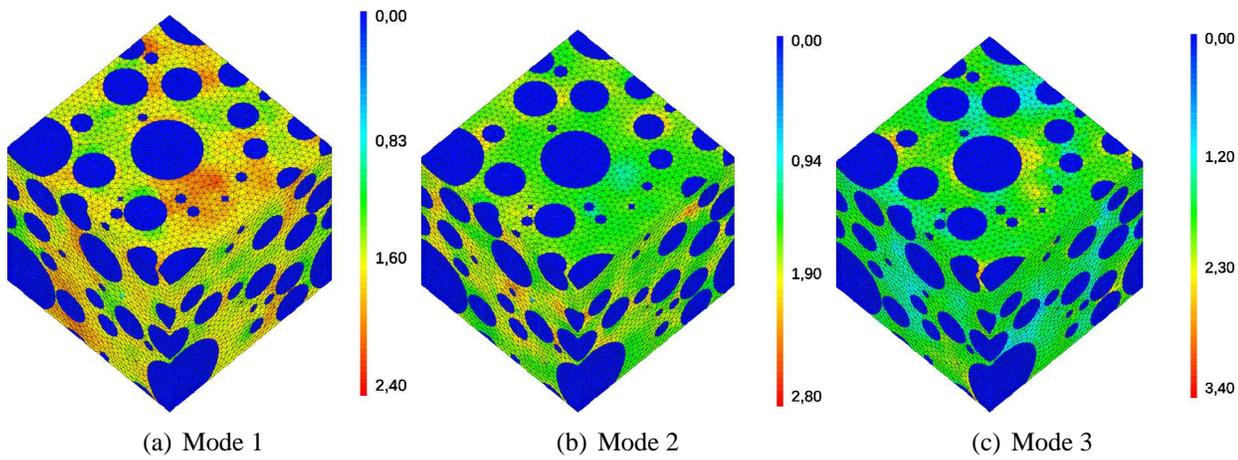


FIG. 7.2: Matrice - Norme équivalente des modes plastiques pour le chargement $\underline{\Sigma}_0^1$

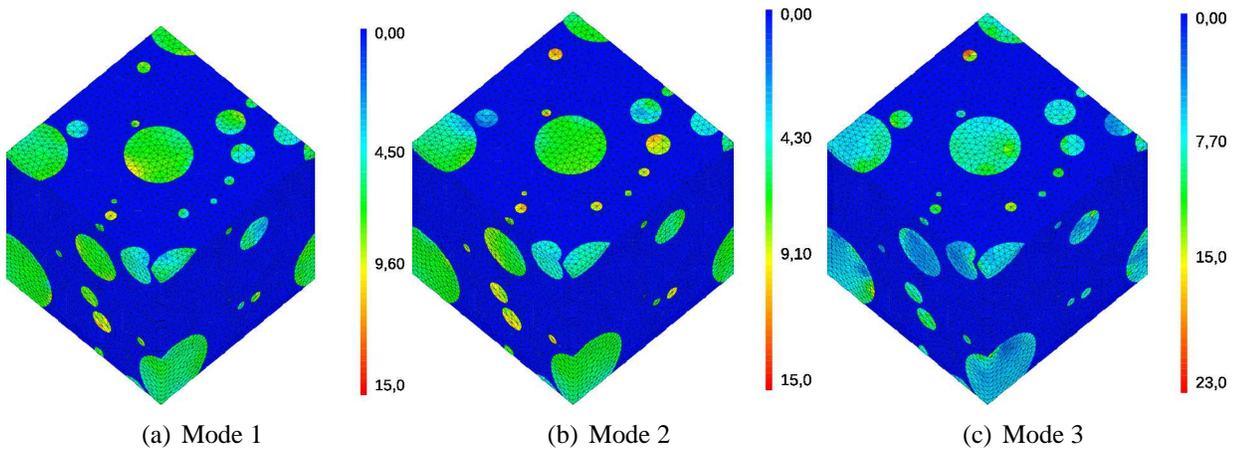


FIG. 7.3: Amas Pu - Norme équivalente des modes plastiques pour le chargement $\underline{\Sigma}_0^1$

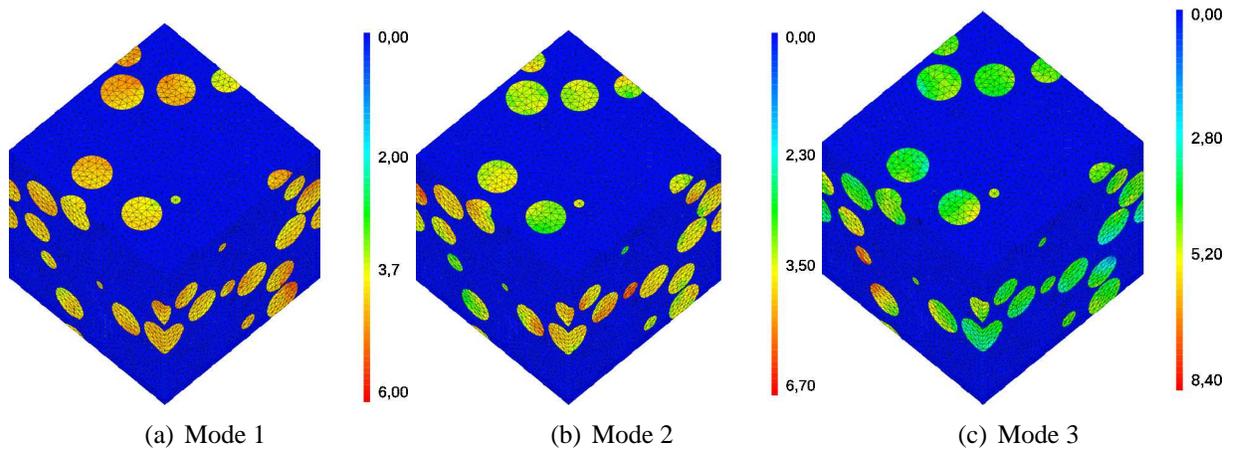


FIG. 7.4: Amas U - Norme équivalente des modes plastiques pour le chargement $\underline{\Sigma}_0^1$

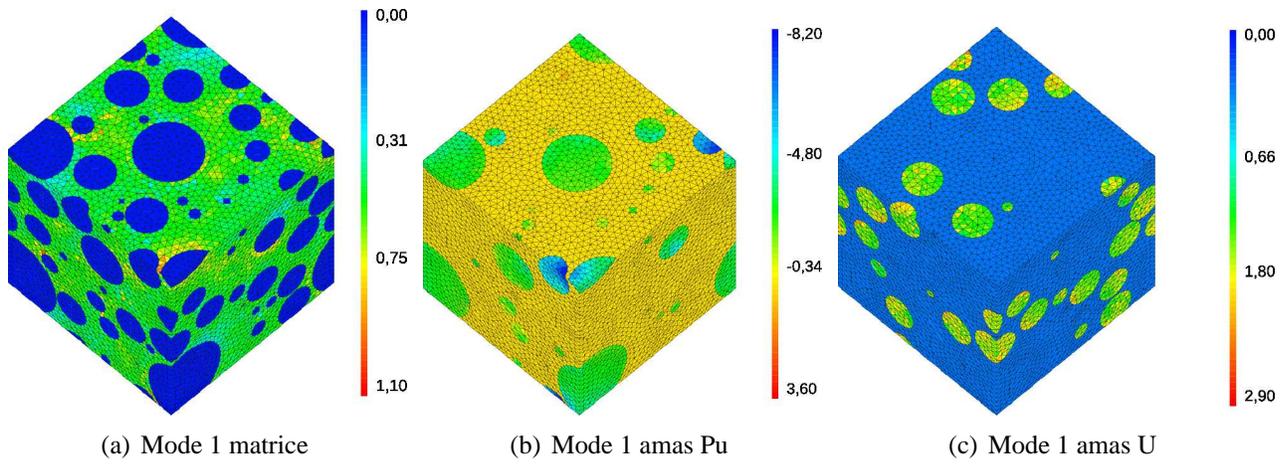


FIG. 7.5: Matrice, amas Pu et U - Norme hydrostatique des modes plastiques pour le chargement $\underline{\Sigma}_0^1$

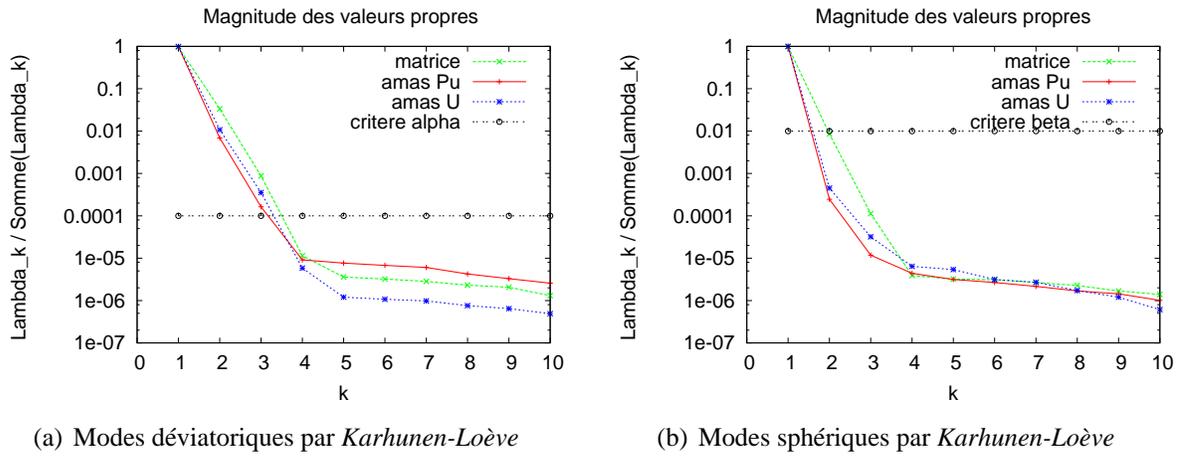


FIG. 7.6: Chargement $\underline{\Sigma}_0^1$ - VER 3D

Pour ce trajet de chargement $\underline{\underline{\Sigma}}_0^1$, nous constatons que trois modes déviatoriques par phase ont été sélectionnés via la méthode de *Karhunen-Loève* et un mode sphérique par phase. Les figures 7.6(a) et 7.6(b) illustrent ces propos. Nous rappelons au lecteur que le critère α a été fixé à 1.10^{-4} et β a été fixé à 1.10^{-2} . Le critère β a été réduit à 1.10^{-2} car nous avons constaté que la méthode de *Karhunen-Loève* sélectionnait beaucoup de modes similaires à 1.10^{-4} .

Pour l'ensemble des trajets de chargements (7 au total), la méthode de *Karhunen-Loève* nous a donc sélectionné 78 modes plastiques dont 57 modes déviatoriques et 21 modes sphériques. Ces modes sont bien orthogonaux entre eux. **Notre modèle NTFA sera donc constitué de 57 variables internes $\tilde{\underline{\underline{\epsilon}}}_k^{vp}$ et 21 variables internes $\hat{\underline{\underline{\epsilon}}}_k^{vp}$ ce qui est cohérent avec l'objectif de construire un modèle réduit.**

Nous rappelons au lecteur qu'au départ, c'est à dire avant la transformée de *Karhunen-Loève*, nous avons 25 champs $\underline{\underline{\theta}}^k$ déviatoriques et 25 champs $\underline{\underline{\hat{\theta}}}^k$ sphériques par phase et par trajet de chargement. Soit un modèle à 525 variables internes déviatoriques et 525 variables internes sphériques. Nous étions donc très loin d'un modèle réduit. D'autre part, ce modèle, en l'état, était inexploitable car les champs $\underline{\underline{\theta}}^k$ ou $\underline{\underline{\hat{\theta}}}^k$ n'étaient pas orthogonaux deux à deux. Les modes plastiques de notre modèle NTFA étant évalués, nous devons maintenant calculer l'ensemble des paramètres indispensables à celui-ci. C'est donc l'objet du paragraphe suivant.

7.2.3 Calculs des paramètres de la NTFA

Avec l'approximation (7.8), on a vu que :

$$\underline{\underline{\epsilon}}(\underline{\underline{x}}) = \underline{\underline{A}}(\underline{\underline{x}}) : \underline{\underline{E}} + \sum_{l=1}^M (\underline{\underline{D}} * \underline{\underline{\tilde{\mu}}^l})(\underline{\underline{x}}) \tilde{\underline{\underline{\epsilon}}}_l^{vp} + \sum_{p=1}^P (\underline{\underline{D}} * \underline{\underline{\hat{\mu}}^p})(\underline{\underline{x}}) \hat{\underline{\underline{\epsilon}}}_p^{vp} + \sum_{r=1}^N (\underline{\underline{D}} * \underline{\underline{\chi}}^{(r)} \underline{\underline{i}})(\underline{\underline{x}}) \underline{\underline{\epsilon}}_r^{gs} . \quad (7.27)$$

Dans cette expression, plusieurs paramètres doivent être déterminés pour pouvoir ensuite intégrer le modèle NTFA. La première étape consiste à évaluer le tenseur de localisation des déformations élastiques $\underline{\underline{A}}(\underline{\underline{x}})$.

1^{ère} étape : calcul du tenseur de localisation des déformations élastiques :

Comme dans le chapitre 6, nous avons supposé que les propriétés élastiques étaient homogènes, nous avons donc $\underline{\underline{A}}(\underline{\underline{x}}) = \underline{\underline{I}}$ avec $\underline{\underline{I}}$ le tenseur identité. Néanmoins, pour les personnes qui souhaiteraient utiliser des propriétés élastiques hétérogènes, nous renvoyons le lecteur au paragraphe 6.2.3 chapitre 6 pour obtenir la démarche permettant d'évaluer ce tenseur de localisation. Celui-ci est obtenu en résolvant, par exemple par éléments finis, successivement les six problèmes d'élasticité linéaire 6.14 sur le VER retenu (Cf. figure 7.1)

Dès lors on obtient le tenseur de rigidité effectif par la relation suivante $\underline{\underline{\tilde{C}}} = \left\langle \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{A}} \right\rangle$. Connaissant le tenseur de localisation des déformations élastiques $\underline{\underline{A}}$, on peut donc évaluer les tenseurs de localisation des déformations réduites en appliquant les relations suivantes $\underline{\underline{\tilde{a}}}_k = \left\langle \underline{\underline{\tilde{\mu}}^k} : \underline{\underline{A}} \right\rangle$ et $\underline{\underline{\hat{a}}}_k = \left\langle \underline{\underline{\hat{\mu}}^k} : \underline{\underline{A}} \right\rangle$. Dans notre cas, élasticité homogène, nous avons donc $\underline{\underline{\tilde{C}}} = \underline{\underline{C}}$, $\underline{\underline{\tilde{a}}}_k = \left\langle \underline{\underline{\tilde{\mu}}^k} \right\rangle$ et $\underline{\underline{\hat{a}}}_k = \left\langle \underline{\underline{\hat{\mu}}^k} \right\rangle$. La deuxième étape consiste à évaluer les tenseurs ainsi que les facteurs d'influence du modèle NTFA.

2^{ème} étape : calcul des tenseurs d'influence et des facteurs d'influence :

Pour les obtenir, on doit résoudre, par exemple par éléments finis (dans notre cas nous avons utilisé le code Cast3m (Cf. [<http://www.cast3m.cea.fr>])), les M problèmes d'élasticité linéaire (7.28) (M étant le nombre de modes déviatoriques, soit ici $M = 57$) et les P problèmes d'élasticité linéaire (7.29) (P étant le nombre de modes sphériques, soit ici $P = 21$) sur le VER retenu (Cf. figure 7.1) :

$$\begin{cases} \operatorname{div}(\underline{\underline{\sigma}}(x)) = 0 , \\ \underline{\underline{\sigma}}(x) = \underline{\underline{C}}(x) : (\underline{\underline{\varepsilon}}(x) - \underline{\underline{\tilde{\mu}}}(x)) , \\ \langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle = 0 . \end{cases} \quad (7.28)$$

avec $\underline{\underline{\tilde{\mu}}} = \underline{\underline{\tilde{\mu}}}^k$, où $k = 1, \dots, M(r)$. Le tenseur d'influence $\underline{\underline{D}} * \underline{\underline{\tilde{\mu}}}^k(x)$ correspond donc au champ de déformations solution du $k^{\text{ième}}$ problème (7.28).

$$\begin{cases} \operatorname{div}(\underline{\underline{\sigma}}(x)) = 0 , \\ \underline{\underline{\sigma}}(x) = \underline{\underline{C}}(x) : (\underline{\underline{\varepsilon}}(x) - \underline{\underline{\hat{\mu}}}(x)) , \\ \langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle = 0 . \end{cases} \quad (7.29)$$

avec $\underline{\underline{\hat{\mu}}} = \underline{\underline{\hat{\mu}}}^k$, où $k = 1, \dots, P(r)$. Le tenseur d'influence $\underline{\underline{D}} * \underline{\underline{\hat{\mu}}}^k(x)$ correspond donc au champ de déformations solution du $k^{\text{ième}}$ problème (7.29).

On peut donc ensuite évaluer les facteurs d'influence \tilde{D}_{kl} , \tilde{F}_{kp} , \hat{D}_{kp} et \hat{F}_{kl} par les relations suivantes $\tilde{D}_{kl} = \left\langle \underline{\underline{\tilde{\mu}}}^k : (\underline{\underline{D}} * \underline{\underline{\tilde{\mu}}}^l) \right\rangle$, $\tilde{F}_{kp} = \left\langle \underline{\underline{\tilde{\mu}}}^k : (\underline{\underline{D}} * \underline{\underline{\hat{\mu}}}^p) \right\rangle$, $\hat{D}_{kp} = \left\langle \underline{\underline{\hat{\mu}}}^k : (\underline{\underline{D}} * \underline{\underline{\hat{\mu}}}^p) \right\rangle$ et $\hat{F}_{kl} = \left\langle \underline{\underline{\hat{\mu}}}^k : (\underline{\underline{D}} * \underline{\underline{\tilde{\mu}}}^l) \right\rangle$ ainsi que les coefficients $\tilde{\rho}^k$ et $\hat{\rho}^k$ par les relations suivantes $\tilde{\rho}^k = \left(\left\langle \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{D}} * \underline{\underline{\tilde{\mu}}}^k \right\rangle - \left\langle \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{\tilde{\mu}}}^k \right\rangle \right)$ et $\hat{\rho}^k = \left(\left\langle \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{D}} * \underline{\underline{\hat{\mu}}}^k \right\rangle - \left\langle \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{\hat{\mu}}}^k \right\rangle \right)$.

Du fait de la présence des déformations libres, type gonflement solide, nous devons également évaluer les $\underline{\underline{D}} * \chi^{(r)} \underline{\underline{i}}$, les \tilde{H}_{kr} , les \hat{H}_{kr} et les $\left\langle \underline{\underline{\hat{\mu}}}^k : \chi^{(r)} \underline{\underline{i}} \right\rangle$. Pour obtenir les $\underline{\underline{D}} * \chi^{(r)} \underline{\underline{i}}$, nous devons résoudre, par exemple par éléments finis (dans notre cas nous avons utilisé le code Cast3m (Cf. [<http://www.cast3m.cea.fr>])), les r problèmes d'élasticité linéaire (7.30) (r étant le nombre de phase, soit ici $r = 3$) sur le VER retenu (Cf. figure 7.1) :

$$\begin{cases} \operatorname{div}(\underline{\underline{\sigma}}(x)) = 0 , \\ \underline{\underline{\sigma}}(x) = \underline{\underline{C}}(x) : (\underline{\underline{\varepsilon}}(x) - \chi^{(r)}(x) \underline{\underline{i}}) , \\ \langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle = 0 . \end{cases} \quad (7.30)$$

Le tenseur d'influence $\left(\underline{\underline{D}} * \chi^{(r)} \underline{\underline{i}}\right) (\underline{\underline{x}})$, correspond donc au champ de déformations solution du $r^{\text{ième}}$ problème (7.30). On peut donc ensuite évaluer les facteurs d'influence \tilde{H}_{kr} et \hat{H}_{kr} par les relations suivantes $\tilde{H}_{kr} = \left\langle \underline{\underline{\hat{\mu}}}^k : \left(\underline{\underline{D}} * \chi^{(r)} \underline{\underline{i}}\right) \right\rangle$ et $\hat{H}_{kr} = \left\langle \underline{\underline{\hat{\mu}}}^k : \left(\underline{\underline{D}} * \chi^{(r)} \underline{\underline{i}}\right) \right\rangle$, ainsi que les coefficients $\underline{\underline{\rho}}^r$ par la relation suivante $\underline{\underline{\rho}}^r = \left\langle \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{D}} * \chi^{(r)} \underline{\underline{i}} \right\rangle - \left\langle \underline{\underline{C}} : \chi^{(r)} \underline{\underline{i}} \right\rangle$.

Les modes plastiques étant connus ainsi que les différents paramètres de notre modèle NTFA, la dernière étape est donc l'intégration de notre loi de comportement (modèle NTFA). C'est donc l'objet du paragraphe suivant.

7.2.4 Intégration de la loi de comportement

Le schéma d'intégration présenté, ci-dessous, est celui utilisé pour des essais à vitesse de déformation et à direction de contrainte imposées, essais nommés dans notre document essais d'«écrouissage».

– **Pas de temps $t + \Delta t$:**

Au pas $t + \Delta t$, les variables $\tilde{e}_t, \tilde{e}_t^{vp}, \tilde{\tau}_t, \hat{e}_t, \hat{e}_t^{vp}, \hat{\sigma}_t, \hat{e}_t^{gs}$ et $\underline{\underline{E}}_t$ sont connues. On connaît également \hat{e}_t^{gs} . On cherche les variables suivantes : $\tilde{e}_{t+\Delta t}, \tilde{e}_{t+\Delta t}^{vp}, \tilde{\tau}_{t+\Delta t}, \hat{e}_{t+\Delta t}, \hat{e}_{t+\Delta t}^{vp}, \hat{\sigma}_{t+\Delta t}, \underline{\underline{E}}_{t+\Delta t}$ et $\underline{\underline{\Sigma}}_{t+\Delta t}$.

– **Itération i+1 :**

Les variables $\tilde{e}_{t+\Delta t}^i, \hat{e}_{t+\Delta t}^i, \tilde{\tau}_{t+\Delta t}^i$ et $\hat{\sigma}_{t+\Delta t}^i$ sont connues.

Le chargement imposé est égal à $\underline{\underline{E}}_{t+\Delta t}^i$ tel que $\underline{\underline{\Sigma}}^0 : \underline{\underline{E}}_{t+\Delta t}^i = c * (t + \Delta t)$ où c est la vitesse de déformation imposée et $\underline{\underline{\Sigma}}^0$ le tenseur de direction de contrainte imposée.

1. Calcul des contraintes réduites : $(\tilde{\tau}_k)_{t+\Delta t}^{i+1}$ et $(\hat{\sigma}_k)_{t+\Delta t}^{i+1}$. Le calcul est détaillé en fin de paragraphe.
2. Calcul des déformations viscoplastiques :

$$\left\{ \begin{array}{l} (\tilde{e}_k^{vp})_{t+\Delta t}^{i+1} = (\tilde{e}_k)_t^i - \frac{(\tilde{\tau}_k)_{t+\Delta t}^{i+1}}{2G^r}, \quad (\tilde{\epsilon}_k^{vp})_{t+\Delta t}^{i+1} = \frac{(\tilde{e}_k^{vp})_{t+\Delta t}^{i+1}}{\left\langle \underline{\underline{\hat{\mu}}}^k : \underline{\underline{\hat{\mu}}}^k \right\rangle} \\ (\hat{e}_k^{vp})_{t+\Delta t}^{i+1} = (\hat{e}_k)_t^i - (\hat{e}_k^{gs})_{t+\Delta t} - \frac{(\hat{\sigma}_k)_{t+\Delta t}^{i+1}}{3K^r}, \quad (\hat{\epsilon}_k^{vp})_{t+\Delta t}^{i+1} = \frac{(\hat{e}_k^{vp})_{t+\Delta t}^{i+1}}{\left\langle \underline{\underline{\hat{\mu}}}^k : \underline{\underline{\hat{\mu}}}^k \right\rangle} \end{array} \right. \quad (7.31)$$

3. Calcul de la contrainte macroscopique :

$$\underline{\underline{\Sigma}}_{t+\Delta t}^{i+1} = \underline{\underline{\tilde{C}}} : \underline{\underline{E}}_{t+\Delta t}^i + \sum_{l=1}^M \underline{\underline{\tilde{\rho}}}^l (\tilde{\epsilon}_l^{vp})_{t+\Delta t}^{i+1} + \sum_{p=1}^P \underline{\underline{\hat{\rho}}}^p (\hat{\epsilon}_p^{vp})_{t+\Delta t}^{i+1} + \sum_{r=1}^N \underline{\underline{\rho}}^r (\epsilon_r^{gs})_{t+\Delta t} \quad (7.32)$$

4. Mise à jour des déformations réduites $(\tilde{e}_k)_{t+\Delta t}^{i+1}$ et $(\hat{e}_k)_{t+\Delta t}^{i+1}$:

$$\begin{cases} (\tilde{e}_k)_{t+\Delta t}^{i+1} = \underline{\tilde{a}}_k : \underline{E}_{t+\Delta t}^i + \sum_{l=1}^M \tilde{D}_{kl} (\tilde{\epsilon}_l^{vp})_{t+\Delta t}^{i+1} + \sum_{p=1}^P \tilde{F}_{kp} (\hat{\epsilon}_p^{vp})_{t+\Delta t}^{i+1} + \sum_{r=1}^N \tilde{H}_{kr} (\epsilon_r^{gs})_{t+\Delta t} \\ (\hat{e}_k)_{t+\Delta t}^{i+1} = \underline{\hat{a}}_k : \underline{E}_{t+\Delta t}^i + \sum_{l=1}^M \hat{F}_{kl} (\tilde{\epsilon}_l^{vp})_{t+\Delta t}^{i+1} + \sum_{p=1}^P \hat{D}_{kp} (\hat{\epsilon}_p^{vp})_{t+\Delta t}^{i+1} + \sum_{r=1}^N \hat{H}_{kr} (\epsilon_r^{gs})_{t+\Delta t} \end{cases} \quad (7.33)$$

1er test de convergence :

$$\max [\max_{l=1, \dots, M} [|(\tilde{e}_l)_{t+\Delta t}^{i+1} - (\tilde{e}_l)_{t+\Delta t}^i|] , \max_{p=1, \dots, P} [|(\hat{e}_p)_{t+\Delta t}^{i+1} - (\hat{e}_p)_{t+\Delta t}^i|]] \leq \delta \Delta t \text{ avec } \delta = 10^{-6}$$

5. Mise à jour de la déformation macroscopique.

On calcule le niveau de contrainte $\lambda_{t+\Delta t}^{i+1}$:

$$\lambda_{t+\Delta t}^{i+1} = \frac{\underline{\Sigma}_0 : \tilde{\underline{C}}^{-1} : \underline{\Sigma}_{t+\Delta t}^{i+1}}{\underline{\Sigma}_0 : \tilde{\underline{C}}^{-1} : \underline{\Sigma}_0} \quad (7.34)$$

Pour mettre à jour la déformation macroscopique on utilise la relation suivante :

$$\underline{E}_{t+\Delta t}^{i+1} = \underline{E}_{t+\Delta t}^i + \tilde{\underline{C}}^{-1} : \left[\lambda_{t+\Delta t}^{i+1} \underline{\Sigma}_0 - \underline{\Sigma}_{t+\Delta t}^{i+1} \right] \quad (7.35)$$

2ème test de convergence :

$$\frac{|\underline{E}_{t+\Delta t}^{i+1} - \underline{E}_{t+\Delta t}^i|}{\|\underline{E}_{t+\Delta t}^{i+1}\|} \leq \varepsilon \text{ avec } \varepsilon = 10^{-6}$$

Développement de l'étape 1 :

1. Estimation des vitesses de déformations réduites :

$$(\dot{\tilde{e}}_k)_{t+\Delta t}^{i+1} = \frac{(\tilde{e}_k)_{t+\Delta t}^{i+1} - (\tilde{e}_k)_t}{\Delta t} , \quad (\dot{\hat{e}}_k)_{t+\Delta t}^{i+1} = \frac{(\hat{e}_k)_{t+\Delta t}^{i+1} - (\hat{e}_k)_t}{\Delta t} \quad (7.36)$$

2. Calcul des contraintes réduites :

$$\begin{cases} (\dot{\tilde{\tau}}_k)_{t+\Delta t}^{i+1} = 2G^r [(\dot{\tilde{e}}_k)_{t+\Delta t}^{i+1} - (\dot{\tilde{e}}_k^{vp})_{t+\Delta t}^{i+1}] = \tilde{h}((\tilde{\tau}_k)_{t+\Delta t}^{i+1}, (\hat{\sigma}_k)_{t+\Delta t}^{i+1}) \\ \text{avec } (\dot{\tilde{e}}_k^{vp})_{t+\Delta t}^{i+1} = \frac{1}{2G_r^{vp}} (\tilde{\tau}_k)_{t+\Delta t}^{i+1} \\ (\dot{\hat{\sigma}}_k)_{t+\Delta t}^{i+1} = 3K^r [(\dot{\hat{e}}_k)_{t+\Delta t}^{i+1} - (\dot{\hat{e}}_k^{vp})_{t+\Delta t}^{i+1} - (\dot{\hat{e}}_k^{gs})_{t+\Delta t}^{i+1}] = \hat{h}((\hat{\sigma}_k)_{t+\Delta t}^{i+1}, (\tilde{\tau}_k)_{t+\Delta t}^{i+1}) \\ \text{avec } (\dot{\hat{e}}_k^{vp})_{t+\Delta t}^{i+1} = \frac{1}{3K_r^{vp}} (\hat{\sigma}_k)_{t+\Delta t}^{i+1} \text{ et } (\dot{\hat{e}}_k^{gs})_{t+\Delta t}^{i+1} = \sum_{r=1}^N \langle \hat{\underline{\mu}}^k : \underline{\chi}^{(r)} \underline{i} \rangle \dot{\epsilon}_r^{gs} . \end{cases} \quad (7.37)$$

On résout donc sur l'intervalle de temps $[t, t + \Delta t]$ le système différentiel suivant :

$$\begin{cases} \dot{\tau} = h(\tau) \\ \tau(t) = \tau_t \end{cases} \quad (7.38)$$

$$\text{avec } h = \begin{Bmatrix} \tilde{h} \\ \hat{h} \end{Bmatrix} \text{ et } \tau = \begin{Bmatrix} \tilde{\tau} \\ \hat{\sigma} \end{Bmatrix}$$

Pour cela on utilise un schéma de *Runge-Kutta* d'ordre 5 à pas contrôlés.

7.2.5 Conclusion

Nous avons présenté dans ce paragraphe la **mise en oeuvre du modèle NTFA pour un composite particulaire triphasé et tridimensionnel (3D) ayant un comportement local visco-élastique linéaire compressible avec déformations libres imposées**. La **première étape importante** de mise en oeuvre du modèle est la **détermination des modes plastiques**. En 3D et pour le comportement local étudié ici (**impact des déformations libres**), **7 trajets de chargements ont été considérés pour identifier ces modes plastiques**. La transformée de *Karhunen-Loève* nous a permis de sélectionner les modes prépondérants et de les orthogonaliser deux à deux : **57 modes déviatoriques et 21 modes sphériques**. L'objectif d'un modèle réduit (à faible nombre de variables internes) a donc été atteint. La **deuxième étape** est le **calcul des paramètres du modèle NTFA** : les tenseurs de localisation réduits, d'influence, les facteurs d'influence ainsi que les tenseurs entrant dans l'équation donnant la contrainte macroscopique. La **troisième étape importante** est **l'intégration des relations constitutives du modèle**.

Cette mise en oeuvre va nous permettre, dans le paragraphe suivant, de présenter les prédictions effectives et locales de ce modèle par rapport à des calculs de référence.

7.3 Résultats - essais non vieillissants

Nous allons donc tout au long de ce paragraphe comparer la prédiction du modèle NTFA (modèle développé dans les paragraphes précédents) par rapport à des calculs de référence que nous avons réalisés avec le code aux éléments finis Cast3m (Cf. [<http://www.cast3m.cea.fr/>]). Les calculs de référence seront notés FEM tandis que les calculs réalisés avec le modèle NTFA seront notés NTFA. L'ensemble des calculs, présentés ci-dessous, utilisent les propriétés matériaux (Cf. tableau 7.2) qui ont servi à identifier les modes et le comportement local présenté dans les paragraphes précédents.

7.3.1 Comportement effectif

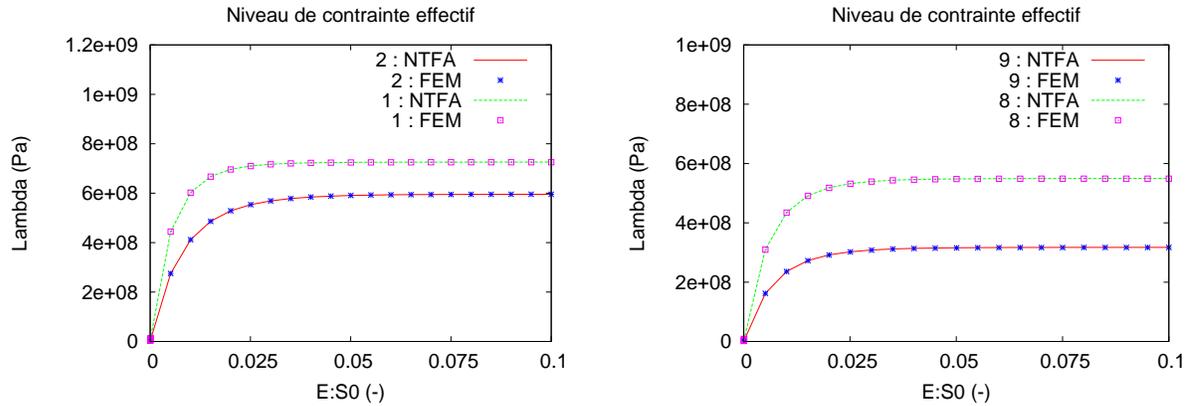
7.3.1.1 Essais d'«écrouissage»

Les réponses effectives (FEM et NTFA) sont déterminés numériquement en simulant la réponse du composite (Cf. figure 7.1) le long de trajets de chargement radiaux dans l'espace des contraintes macroscopiques $\underline{\underline{\Sigma}}(t) = \lambda(t)\underline{\underline{\Sigma}}_0^k$ (pilotage dit à direction de contrainte et à vitesse de déformation imposées : voir chapitre 3 paragraphe 3.8.3 de la référence [BORNERT et al., 2001]). Nos essais k sont réalisés jusqu'à $\underline{\underline{E}} : \underline{\underline{\Sigma}}_0^k = 10\%$ avec $\underline{\underline{E}} : \underline{\underline{\Sigma}}_0^k$ fixée à $10^{-2}s^{-1}$ (vitesse qui a servi à identifier les modes). Nous avons évalué le niveau de contrainte macroscopique $\lambda(t)$ pour quatre cas de trajet de chargement $\underline{\underline{\Sigma}}(t) = \lambda(t)\underline{\underline{\Sigma}}_0^{(k)}$:

1. $\underline{\underline{\Sigma}}_0^{(1)}$ correspondant au chargement de traction uniaxiale.

2. $\underline{\underline{\Sigma}}_0^{(2)}$ correspondant au chargement en cisaillement pur.
3. $\underline{\underline{\Sigma}}_0^{(8)}$ correspondant au chargement suivant $\underline{\underline{\Sigma}}_0^{(8)} = \underline{\underline{\Sigma}}_0^{(1)} + \frac{1}{2}\underline{\underline{\Sigma}}_0^{(2)}$.
4. $\underline{\underline{\Sigma}}_0^{(9)}$ correspondant au chargement suivant $\underline{\underline{\Sigma}}_0^{(9)} = \underline{\underline{\Sigma}}_0^{(1)} + \underline{\underline{\Sigma}}_0^{(2)}$.

La figure 7.7(a) présente les prédictions macroscopiques du modèle NTFA par rapport aux éléments finis FEM, pour deux trajets de chargements élémentaires, à savoir $\underline{\underline{\Sigma}}_0^1$, nommé 1 sur la figure 7.7(a), et $\underline{\underline{\Sigma}}_0^2$, nommé 2 sur la figure 7.7(a). Pour ces deux trajets, nous constatons une très bonne prédiction du modèle NTFA par rapport aux éléments finis bien que ces trajets n'aient pas servi à identifier les modes. En effet, il y a ici du gonflement solide.



(a) Chargements hors identification des modes

- 1 : $S_0 = \underline{\underline{\Sigma}}_0^1$ traction uniaxiale 11
- 2 : $S_0 = \underline{\underline{\Sigma}}_0^2$ cisaillement pur 12

(b) Chargements hors identification des modes

- 8 : $S_0 = \underline{\underline{\Sigma}}_0^1 + \frac{1}{2}\underline{\underline{\Sigma}}_0^2$
- 9 : $S_0 = \underline{\underline{\Sigma}}_0^1 + \underline{\underline{\Sigma}}_0^2$

FIG. 7.7: Essai d'«écrouissage» $\underline{\underline{\dot{E}}} : \underline{\underline{\Sigma}}_0^k$ est fixée à $10^{-2}s^{-1}$ avec gonflement solide

Sur la figure 7.7(b), nous présentons également les prédictions du modèle NTFA par rapport aux éléments finis FEM, pour les essais nommés 8 et 9. Nous rappelons que ces essais n'ont également pas servi à identifier les modes. Pour ces deux essais, nous constatons également une très bonne prédiction du modèle NTFA. Il est important de souligner que le calcul aux éléments finis nécessite un temps de calcul de 3 heures tandis que le modèle NTFA nécessite moins de 2 secondes. L'ensemble de ces essais ont été réalisés avec une vitesse de déformation imposée de $10^{-2}s^{-1}$. Cette vitesse est celle qui a servi à identifier les modes. Nous avons donc voulu tester la prédiction de notre modèle NTFA si nous changions cette vitesse de déformation. Par conséquent, deux essais de traction uniaxiale $\underline{\underline{\Sigma}}_0^{(1)}$ ont été réalisés, pendant 10 secondes, avec $\underline{\underline{\dot{E}}} : \underline{\underline{\Sigma}}_0^k$ fixée à $10^{-1}s^{-1}$ et l'autre fixée à $5.10^{-2}s^{-1}$. Les résultats sont exposés sur la figure 7.8.

Quelle que soit la vitesse, nous constatons une bonne prédiction du modèle. Pour la loi de comportement utilisée, nous pouvons donc affirmer que la vitesse de déformation, ayant servi à identifier les modes, n'a pas d'impact sur la prédiction effective du modèle. Ces résultats sont cohérents avec [ROUSETTE, 2005]. Les modes de notre modèle ont été identifiés pour des essais dits d'«écrouissage». Par conséquent, nous avons également analysé la prédiction effective du modèle pour des essais de fluage et de relaxation. C'est donc l'objet du paragraphe suivant.

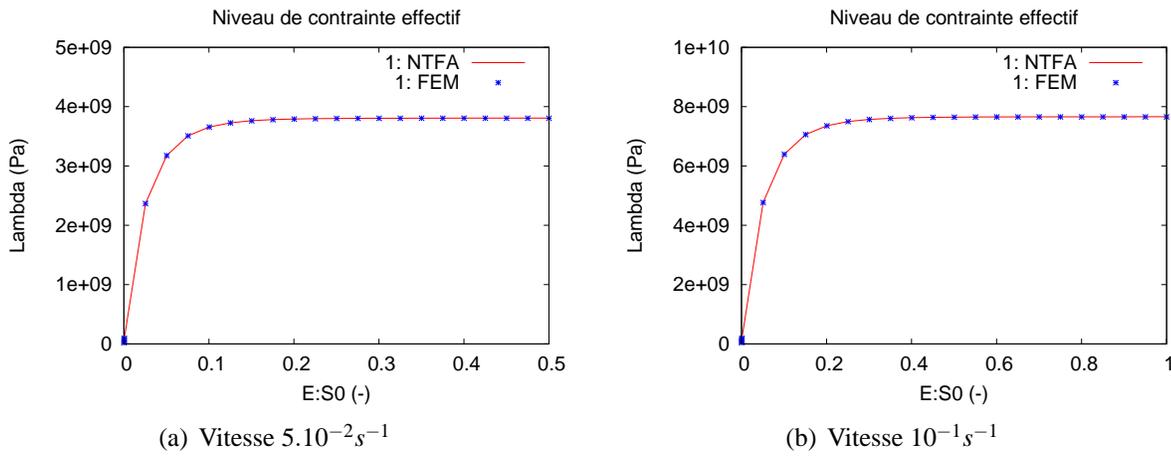


FIG. 7.8: Essai d'«écrouissage» - traction uniaxiale $\underline{\underline{\Sigma}}_0^{(1)}$ avec gonflement solide

7.3.1.2 Essais de fluage et de relaxation

La figure 7.9(a) présente la prédiction macroscopique du modèle NTFA pour un essai de fluage à contrainte uniaxiale (direction 33 - $\Sigma_{33} = 100MPa$) sans gonflement solide, tandis que la figure 7.9(b) présente la prédiction macroscopique du modèle pour un essai de relaxation uniaxiale (direction 33 - $E_{33} = 2\%$) sans gonflement solide. Bien que les modes aient été identifiés pour des essais d'écrouissage, nous constatons toujours une très bonne prédiction effective du modèle NTFA.

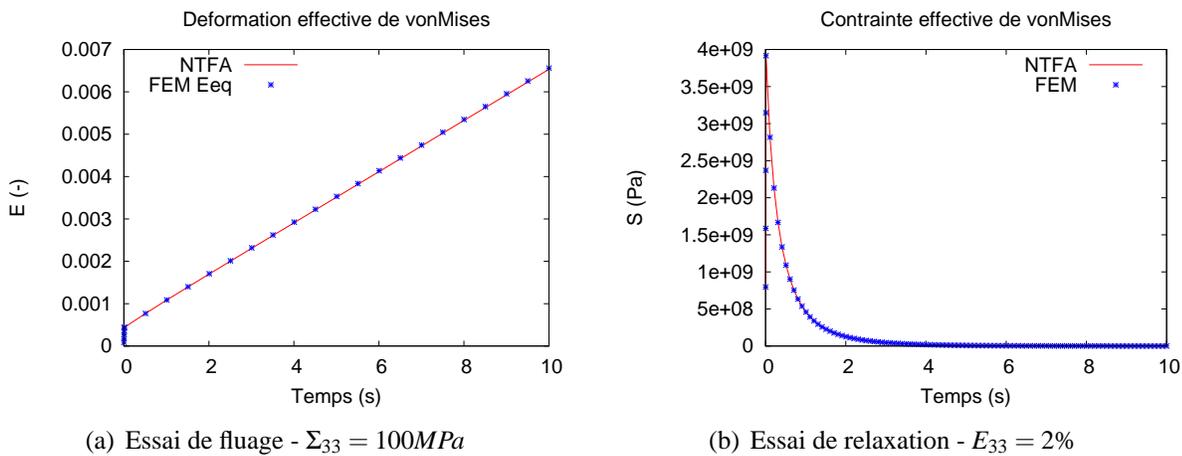


FIG. 7.9: Essais de fluage et de relaxation sans gonflement solide ($\dot{\epsilon}_r^{gs} = 0$)

Nous avons également analysé la prédiction effective du modèle pour un essai tournant. C'est donc l'objet du paragraphe suivant.

7.3.1.3 Essai tournant

La figure 7.10 présente la prédiction macroscopique du modèle pour l'essai tournant sans gonflement solide défini ci-dessous :

$$\begin{cases} E_{11} = 1.10^{-1} \sin(\omega t) \\ E_{12} = 1.10^{-1} (1.0 - \cos(\omega t)) \end{cases} \quad (7.39)$$

avec E_{11} la composante suivant la direction 11 du tenseur des déformations macroscopiques et E_{12} la composante suivant la direction 12. ω est fixé à $\frac{\pi}{2}$. Nous constatons une bonne prédiction effective du modèle.

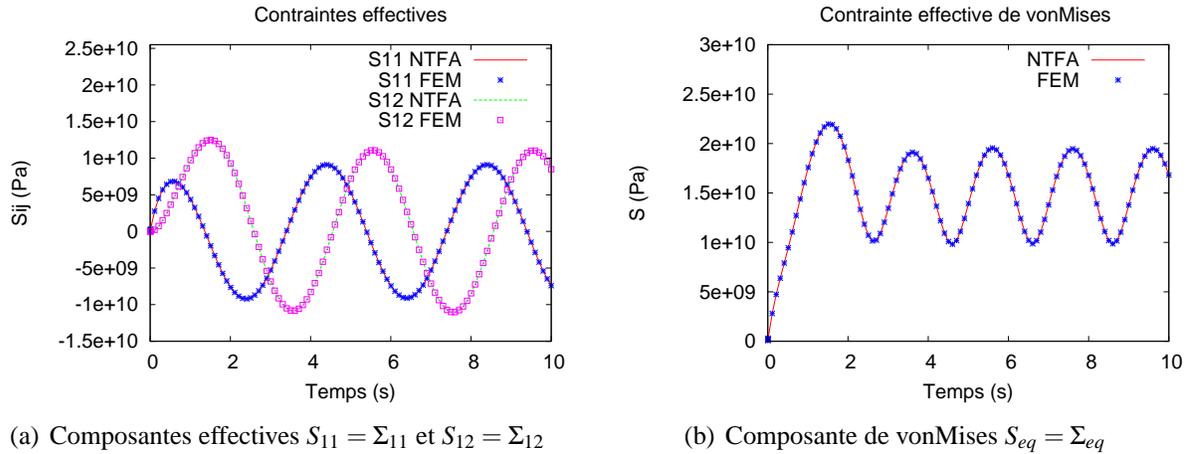


FIG. 7.10: Essai tournant sans gonflement solide ($\dot{\epsilon}_r^{gs} = 0$)

Nous rappelons au lecteur que notre modèle NTFA a été identifié pour une microstructure donnée (Cf. figure 7.1). Il est donc a priori dépendant de celle-ci. Cette microstructure correspond à celle présentée au chapitre 5 paragraphe 5.2.1 figure 5.4(a) : nous l'avons appelée tirage 1 au chapitre 6 et nous continuerons à la nommer ainsi. Au chapitre 5 paragraphe 5.2.4 nous avons montré une quasi indépendance du comportement effectif, du premier moment et de l'écart type de la variable analysée, à la microstructure considérée (Rappel : huit tirages de microstructures (Cf. figure 5.4)).

Nous avons donc voulu analyser, ci-dessous, la prédiction effective de notre modèle NTFA par rapport à ces 7 autres tirages supplémentaires (tirages de 2 à 8). Les réponses effectives des 8 VER sont déterminés numériquement par éléments finis en simulant la réponse des composites le long de trajets de chargement radiaux dans l'espace des contraintes macroscopiques $\underline{\Sigma}(t) = \lambda(t) \underline{\Sigma}_0^k$ avec $k = 8$ comme au paragraphe 7.3.1.1. Nous appliquons les mêmes conditions de chargements. Sur la figure 7.11, nous présentons les réponses effectives des différents tirages et du modèle NTFA. Malgré les déformations libres très élevées dans les amas plutonifères (déformations libres très conservatives par rapport à celles qui peuvent se produire en réacteur), nous constatons que la réponse effective du modèle NTFA s'inscrit parfaitement dans la moyenne des 8 VER. En effet, quantitativement, l'écart à la moyenne du niveau de contrainte effectif du modèle NTFA par rapport à la moyenne de ces 8 VER ne dépasse pas 0.2 %. Par conséquent, pour le comportement étudié (visco-élasticité linéaire compressible avec déformation libre imposée) et les contrastes entre les propriétés matériaux utilisés

ici, nous pouvons donc affirmer que la réponse effective de notre modèle NTFA est indépendante de la microstructure sur laquelle il a été identifié.

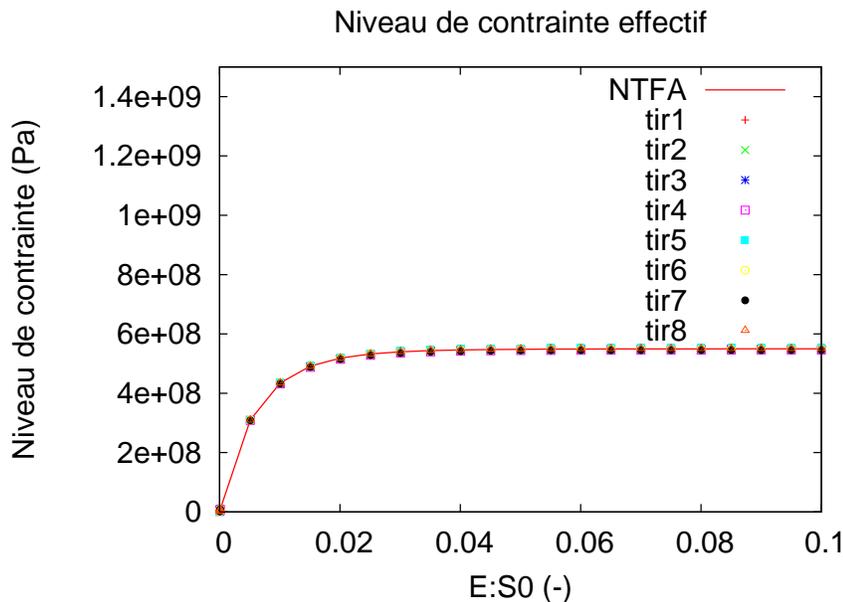


FIG. 7.11: Essai 8 avec gonflement solide - Niveau de contrainte effective - Comparaison FEM (8 tirages) et NTFA

7.3.1.4 Conclusion

Nous avons présenté dans ce paragraphe la prédiction effective de notre modèle NTFA, dédié au comportement du combustible *MOX* en fonctionnement normal (Cf. paragraphe 2.3 chapitre 2), par rapport à des calculs de référence (calculs réalisés par éléments finis : FEM). Tout d'abord, **pour des essais à vitesse de déformation et à direction de contrainte imposées (essais d'«écrouissage»), nous avons constaté une très bonne prédiction effective du modèle. Cette prédiction est excellente (erreur inférieure à 0.2 %) aussi bien pour des trajets de chargement qui ont servi ou qui n'ont pas servi à identifier les modes.** Nous avons également démontré que la vitesse de déformation, ayant servi à identifier les modes, n'a pas ou peu d'impact sur la prédiction effective du modèle. Cette remarque est à prendre avec précaution car elle est à priori fortement dépendante de la loi de comportement locale utilisée. Ensuite, **nous avons également démontré une prédiction effective excellente du modèle NTFA pour des essais de fluage et de relaxation, bien que les modes aient été identifiés sur des essais à vitesse de déformation et à direction de contrainte imposées. L'erreur étant toujours inférieure à 0.2 %.** Nous avons aussi montré que **la réponse effective de notre modèle NTFA était indépendante de la microstructure sur laquelle il avait été identifié, du moins pour le comportement étudié (visco-élasticité linéaire compressible avec déformation libre imposée) et les contrastes entre les propriétés matériaux utilisés ici.** Enfin, il est important de souligner que le calcul aux éléments finis nécessite un temps de calcul de 3 heures tandis que le modèle NTFA nécessite moins de 2 secondes, et ce pour le même degrés de précision sur le comportement effectif.

La méthode NTFA est donc particulièrement attrayante pour sa rapidité d'exécution et sa qualité de prédiction du comportement effectif. **L'extension de la NTFA aux déformations libres, pour un comportement visco-élastique linéaire compressible, a été validée avec succès du point de vue du comportement effectif.** Mais, la prédiction des comportements moyens par phase est elle aussi excellente ? Nous allons donc répondre à cette question dans le paragraphe suivant.

7.3.2 Comportement moyen par phase

7.3.2.1 Essais d'«écrouissage»

Sur la figure 7.12 nous comparons la prédiction de la contrainte équivalente (au sens de *von Mises*) et de la contrainte hydrostatique moyenne par phase entre le modèle NTFA et les éléments finis (FEM). Il s'agit de l'essai 8 présenté au paragraphe 7.3.1.1. Pour cet essai, nous constatons également une très bonne prédiction des comportements moyens par phase (l'erreur commise par le modèle est inférieure à 1.0%).

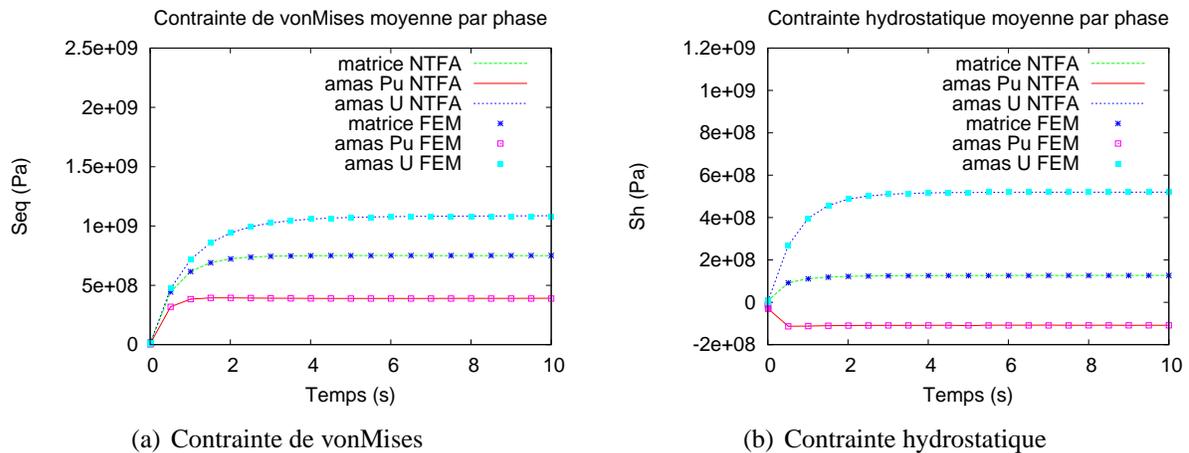


FIG. 7.12: Essai d'«écrouissage» 8 avec gonflement solide - $\underline{\underline{E}} : \underline{\underline{\Sigma}}_0^k$ est fixée à $10^{-2}s^{-1}$

Nous avons également voulu tester la prédiction des comportements moyens par phase de notre modèle NTFA si nous changions la vitesse de déformation imposée. Par conséquent, nous avons repris l'essai de traction uniaxiale $\underline{\underline{\Sigma}}_0^{(1)}$ qui a été présenté au paragraphe 7.3.1.1 avec une vitesse de déformation imposée de $10^{-1}s^{-1}$. Les résultats sont exposés sur la figure 7.13.

Quelle que soit la vitesse, nous constatons toujours une très bonne prédiction des comportements moyens par phase. Nous avons également analysé la prédiction des comportements moyens par phase du modèle pour les essais de fluage et de relaxation exposés au paragraphe 7.3.1.2. C'est donc l'objet du paragraphe suivant.

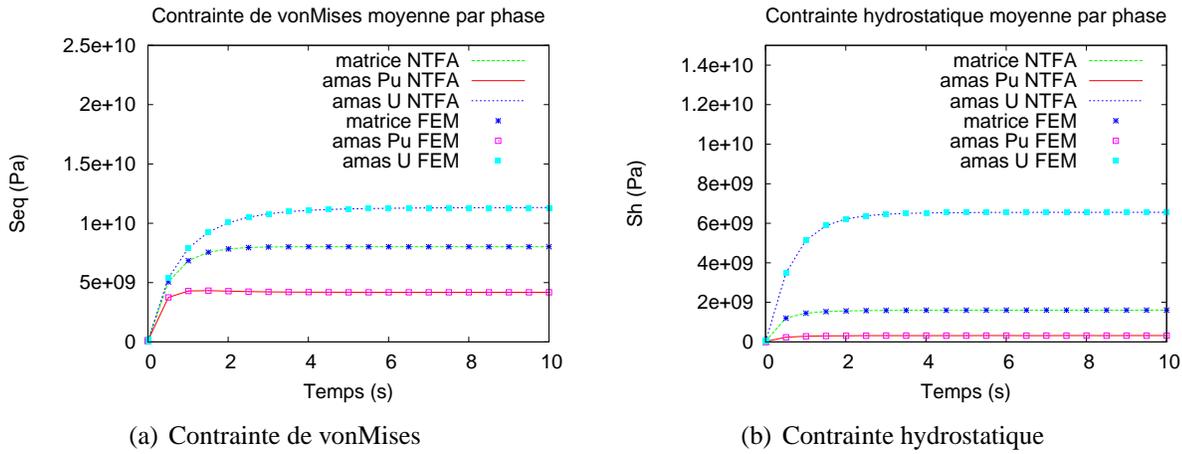


FIG. 7.13: Essai d'«écrouissage» avec gonflement solide - traction uniaxiale $\underline{\underline{\Sigma}}_0^{(1)}$ - Vitesse $10^{-1}s^{-1}$

7.3.2.2 Essais de fluage et de relaxation

La figure 7.14 présente la prédiction des comportements moyens par phase du modèle NTFA pour l'essai de fluage à contrainte uniaxiale (direction 33 - $\Sigma_{33} = 100MPa$) et l'essai de relaxation uniaxiale (direction 33 - $E_{33} = 2\%$) sans gonflement solide. Bien que les modes aient été identifiés pour des essais d'écrouissage, nous constatons toujours une très bonne prédiction des comportements moyens par phase du modèle NTFA.

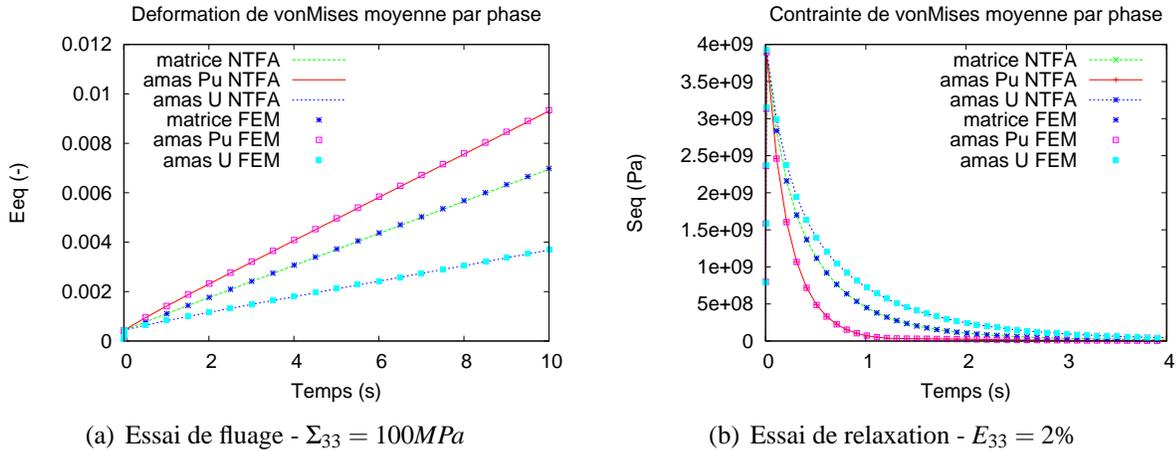


FIG. 7.14: Essais de fluage et de relaxation sans gonflement solide ($\dot{\epsilon}_r^{gs} = 0$)

Nous avons également analysé le comportement moyen par phase du modèle pour l'essai tournant exposé au paragraphe 7.3.1.3. C'est donc l'objet du paragraphe suivant.

7.3.2.3 Essai tournant

La figure 7.15 présente la prédiction du comportement moyen par phase du modèle NTFA pour l'essai tournant sans gonflement solide défini au paragraphe 7.3.1.3.

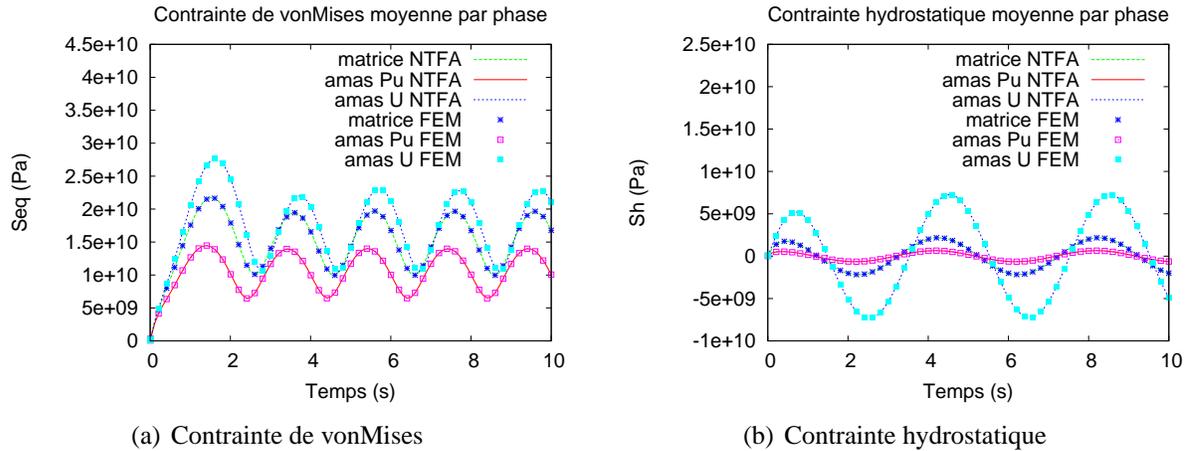


FIG. 7.15: Essai tournant sans gonflement solide ($\dot{\epsilon}_r^{ss} = 0$)

Nous constatons une très bonne prédiction du comportement moyen par phase du modèle NTFA. Comme au paragraphe 7.3.1.3, nous avons analysé, ci-dessous, la prédiction des comportements moyens par phase de notre modèle NTFA par rapport aux sept autres tirages supplémentaires (tirages de 2 à 8). Nous rappelons que le modèle NTFA a été identifié sur le tirage 1. Sur la figure 7.16, nous présentons les réponses moyennes du modèle NTFA et des 8 tirages. Il s'agit de l'essai 8 présenté au paragraphe 7.3.1.1.

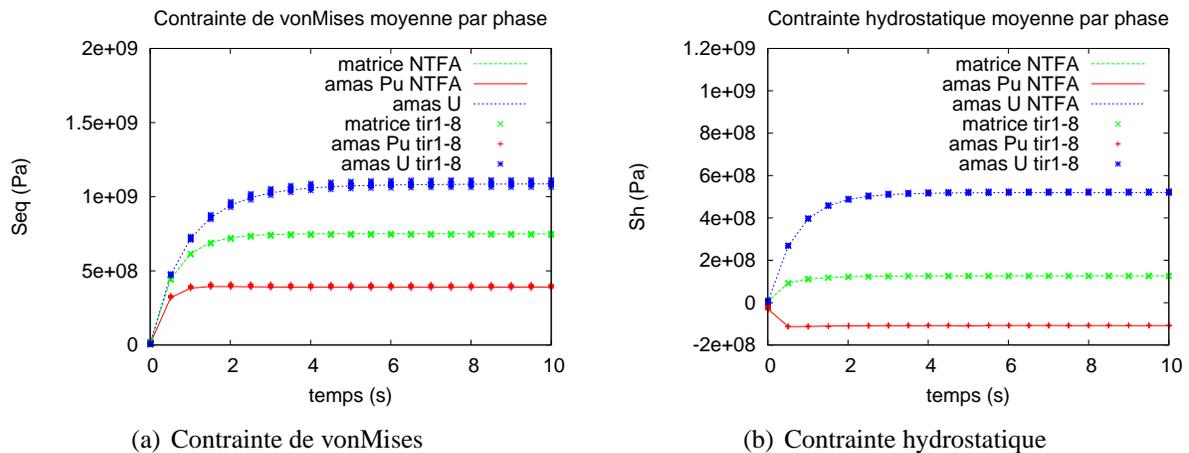


FIG. 7.16: Réponse des 8 VER et du modèle NTFA - Essai 8 avec gonflement solide

Qualitativement, nous remarquons que les contraintes équivalentes et hydrostatiques moyennes par phase du modèle NTFA sont très proches de la moyenne des 8 tirages.

Quantitativement, nous observons (Cf. tableaux 7.3 et 7.4) que les erreurs commises par le modèle NTFA par rapport à la moyenne des 8 tirages sont très faibles. En effet, l'erreur absolue la plus importante concerne le tableau 7.3 et se situe dans la phase plutonifère (amas Pu) : 1.51 %.

$\langle \sigma \rangle_{eq}$	1	2	3	4	5	6	7	8	moy	NTFA	err
matrice	7.50	7.47	7.48	7.40	7.51	7.46	7.48	7.44	7.47	7.50	+0.40
amas Pu	3.88	3.96	3.93	4.08	3.81	4.02	4.05	4.01	3.97	3.91	-1.51
amas U	10.80	10.88	10.87	10.85	11.15	10.90	10.64	11.06	10.89	10.87	-0.18

TAB. 7.3: 1er moment contrainte équivalente de vonMises des 8 tirages, moyenne (moy) des 8 tirages, prédiction NTFA (en $Pa.10^8$) - Erreur (err) commise par le modèle NTFA par rapport à la moyenne des 8 tirages (en %)

$\langle \sigma \rangle_h$	1	2	3	4	5	6	7	8	moy	NTFA	err
matrice	1.26	1.26	1.26	1.26	1.26	1.26	1.25	1.25	1.26	1.27	+0.79
amas Pu (négatif)	1.09	1.09	1.09	1.08	1.09	1.09	1.09	1.09	1.09	1.09	+0.00
amas U	5.20	5.21	5.22	5.22	5.27	5.21	5.16	5.25	5.22	5.20	-0.38

TAB. 7.4: 1er moment contrainte hydrostatique des 8 tirages, moyenne (moy) des 8 tirages, prédiction NTFA (en $Pa.10^8$) - Erreur (err) commise par le modèle NTFA par rapport à la moyenne des 8 tirages (en %)

Par conséquent, pour le comportement étudié (visco-élasticité linéaire compressible avec déformation libre imposée) et les contrastes entre les propriétés matériaux utilisés ici, nous pouvons donc affirmer que le comportement moyen (premier moment) par phase de notre modèle NTFA est également indépendant de la microstructure sur laquelle il a été identifié. Ces observations consolident donc les conclusions établies au chapitre 5 paragraphe 5.2.4.

7.3.2.4 Conclusion

Nous avons présenté dans ce paragraphe la prédiction des comportements moyens par phase de notre modèle NTFA par rapport à des calculs de référence (calculs réalisés par élément finis : FEM). Tout d'abord, **pour des essais à vitesse de déformation et à direction de contrainte imposées (essais d'«écrouissage»), nous avons constaté une très bonne prédiction du modèle. Cette prédiction est excellente (erreur inférieure à 1.0 %) aussi bien pour des trajets de chargement qui ont servi ou qui n'ont pas servi à identifier les modes.** Nous avons également démontré que la vitesse de déformation, ayant servi à identifier les modes, n'a pas ou peu d'impact sur la prédiction du modèle. Comme pour le comportement effectif, cette remarque est à prendre avec beaucoup de précaution car elle est à priori fortement dépendante de la loi de comportement locale utilisée. Ensuite, **nous avons également démontré une prédiction excellente des comportements moyens par phase du modèle NTFA pour des essais de fluage, de relaxation et tournant, bien que les modes aient été identifiés sur des essais à vitesse de déformation et à direction de contrainte imposées. L'erreur étant toujours inférieure à 1.0 %. Nous avons aussi montré que le comportement moyen par phase de notre modèle NTFA était quasi indépendant de la microstructure sur laquelle il avait été identifié. En effet, l'erreur absolue la plus importante sur le premier moment de la variable analysée, entre le modèle NTFA et la moyenne par éléments finis des 8 tirages, est égale à 1.51 %. Elle se situe dans la phase plutonifère (amas Pu).**

L'extension de la NTFA aux déformations libres, pour un comportement visco-élastique linéaire compressible, a donc été validée avec succès au niveau du comportement moyen par phase. Non seulement la méthode NTFA est particulièrement attrayante pour sa rapidité d'exécution et sa qualité prédictive des comportements effectif et moyens par phase, mais elle est surtout très intéressante pour sa capacité à prédire également les champs locaux, contrairement à la plupart des méthodes d'homogénéisation analytiques ou semi-analytiques. Par conséquent, dans le paragraphe suivant, nous comparons les champs locaux estimés par le modèle NTFA à ceux estimés par la méthode des éléments finis (calculs de référence).

7.3.3 Champs locaux

7.3.3.1 Essais d'«écrouissage»

Sur les figures 7.17, 7.18, 7.19 nous comparons qualitativement la prédiction de la contrainte équivalente (au sens de *von Mises*) locale, par phase, entre le modèle NTFA et les éléments finis (FEM). Il s'agit de l'essai 8 (avec gonflement solide), à $t = 10$ secondes, présenté au paragraphe 7.3.1.1.

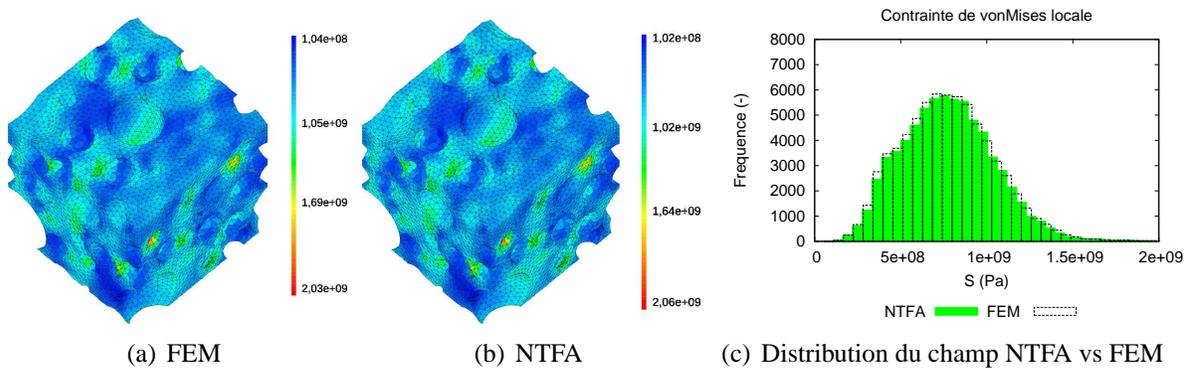


FIG. 7.17: $\sigma_{eq}(\underline{x})$ - Essai d'«écrouissage» $\underline{\dot{E}} : \underline{\underline{\Sigma}}_0^k = 10^{-2} s^{-1}$ - Essai 8 $t=10s$ $S_0 = \underline{\underline{\Sigma}}_0^1 + \frac{1}{2} \underline{\underline{\Sigma}}_0^2$ - Phase matrice

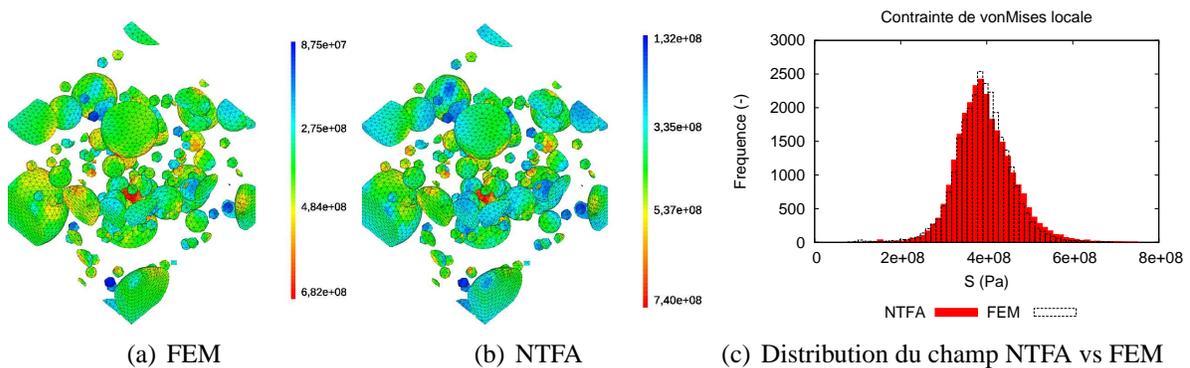


FIG. 7.18: $\sigma_{eq}(\underline{x})$ - Essai d'«écrouissage» $\underline{\dot{E}} : \underline{\underline{\Sigma}}_0^k = 10^{-2} s^{-1}$ - Essai 8 $t=10s$ $S_0 = \underline{\underline{\Sigma}}_0^1 + \frac{1}{2} \underline{\underline{\Sigma}}_0^2$ - Phase amasPu

Pour cet essai, à $t=10s$, nous constatons une bonne prédiction qualitative des champs locaux (contrainte équivalente). Le tableau 7.5 nous donne, dans chaque phase, l'écart type estimé avec le modèle NTFA

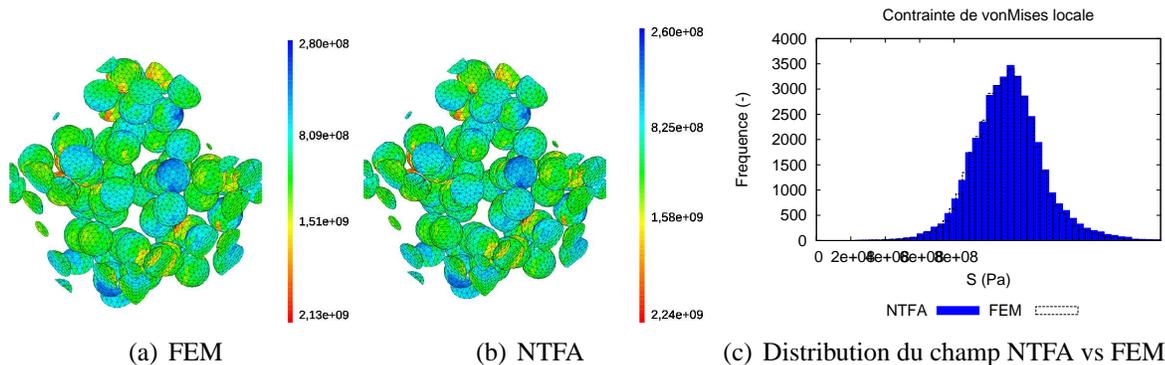


FIG. 7.19: $\sigma_{eq}(\underline{x})$ - Essai d'«écrouissage» $\underline{\dot{E}} : \underline{\Sigma}_0^k = 10^{-2} s^{-1}$ - Essai 8 $t=10s$ $S_0 = \underline{\Sigma}_0^1 + \frac{1}{2} \underline{\Sigma}_0^2$ - Phase amasU

et les éléments finis, ainsi que l'erreur commise par le modèle. L'erreur la plus importante est de l'ordre de 6% dans la phase plutonifère.

Quantitativement, nous pouvons donc affirmer que l'approche NTFA prédit avec une précision correcte l'écart type du champ local analysé et ce pour un essai d'«écrouissage» (essai 8) qui n'a pas servi à identifier les modes.

	FEM en %	NTFA en %	Erreur en %
Matrice	32.49	32.34	-0.46
Amas Pu	14.55	15.42	+5.98
Amas U	17.83	18.88	+5.89

TAB. 7.5: Écart type contrainte équivalente (en % par rapport au 1er moment) - NTFA vs FEM (Essai 8 $t=10s$)

Comme au paragraphe 7.3.2.3, nous avons analysé, ci-dessous, la prédiction des comportements locaux par phase de notre modèle NTFA par rapport aux sept autres tirages supplémentaires (tirages de 2 à 8). Nous rappelons que le modèle NTFA a été identifié sur le tirage 1. Les tableaux 7.6 et 7.7 présentent, pour l'essai 8 à $t = 10s$, l'erreur commise par le modèle NTFA par rapport à la valeur moyenne des écarts type des 8 tirages obtenus par éléments finis. Il s'agit des écarts type de la contrainte équivalente (au sens de vonMises) et de la contrainte hydrostatique au sein de chacune des phases.

Quantitativement, nous observons que l'erreur absolue la plus importante par rapport à la moyenne des 8 écarts types ne dépassent pas 8.44%. L'erreur absolue la plus importante concerne le tableau 7.6 et se situe dans la phase plutonifère (amas Pu). Par conséquent, pour le comportement étudié (visco-élasticité linéaire compressible avec déformation libre imposée) et les contrastes entre les propriétés matériaux utilisés ici, nous pouvons donc affirmer que l'écart type de la variable analysée estimé par le modèle NTFA est quasi indépendant de la microstructure sur laquelle il a été identifié. Ces observations consolident donc les conclusions établies au chapitre 5 paragraphe 5.2.4

STD_{eq}	1	2	3	4	5	6	7	8	moy	NTFA	err
matrice	32.49	32.49	32.71	33.36	31.87	32.39	32.34	32.64	32.54	32.34	-0.62
amas Pu	14.55	14.88	13.96	13.52	14.74	14.49	13.97	13.66	14.22	15.42	+8.44
amas U	17.83	20.66	20.66	21.75	17.52	17.75	18.84	19.98	19.37	18.88	-2.53

TAB. 7.6: Écart type contrainte équivalente de vonMises des 8 tirages, moyenne (moy) des 8 tirages, prédiction du modèle NTFA (en % par rapport au 1er moment) - Erreur (err) commise par le modèle NTFA par rapport à la moyenne des 8 tirages (en %)

STD_h	1	2	3	4	5	6	7	8	moy	NTFA	err
matrice	13.44	13.66	13.36	13.37	13.15	13.38	13.68	13.23	13.41	13.33	-0.60
amas Pu	1.75	1.93	1.85	1.89	1.77	1.84	1.86	1.86	1.84	1.95	+5.98
amas U	6.35	7.62	7.08	7.18	6.33	6.66	7.10	7.02	6.92	7.20	+4.05

TAB. 7.7: Écart type contrainte hydrostatique des 8 tirages, moyenne (moy) des 8 tirages, prédiction du modèle NTFA (en % par rapport au 1er moment) - Erreur (err) commise par le modèle NTFA par rapport à la moyenne des 8 tirages (en %)

7.3.3.2 Conclusion

Nous avons présenté dans ce paragraphe la prédiction des champs locaux par phase de notre modèle NTFA par rapport à des calculs de référence (calculs réalisés par élément finis : FEM). **Pour l'essai numéro 8 à vitesse de déformation et à direction de contrainte imposées (essai d'«écrouissage»), nous avons constaté une prédiction correcte du modèle. L'erreur commise est inférieure à 6.0 % sur l'écart type de la variable analysée. Nous rappelons au lecteur que ce trajet de chargement n'a pas servi à identifier les modes.** Nous avons également démontré que l'écart type de la variable analysée, estimé par le modèle NTFA dans chacune des phases, était quasi indépendant de la microstructure sur laquelle il avait été identifié. En effet, quantitativement, nous observons que l'erreur absolue la plus importante par rapport à la moyenne des écarts types des 8 tirages testés ne dépasse pas 8.44%. Ces observations consolident donc les conclusions établies au chapitre 5 paragraphe 5.2.4.

A ce stade nous pouvons donc affirmer que l'extension de la NTFA aux déformations libres, pour un comportement visco-élastique linéaire compressible, a été validée. Cette validation a porté aussi bien sur le comportement effectif que sur les champs locaux et ce pour différents types d'essais (essais d'«écrouissage», de fluage, de relaxation et tournant). Ce modèle peut donc être intégré et utilisé dans un code de calcul industriel pour modéliser le comportement du combustible MOX en fonctionnement normal. Néanmoins nous avons vu, au chapitre 2 paragraphe 2.3, que les propriétés matériaux évoluaient en fonction du temps : on parle de vieillissement du matériau. L'aspect vieillissant n'a jamais été étudié dans les approches NTFA. Nous pouvons donc nous interroger sur la qualité prédictive de notre modèle NTFA lorsque les propriétés matériaux (par exemple les modules visqueux $\mu_r^{VP}(t)$ et $k_r^{VP}(t)$) évoluent en fonction du temps. Les modes plastiques ont été identifiés à $t = 0$ seconde, c'est à dire pour un contraste donné et sans tenir compte de cet aspect vieillissant. Nous allons donc répondre à ces interrogations dans le paragraphe suivant.

7.4 Résultats - essais vieillissants d'«écrouissage»

Ces études vont porter sur l'essai numéro 8 : essai à vitesse de déformation et à direction de contrainte imposées que nous avons présenté au paragraphe 7.3.1.1. Les paramètres matériaux à $t = 0$ seconde sont définis dans le tableau 7.2. Deux études vieillissantes ont été réalisées. Dans chaque étude, nous ne faisons vieillir que les propriétés visqueuses : $\frac{1}{2G_r^v(t)}$ et $\frac{1}{3K_r^v(t)}$. Par conséquent, les propriétés élastiques ne dépendront pas du temps.

Dans la première étude (étude 1), les contrastes entre la phase amas U (indice de la phase : $r = 3$) et la phase matricielle (indice de la phase : $r = 1$) sont constants en fonction du temps. Ces contrastes sont définis par les rapports suivants : $\frac{1}{2G_3^v(t)}/\frac{1}{2G_1^v(t)}$ et $\frac{1}{3K_3^v(t)}/\frac{1}{3K_1^v(t)}$. Par contre les contrastes entre la phase amas Pu (indice de la phase : $r = 2$) et la phase matricielle (indice de la phase : $r = 1$), définis par les rapports $\frac{1}{2G_2^v(t)}/\frac{1}{2G_1^v(t)}$ et $\frac{1}{3K_2^v(t)}/\frac{1}{3K_1^v(t)}$, sont décroissants entre $t = 0$ et $t = 6.5$ secondes. On appellera cette phase temporelle la période 1. Puis, de $t = 6.5$ à $t = 10$ secondes les contrastes s'inversent et deviennent croissants. On appellera cette phase temporelle la période 2. Sur cette période, on dira de manière abusive que les «rigidités» s'inversent : la phase la plus souple, les amas Pu, devient plus raide et inversement pour la phase matricielle. La période 1 correspond à ce qui se passe réellement en réacteur et en fonctionnement normal pour le combustible MOX : les contrastes entre la phase amas Pu et la matrice diminuent, tandis que ceux entre la phase amas U et la matrice restent constants. La période 2 est quant à elle une étude de cas pour tester la prédiction de notre modèle NTFA. L'étude de vieillissement numéro 1 est présentée sur la figure 7.20(a).

Dans la deuxième étude (étude 2), les contrastes entre la phase amas U et la phase matricielle sont également constants en fonction du temps. Par contre les contrastes entre la phase amas Pu et la phase matricielle sont croissants sur toute la durée de l'essai. En effet, le contraste défini par le rapport $\frac{1}{2G_2^v(t)}/\frac{1}{2G_1^v(t)}$ évolue de 2.47 à 14.78 et le contraste défini par le rapport $\frac{1}{3K_2^v(t)}/\frac{1}{3K_1^v(t)}$ évolue de 3.71 à 22.17. Ce cas d'étude ne se produit pas en réacteur pour le combustible MOX. Mais il s'agit également d'une étude de cas pour tester la prédiction de notre modèle NTFA. Cette étude vieillissante numéro 2 est présentée sur la figure 7.20(b).

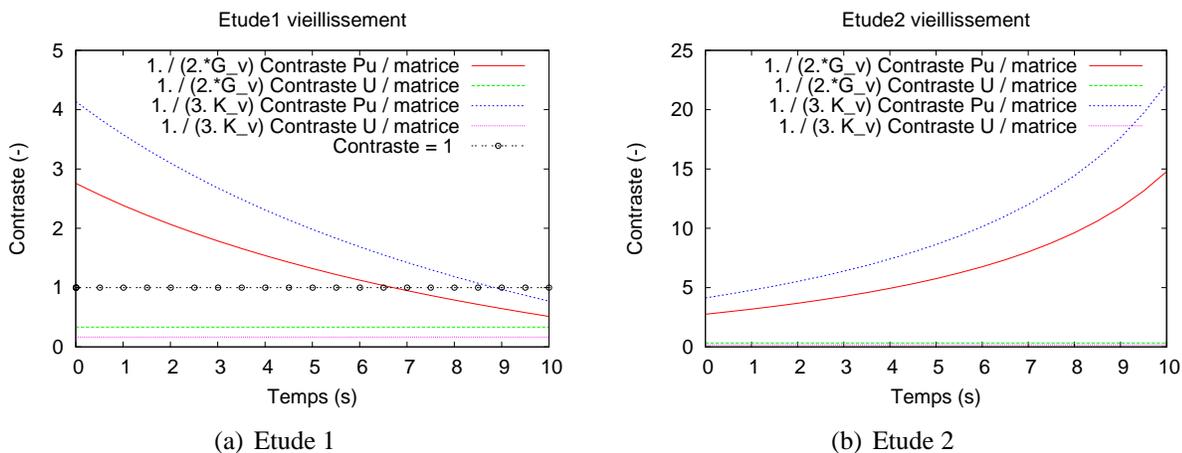


FIG. 7.20: Études de vieillissement des propriétés matériaux - $\frac{1}{2G_r^v(t)}$ et $\frac{1}{3K_r^v(t)}$

Les modes de notre modèle NTFA ont été identifiés pour les contrastes définis à $t = 0$ seconde

(Cf. paragraphe 7.2.2). Nous pouvons donc nous interroger sur la capacité prédictive du comportement effectif de notre modèle NTFA dans le cadre de ces deux études vieillissantes. C'est donc l'objet du paragraphe suivant.

7.4.1 Comportement effectif

La figure 7.21 présente les prédictions macroscopiques du modèle NTFA par rapport aux éléments finis FEM, pour l'essai numéro 8. Pour l'étude 1 (Cf. figure 7.21(a)), nous remarquons que le modèle NTFA prédit correctement le comportement effectif sur la période 1. Cette remarque est particulièrement rassurante pour la modélisation du combustible *MOX* par ce type d'approche (NTFA). Nous rappelons que cette période correspond réellement à ce qui se passe en réacteur et en fonctionnement normal pour ce type de combustible. Par contre, sur la période 2, qui correspond à un cas d'étude, nous remarquons un décrochement du modèle NTFA par rapport aux éléments finis. Cette observation n'est pas surprenante : en effet dans le cas d'un milieu poreux la déformation passe par les trous alors que dans le cas d'un milieu renforcé par des inclusions rigides celle-ci les contourne. Dès lors, en cas de rigidités inversées les modes sont très différents. Par conséquent, si on souhaite que le modèle NTFA soit prédictif sur cette période, il est nécessaire d'identifier des modes plastiques supplémentaires avec les «rigidités» inversées. Pour l'étude 2 (Cf. figure 7.21(b)), où les contrastes entre la phase amas Pu et la phase matricielle ne cessent d'augmenter, nous observons une très bonne prédiction du modèle NTFA.

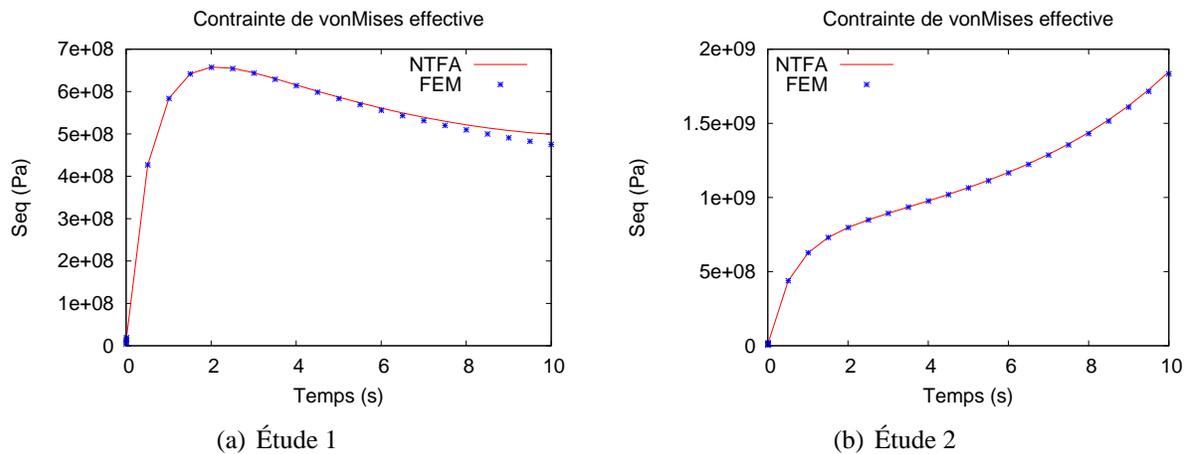


FIG. 7.21: Essai d'«écrouissage» 8 - $\underline{\underline{E}} : \underline{\underline{\Sigma}}_0^k$ est fixée à $10^{-2}.s^{-1}$ avec gonflement solide

Nous avons également analysé la prédiction du comportement moyen par phase de notre modèle NTFA pour ces deux études de vieillissement. C'est donc l'objet du paragraphe suivant.

7.4.2 Comportement moyen par phase

La figure 7.22 présente les comportements moyens par phase du modèle NTFA par rapport aux éléments finis FEM, pour l'essai numéro 8. Pour l'étude 1 (Cf. figure 7.20), nous remarquons que le modèle NTFA prédit correctement le comportement moyen par phase sur la période 1. Cette remarque est également rassurante pour la modélisation du combustible *MOX* par ce type d'approche (NTFA). Par contre, sur la période 2, nous retrouvons le décrochement du modèle NTFA observé sur le comportement effectif. Cette observation est cohérente avec ce qui a été dit au paragraphe précédent. Pour

l'étude 2 (Cf. figure 7.22(b)), où les contrastes entre la phase amas Pu et la phase matricielle ne cessent d'augmenter, nous observons toujours une très bonne prédiction du modèle NTFA. L'erreur absolue la plus importante commise sur le premier moment par le modèle NTFA est inférieure à 2.5 %.

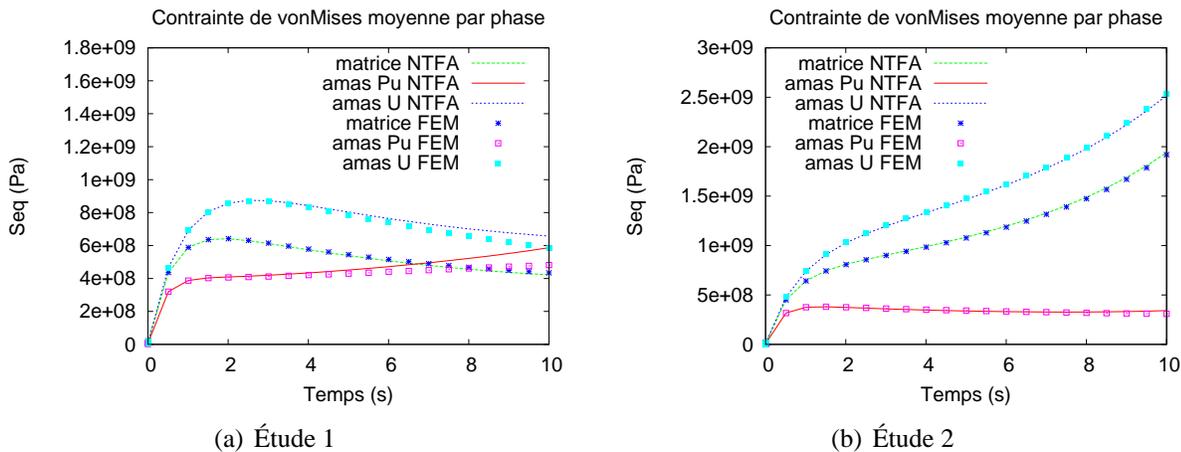


FIG. 7.22: Essai d'«écrouissage» 8 - $\underline{\dot{E}} : \underline{\Sigma}_0^k$ est fixée à $10^{-2}s^{-1}$ avec gonflement solide

Enfin, nous avons également analysé la prédiction du comportement local par phase de notre modèle NTFA dans le cadre de la deuxième étude de vieillissement. C'est donc l'objet du paragraphe suivant.

7.4.3 Champs locaux

Dans ce paragraphe, nous ne présentons pas les études locales menées sur l'étude numéro 1 pour plusieurs raisons :

1. sur la période 1 de l'étude 1, le matériau a tendance à s'homogénéiser car les contrastes entre les phases diminuent. Nous avons donc observé une très bonne prédiction locale du modèle NTFA sur cette période. Le cas le plus pénalisant étant en réalité à $t = 0$ seconde, c'est à dire quand les contrastes entre les phases sont les plus élevés. **Par conséquent cette remarque est extrêmement rassurante pour la modélisation du combustible MOX par une approche type NTFA.**
2. Par contre, sur la période 2, étant conscient des lacunes de notre modèle, nous n'avons pas d'intérêt à montrer la mauvaise prédiction des champs locaux. Comme nous l'avons signalé au paragraphe 7.4.1, pour être prédictif aussi bien localement que macroscopiquement sur cette période, le modèle nécessite des modes plastiques supplémentaires identifiés avec les «rigidités» inversées.

Ci-dessous, nous analysons la prédiction du comportement local par phase de notre modèle NTFA dans le cadre de la deuxième étude. Sur les figures 7.23, 7.24, 7.25 nous comparons qualitativement la prédiction de la contrainte équivalente locale, par phase et à $t = 10$ seconde, entre le modèle NTFA et les éléments finis (FEM). Pour cet essai, à $t=10s$, nous constatons une prédiction qualitative correcte des champs locaux (contrainte équivalente) dans la phase matricielle et les amas U. Par contre celle-ci est beaucoup moins bonne dans la phase plutonifère. Le tableau 7.8 nous donne, dans chaque phase, l'écart type estimé avec le modèle NTFA et les éléments finis, ainsi que l'erreur commise par le modèle. L'erreur la plus importante est de l'ordre de 30% et il s'agit de la phase plutonifère.

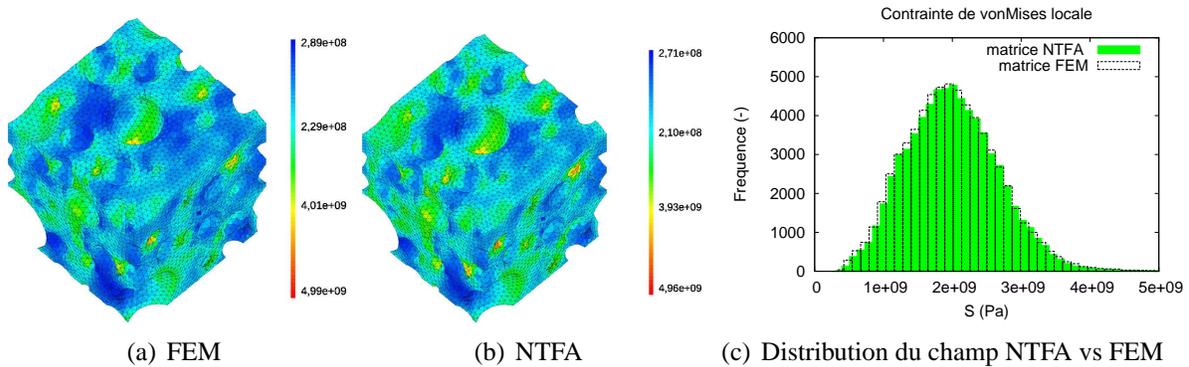


FIG. 7.23: $\sigma_{eq}(\underline{x})$ - Essai d'«écrouissage» $\underline{\dot{E}} : \underline{\Sigma}_0^k = 10^{-2} s^{-1}$ - Essai 8 t=10s $S_0 = \underline{\Sigma}_0^1 + \frac{1}{2} \underline{\Sigma}_0^2$ - Phase matrice

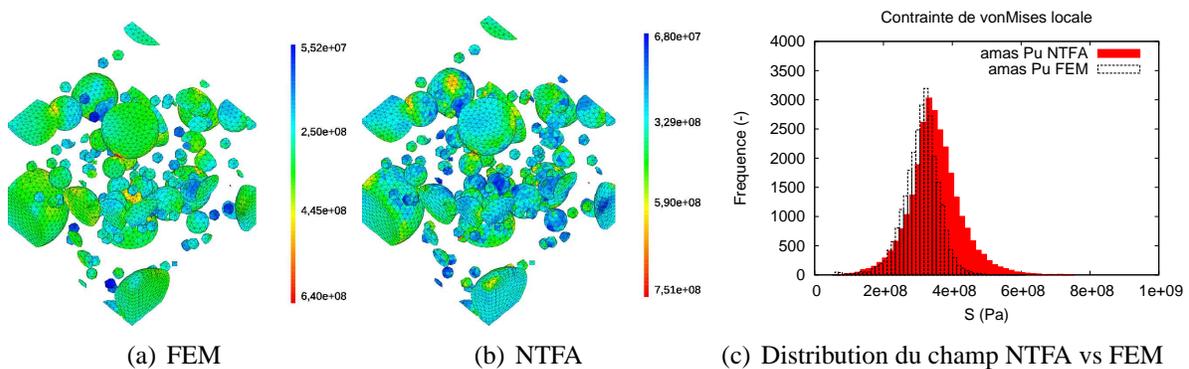


FIG. 7.24: $\sigma_{eq}(\underline{x})$ - Essai d'«écrouissage» $\underline{\dot{E}} : \underline{\Sigma}_0^k = 10^{-2} s^{-1}$ - Essai 8 t=10s $S_0 = \underline{\Sigma}_0^1 + \frac{1}{2} \underline{\Sigma}_0^2$ - Phase amasPu

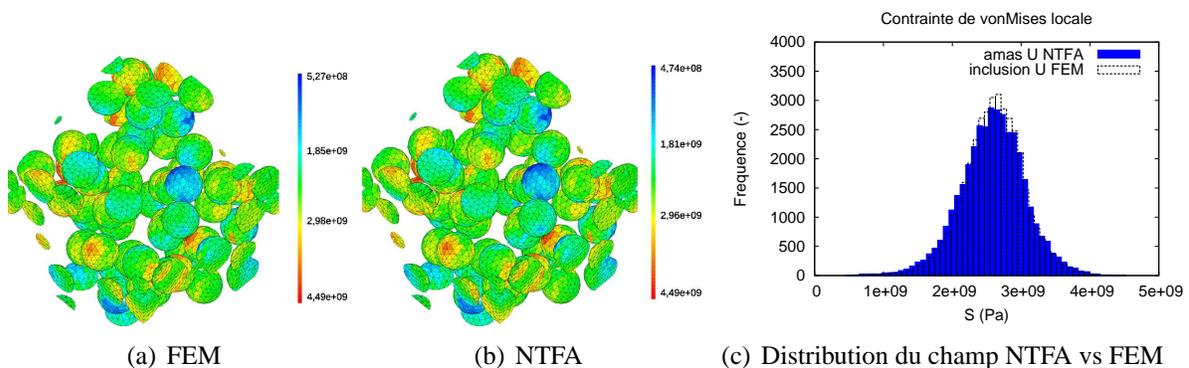


FIG. 7.25: $\sigma_{eq}(\underline{x})$ - Essai d'«écrouissage» $\underline{\dot{E}} : \underline{\Sigma}_0^k = 10^{-2} s^{-1}$ - Essai 8 t=10s $S_0 = \underline{\Sigma}_0^1 + \frac{1}{2} \underline{\Sigma}_0^2$ - Phase amasU

Quantitativement et pour cette étude de vieillissement (étude 2), l'approche NTFA ne prédit pas correctement l'écart type du champ local analysé, surtout dans la phase plutonifère (amas Pu).

	FEM en %	NTFA en %	Erreur en %
Matrice	31.28	30.31	-3.10
Amas Pu	15.29	19.92	+30.3
Amas U	17.80	19.49	+9.50

TAB. 7.8: Écart type contrainte équivalente (en % par rapport au 1er moment) - NTFA vs FEM (Essai 8 t=10s)

7.4.4 Conclusion

Nous avons présenté dans ce paragraphe la prédiction de notre modèle NTFA pour deux études vieillissantes. L'étude 1 sur la période 1 est la plus représentative de ce qui se passe pour le combustible *MOX* en réacteur et en fonctionnement normal. Pour cette étude et cette période, nous avons démontré une très bonne prédiction du comportement effectif et moyen par phase du modèle NTFA. La prédiction des champs locaux a également été analysée mais n'a pas été présentée dans ce paragraphe. Nous pouvons néanmoins affirmer que celle-ci est de très bonne qualité car les contrastes entre les phases sont moins élevés que ceux qui ont servi à identifier les modes plastiques. **Par conséquent nous pouvons donc conclure que le vieillissement du combustible *MOX* sous irradiation sera bien pris en compte par notre modèle NTFA. Ce modèle peut donc être intégré et utilisé dans un code de calcul industriel pour modéliser le comportement de ce combustible en fonctionnement normal.** L'étude 1 sur la période 2 a mis en défaut le modèle NTFA aussi bien sur le comportement effectif que sur le comportement moyen par phase. Cette lacune du modèle n'est pas surprenante. Pour être prédictif aussi bien localement que macroscopiquement, le modèle nécessite des modes plastiques supplémentaires identifiés avec les «rigidités» inversées. L'étude 2 a démontré une bonne prédiction du modèle NTFA au niveau du comportement effectif et moyen par phase, bien que les contrastes entre les phases ne cessent d'augmenter. Le modèle a néanmoins montré ses limites lorsque nous avons analysé la prédiction des champs locaux. En effet, dans la phase plutonifère, l'erreur commise par le modèle NTFA sur l'écart type de la variable analysée est de l'ordre de 30 %. Pour bien faire, il aurait fallu identifier les modes plastiques de ce modèle avec les contrastes les plus élevés c'est à dire à la fin de la vie du matériau.

7.5 Bilan du chapitre

Jusqu'à présent les approches NTFA n'abordaient pas les aspects **déformations libres** et **vieillissant**. Dans ce chapitre, nous avons présenté les développements théoriques et numériques menés sur ces axes d'étude. Ces travaux ont été réalisés sur le composite particulière triphasé retenus dans la partie 2 et pour le comportement local suivant : visco-élastique linéaire compressible.

Dans le premier paragraphe, nous avons présenté les équations constitutives du modèle que nous avons développées dans le cadre de cette thèse. Puis, dans le second paragraphe, nous avons abordé la mise en oeuvre de ce modèle. Pour calculer les modes, **nous avons vu qu'en 3D et pour le comportement local étudié nous considérons 7 trajets de chargements élémentaires. L'orthogonalisation et la sélection des modes prépondérants ont été réalisées par la transformée de Karhunen-Loève. Nous avons donc abouti à un modèle à 57 variables internes déviatoriques et 21 variables internes sphériques.** Ensuite, dans le troisième paragraphe, les prédictions de celui-ci par rapport à des calculs de référence en champs complets ont été exposées. Ces analyses ont été menées sur le comportement effectif, sur les comportements moyens par phase et sur les champs locaux, et ce pour différents types d'essais et de chargements (essais d'«écrouissage», de fluage, relaxation, tournant). Pour la microstructure ayant servi à identifier les modes, **les résultats furent très satisfaisants : l'erreur commise par le modèle sur le comportement effectif et moyen par phase était inférieure à 1%. Concernant les champs locaux dans chaque phase, l'erreur la plus importante commise sur l'écart type de la variable analysée était égale à 6.%. Nous avons également démontré que la vitesse de déformation, ayant servi à identifier les modes, n'avait pas ou peu d'impact sur la prédiction du modèle. Cette remarque est à prendre avec beaucoup de précaution car elle est a priori fortement dépendante de la loi de comportement locale utilisée. Des études de sensibilité à la microstructure considérée ont également été présentées. Nous avons montré que la réponse effective, les comportements moyens par phase et les écarts type de la variable analysée localement dans chaque phase étaient quasi indépendants de la microstructure sur laquelle le modèle NTFA avait été identifié. L'erreur maximale absolue commise par le modèle NTFA sur la moyenne des n tirages du premier moment de la variable analysée ne dépasse pas 1.51%, quant à celle commise sur l'écart type, elle ne dépasse pas 8.44%. Finalement, nous pouvons donc affirmer que l'extension de la NTFA aux déformations libres a été validée avec succès pour le comportement local suivant : visco-élasticité linéaire compressible.** Enfin, nous avons présenté dans le dernier paragraphe la prédiction de notre modèle NTFA pour deux études vieillissantes. L'étude 1 sur la période 1, qui est la plus représentative de ce qui se passe pour le combustible *MOX* en réacteur et en fonctionnement normal, a démontré une très bonne prédiction du comportement effectif et moyen par phase de notre modèle NTFA. La prédiction des champs locaux a également été analysée mais n'a pas été présentée dans ce paragraphe. Nous pouvons néanmoins affirmer que celle-ci est de très bonne qualité car les contrastes entre les phases sont moins élevés que ceux qui ont servi à identifier les modes plastiques. **Nous pouvons donc conclure ce chapitre en affirmant que le vieillissement du combustible *MOX* sous irradiation sera bien pris en compte par notre modèle NTFA.**

Le modèle NTFA remplit donc parfaitement le cahier des charges fixé au chapitre 1 paragraphe 1.4. Il est également en adéquation avec le problème mécanique local établi au chapitre 2 paragraphe 2.3. Dans le chapitre suivant nous présentons les prédictions de l'approche NTFA en 3D et pour le comportement local suivant : visco-élasticité **non linéaire** incompressible avec déformations libres imposées. En fonctionnement normal, le combustible *MOX* n'a pas un comportement non linéaire. Nous sortons donc du cadre de cette thèse et du problème local établi au chapitre 2 paragraphe 2.3. Ce chapitre s'inscrit donc plus dans une démarche prospective et de démonstration que les approches NTFA fonctionnent également bien pour les comportements non linéaires. Ce comportement est typiquement celui que le combustible *MOX* subit en fonctionnement dit de classe 2 : transitoire ou rampe de puissance. Ces fonctionnements sont modélisés dans les codes de calculs industriels. Par conséquent, il est intéressant d'étudier la qualité prédictive des approches NTFA pour ce type de comportement, d'autant plus que celui-ci se retrouve dans de nombreux autres matériaux (béton, composite ...).

Chapitre 8

NTFA 3D avec déformations libres - comportement visco-élastique non linéaire incompressible

Objet du chapitre :

Dans ce chapitre nous présentons les prédictions de l'approche NTFA en 3D (tridimensionnel) mais pour le comportement local suivant : visco-élasticité non linéaire incompressible avec déformations libres imposées. En fonctionnement normal, le combustible *MOX* n'a pas un comportement non linéaire. Nous sortons donc du cadre de cette thèse et du problème local établi au chapitre 2 paragraphe 2.3. Ce chapitre s'inscrit plus dans une démarche prospective et de démonstration que les approches NTFA fonctionnent également correctement pour les comportements non linéaires. Ce comportement est typiquement celui que le combustible *MOX* subit en fonctionnement dit de classe 2 : transitoire ou rampe de puissance. Ces fonctionnements sont modélisés dans les codes de calculs industriels. Par conséquent, il est intéressant d'étudier la qualité prédictive des approches NTFA pour ce comportement local. Nous appliquons une démarche similaire à celle présentée dans les chapitres 6 et 7. Dans le premier paragraphe, nous présentons succinctement les équations constitutives du modèle, la manière dont la non linéarité du problème est prise en compte dans l'approche NTFA et nous exposons la mise en oeuvre du modèle. Dans le deuxième paragraphe, les prédictions de celui-ci par rapport à des calculs de référence en champs complets sont exposées. Ces analyses sont menées aussi bien sur le comportement effectif que sur les champs locaux.

Sommaire

8.1	Principe de la méthode	194
8.1.1	Potentiel de dissipation - Traitement de la non linéarité	194
8.1.2	Récapitulatif des équations du modèle NTFA pour la visco-élasticité non linéaire incompressible avec déformations libres imposées	195
8.1.3	Mise en oeuvre du modèle NTFA	195
8.2	Résultats - essais non vieillissants	196
8.2.1	Comportement effectif	196
8.2.2	Comportement moyen par phase	197
8.2.3	Champs locaux	198
8.3	Bilan du chapitre	198

8.1 Principe de la méthode

Nous avons déjà présenté au chapitre 7 paragraphe 7.1.2 l'approche NTFA appliquée au comportement suivant : visco-élastique linéaire compressible avec déformations libres imposées. Comme nous sommes ici dans le cas incompressible, les modes plastiques, identifiés selon la méthode présentée au paragraphe 7.1.5 du chapitre 7, seront de trace nulle. Par conséquent, toutes les variables qui se rapportent à la partie sphérique des modes et qu'on notait \hat{X} seront nulles. On notera dorénavant X toutes les variables qui se rapportent à la partie déviatorique des modes et non plus \hat{X} . Nous ne revenons pas sur le principe de la méthode ainsi que sur les équations de l'approche (variables réduites, relations constitutives), puisqu'il s'agit d'une version simplifiée de ce qui a été présentée au chapitre 7.

Néanmoins, du fait de la non linéarité du problème nous n'avons pas une relation exacte entre \dot{e}_k^{vp} et τ_k , contrairement à ce que l'on pouvait avoir au chapitre 7. En effet, pour obtenir une relation entre les variables internes réduites \dot{e}_k^{vp} et τ_k , il est nécessaire de faire une approximation de σ_{eq} afin de simplifier l'équation (7.15). Une approximation possible est donnée par *Michel et Suquet* (Cf. [MICHEL and SUQUET, 2003]), qui estiment une contrainte réduite globale a_r pour la phase r et agissant sur l'ensemble des modes à support dans cette phase, du fait qu'il soit attendu que l'ensemble des modes plastiques à support dans la phase r soient couplés. Nous rappelons que a_r est estimée de la façon suivante (Cf. paragraphe 3.5.4.1 chapitre 3) :

$$a_r = \left[\sum_{k=1}^{M(r)} (\tau_k)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (8.1)$$

où $M(r)$ est le nombre de modes à support dans la phase r . On remplace alors dans l'équation (7.15) σ_{eq} par a_r ce qui donne :

$$\dot{e}_k^{vp} = \frac{3}{2} \frac{\partial \psi^k}{\partial \sigma_{eq}}(a_r) \frac{\tau_k}{a_r} \quad (8.2)$$

Le potentiel de dissipation associé à la phase r et agissant sur l'ensemble des modes à support dans cette phase est présenté dans le paragraphe suivant.

8.1.1 Potentiel de dissipation - Traitement de la non linéarité

$$\psi^k(a_r) = \frac{1}{(n+1)G_r^{vp}} (a_r)^{n+1} \quad (8.3)$$

avec G_r^{vp} le module de cisaillement visqueux associé à la phase r . On remplace (8.3) dans l'équation (8.2) ce qui donne :

$$\dot{e}_k^{vp} = \frac{3}{2G_r^{vp}} (a_r)^{n-1} \tau_k \quad (8.4)$$

Les équations constitutives du modèle NTFA, pour le comportement local visco-élastique non linéaire incompressible avec déformations libres imposées, sont donc exposées et synthétisées dans le paragraphe suivant.

8.1.2 Récapitulatif des équations du modèle NTFA pour la visco-élasticité non linéaire incompressible avec déformations libres imposées

$$\left\{ \begin{array}{l} \tau_k = 2G^r(e_k - e_k^{vp}) , \\ \dot{e}_k^{vp} = \frac{3}{2G_r^{vp}}(a_r)^{n-1}\tau_k , \quad \varepsilon_k^{vp} = e_k^{vp} \langle \underline{\underline{\mu}}^k : \underline{\underline{\mu}}^k \rangle^{-1} , \\ e_k = \underline{\underline{a}}_k : \underline{\underline{E}} + \sum_{l=1}^M D_{kl} \varepsilon_l^{vp} + \sum_{r=1}^N H_{kr} \varepsilon_r^{gs} , \\ \underline{\underline{\Sigma}} = \underline{\underline{\tilde{C}}} : \underline{\underline{E}} + \sum_{k=1}^M \underline{\underline{\rho}}^k \varepsilon_k^{vp} + \sum_{r=1}^N \underline{\underline{\rho}}^r \varepsilon_r^{gs} . \end{array} \right. \quad (8.5)$$

La solution de ce problème est obtenue en résolvant le système différentiel en τ_k couplé d'ordre 1 résolu le long d'un trajet imposé :

$$\dot{\tau}_k = 2G^r(\dot{e}_k - \dot{e}_k^{vp}) \quad (8.6)$$

8.1.3 Mise en oeuvre du modèle NTFA

Le Volume Élémentaire Représentatif pour identifier les modes est toujours celui retenu en fin de partie 2 :

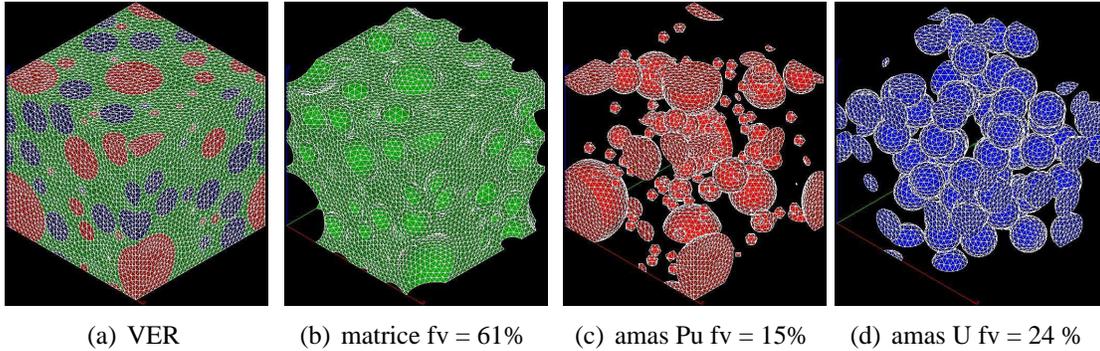


FIG. 8.1: VER «polydispersés» triphasés. Maillage périodique en 3D - Tétraèdres à 4 noeuds

Les propriétés matériaux utilisées pour l'identification des modes plastiques ainsi que le calcul des tenseurs d'influence sont les suivantes :

VER Triphasé	E (GPa)	ν (-)	G_r^{vp} (GPa.s)	n (-)	$\dot{\varepsilon}_r^{gs}$ (s^{-1})
Amas Pu	200	0.3	21.43	4	0.0
Matrice	200	0.3	52.94	4	0.0
Amas U	200	0.3	158.83	4	0.0

TAB. 8.1: Propriétés inclusions Pu, U et de la matrice pour les six premiers trajets de chargements

VER Triphasé	E (GPa)	ν (-)	G_r^{vp} (GPa.s)	n (-)	$\dot{\epsilon}_r^{gs}$ (s^{-1})
Amas Pu	200	0.3	21.43	4	$2.10E - 04$
Matrice	200	0.3	52.94	4	$7.00E - 05$
Amas U	200	0.3	158.83	4	$2.84E - 05$

TAB. 8.2: Propriétés inclusions Pu, U et de la matrice pour le septième trajet de chargement

On a vu au chapitre 7 qu'il existait différentes étapes pour mettre en oeuvre l'analyse par champs de transformation non uniformes :

1. La première étape consiste à calculer les modes plastiques, les tenseurs de localisation des déformations élastiques (cas des propriétés élastiques hétérogènes) et les facteurs d'influence. Dans notre cas d'étude on reconduit les mêmes étapes qu'aux paragraphes 7.2.2 et 7.2.3 du chapitre 7 mais avec les propriétés matériaux précédentes et la loi de comportement locale (8.3). De plus, comme nous sommes en incompressible il n'est pas nécessaire de décomposer les champs $\underline{\underline{\theta}}^k(x)$ en une partie sphérique et déviatorique.
2. La deuxième étape est l'intégration de la loi de comportement. Dans ce cas, on reconduit le schéma d'intégration proposé en 7.2.4 mais en annulant toutes les variables sphériques notées \hat{X} .

Dans ce chapitre, nous ne présentons pas toute la mise en oeuvre du modèle car la démarche est similaire à celles qui ont pu être présentées dans les chapitres 6 et 9. Dans le paragraphe suivant, nous présentons donc les prédictions effectives et locales de ce modèle par rapport à des calculs de référence.

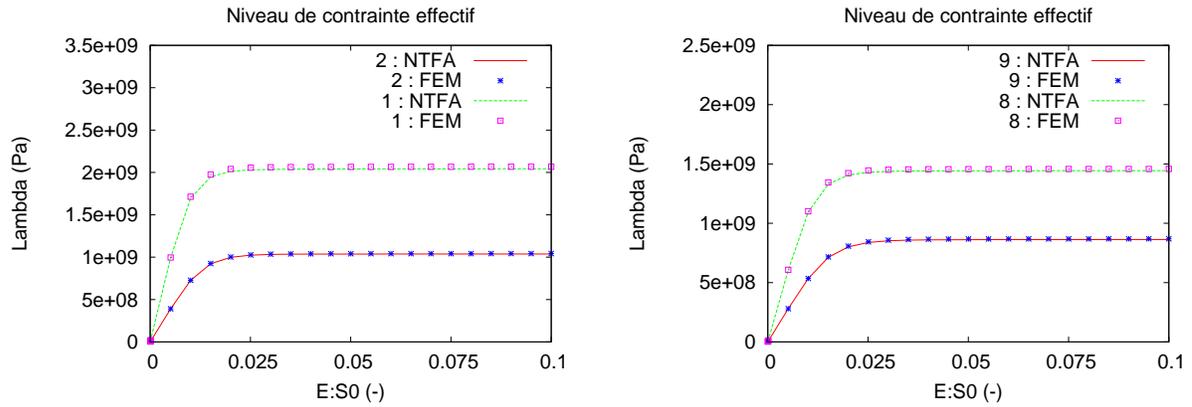
8.2 Résultats - essais non vieillissants

8.2.1 Comportement effectif

Les réponses effectives (FEM et NTFA) sont déterminés numériquement en simulant la réponse du composite (Cf. figure 8.1) le long de trajets de chargement radiaux dans l'espace des contraintes macroscopiques $\underline{\underline{\Sigma}}(t) = \lambda(t)\underline{\underline{\Sigma}}_0^k$. Nos essais k sont réalisés jusqu'à $\underline{\underline{E}} : \underline{\underline{\Sigma}}_0^k = 10\%$ avec $\underline{\underline{E}} : \underline{\underline{\Sigma}}_0^k$ fixée à $10^{-2}s^{-1}$ (vitesse qui a servi à identifier les modes). Nous avons évalué le niveau de contrainte macroscopique $\lambda(t)$ pour quatre cas de trajet de chargement $\underline{\underline{\Sigma}}(t) = \lambda(t)\underline{\underline{\Sigma}}_0^{(k)}$:

1. $\underline{\underline{\Sigma}}_0^{(1)}$ correspondant au chargement de traction uniaxiale.
2. $\underline{\underline{\Sigma}}_0^{(2)}$ correspondant au chargement en cisaillement pur.
3. $\underline{\underline{\Sigma}}_0^{(8)}$ correspondant au chargement suivant $\underline{\underline{\Sigma}}_0^{(8)} = \underline{\underline{\Sigma}}_0^{(1)} + \frac{1}{2}\underline{\underline{\Sigma}}_0^{(2)}$.
4. $\underline{\underline{\Sigma}}_0^{(9)}$ correspondant au chargement suivant $\underline{\underline{\Sigma}}_0^{(9)} = \underline{\underline{\Sigma}}_0^{(1)} + \underline{\underline{\Sigma}}_0^{(2)}$.

La figure 8.2(a) présente les prédictions macroscopiques du modèle NTFA par rapport aux éléments finis FEM, pour deux trajets de chargements élémentaires, à savoir $\underline{\underline{\Sigma}}_0^1$, nommé 1 sur la figure 8.2(a), et $\underline{\underline{\Sigma}}_0^2$, nommé 2 sur la figure 8.2(a). Pour ces deux trajets, nous constatons une très bonne prédiction du modèle NTFA par rapport aux éléments finis bien que ces trajets n'aient pas servi à identifier les modes. En effet, il y a ici du gonflement solide.



(a) Chargements hors identification des modes
 1 : $S_0 = \underline{\underline{\Sigma}}_0^1$ traction uniaxiale 11
 - 2 : $S_0 = \underline{\underline{\Sigma}}_0^2$ cisaillement pur 12

(b) Chargements hors identification des modes
 - 8 : $S_0 = \underline{\underline{\Sigma}}_0^1 + \frac{1}{2}\underline{\underline{\Sigma}}_0^2$
 - 9 : $S_0 = \underline{\underline{\Sigma}}_0^1 + \underline{\underline{\Sigma}}_0^2$

FIG. 8.2: Essai d'«écrouissage» $\underline{\underline{\dot{E}}} : \underline{\underline{\Sigma}}_0^k$ est fixée à $10^{-2}s^{-1}$ avec gonflement solide

Sur la figure 8.2(b), nous présentons également les prédictions du modèle NTFA par rapport aux éléments finis FEM, pour les essais nommés 8 et 9. Nous rappelons que ces essais n'ont également pas servi à identifier les modes. Pour ces deux essais, nous constatons également une bonne prédiction du modèle NTFA malgré la non linéarité du problème. L'erreur absolue la plus importante commise par le modèle NTFA ne dépasse pas 0.5 %. Il est important de souligner que le calcul aux éléments finis nécessite un temps de calcul de 6 heures tandis que le modèle NTFA nécessite moins de 3 secondes.

8.2.2 Comportement moyen par phase

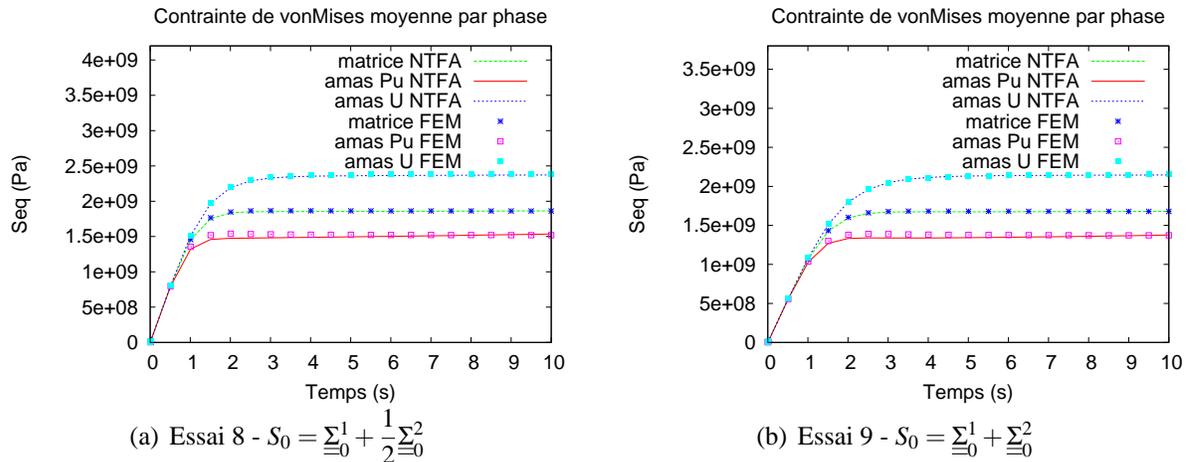


FIG. 8.3: Essai d'«écrouissage» $\underline{\underline{\dot{E}}} : \underline{\underline{\Sigma}}_0^k$ est fixée à $10^{-2}s^{-1}$

Sur la figure 8.3 nous comparons la prédiction de la contrainte équivalente (au sens de *von Mises*) moyenne par phase entre le modèle NTFA et les éléments finis (FEM). Les essais 8 et 9 étant les essais présentés au paragraphe 8.2.1. Pour ces deux essais, nous constatons également une assez

bonne prédiction des comportements moyens par phase. L'erreur absolue la plus importante commise par le modèle NTFA sur le premier moment de la contrainte équivalente est inférieure à 1.32 % (essai 8 phase plutonifère).

8.2.3 Champs locaux

Pour l'essai 8, à $t=10s$, le tableau 8.3 nous donne, dans chaque phase, l'écart type estimé avec le modèle NTFA et les éléments finis, ainsi que l'erreur commise par le modèle. L'erreur absolue la plus importante commise par le modèle NTFA est de l'ordre de 24.0% dans la phase plutonifère. Quantitativement, nous ne pouvons donc pas affirmer que l'approche NTFA prédit avec une bonne précision l'écart type du champ local analysé. La non linéarité en est la cause.

	FEM en %	NTFA en %	Erreur en %
Matrice	61.31	50.19	-18.14
Amas Pu	42.983	32.983	-23.27
Amas U	46.17	52.06	+12.76

TAB. 8.3: Écart type $\sigma_{eq}(x)$ en % par rapport au premier moment - NTFA vs FEM (Essai 8 $t=10s$)

8.3 Bilan du chapitre

Dans ce chapitre nous avons présenté les prédictions de l'approche NTFA en 3D (tridimensionnel) mais pour le comportement local suivant : visco-élasticité non linéaire incompressible avec déformations libres imposées. En fonctionnement normal, le combustible *MOX* n'a pas un comportement non linéaire, nous sortions donc du cadre de cette thèse et du problème local établi au chapitre 2 paragraphe 2.3. Ce chapitre s'inscrivait donc plus dans une démarche prospective et de démonstration que les approches NTFA fonctionnaient également correctement pour les comportements non linéaires. Il faut savoir que ce comportement est typiquement celui du combustible *MOX* en fonctionnement dit de classe 2 : transitoire ou rampe de puissance. Ces fonctionnements sont modélisés dans les codes de calculs industriels. Par conséquent, il était intéressant d'étudier la qualité prédictive des approches NTFA pour ce comportement local. Dans le premier paragraphe, nous avons donc présenté succinctement les équations constitutives du modèle et la manière dont la non linéarité du problème était prise en compte. Dans le deuxième paragraphe, les prédictions de ce modèle par rapport à des calculs de référence en champs complets ont été exposées. **Pour des essais à vitesse et à direction de contrainte imposées qui ont servi ou pas servi à identifier les modes plastiques, nous avons pu montrer une bonne prédiction du comportement effectif et des comportements moyens par phase du modèle NTFA.** Par contre, **nous avons démontré une prédiction des champs locaux de moins bonne qualité que dans les cas des études linéaires.** En effet, l'erreur absolue la plus importante commise par le modèle NTFA sur l'écart type de la variable analysée est de l'ordre de 24.0% dans la phase plutonifère.

Ce chapitre a permis de montrer que la non linéarité n'était pas du tout un point bloquant dans les approches NTFA, notamment en 3D et pour un comportement visco-élastique avec des

déformations libres imposées. Si les comportements effectif et moyens par phase sont plutôt bien prédits, la prédiction des champs locaux est bien plus difficile que dans le cas des études linéaires. Néanmoins, par rapport aux modèles analytiques ou semi-analytiques, l'approche NTFA reste particulièrement intéressante. Cette étude a été réalisée en fin de thèse, elle n'est donc pas complète. En perspective de cette thèse, il serait intéressant d'analyser les prédictions effectives et locales du modèle NTFA pour d'autres essais : fluage, relaxation et essais tournants.

Une seconde démarche prospective a été réalisée dans le cadre de cette thèse. Celle-ci est présentée dans le chapitre suivant.

Chapitre 9

Optimisation de l'approche NTFA - Perspectives de recherche

Objet du chapitre :

L'objectif de ce chapitre est de présenter les travaux, menés dans le cadre de cette thèse, pour optimiser le modèle NTFA (réduction du nombre de modes mais dans le cas linéaire) afin de le rendre encore plus performant dans les codes de calculs industriels. Deux méthodes ont été proposées et développées. Dans le premier paragraphe, nous présentons la première méthode qui consiste à relaxer le critère numérique α de sélection des modes de la transformée de *Karhunen-Loève*. Dans le deuxième paragraphe, nous exposons la méthode où les modes plastiques sont non plus considérés par phase mais sur tout le VER. Cette méthode réduit considérablement le nombre de modes et ouvre de nouvelles perspectives de recherche sur l'approche NTFA, notamment son extension aux polycristaux. Pour chaque méthode, nous présentons les résultats effectifs et locaux obtenus par rapport aux calculs de références (FEM).

Sommaire

9.1	Méthode 1 - Relaxation du critère numérique <i>Karhunen-Loève</i>	202
9.1.1	Principe	202
9.1.2	Résultats - essais non vieillissants	202
9.2	Méthode 2 - Modes sur tout le VER	205
9.2.1	Principe	205
9.2.2	<i>Karhunen-Loève</i> modifiée	207
9.2.3	Résultats - essais non vieillissants	209
9.3	Bilan du chapitre	212

La méthode NTFA est particulièrement attrayante pour sa rapidité d'exécution. Elle est également intéressante car elle prédit avec une bonne précision les comportements effectif et moyens par phase ainsi que les champs locaux par phase (bonne prédiction des champs locaux surtout dans les études linéaires). Néanmoins, dans le chapitre 6 nous avons vu que notre modèle NTFA en 3D était constitué de 54 variables internes scalaires pour le comportement local suivant : visco-élastique linéaire incompressible. Les approches semi-analytiques, présentées en partie 4, sont généralement constituées d'une vingtaine de variables internes scalaires pour ce type de comportement. Certes, ces approches ne nous donnent pas accès aux champs locaux, mais nous avons néanmoins, dans le cadre de cette thèse, cherché à optimiser (réduction du nombre de variables internes) notre modèle NTFA pour le rendre aussi compétitif. C'est donc l'objet de ce chapitre. Cette phase d'optimisation a été réalisée sur le modèle NTFA exposé dans le chapitre 6.

Pour réduire le nombre de variables internes, plusieurs approches ont été étudiées. En effet, dans un premier temps nous avons cherché à utiliser dans les phases inclusionnaires une approche en champs de transformation uniformes, d'abord dans les deux phases, puis dans l'une et dans l'autre. Mais les prédictions effectives se sont avérées de piètre qualité. Nous avons donc abandonné cette axe d'étude. Dans un deuxième temps, deux autres approches ont été développées et testées. Celles-ci sont présentées dans les deux paragraphes suivants.

9.1 Méthode 1 - Relaxation du critère numérique *Karhunen-Loève*

9.1.1 Principe

Nous avons vu au paragraphe 3.5.4.3 chapitre 6 qu'un des intérêts de la transformée de *Karhunen-Loève* réside dans le fait que la magnitude d'une valeur propre correspond à la quantité d'information contenue dans le vecteur propre associé. La relation (6.8) permet de sélectionner les modes prépondérants. La valeur du seuil α est laissée au choix de l'utilisateur et dépend de la précision désirée. Dans notre cas (Cf. paragraphe 6.1.1 chapitre 6), nous avons fixé α à 1.10^{-4} . Pour diminuer le nombre de modes, nous avons donc relaxé et testé deux valeurs de α :

1. 1.10^{-2} : cette valeur de α nous a permis de passer de 54 variables internes scalaires à 18 variables internes scalaires (un mode par phase et par trajet de chargement). Les prédictions effectives se sont avérées très prometteuses mais celles des champs moyens par phase de très mauvaises qualités. Nous avons donc testé ensuite la valeur de 1.10^{-3} .
2. 1.10^{-3} : cette valeur de α nous a permis de passer de 54 variables internes scalaires à 36 variables internes scalaires. Les prédictions effectives se sont avérées aussi bonnes qu'avec le modèle constitué de 54 variables internes scalaires, tandis que les prédictions des champs moyens et locaux par phase ont légèrement perdu en précision. Les résultats de cette méthode 1 sont exposés dans le paragraphe suivant.

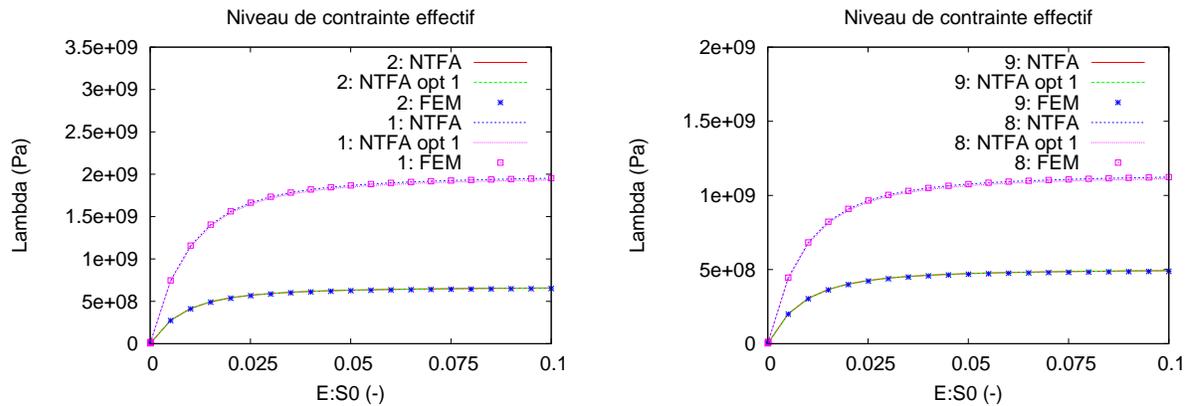
9.1.2 Résultats - essais non vieillissants

Dans ce paragraphe nous reprenons les essais d'«écrouissage» exposés aux paragraphes 6.3.1.1, 6.3.2.1 et 6.3.3 du chapitre 6. Nous allons donc tout au long de ce paragraphe comparer la prédiction du modèle NTFA non optimisé (modèle développé au chapitre 6) et celle du modèle NTFA optimisé par rapport aux calculs de référence que nous avons réalisés avec le code aux éléments finis Cast3m (Cf. [<http://www.cast3m.cea.fr/> ;]). Comme dans les chapitres précédents, les calculs de référence seront

notés FEM tandis que les calculs réalisés avec le modèle NTFA non optimisé seront notés NTFA et ceux réalisés avec le modèle NTFA optimisé seront notés NTFA opt 1 . L'ensemble des calculs, présentés ci-dessous, utilisent les propriétés matériaux du tableau 6.1 (propriétés qui ont servi à identifier les modes) et le comportement local présenté au chapitre 6.

9.1.2.1 Comportement effectif

La figure 9.1(a) présente les prédictions macroscopiques des modèles NTFA et NTFA opt 1 par rapport aux éléments finis FEM, pour deux des six trajets de chargements élémentaires qui ont servi à identifier les modes, à savoir $\underline{\underline{\Sigma}}_0^1$, nommé 1 sur la figure 9.1(a), et $\underline{\underline{\Sigma}}_0^2$, nommé 2 sur la figure 9.1(a). Pour ces deux trajets, nous constatons une très bonne prédiction du modèle NTFA et NTFA opt 1 par rapport aux éléments finis. L'erreur commise par le modèle NTFA et le modèle NTFA opt1 par rapport aux éléments finis est inférieure à 0.1%. Les deux modèles NTFA sont quasi confondus.



(a) Chargements pour l'identification des modes

- 1 : $S_0 = \underline{\underline{\Sigma}}_0^1$ traction uniaxiale 11
- 2 : $S_0 = \underline{\underline{\Sigma}}_0^2$ cisaillement pur 12

(b) Chargements hors identification des modes

- 8 : $S_0 = \underline{\underline{\Sigma}}_0^1 + \frac{1}{2}\underline{\underline{\Sigma}}_0^2$
- 9 : $S_0 = \underline{\underline{\Sigma}}_0^1 + \underline{\underline{\Sigma}}_0^2$

FIG. 9.1: Essai d'«écrouissage» $\underline{\underline{\dot{E}}}$: $\underline{\underline{\Sigma}}_0^k$ est fixée à $10^{-2}s^{-1}$

Sur la figure 9.1(b), nous présentons également les prédictions des deux modèles NTFA par rapport aux éléments finis FEM, pour les essais nommés 8 et 9. Nous rappelons que ces essais n'ont pas servi à identifier les modes. Pour ces deux essais, nous constatons également une très bonne prédiction du modèle NTFA opt 1. Celui-ci est confondu avec le modèle NTFA non optimisé. Le modèle NTFA optimisé (NTFA opt 1 : 36 variables internes scalaires) est donc particulièrement attrayant : il prédit le comportement effectif avec une précision aussi bonne que celle du modèle NTFA non optimisé (NTFA : 54 variables internes scalaires) et il est plus rapide en temps de calcul. Mais, la prédiction des comportements moyens par phase de ce modèle est elle aussi excellente ? Nous allons donc répondre à cette question dans le paragraphe suivant.

9.1.2.2 Comportement moyen par phase

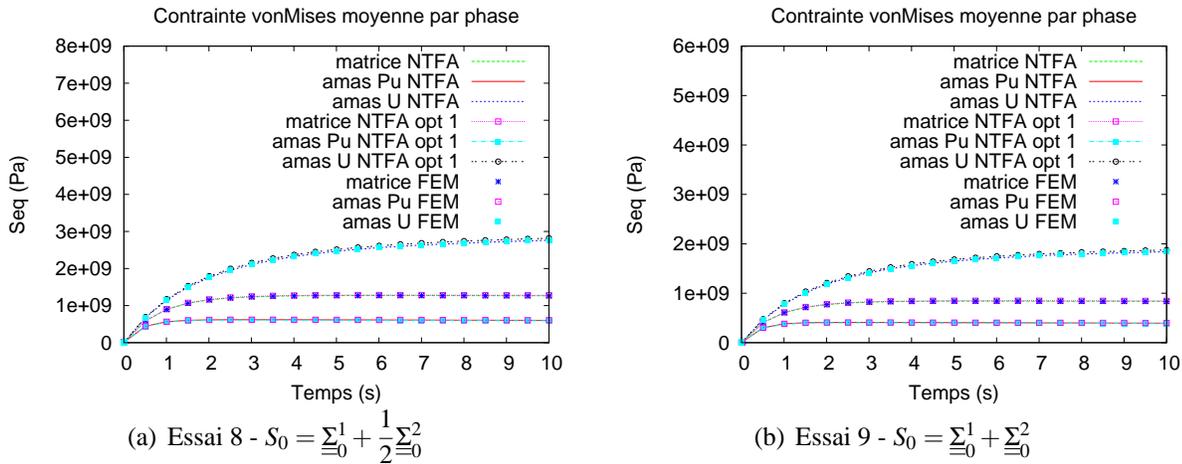


FIG. 9.2: Essai d'«écrouissage» $\underline{\dot{E}} : \underline{\Sigma}_0^k$ est fixée à $10^{-2}s^{-1}$

Sur la figure 9.2 nous comparons la prédiction de la contrainte équivalente (au sens de *von Mises*) moyenne par phase entre le modèle NTFA, le modèle NTFA opt1 et les éléments finis (FEM). Les essais 8 et 9 étant les essais présentés au paragraphe précédent. Pour ces deux essais, nous constatons également une bonne prédiction du modèle NTFA opt 1 du comportement moyen dans les phases matricielle et amas Pu. Dans la phase amas U, le modèle NTFA opt 1 commet une erreur plus importante que le modèle NTFA non optimisé. En effet, l'erreur commise par le modèle NTFA opt 1 par rapport aux éléments finis est égale à 2 % tandis que celle commise par le modèle NTFA non optimisé est inférieure à 0.5 %. A ce stade, nous voyons que le choix entre le modèle NTFA non optimisé et le modèle NTFA optimisé sera gouverné par ce que l'utilisateur recherche : précision ou rapidité. Dans notre cas d'étude (intégration dans un code industriel du comportement du crayon combustible), 2% d'erreur sur le premier moment de la variable analysé est acceptable compte tenu du gain obtenu en temps de calcul. Mais, la prédiction des comportements locaux par phase de ce modèle est elle aussi excellente ? Nous allons donc répondre à cette question dans le paragraphe suivant.

9.1.2.3 Champs locaux

Pour l'essai 8, à $t=10s$, le tableau 9.1 nous donne, dans chaque phase, l'écart type estimé avec le modèle NTFA, le modèle NTFA opt 1 et les éléments finis, ainsi que l'erreur commise par les modèles. L'erreur absolue la plus importante commise par le modèle NTFA opt 1 est de l'ordre de 3% dans la phase uranifère, tandis que celle commise par le modèle NTFA non optimisé est de l'ordre de 1% dans la phase plutonifère. Comme nous l'avons souligné au paragraphe précédent, nous voyons que, du point de vue local, le choix entre le modèle NTFA non optimisé et le modèle NTFA optimisé sera également gouverné par ce que l'utilisateur recherche : précision ou rapidité. Quantitativement, nous pouvons néanmoins affirmer que l'approche NTFA optimisée prédit avec une bonne précision l'écart type du champ local analysé et ce pour un essai d'«écrouissage» (essai 8) qui n'a pas servi à identifier les modes.

	FEM en Pa	NTFA en Pa	Erreur en %	NTFA opt 1 en Pa	Erreur opt 1 en %
Matrice	$1.62E + 08$	$1.63E + 08$	+0.62	$1.64E + 08$	+1.24
Amas Pu	$5.95E + 07$	$6.01E + 07$	+1.01	$6.04E + 07$	+1.51
Amas U	$3.39E + 08$	$3.36E + 08$	-0.88	$3.29E + 08$	-2.95

TAB. 9.1: Écart type contrainte équivalente - NTFA vs FEM (Essai 8 t=10s)

9.1.2.4 Conclusion

Dans ce paragraphe nous avons présenté une première méthode d'optimisation du modèle NTFA établi au chapitre 6. Pour diminuer le nombre de modes, nous avons donc relaxé le critère α de sélection des modes prépondérants par la méthode de *Karhunen-Loève*. Deux valeurs de α ont été testées :

1. 1.10^{-2} : cette valeur de α nous a permis de passer de 54 variables internes scalaires à 18 variables internes scalaires (un mode par phase et par trajet de chargement). Les prédictions effectives se sont avérées très prometteuses mais celles des champs moyens par phase de très mauvaises qualités. Nous avons donc testé ensuite la valeur de 1.10^{-3} .
2. 1.10^{-3} : **cette valeur de α nous a permis de passer de 54 variables internes scalaires à 36 variables internes scalaires. Les prédictions effectives se sont avérées aussi bonnes qu'avec le modèle constitué de 54 variables internes scalaires, tandis que les prédictions des comportements moyens et des champs locaux par phase ont légèrement perdu en précision.** Au niveau du premier moment de la variable analysée, l'erreur absolue la plus importante commise par le modèle NTFA «réduit» (NTFA opt 1 : 36 variables internes scalaires) est de l'ordre de 2%, tandis qu'elle est de 0.5% pour le modèle NTFA «complet» (NTFA 54 variables internes scalaires). Au niveau de l'écart type de la variable analysée, l'erreur absolue la plus importante commise par le modèle NTFA «réduit» est de l'ordre de 3%, tandis qu'elle est de 1.% pour le modèle NTFA «complet». **Nous pouvons donc considérer que ce modèle «réduit» est très intéressant, surtout si l'on cherche à l'intégrer dans un code calcul industriel (code qui nécessite des modèles performants en temps de calcul).**

Dans le cadre de cette thèse, une deuxième méthode d'optimisation du modèle NTFA a été développée. C'est donc l'objet du paragraphe suivant.

9.2 Méthode 2 - Modes sur tout le VER

9.2.1 Principe

Nous avons vu au paragraphe 3.5.4.3 que nous identifions les modes par phase. Ce choix avait été établi par [MICHEL and SUQUET, 2003] et était nécessaire surtout pour les comportements non linéaires. Dans le cadre de cette étude, le comportement local est linéaire. Nous avons donc décidé, ici, d'identifier les modes sur tout le VER. En appliquant cette démarche, nous passons d'un modèle NTFA «complet» composé de 54 variables internes scalaires à un modèle «réduit» composé de 15

variables internes scalaires.

La considération de modes sur tout le VER modifie les équations du modèle NTFA. Nous présentons donc ci-dessous les évolutions apportées dans le cadre de cette thèse.

Nous avons vu au chapitre 6 que la contrainte locale était définie par la relation suivante :

$$\underline{\underline{\underline{\underline{\sigma}}}}(\underline{x}, t) = \underline{\underline{\underline{\underline{C}}}}(\underline{x}) : \left(\underline{\underline{\underline{\underline{\varepsilon}}}}(\underline{x}, t) - \underline{\underline{\underline{\underline{\varepsilon}}}}^{vp}(\underline{x}, t) \right) , \quad (9.1)$$

avec $\underline{\underline{\underline{\underline{C}}}}(\underline{x})$ le tenseur d'ordre 4 des propriétés élastiques. La vitesse de déformation viscoplastique dépend linéairement de la contrainte, on peut donc l'écrire comme ci-dessous :

$$\underline{\underline{\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}}}}^{vp}(\underline{x}, t) = \underline{\underline{\underline{\underline{M}}}}^{vp}(\underline{x}) : \underline{\underline{\underline{\underline{\sigma}}}}(\underline{x}, t) , \quad (9.2)$$

avec $\underline{\underline{\underline{\underline{M}}}}^{vp}(\underline{x})$ le tenseur d'ordre 4 des propriétés viscoplastiques. On a aussi $\underline{\underline{\underline{\underline{\sigma}}}}(\underline{x}, t) = \underline{\underline{\underline{\underline{L}}}}^{vp}(\underline{x}) : \underline{\underline{\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}}}}^{vp}(\underline{x}, t)$ avec $\underline{\underline{\underline{\underline{L}}}}^{vp} = (\underline{\underline{\underline{\underline{M}}}}^{vp})^{-1}$. On rappelle que l'approche NTFA décompose la déformation viscoplastique suivant la relation ci-dessous :

$$\underline{\underline{\underline{\underline{\varepsilon}}}}^{vp}(\underline{x}, t) = \sum_{k=1}^M \varepsilon_k^{vp}(t) \underline{\underline{\underline{\underline{\mu}}}}^k(\underline{x}) , \quad (9.3)$$

et on a vu au chapitre 3 paragraphe 3.5.4.1 que la déformation totale locale était donnée par la relation suivante :

$$\underline{\underline{\underline{\underline{\varepsilon}}}}(\underline{x}) = \underline{\underline{\underline{\underline{A}}}}(\underline{x}) : \underline{\underline{\underline{\underline{E}}}} + \sum_{l=1}^M (\underline{\underline{\underline{\underline{D}}}} * \underline{\underline{\underline{\underline{\mu}}}}^l)(\underline{x}) : \varepsilon_l^{vp} . \quad (9.4)$$

Comme la contrainte locale est définie par $\underline{\underline{\underline{\underline{\sigma}}}}(\underline{x}) = \underline{\underline{\underline{\underline{C}}}}(\underline{x}) : \left(\underline{\underline{\underline{\underline{\varepsilon}}}}(\underline{x}) - \underline{\underline{\underline{\underline{\varepsilon}}}}^{vp}(\underline{x}) \right)$, on a donc :

$$\underline{\underline{\underline{\underline{\sigma}}}}(\underline{x}) = \underline{\underline{\underline{\underline{C}}}}(\underline{x}) : \underline{\underline{\underline{\underline{A}}}}(\underline{x}) : \underline{\underline{\underline{\underline{E}}}} + \sum_{l=1}^M \underline{\underline{\underline{\underline{C}}}}(\underline{x}) : \left((\underline{\underline{\underline{\underline{D}}}} * \underline{\underline{\underline{\underline{\mu}}}}^l)(\underline{x}) - \underline{\underline{\underline{\underline{\mu}}}}^l(\underline{x}) \right) \varepsilon_l^{vp} . \quad (9.5)$$

On a vu que la contrainte réduite associée au mode k était définie par $\tau_k(t) = \left\langle \underline{\underline{\underline{\underline{\mu}}}}^k : \underline{\underline{\underline{\underline{\sigma}}}}(t) \right\rangle$. On a donc la relation suivante pour $\tau_k(t)$:

$$\tau_k(t) = \left\langle \underline{\underline{\underline{\underline{\mu}}}}^k : \underline{\underline{\underline{\underline{C}}}} : \underline{\underline{\underline{\underline{A}}}} \right\rangle : \underline{\underline{\underline{\underline{E}}}}(t) + \sum_{l=1}^M \left\langle \underline{\underline{\underline{\underline{\mu}}}}^k : \underline{\underline{\underline{\underline{C}}}} : (\underline{\underline{\underline{\underline{D}}}} * \underline{\underline{\underline{\underline{\mu}}}}^l) \right\rangle - \left\langle \underline{\underline{\underline{\underline{\mu}}}}^k : \underline{\underline{\underline{\underline{C}}}} : \underline{\underline{\underline{\underline{\mu}}}}^l \right\rangle \varepsilon_l^{vp}(t) . \quad (9.6)$$

On pose $\underline{\underline{\underline{\underline{a}}}}^k = \left\langle \underline{\underline{\underline{\underline{\mu}}}}^k : \underline{\underline{\underline{\underline{C}}}} : \underline{\underline{\underline{\underline{A}}}} \right\rangle$, $D_{kl} = \left\langle \underline{\underline{\underline{\underline{\mu}}}}^k : \underline{\underline{\underline{\underline{C}}}} : (\underline{\underline{\underline{\underline{D}}}} * \underline{\underline{\underline{\underline{\mu}}}}^l) \right\rangle$ et $L_{kl} = \left\langle \underline{\underline{\underline{\underline{\mu}}}}^k : \underline{\underline{\underline{\underline{C}}}} : \underline{\underline{\underline{\underline{\mu}}}}^l \right\rangle$. On remarque que les $\underline{\underline{\underline{\underline{a}}}}^k$ et les D_{kl} sont différents ici du cas où l'on identifie les modes par phase (Cf. chapitre 3 paragraphe 3.5.4.1). Avec ces notations on a donc :

$$\tau_k(t) = \underline{\underline{\underline{\underline{a}}}}^k : \underline{\underline{\underline{\underline{E}}}}(t) + \sum_{l=1}^M (D_{kl} - L_{kl}) \varepsilon_l^{vp}(t) . \quad (9.7)$$

On a également la contrainte réduite associée au mode k qui est définie par :

$$\tau_k(t) = \left\langle \underline{\underline{\underline{\underline{\mu}}}}^k : \underline{\underline{\underline{\underline{\sigma}}}}(t) \right\rangle = \left\langle \underline{\underline{\underline{\underline{\mu}}}}^k : \underline{\underline{\underline{\underline{L}}}}^{vp} : \underline{\underline{\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}}}}^{vp}(t) \right\rangle = \sum_{l=1}^M \left\langle \underline{\underline{\underline{\underline{\mu}}}}^k : \underline{\underline{\underline{\underline{L}}}}^{vp} : \underline{\underline{\underline{\underline{\mu}}}}^l \right\rangle \varepsilon_l^{vp}(t) . \quad (9.8)$$

On pose $V_{kl} = \left\langle \underline{\underline{\underline{\mu}}^k} : \underline{\underline{\underline{L}}}^{vp} : \underline{\underline{\underline{\mu}}^l} \right\rangle$ et on a donc :

$$\tau_k(t) = \sum_{l=1}^M V_{kl} \dot{\underline{\underline{\underline{\mu}}}}_l^{vp}(t) , \quad (9.9)$$

et en inversant cette relation :

$$\dot{\underline{\underline{\underline{\mu}}}}_l^{vp}(t) = \sum_{m=1}^M (V)_{lm}^{-1} \tau_m(t) . \quad (9.10)$$

En différentiant la relation (9.7) on obtient :

$$\dot{\tau}_k = \underline{\underline{\underline{a}}}^k : \underline{\underline{\underline{E}}}(t) + \sum_{l=1}^M (D_{kl} - L_{kl}) \dot{\underline{\underline{\underline{\mu}}}}_l^{vp} . \quad (9.11)$$

En injectant (9.10) dans l'équation (9.11) on obtient le système différentiel suivant couplé d'ordre 1 en τ :

$$\dot{\tau}_k = \underline{\underline{\underline{a}}}^k : \underline{\underline{\underline{E}}}(t) + \left(\sum_{l=1}^M (D_{kl} - L_{kl}) \left(\sum_{m=1}^M (V)_{lm}^{-1} \tau_m \right) \right) . \quad (9.12)$$

La solution de ce problème est obtenue en résolvant le **système différentiel en τ couplé d'ordre 1 le long d'un trajet imposé**. Nous rappelons au lecteur qu'ici la loi de comportement local est visco-élastique linéaire incompressible (Cf. chapitre 6). Les modes $\underline{\underline{\underline{\mu}}^k}(\underline{x})$ sont donc purement déviatoriques. Nous avons également supposé que les constituants étaient isotropes. Les modules élastiques et visqueux sont caractérisés par le module de cisaillement élastique $G(\underline{x})$ et le module de cisaillement visqueux $G^{vp}(\underline{x})$. On a donc :

$$\underline{\underline{\underline{C}}} : \underline{\underline{\underline{\mu}}^k}(\underline{x}) = 2G(\underline{x}) \underline{\underline{\underline{\mu}}^k}(\underline{x}) , \quad \underline{\underline{\underline{L}}}^{vp} : \underline{\underline{\underline{\mu}}^k}(\underline{x}) = 2G^{vp}(\underline{x}) \underline{\underline{\underline{\mu}}^k}(\underline{x}) . \quad (9.13)$$

9.2.2 Karhunen-Loève modifiée

Nous avons vu au paragraphe 6.1.1 chapitre 6 que la transformation de *Karhunen-Loève*, encore appelée décomposition orthogonale aux valeurs propres (Proper Orthogonal Decomposition : POD), est non seulement capable d'orthogonaliser les modes deux à deux mais également capable de sélectionner les modes où l'information est distribuée de façon optimale. Nous présentons donc ci-dessous cette méthode mais appliquée au cas optimisé.

A la vue de l'équation (9.10) donnant l'évolution des variables internes réduites, nous choisissons ici de considérer des modes tels que la matrice V_{kl} soit diagonale, c'est à dire des modes tels que :

$$\left\langle \underline{\underline{\underline{\mu}}^k} : 2G^{vp} \underline{\underline{\underline{\mu}}^l} \right\rangle = 0 \quad \text{si } k \neq l \quad (9.14)$$

Soit $\underline{\underline{\underline{\theta}}^k}(\underline{x}), k = 1, \dots, M_T$, M_T champs de déformations viscoplastiques déterminés comme décrit chapitre 6 paragraphe 6.1.1. A partir de ces champs on calcule la matrice de corrélation modifiée, notée g :

$$g_{ij} = \left\langle \underline{\underline{\underline{\theta}}^i}(\underline{x}) : 2G^{vp}(\underline{x}) \underline{\underline{\underline{\theta}}^j}(\underline{x}) \right\rangle , \quad i, j = 1, \dots, M_T \quad (9.15)$$

On peut donc calculer les vecteurs propres \underline{v}^k et les valeurs propres λ_k avec $k = 1, \dots, M_T$, et on a :

$$\sum_{j=1}^{M_T} g_{ij} v_j^k = \lambda_k v_i^k , \quad i, k = 1, \dots, M_T \quad (9.16)$$

A partir de ces vecteurs propres, on construit les vecteurs de la nouvelle base, les modes, qu'on appelle dans la NTFA les modes plastiques $\underline{\underline{\mu}}^k(\underline{x}), k = 1, \dots, M_T$:

$$\underline{\underline{\mu}}^k(\underline{x}) = \sum_{l=1}^{M_T} v_l^k \underline{\underline{\theta}}^l(\underline{x}) \quad (9.17)$$

Comme pour *Karhunen-Loève*, une des propriétés majeures de la transformation de *Karhunen-Loève* modifiée est la totale décorrélation des nouvelles données et on peut vérifier que les nouveaux modes $\underline{\underline{\mu}}^k$ sont orthogonaux au sens de la norme (9.14). Pour le vérifier, on calcule d'abord la moyenne du produit doublement contracté d'un mode plastique $\underline{\underline{\mu}}^k$ avec un champ de déformation anélastique $\underline{\underline{\theta}}^l$ pondéré par $2G^{vp}$:

$$\langle \underline{\underline{\mu}}^k : 2G^{vp} \underline{\underline{\theta}}^l \rangle = \sum_i v_i^k \langle \underline{\underline{\theta}}^i : 2G^{vp} \underline{\underline{\theta}}^l \rangle = \sum_i g_{il} v_i^k = \lambda_k v_l^k \quad (9.18)$$

Ensuite, on calcule le produit de deux modes pondérés par $2G^{vp}$ et on calcule sa moyenne sur tout le VER :

$$\langle \underline{\underline{\mu}}^k : 2G^{vp} \underline{\underline{\mu}}^r \rangle = \sum_l v_l^r \langle \underline{\underline{\mu}}^k : 2G^{vp} \underline{\underline{\theta}}^l \rangle = \lambda_k \sum_l v_l^k v_l^r = \begin{cases} \lambda_k & \text{si } k = r \\ 0 & \text{si } k \neq r \end{cases} \quad (9.19)$$

On a donc trouvé ce qu'il fallait démontrer. On remarque que dans le cas de *Karhunen-Loève* modifiée les λ_k sont des viscosités.

Un autre intérêt de la transformée de *Karhunen-Loève* modifiée réside toujours dans le fait que la magnitude d'une valeur propre correspond à la quantité d'information contenue dans le vecteur propre associé. En d'autres termes plus le rapport $\lambda_l / \sum_{k=1}^{M_T} \lambda_k$ est proche de 1, plus le vecteur propre v_l associé à λ_l contient d'informations issues des données initiales (dans notre cas, les champs de déformations viscoplastiques $\underline{\underline{\theta}}^k(\underline{x}), k = 1, \dots, M_T$). En supposant que les valeurs propres sont ordonnées de manière décroissante $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_{M_T}$ et en prenant en compte la propriété précédente, seuls les M premiers modes correspondant aux plus grandes valeurs propres et vérifiant le critère (9.20) peuvent être considérés :

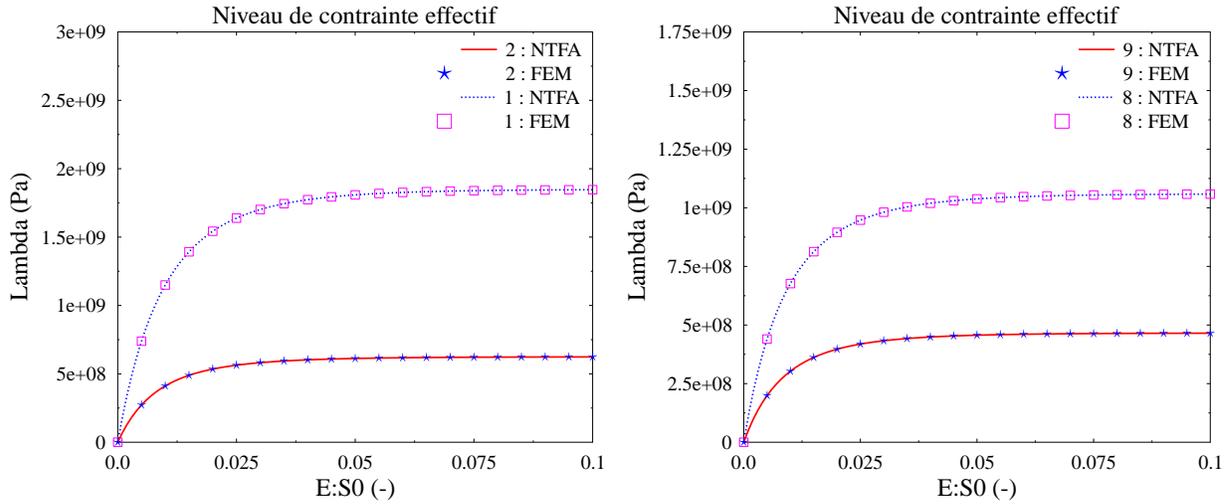
$$\sum_{k=1}^M \lambda_k / \sum_{k=1}^{M_T} \lambda_k \geq \alpha \quad (9.20)$$

Comme pour la transformée de *Karhunen-Loève*, la valeur du seuil α est laissé au choix de l'utilisateur et dépend de la précision désirée.

Cette démarche d'optimisation, consistant à considérer des modes globaux sur tout le VER, permet donc de diminuer considérablement le nombre de variables internes. En appliquant cette démarche, nous passons d'un modèle NTFA «complet» composé de 54 variables internes scalaires à un modèle «réduit» composé de 15 variables internes scalaires. Ce modèle NTFA optimisé est donc particulièrement attrayant pour sa rapidité d'exécution : non seulement il est plus rapide en temps de calcul que modèle NTFA établi au chapitre 6 mais il est également plus rapide que le modèle NTFA optimisé, proposé précédemment, NTFA opt 1. On peut dès lors s'interroger sur la qualité prédictive de ce modèle. Nous allons donc répondre à cette question dans les paragraphes suivants.

9.2.3 Résultats - essais non vieillissants

9.2.3.1 Comportement effectif



(a) Chargements pour l'identification des modes

- 1 : $S_0 = \underline{\underline{\Sigma}}_0^1$ traction uniaxiale 11

- 2 : $S_0 = \underline{\underline{\Sigma}}_0^2$ cisaillement pur 12

(b) Chargements hors identification des modes

- 8 : $S_0 = \underline{\underline{\Sigma}}_0^1 + \frac{1}{2} \underline{\underline{\Sigma}}_0^2$

- 9 : $\underline{\underline{\Sigma}}_0^1 + \underline{\underline{\Sigma}}_0^2$

FIG. 9.3: Essai d'«écrouissage» $\underline{\underline{E}} : \underline{\underline{\Sigma}}_0^k$ est fixée à $10^{-2} s^{-1}$

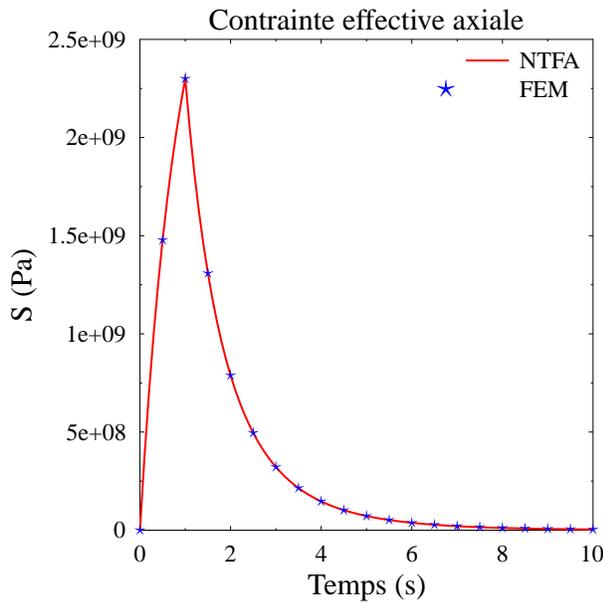


FIG. 9.4: Essai de relaxation - $E_{33} = 2\%$

Nous reprenons les essais d'«écrouissage» exposés au paragraphe 6.3.1.1 du chapitre 6. La figure 9.3(a) présente les prédictions macroscopiques de ce modèle NTFA optimisé (15 modes) par rapport aux éléments finis FEM, pour deux des six trajets de chargements élémentaires qui ont servi à identifier les modes, à savoir $\underline{\underline{\Sigma}}_0^1$, nommé 1 sur la figure 9.3(a), et $\underline{\underline{\Sigma}}_0^2$, nommé 2 sur la figure 9.3(a). Pour ces deux trajets, nous constatons une très bonne prédiction du modèle NTFA optimisé par rapport aux éléments finis. Sur la figure 9.3(b), nous présentons également les prédictions du modèle NTFA optimisé par rapport aux éléments finis FEM, pour les essais 8 et 9 présentés au chapitre 6 paragraphe 6.3.1.1. Ces essais 8 et 9 sont nommés 8 et 9 sur la figure. Nous rappelons que ces essais n'ont pas servi à identifier les modes. Pour ces deux essais, nous constatons également une très bonne prédiction du modèle NTFA optimisé. Le modèle NTFA optimisé (15 variables internes scalaires) est donc

particulièrement attrayant : il prédit le comportement effectif avec une précision aussi bonne que le modèle NTFA non optimisé (54 variables internes scalaires) et il est plus rapide en temps de calcul. L'écart entre le modèle NTFA optimisé et les éléments finis (FEM) est inférieur à 0.1 %. Cet écart est

donc du même ordre de grandeur que celui obtenu avec le modèle NTFA non optimisé.

Mais, cette prédiction du comportement effectif est elle aussi bonne pour un essai de relaxation ? Rappel : les modes obtenus sur tout le VER ont été identifiés pour des essais d'«écrouissage». Sur la figure 9.4 nous présentons la réponse effective de notre modèle NTFA optimisé pour l'essai de relaxation présenté au paragraphe 6.3.1.2 du chapitre 6. Bien que les modes aient été identifiés pour des essais d'écrouissage, nous constatons toujours une très bonne prédiction effective du modèle NTFA optimisé (erreur inférieure à 0.1%).

Mais, la prédiction des comportements moyens par phase de ce modèle est elle aussi excellente ? Nous allons donc répondre à cette question dans le paragraphe suivant.

9.2.3.2 Comportement moyen par phase

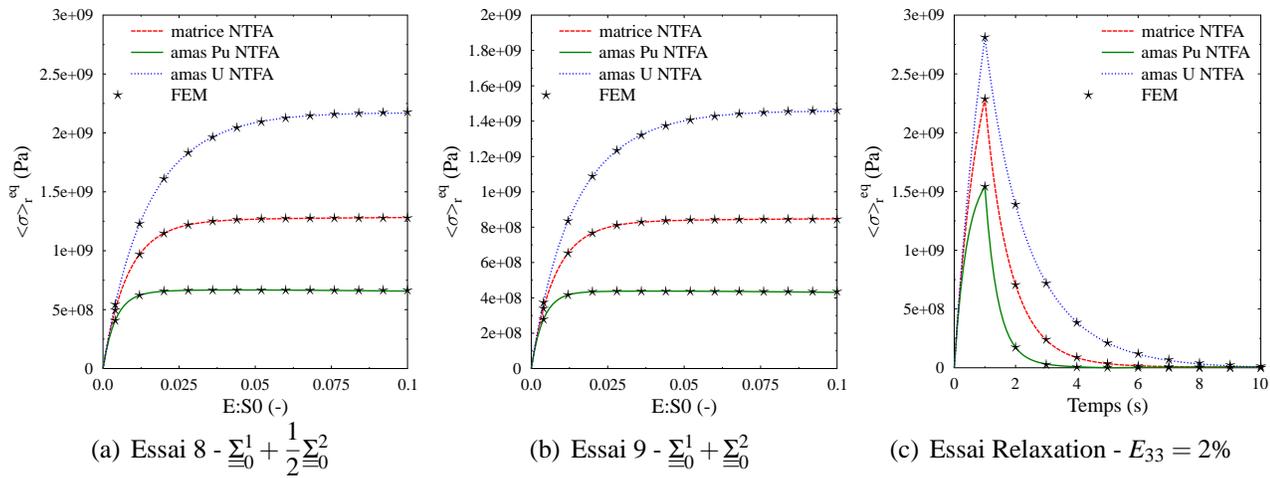


FIG. 9.5: 2 essais d'«écrouissage» $\underline{\dot{E}} : \underline{\Sigma}_0^k$ est fixée à $10^{-2}s^{-1}$ et 1 essai de relaxation

Sur les figures 9.5(a) et 9.5(b) nous comparons la prédiction de la contrainte équivalente (au sens de *von Mises*) moyenne par phase entre le modèle NTFA optimisé et les éléments finis (FEM). Les essais 8 et 9 étant les essais présentés au paragraphe 9.2.3.1. Pour ces deux essais, nous constatons également une très bonne prédiction des comportements moyens par phase (erreur inférieure à 0.5 %). Sur la figure 9.5(c) nous présentons le comportement moyen par phase de notre modèle NTFA optimisé pour l'essai de relaxation précédent. Bien que les modes aient été identifiés pour des essais d'écrouissage, nous constatons toujours une très bonne prédiction effective du modèle NTFA optimisé (erreur inférieure à 0.5%).

9.2.3.3 Champs locaux

Sur la figure 9.6 nous comparons la prédiction de la contrainte équivalente (au sens de *von Mises*) locale par phase entre le modèle NTFA optimisé et les éléments finis (FEM). Les essais 8 et 9 étant les essais présentés aux paragraphes précédents. Pour ces deux essais, nous constatons également une très bonne prédiction qualitative des champs locaux par phase. Pour l'essai 8, à $t=10s$, l'erreur absolue la plus importante commise par le modèle NTFA optimisé sur l'écart type de la contrainte

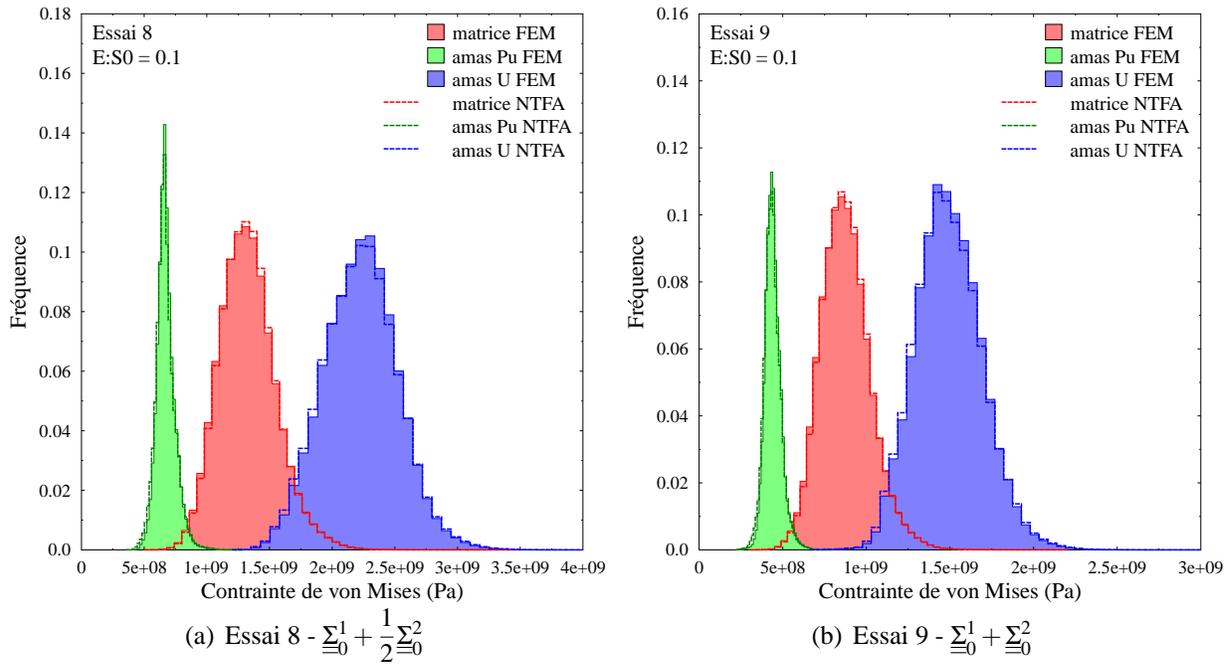


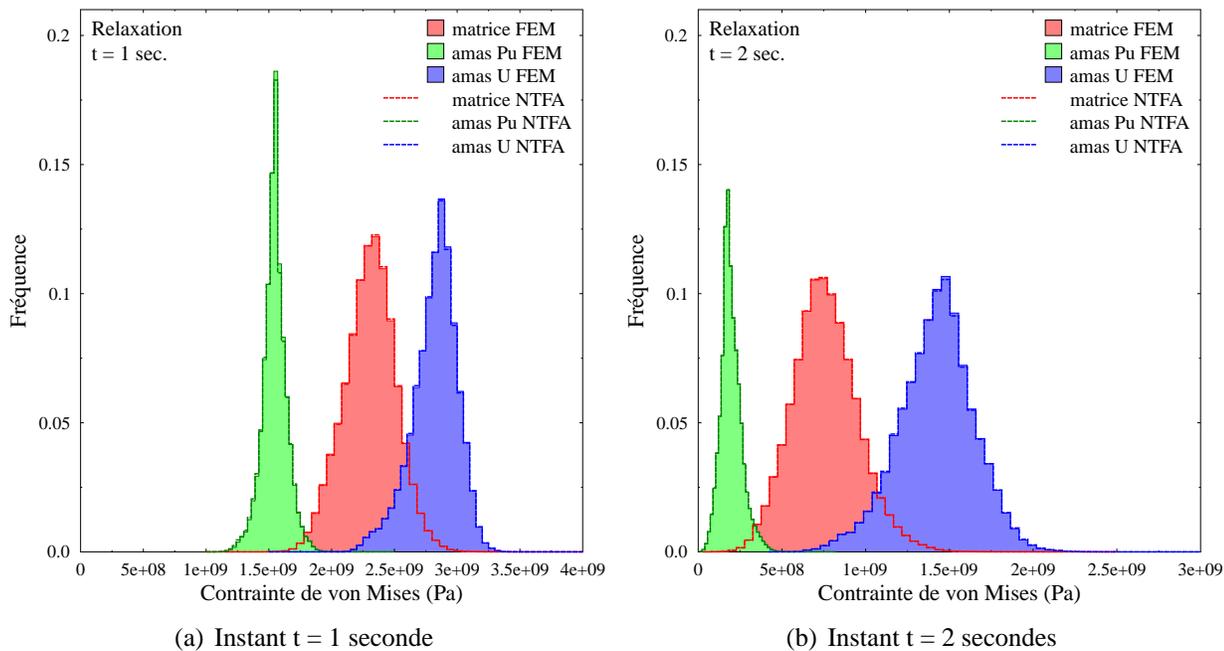
FIG. 9.6: Essai d'«écrouissage» $\underline{\underline{E}} : \underline{\underline{\Sigma}}_0^k$ est fixée à $10^{-2} s^{-1}$

équivalente est de l'ordre de 1% (phase plutonifère). Quantitativement, nous pouvons donc affirmer que l'approche NTFA optimisée prédit avec une bonne précision l'écart type du champ local analysé et ce pour un essai d'«écrouissage» qui n'a pas servi à identifier les modes.

Nous avons observé la même qualité de prédiction du modèle NTFA optimisé pour l'essai de relaxation présenté dans les paragraphes précédents. En effet, ces propos sont illustrés sur la figure 9.7, où nous comparons la prédiction de la contrainte équivalente (au sens de *von Mises*) locale par phase entre le modèle NTFA optimisé et les éléments finis (FEM) pour deux instants : $t = 1$ seconde et $t = 2$ secondes.

9.2.3.4 Conclusion

Dans ce paragraphe nous avons présenté une deuxième méthode d'optimisation du modèle NTFA établi au chapitre 6. Pour diminuer le nombre de modes, nous avons considéré des modes globaux sur tout le VER et non plus par phase. En appliquant cette démarche, nous passons d'un modèle NTFA «complet» composé de 54 variables internes scalaires à un modèle «réduit» composé de 15 variables internes scalaires. L'identification des modes sur tout le VER modifie les équations du modèle NTFA, nous avons donc présenté dans un premier temps les évolutions apportées. Puis dans un second temps, nous avons comparé la prédiction de ce modèle par rapport aux calculs de référence obtenus par éléments finis. Ces analyses ont été menées aussi bien sur le comportement effectif que sur les comportements moyens par phase et locaux, et ce pour différents types d'essais (essais d'«écrouissage» et de relaxation). Ce modèle NTFA optimisé prédit le comportement effectif, les comportements moyens par phase ainsi que les champs locaux avec une aussi bonne précision que le modèle NTFA non optimisé. **Nous pouvons donc considérer que ce modèle «réduit» est de loin le plus performant : rapidité d'exécution et précision accrue.**

FIG. 9.7: Essai de relaxation - $E_{33} = 2\%$

9.3 Bilan du chapitre

Pour réduire le nombre de variables internes dans le modèle NTFA développé au chapitre 6, deux approches d'optimisation ont été développées dans le cadre de cette thèse :

1. Relaxation du critère numérique de sélection des modes - *Karhunen-Loève* : en relaxant le critère α de 1.10^{-4} à 1.10^{-3} , nous sommes passés d'un modèle de 54 variables internes scalaires à 36 variables internes scalaires. **Les prédictions effectives se sont avérées aussi bonnes qu'avec le modèle constitué de 54 variables internes scalaires, tandis que les prédictions des comportements moyens et des champs locaux par phase ont légèrement perdu en précision.**
2. Modes sur tout le VER : dans cette démarche nous avons considéré des modes globaux sur tout le VER et non plus par phase. En appliquant cette démarche, nous sommes passés d'un modèle «complet» de 54 variables internes scalaires à un modèle «réduit» de 15 variables internes scalaires. Ce modèle NTFA optimisée prédit le comportement effectif, les comportements moyens par phase ainsi que les champs locaux avec une aussi bonne précision que le modèle NTFA non optimisé (54 variables internes scalaires). **Nous pouvons donc considérer que ce modèle «réduit» est de loin le plus performant : rapidité d'exécution et précision accrue.**

La deuxième méthode d'optimisation réduit considérablement le nombre de modes dans le cas de comportement linéaire. Par conséquent, elle ouvre de nouvelles perspectives de recherche sur l'approche NTFA : réflexion et extension de cette méthode d'optimisation aux comportements non linéaires pour des composites particuliers multi-phases, puis extension aux polycristaux avec cette méthode.

BILAN PARTIE 3 :

**Un modèle NTFA pour des composites particulaires triphasés,
type MOX**

En fonctionnement normal, nous avons vu que la loi de comportement locale des constituants du combustible MOX (Cf. partie 5.3) était de nature : **visco-élastique linéaire compressible vieillissante avec des déformations libres imposées**. Pour homogénéiser ce problème local, la méthode NTFA (Cf. [MICHEL and SUQUET, 2003]) a été choisie. L'aspect 3D, les aspects déformations libres et vieillissants sont des axes d'études qui n'avaient jamais été abordés jusqu'à présent. L'objectif de cette troisième partie était donc de présenter l'ensemble des développements théoriques et numériques menés sur l'approche NTFA pour prendre en compte ces axes d'études. De plus, dans cette partie nous avons également présenté deux démarches prospectives : l'une portait sur l'étude de la prise en compte de la non linéarité dans les approches NTFA en 3D pour le comportement local visco-élastique non linéaire incompressible avec déformations libres imposées et l'autre portait sur le développement de méthodes d'optimisation (réduction du nombre de variables internes) des modèles NTFA dans le cas de comportement linéaire.

Dans le chapitre 6, nous avons présenté les développements réalisés pour étendre la NTFA au 3D (tridimensionnel). Cette extension a été réalisée sur le composite particulière triphasé retenu dans la partie 2 et pour le comportement local suivant : visco-élasticité linéaire incompressible. Dans le premier paragraphe, nous avons présenté succinctement les équations constitutives du modèle. Puis, dans le second paragraphe, nous avons abordé la mise en oeuvre de ce modèle. Pour calculer les modes, **nous avons vu qu'en 3D et pour le comportement local étudié nous considérons 6 trajets de chargements élémentaires. L'orthogonalisation et la sélection des modes prépondérants ont été réalisées par la transformée de Karhunen-Loève. Nous avons donc abouti à un modèle à 54 variables internes**. Ensuite, dans le troisième paragraphe, les prédictions de celui-ci par rapport à des calculs de référence en champs complets ont été exposées. Ces analyses ont été menées aussi bien sur le comportement effectif que sur les comportements moyens par phase et locaux, et ce pour différents types d'essais (essais d'«écrouissage», de fluage et de relaxation). Pour la microstructure ayant servi à identifier les modes, **les résultats furent très satisfaisants : l'erreur commise par le modèle sur le comportement effectif et moyen par phase était inférieure à 0.5%. Concernant les champs locaux dans chaque phase, l'erreur la plus importante commise sur l'écart type de la variable analysée était égale à 1.39 %**. Nous avons également démontré que la vitesse de déformation, ayant servi à identifier les modes, n'avait pas ou peu d'impact sur la prédiction du modèle. Cette remarque est à prendre avec beaucoup de précaution car elle est à priori fortement dépendante de la loi de comportement locale utilisée. **Des études de sensibilité à la microstructure considérée ont également été présentées. Nous avons montré que la réponse effective, les comportements moyens par phase et les écarts type de la variable analysée localement dans chaque phase étaient indépendants de la microstructure sur laquelle le modèle NTFA avait été identifié**. Finalement, **nous pouvons donc affirmer que l'extension de la NTFA au 3D a été validée avec succès pour le comportement local suivant : visco-élasticité linéaire incompressible**. Ces résultats sont cohérents avec les études menées par [FRITZEN and BOHLKE, 2010] et [FRITZEN and BOHLKE, 2011] (études réalisées en parallèle de cette thèse).

Le problème local complet à résoudre est celui établi au chapitre 2 paragraphe 2.3. D'un point de vue formel, **la loi de comportement locale proposée est de nature visco-élastique linéaire compressible vieillissante avec des déformations libres imposées**.

Jusqu'à présent les approches NTFA n'abordaient pas les aspects **déformations libres** et **vieillissant**. Dans le chapitre 7, nous avons présenté les développements théoriques et numériques menés sur ces axes d'étude. Ces travaux ont été réalisés sur le composite particulière triphasé retenu dans la partie 2. Dans le premier paragraphe, nous avons présenté les équations constitutives du modèle

que nous avons développées dans le cadre de cette thèse. Puis, dans le second paragraphe, nous avons abordé la mise en oeuvre de ce modèle. Pour calculer les modes, **nous avons vu qu'en 3D et pour le comportement local étudié nous considérons 7 trajets de chargements élémentaires. L'orthogonalisation et la sélection des modes prépondérants ont été réalisées par la transformée de Karhunen-Loève. Nous avons donc abouti à un modèle à 57 variables internes déviatoriques et 21 variables internes sphériques.** Ensuite, dans le troisième paragraphe, les prédictions de celui-ci par rapport à des calculs de référence en champs complets ont été exposées. Ces analyses ont été menées sur le comportement effectif, sur les comportements moyens par phase et sur les champs locaux, et ce pour différents types d'essais (essais d'«écrouissage», de fluage, relaxation, tournant). Pour la microstructure ayant servi à identifier les modes, **les résultats furent très satisfaisants : l'erreur commise par le modèle sur le comportement effectif et moyen par phase était inférieure à 1%. Concernant les champs locaux dans chaque phase, l'erreur la plus importante commise sur l'écart type de la variable analysée était égale à 6%.** Nous avons également démontré que la vitesse de déformation, ayant servi à identifier les modes, n'avait pas ou peu d'impact sur la prédiction du modèle. Cette remarque est à prendre avec beaucoup de précaution car elle est à priori fortement dépendante de la loi de comportement locale utilisée. **Des études de sensibilité à la microstructure considérée ont également été présentées. Nous avons montré que la réponse effective, les comportements moyens par phase et les écarts type de la variable analysée localement dans chaque phase étaient quasi indépendants de la microstructure sur laquelle le modèle NTFA avait été identifié. L'erreur maximale absolue commise par le modèle NTFA sur la moyenne des n tirages du premier moment de la variable analysée ne dépassait pas 1.51%, quant à celle commise sur l'écart type, elle ne dépassait pas 8.44%.** Finalement, **nous pouvons donc affirmer que l'extension de la NTFA aux déformations libres a été validée avec succès pour le comportement local suivant : visco-élasticité linéaire compressible.** Enfin, nous avons présenté dans le dernier paragraphe la prédiction de notre modèle NTFA pour deux études vieillissantes. L'étude 1 sur la période 1, qui est la plus représentative de ce qui se passe pour le combustible MOX en réacteur et en fonctionnement normal, a démontré une très bonne prédiction du comportement effectif et moyen par phase de notre modèle NTFA. La prédiction des champs locaux a également été analysée mais n'a pas été présentée dans ce paragraphe. Nous pouvons néanmoins affirmer que celle-ci est de très bonne qualité car les contrastes entre les phases sont moins élevés que ceux qui ont servi à identifier les modes plastiques. **Nous avons donc conclu ce chapitre en affirmant que le vieillissement du combustible MOX sous irradiation sera bien pris en compte par le modèle NTFA développé dans les paragraphes précédents.**

Ce modèle NTFA remplit donc parfaitement le cahier des charges fixé au chapitre 1 paragraphe 1.4. Il est également en adéquation avec le problème mécanique local établi au chapitre 2 paragraphe 2.3.

Dans le chapitre 8 nous avons présenté les prédictions de l'approche NTFA en 3D et pour le comportement local suivant : visco-élasticité **non linéaire** incompressible avec déformations libres imposées. En fonctionnement normal, le combustible MOX n'a pas un comportement non linéaire. Nous sortions donc du cadre de cette thèse et du problème local établi au chapitre 2 paragraphe 2.3. Ce chapitre s'inscrivait donc plus dans une démarche prospective et de démonstration que les approches NTFA fonctionnaient également bien pour les comportements non linéaires. Ce comportement est typiquement celui que le combustible MOX subit en fonctionnement dit de classe 2 : transitoire ou rampe de puissance. Ces fonctionnements sont modélisés dans les codes de calculs industriels. Par conséquent, il était intéressant d'étudier la qualité prédictive des approches NTFA pour ce type de comportement. Dans le premier paragraphe, nous avons donc présenté succinctement les équations constitutives du modèle et la manière dont la non linéarité du problème était prise en compte. Dans

le deuxième paragraphe, les prédictions de celui-ci par rapport à des calculs de référence en champs complets ont été exposées. **Pour des essais à vitesse et à direction de contrainte imposées qui ont servi ou pas servi à identifier les modes plastiques, nous avons pu montrer une bonne prédiction du comportement effectif et des comportements moyens par phase du modèle NTFA.** Par contre, **nous avons démontré une prédiction des champs locaux de moins bonne qualité que dans les cas des études linéaires. En effet, l'erreur absolue la plus importante commise par le modèle NTFA sur l'écart type de la variable analysée est de l'ordre de 24.0% dans la phase plutonifère.** Ce chapitre a permis de montrer que la non linéarité n'était pas du tout un point bloquant dans les approches NTFA. Si les comportements effectif et moyens par phase sont plutôt bien prédits, la prédiction des champs locaux est bien plus difficile que dans le cas des études linéaires. Néanmoins, par rapport aux modèles analytiques ou semi-analytiques, l'approche NTFA reste particulièrement intéressante. Cette étude a été réalisée en fin de thèse, elle n'est donc pas complète. En perspective de cette thèse, il serait intéressant d'analyser les prédictions effectives et locales du modèle NTFA pour d'autres essais : fluage, relaxation et essais tournants.

Une seconde démarche prospective a été réalisée dans le cadre de cette thèse à travers le chapitre 9. La méthode NTFA est particulièrement attrayante pour sa rapidité d'exécution. Elle est également intéressante car elle prédit avec une bonne précision les comportements effectifs et moyens par phase ainsi que les champs locaux par phase (surtout pour les comportements linéaires). Néanmoins, dans le chapitre 6 nous avons vu que notre modèle NTFA en 3D était constitué de 54 variables internes scalaires pour le comportement local suivant : visco-élastique linéaire incompressible. Les approches semi-analytiques, présentées en partie 4, sont généralement constituées d'une vingtaine de variables internes scalaires pour ce type de comportement local. Certes, ces approches ne nous donnent pas accès aux champs locaux, mais nous avons néanmoins, dans le cadre de cette thèse, cherché à optimiser (réduction du nombre de variables internes) notre modèle NTFA à travers le chapitre 9. Cette phase d'optimisation a été réalisée sur le modèle NTFA exposé dans le chapitre 6. Pour réduire le nombre de variables internes, plusieurs approches ont été étudiées dans le cadre de cette thèse. En effet, dans un premier temps nous avons cherché à utiliser dans les phases inclusionnaires une approche en champs de transformation uniformes, d'abord dans les deux phases, puis dans l'une et dans l'autre. Mais les prédictions effectives se sont avérées de piètre qualité. Nous avons donc abandonné cette axe d'étude. Dans un deuxième temps, deux autres approches d'optimisation ont été développées dans le cadre de cette thèse :

1. Relaxation du critère numérique de sélection des modes - *Karhunen-Loève* : en relaxant le critère α de 1.10^{-4} à 1.10^{-3} , nous sommes passés d'un modèle de 54 variables internes scalaires à 36 variables internes scalaires. **Les prédictions effectives se sont avérées aussi bonnes qu'avec le modèle constitué de 54 variables internes scalaires, tandis que les prédictions des comportements moyens et des champs locaux par phase ont légèrement perdu en précision.**
2. Modes sur tout le VER : dans cette démarche nous avons considéré des modes globaux sur tout le VER et non plus par phase. En appliquant cette démarche, nous sommes passés d'un modèle «complet» de 54 variables internes scalaires à un modèle «réduit» de 15 variables internes scalaires. Ce modèle NTFA optimisée prédit le comportement effectif, les comportements moyens par phase ainsi que les champs locaux avec une aussi bonne précision que le modèle NTFA non optimisé (54 variables internes scalaires). **Nous pouvons donc considérer que ce modèle «réduit» est de loin le plus performant : rapidité d'exécution et précision accrue.**

La deuxième méthode d'optimisation réduit considérablement le nombre de modes dans le cas de comportement linéaire. Par conséquent, elle ouvre de nouvelles perspectives de recherche sur l'ap-

proche NTFA : réflexion et extension de cette méthode d'optimisation aux comportements non linéaires pour des composites particuliers multi-phasés, puis extension aux polycristaux avec cette méthode.

Le modèle NTFA établi au chapitre 7 remplit donc parfaitement le cahier des charges fixé au chapitre 1 paragraphe 1.4. Il est également en adéquation avec le problème mécanique local établi au chapitre 2 du paragraphe 2.3. Il peut donc être intégré dans un code de calcul industriel. Avant intégration dans un code de structure, nous avons souhaité positionner notre modèle NTFA par rapport à un autre modèle d'homogénéisation récemment développé dans la littérature pour simuler le comportement du combustible *MOX* en fonctionnement normal (Cf. [RICAUD and MASSON, 2009]). C'est donc l'objet de la quatrième partie de ce mémoire de thèse.

Quatrième partie

POSITIONNEMENT DE L'APPROCHE NTFA PAR RAPPORT AU MODÈLE [RICAUD and MASSON, 2009]

Chapitre 10

Extension de « Mori-Tanaka incrémental » [RICAUD and MASSON, 2009] aux composites triphasés [BLANC et al., 2011]

Objet du chapitre :

Le modèle, récemment développé par [RICAUD and MASSON, 2009], a retenu notre attention au chapitre 3. Ce modèle est basé sur un schéma d'homogénéisation *Mori-Tanaka* incrémental et il est particulièrement optimisé en temps de calcul (modèle avec un faible nombre de variables internes α). Ce modèle donne accès au comportement effectif et moyen par phase et il est parfaitement adapté au comportement local des constituants du combustible *MOX* en service. Cependant, il ne remplit pas pleinement le cahier des charges fixé au paragraphe 1.4 du chapitre 1. En effet, il ne nous donne pas accès aux champs locaux. Mais, du fait de ses performances (rapidité, précision...) pour les composites particuliers biphasés, nous avons décidé, dans le cadre de cette thèse, de l'étudier et de le comparer théoriquement et numériquement au modèle NTFA développé dans la partie 3. Ce modèle (*Cf. [RICAUD and MASSON, 2009]*) ne s'appliquant qu'à des composites particuliers bi-phasés, nous avons donc réalisé, dans un premier temps, une extension de celui-ci aux composites particuliers triphasés. C'est donc l'objet de ce chapitre. Dans le premier paragraphe, nous rappelons succinctement le comportement retenu pour ce modèle. Puis dans le second paragraphe nous exposons les différences majeures apportées à ce modèle du fait de la présence de cette troisième phase.

Sommaire

10.1 Comportement retenu	222
10.2 Homogénéisation d'un composite particulière triphasé utilisant une formulation à variables internes	223
10.2.1 Comportement effectif	223
10.2.2 Comportement moyen par phase	227
10.3 Bilan du chapitre	228

Ce chapitre a fait l'objet d'une publication dans le congrès ICM11 (Cf. [BLANC et al., 2011]).

10.1 Comportement retenu

Nous adoptons ici le comportement et les hypothèses utilisés au chapitre 3 paragraphe 3.5.2.1. La méthode d'homogénéisation adoptée est celle de *Hashin et Shtrikman* (Cf. annexe B paragraphe B.5.2). Dans ce chapitre, nous ne considérons plus le combustible *MOX MIMAS ADU* comme un milieu biphasé (hypothèse simplificatrice adoptée par [RICAUD and MASSON, 2009]). Comme au paragraphe 3.5.2.1 chapitre 3 les constituants (matrice, inclusions plutonifères Pu et inclusions uranifères U) sont considérés comme isotropes et suivent le schéma rhéologique de *Maxwell* :

$$\left\{ \begin{array}{l} \dot{\underline{\underline{\epsilon}}}_m(\underline{x}, t) = \frac{1}{3k(t)} \dot{\underline{\underline{\sigma}}}_m(\underline{x}, t) + \dot{\underline{\underline{\epsilon}}}_m^{vp}(\underline{x}, t) + \dot{\underline{\underline{\epsilon}}}_m^{gs}(\underline{x}, t) \\ \dot{\underline{\underline{\epsilon}}}(\underline{x}, t) = \frac{1}{2\mu(t)} \dot{\underline{\underline{s}}}(\underline{x}, t) + \dot{\underline{\underline{\epsilon}}}^{vp}(\underline{x}, t) \\ \dot{\underline{\underline{\epsilon}}}_m^{vp}(\underline{x}, t) = \sum_{r=1}^3 \frac{1}{3k_r^{vp}(t)} \underline{\underline{\sigma}}_m(\underline{x}, t) \chi_r(\underline{x}) \quad r \text{ l'indice de la phase (1 (matrice), 2 (inclusion Pu), 3 (inclusion U))} \\ \dot{\underline{\underline{\epsilon}}}^{vp}(\underline{x}, t) = \sum_{r=1}^3 \frac{1}{2\mu_r^{vp}(t)} \underline{\underline{s}}(\underline{x}, t) \chi_r(\underline{x}) \quad r \text{ l'indice de la phase (1 (matrice), 2 (inclusion Pu), 3 (inclusion U))} \end{array} \right. \quad (10.1)$$

avec

1. \underline{x} le vecteur position au sein du VER de volume V et de contour ∂V , t le temps et $\chi_r(\underline{x})$ la fonction caractéristique.
2. $k(t)$ le module de compressibilité élastique homogène et $\mu(t)$ le module de cisaillement élastique homogène. Ils dépendent du temps t (aspect vieillissant).
3. $\underline{\underline{\sigma}}_m = \frac{1}{3} \underline{\underline{\sigma}}_{ii}$ la contrainte hydrostatique.
4. $\underline{\underline{s}} = \underline{\underline{\underline{\sigma}}} - \underline{\underline{\sigma}}_m \underline{\underline{\delta}}$ le tenseur d'ordre 2 des contraintes déviatoriques où $\underline{\underline{\delta}}$ est le tenseur identité.
5. $\dot{\underline{\underline{\epsilon}}}_m$ la vitesse de déformation hydrostatique.
6. $\dot{\underline{\underline{\epsilon}}}$ la vitesse du tenseur des déformations déviatoriques.
7. $\dot{\underline{\underline{\epsilon}}}_m^{vp}$ la vitesse de déformation viscoplastique hydrostatique due au gonflement induit par la restructuration. Nous rappelons qu'on suppose que, au premier ordre au moins, une relation linéaire lie le gonflement à la pression. Nous introduisons ainsi un module visqueux k_r^{vp} différents dans chacune des phases et dépendant du temps t . C'est le module MARGARET hétérogène (Cf. chapitre 2) qui délivre au modèle mécanique non seulement le gonflement solide mais aussi le module de compressibilité associé au gonflement induit par la restructuration dans les trois phases. Tandis que le modèle mécanique doit fournir à MARGARET une estimation des pressions moyennes dans chaque phase. Il y a donc un couplage entre les modules de physico-chimie et de mécanique. En réalité, MARGARET ne délivre pas un module de compressibilité mais un incrément de déformation de gonflement induit par la restructuration. Connaissant cet incrément de déformation et l'incrément de contrainte appliqué, il sera cependant facile d'en déduire le module de compressibilité pour chacune des phases.
8. $\dot{\underline{\underline{\epsilon}}}_m^{gs}$ la vitesse de déformation hydrostatique due au gonflement solide. Cette vitesse est homogène par phase mais différente d'une phase à l'autre (Cf. chapitre 2 paragraphe 2.2.2).

9. $\underline{\dot{\epsilon}}^{vp} = \frac{1}{2\mu_r^{vp}(t)} \underline{\dot{s}}$ la vitesse de fluage induit par l'irradiation, purement déviatorique et linéairement dépendant de la contrainte. μ_r^{vp} correspond au module de cisaillement visqueux associé à chacune des phases et il dépend du temps t (aspect vieillissant).

D'un point de vue formel, cette loi de comportement est de nature visco-élastique linéaire compressible vieillissante avec des déformations libres (gonflement solide) imposées et ce pour un composite particulière triphasé. Elle est donc en parfaite adéquation avec celle qui a été établie au paragraphe 2.3 chapitre 2. La méthodologie employée pour résoudre ce problème est identique à celle employée aux paragraphes 3.5.2.2, 3.5.2.3, et 3.5.2.4 du chapitre 3. La seule différence vient de la décomposition en fraction rationnelle simple. Pour illustrer ces propos, nous exposons cette nouvelle décomposition dans le paragraphe suivant.

10.2 Homogénéisation d'un composite particulière triphasé utilisant une formulation à variables internes

Nous supposons que le comportement local des constituants est visco-élastique linéaire compressible. Il s'agit donc d'une simplification du problème exposé précédemment. Les aspects déformation libre et vieillissant sont omis volontairement car ils sont obtenus selon des méthodes déjà exposées aux paragraphes 3.5.2.3 et 3.5.2.4 du chapitre 3, avec bien entendu les paramètres obtenus ci-dessous (temps de relaxation effectifs, magnitudes ...) et le modèle d'homogénéisation employé ici.

10.2.1 Comportement effectif

Le système différentiel (10.1) simplifié s'écrit alors de la façon suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} \dot{\underline{\epsilon}}_m(\underline{x}, t) = \frac{1}{3k} \dot{\underline{\sigma}}_m(\underline{x}, t) + \dot{\underline{\epsilon}}_m^{vp}(\underline{x}, t) \\ \dot{\underline{\epsilon}}(\underline{x}, t) = \frac{1}{2\mu} \dot{\underline{s}}(\underline{x}, t) + \underline{\dot{\epsilon}}^{vp}(\underline{x}, t) \\ \dot{\underline{\epsilon}}_m^{vp}(\underline{x}, t) = \sum_{r=1}^3 \frac{1}{3k_r^{vp}} \underline{\sigma}_m(\underline{x}, t) \chi_r(\underline{x}) \\ \dot{\underline{\epsilon}}^{vp}(\underline{x}, t) = \sum_{r=1}^3 \frac{1}{2\mu_r^{vp}} \underline{s}(\underline{x}, t) \chi_r(\underline{x}) \end{array} \right. \quad (10.2)$$

Comme il s'agit d'une approche moyenne par phase on peut écrire le système de la façon suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} \dot{\underline{\epsilon}}_{rm} = \frac{1}{3k} \dot{\underline{\sigma}}_{rm} + \dot{\underline{\epsilon}}_{rm}^{vp} \\ \dot{\underline{\epsilon}}_r = \frac{1}{2\mu_r} \dot{\underline{s}}_r + \underline{\dot{\epsilon}}_r^{vp} \\ \dot{\underline{\epsilon}}_{rm}^{vp} = \frac{1}{3k_r^{vp}} \underline{\sigma}_{rm} \\ \dot{\underline{\epsilon}}_r^{vp} = \frac{1}{2\mu_r^{vp}} \underline{s}_r \end{array} \right. \quad (10.3)$$

Comme nous l'avons vu au paragraphe 3.5.2.2 du chapitre 3, la méthodologie à adopter dans ce cas est bien connue. Cette méthodologie s'appuie sur le principe de correspondance de *Mandel* [MANDEL, 1966] qui permet de ramener le problème différentiel (10.3) précédent à un problème pseudo-élastique par la transformée de Laplace-Carson. Nous rappelons que la transformée de *Laplace-Carson* d'une fonction f est définie par :

$$f^*(p) = p \int_0^\infty f(t) e^{-pt} dt \quad (10.4)$$

Nous appliquons donc cette transformée à notre système différentiel (10.3) :

$$\begin{cases} \sigma_{rm}^*(p) = 3k_r^*(p) \epsilon_{rm}^*(p) \\ \underline{s}_r^*(p) = 2\mu_r^*(p) \underline{e}_r^*(p) \end{cases} \quad (10.5)$$

$$\text{avec } k_r^*(p) = \frac{1}{\frac{1}{k} + \frac{1}{pk_r^{vp}}} \text{ et } \mu_r^*(p) = \frac{1}{\frac{1}{\mu} + \frac{1}{p\mu_r^{vp}}}.$$

On pose $\tau_r^m = \frac{k_r^{vp}}{k}$ et $\tau_r^d = \frac{\mu_r^{vp}}{\mu}$. Le problème (10.5) est bien un problème élastique linéaire dans l'espace de *Laplace-Carson*. Nous pouvons donc appliquer les schémas d'homogénéisation analytiques linéaires présentés en annexe B. Dans le cas d'un composite biphasé, *Ricaud et Masson* [RICAUD and MASSON, 2008] avaient choisi d'utiliser le schéma d'homogénéisation de *Mori-Tanaka* pour évaluer les modules effectifs \tilde{k}_{MT}^* et $\tilde{\mu}_{MT}^*$. Dans le cas d'un composite triphasé nous avons choisi d'utiliser le schéma d'homogénéisation de *Hashin-Shtrikman* pour évaluer les modules effectifs \tilde{k}_{HS}^* et $\tilde{\mu}_{HS}^*$ (Rappel : dans le cas biphasé on retrouve le modèle de *Mori-Tanaka* si on utilise le modèle de *Hashin et Shtrikman* en prenant comme milieu de référence la matrice) :

$$\begin{cases} \tilde{k}_{HS}^*(p) = \frac{1}{\left\langle \frac{1}{\hat{k}^* + k_r^*} \right\rangle} - \hat{k}^* \\ \tilde{\mu}_{HS}^*(p) = \frac{1}{\left\langle \frac{1}{\hat{\mu}^* + \mu_r^*} \right\rangle} - \hat{\mu}^* \end{cases} \quad (10.6)$$

avec $\hat{k}^* = \frac{4}{3}\mu_1^*$ et $\hat{\mu}^* = \frac{\mu_1^*}{6} \frac{9k_1^* + 8\mu_1^*}{k_1^* + 2\mu_1^*}$. L'inversion de *Laplace-Carson* est habituellement réalisée numériquement (méthode de Collocation de *Schapery* (1962) [SCHAPERY, 1962]). Mais, dans ce cas (schéma d'homogénéisation de *Hashin-Shtrikman*), il est possible de repasser dans l'espace réel sans «pertes d'informations». Pour cela, les fractions rationnelles \tilde{k}_{HS}^* et $\tilde{\mu}_{HS}^*$, qui dépendent de p dans l'espace de *Laplace-Carson*, sont décomposées en une somme de fractions rationnelles simples :

$$\begin{cases} \tilde{k}_{HS}^*(p) = \sum_{i=1}^{N_{(HS)p}^m} k_{\tau_{(HS)i}^m} \frac{p}{p + \frac{1}{\tau_{(HS)i}^m}} \\ \tilde{\mu}_{HS}^*(p) = \sum_{i=1}^{N_{(HS)p}^d} \mu_{\tau_{(HS)i}^d} \frac{p}{p + \frac{1}{\tau_{(HS)i}^d}} \end{cases} \quad (10.7)$$

avec $N_{(HS)p}^m$ et $N_{(HS)p}^d$ le nombre de variables internes sphériques et déviatoriques, $(\bar{\tau}_{(HS)i}^m, \bar{\tau}_{(HS)i}^d)$ les temps de relaxations effectifs respectifs et $(k_{\bar{\tau}_{(HS)i}^m}, \mu_{\bar{\tau}_{(HS)i}^d})$ les amplitudes. Dans le cas du schéma d'homogénéisation de *Hashin-Shtrikman* et pour le composite triphasé particulière, nous avons obtenu $N_{(HS)p}^m = 4$ et $N_{(HS)p}^d = 6$. En appliquant la transformée inverse de *Laplace-Carson*, on obtient les modules effectifs dans l'espace temporel :

$$\begin{cases} \tilde{k}_{HS}(t) = \sum_{i=1}^{N_{(HS)}^m} k_{\bar{\tau}_{(HS)i}^m} e^{-\frac{t}{\bar{\tau}_{(HS)i}^m}} \\ \tilde{\mu}_{HS}(t) = \sum_{i=1}^{N_{(HS)}^d} \mu_{\bar{\tau}_{(HS)i}^d} e^{-\frac{t}{\bar{\tau}_{(HS)i}^d}} \end{cases} \quad (10.8)$$

On dit alors que les modules $\tilde{k}_{HS}(t)$ et $\tilde{\mu}_{HS}(t)$ ont été décomposés en une somme de série de *Prony-Dirichlet*. On a également $\sum_{i=1}^{N_{(HS)}^m} k_{\bar{\tau}_{(HS)i}^m} = k$ et $\sum_{i=1}^{N_{(HS)}^d} \mu_{\bar{\tau}_{(HS)i}^d} = \mu$ (réponse élastique).

Les différentes expressions des couples $(\bar{\tau}_{(HS)i}^m, k_{\bar{\tau}_{(HS)i}^m})$ et $(\bar{\tau}_{(HS)i}^d, \mu_{\bar{\tau}_{(HS)i}^d})$ sont données ci-dessous :

1. La fonction de relaxation hydrostatique $\tilde{k}_{HS}(t)$ présente 4 temps de relaxation $N_{(HS)}^m = 4$. Le premier temps correspond à celui de la matrice $\bar{\tau}_{(HS)1}^m = \tau_1^d$. Les trois autres temps $(\bar{\tau}_{(HS)2}^m, \bar{\tau}_{(HS)3}^m$ et $\bar{\tau}_{(HS)4}^m)$ sont obtenus en résolvant l'équation suivante :

$$Q^m(p) = p^3 + a_2^m p^2 + a_1^m p + a_0^m \quad (10.9)$$

avec :

$$a_2^m = \left\langle \frac{1}{\tau^m} - \frac{1}{\hat{\tau}^m} \right\rangle + \sum_{r=1}^3 \frac{1}{\hat{\tau}_r^m}, \quad a_1^m = \left\langle \frac{1}{\tau^m} \right\rangle \sum_{r=1}^3 \frac{1}{\hat{\tau}_r^m} + \frac{\langle \hat{\tau}^m \rangle}{\prod_{r=1}^3 \hat{\tau}_r^m} - \left\langle \frac{1}{\hat{\tau}^m \tau^m} \right\rangle, \quad a_0^m = \frac{\langle \hat{\tau}^m \rangle}{\prod_{r=1}^3 \hat{\tau}_r^m} \quad (10.10)$$

et :

$$\hat{\tau}_r^m = \frac{k + \frac{4}{3}\mu}{\frac{k}{\tau_1^d} + \frac{4}{3} \frac{\mu}{\tau_r^m}} \quad (10.11)$$

Les racines de ce polynôme correspondent à $-\frac{1}{\bar{\tau}_{(HS)2}^m}$, $-\frac{1}{\bar{\tau}_{(HS)3}^m}$ et $-\frac{1}{\bar{\tau}_{(HS)4}^m}$. Les magnitudes $k_{\bar{\tau}_{(HS)i}^m}$ associées à ces temps de relaxation sont données par :

$$k_{\bar{\tau}_{(HS)i}^m} = \left(k + \frac{4}{3}\mu\right) \frac{\prod_{r=1}^3 \left(\frac{1}{\hat{\tau}_r^m} - \frac{1}{\bar{\tau}_{(HS)i}^m}\right)}{\prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^4 \left(\frac{1}{\bar{\tau}_{(HS)j}^m} - \frac{1}{\bar{\tau}_{(HS)i}^m}\right)} - \frac{4}{3}\mu \delta_{ij} \quad (10.12)$$

avec $\delta_{ij} = 1$ le symbole de Kronecker.

2. Pour la partie déviatorique, nous trouvons 6 temps de relaxation : $N_{(HS)}^d = 6$. Le premier et le second temps ne dépendent que du comportement de la matrice : $\bar{\tau}_{(HS)1}^d = \tau_1^d$, $\bar{\tau}_{(HS)2}^d = \frac{k+2\mu}{\tau_1^d + 2\frac{\mu}{\tau_1^m}}$.

Les quatre autres temps $(\bar{\tau}_{(HS)3}^d, \bar{\tau}_{(HS)4}^d, \bar{\tau}_{(HS)5}^d, \bar{\tau}_{(HS)6}^d)$ sont obtenus en résolvant l'équation suivante :

$$Q^d(p) = p^4 + a_3^d p^3 + a_2^d p^2 + a_1^d p + a_0^d \quad (10.13)$$

où les coefficients a_i^d sont donnés par les relations suivantes :

$$\begin{aligned}
 - a_3^d &= \sum_{r=1}^3 \frac{1}{\hat{\tau}_r^d} + \left\langle \frac{1}{\tau^d} - \frac{1}{\hat{\tau}^d} \right\rangle - \frac{1}{\tau_1^d} \\
 - a_2^d &= \sum_{r=1}^3 P_r - \langle P \rangle + \langle \hat{\tau}^d \rangle \prod_{r=1}^3 \frac{1}{\hat{\tau}_r^d} + \left(\sum_{r=1}^3 \frac{1}{\hat{\tau}_r^d} - \frac{1}{\tau_1^d} \right) \left(\left\langle \frac{1}{\tau^d} \right\rangle - \frac{1}{\tau_1^d} \right) - \left\langle \frac{1}{\hat{\tau}^d} \left(\frac{1}{\tau^d} - \frac{1}{\tau_1^d} \right) \right\rangle \\
 - a_1^d &= \left(\langle \hat{\tau}^d \rangle \sum_{r=1}^3 P_r \hat{\tau}_r^d + P_1 \hat{\tau}_1^d \left(\left(\frac{\tau_1^d}{\tau^d} - 1 \right) \hat{\tau}^d \right) - \langle P (\hat{\tau}^d)^2 \rangle \right) \prod_{r=1}^3 \frac{1}{\hat{\tau}_r^d} + \left\langle \left(\frac{1}{\tau^d} - \frac{1}{\tau_1^d} \right) \frac{1}{P} \right\rangle \frac{1}{P_1} \prod_{r=1}^3 P_r \\
 - a_0^d &= \left\langle \frac{1}{P \tau^d} \right\rangle \tau_1^d \prod_{r=1}^3 P_r
 \end{aligned}$$

Les 6 constantes $(\hat{\tau}_r^d, P_r)$ étant elles données par :

$$\text{pour } r = 1..3 : \frac{1}{\hat{\tau}_r^d} = \frac{1}{\tau_1^d} + \frac{1}{\hat{\tau}_1^m} + \frac{9k+8\mu}{15k+20\mu} \left(\frac{1}{\tau_r^d} - \frac{1}{\tau_1^d} \right), \quad P_r = \frac{1}{\tau_1^d \hat{\tau}_1^m} + \frac{\frac{9k}{\tau_1^d} + \frac{8\mu}{\hat{\tau}_1^m}}{15k+20\mu} \left(\frac{1}{\tau_r^d} - \frac{1}{\tau_1^d} \right). \quad (10.14)$$

Les racines de ce polynôme correspondent à $-\frac{1}{\tau_{(HS)3}^d}$, $-\frac{1}{\tau_{(HS)4}^d}$, $-\frac{1}{\tau_{(HS)5}^d}$ et $-\frac{1}{\tau_{(HS)6}^d}$. Les magnitudes $\mu_{\tau_{(HS)i}^d}$ associées à ces temps de relaxation sont données par :

$$\mu_{\tau_{(HS)i}^d} = \mu \gamma \frac{\left(\frac{1}{\hat{\tau}_1^m} - \frac{1}{\tau_{(HS)i}^d} \right) \prod_{r=2}^3 \left(\frac{1}{\hat{\tau}_{ra}^d} - \frac{1}{\tau_{(HS)i}^d} \right) \left(\frac{1}{\hat{\tau}_{rb}^d} - \frac{1}{\tau_{(HS)i}^d} \right)}{\prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{N_p^d} \left(\frac{1}{\tau_{(HS)j}^d} - \frac{1}{\tau_{(HS)i}^d} \right)} - \mu(\gamma-1) \delta_{i1} \delta_{i2} \frac{\frac{1}{\tau_1} - \frac{1}{\tau_{(HS)i}^d}}{\frac{\delta_{i1}}{\tau_{(HS)2}^d} + \frac{\delta_{i2}}{\tau_{(HS)1}^d} - \frac{1}{\tau_{(HS)i}^d}} \quad (10.15)$$

avec $\gamma = \frac{15k+20\mu}{6(k+2\mu)}$, $\tilde{\tau}_1 = \frac{9k+8\mu}{\frac{9k}{\tau_1^d} + \frac{8\mu}{\hat{\tau}_1^m}}$, et $(-\frac{1}{\hat{\tau}_{ra}^d}, -\frac{1}{\hat{\tau}_{rb}^d})$ solutions de :

$$p^2 + \frac{1}{\hat{\tau}_r^d} p + P_r = 0 \quad \text{pour } r = 1..3 \quad (10.16)$$

Ces temps de relaxation $(\hat{\tau}_{ra}^d, \hat{\tau}_{rb}^d)$ sont utilisés pour obtenir la contrainte moyenne par phase r (Cf. paragraphe 10.2.2).

La contrainte macroscopique $\underline{\underline{\sigma}}$ est obtenue par la relation suivante :

$$\underline{\underline{\sigma}} = 3 \int_0^t \tilde{k}_{HS}(t-u) d\underline{\underline{\varepsilon}}_m(u) \underline{\underline{\delta}} + 2 \int_0^t \tilde{\mu}_{HS}(t-u) d\underline{\underline{\varepsilon}}(u) \quad (10.17)$$

Résoudre l'équation (10.17) revient (Principe de Correspondance de Mandel [MANDEL, 1966]) à résoudre le problème suivant car le nombre de termes dans le développement en séries de *Prony-Dirichlet* est fini :

$$\left\{ \begin{array}{l} \underline{\underline{\sigma}}_m = 3k \left(\underline{\underline{\varepsilon}}_m(t) - \sum_{i=1}^{N_m^{(HS)}} \underline{\underline{\alpha}}_{\tau_{(HS)i}^m}^m(t) \right) \\ \underline{\underline{\delta}} = 2\mu \left(\underline{\underline{\varepsilon}}(t) - \sum_{i=1}^{N_d^{(HS)}} \underline{\underline{\alpha}}_{\tau_{(HS)i}^d}^d(t) \right) \\ \text{avec } \dot{\underline{\underline{\alpha}}}_i(t) + \frac{1}{\tau_{(HS)i}^m} \underline{\underline{\alpha}}_i(t) = \frac{1}{\tau_{(HS)i}^m} \frac{k_{\tau_{(HS)i}^m}}{k} \underline{\underline{\varepsilon}}_m(t), \quad 1 \leq i \leq N_m^{(HS)}, \quad \underline{\underline{\alpha}}_i(0) = 0 \\ \text{avec } \dot{\underline{\underline{\alpha}}}_i(t) + \frac{1}{\tau_{(HS)i}^d} \underline{\underline{\alpha}}_i(t) = \frac{1}{\tau_{(HS)i}^d} \frac{\mu_{\tau_{(HS)i}^d}}{\mu} \underline{\underline{\varepsilon}}(t), \quad 1 \leq i \leq N_d^{(HS)}, \quad \underline{\underline{\alpha}}_i(0) = \underline{\underline{0}} \end{array} \right. \quad (10.18)$$

Ainsi, dans le cas isotrope, la réponse est donc réduite à une formulation incrémentale à variables internes au nombre de $N_{(HS)}^m + 5N_{(HS)}^d$. Dans le cas du schéma d'homogénéisation de *Hashin-Shtrikman* et pour le composite triphasé particulaire, nous avons obtenu $N_{(HS)}^m = 4$ et $N_{(HS)}^d = 6$, soit un modèle à 34 variables internes. Nous rappelons au lecteur que dans le cas biphasé et avec le modèle d'homogénéisation de *Mori-Tanaka* nous avons $N_{(MT)}^m = 2$ et $N_{(MT)}^d = 3$ (Cf. paragraphe 3.5.2.2 chapitre 3), soit donc un modèle à 17 variables internes. **En prenant en compte cette troisième phase du combustible MOX nous sommes donc passés d'un modèle de 17 à 34 variables internes.**

10.2.2 Comportement moyen par phase

Le problème de l'inclusion d'*Eshelby* (Cf. annexe B paragraphe B.1) est utilisé pour trouver les tenseurs de localisation des déformations A_r^{m*} et A_r^{d*} dans l'espace de *Laplace-Carson*. Ces tenseurs d'ordre 4 sont scalaires dans le cas isotrope :

$$\underline{\varepsilon}_{rm}^*(p) = A_r^{m*}(p)\underline{\varepsilon}_{0m}^*(p), \quad \underline{\varepsilon}_r^*(p) = A_r^{d*}(p)\underline{\varepsilon}_0^*(p) \quad (10.19)$$

avec $A_r^{m*} = \frac{\hat{k}^* + k_0^*}{\hat{k}^* + k_r^*}$, $A_r^{d*} = \frac{\hat{\mu}^* + \mu_0^*}{\hat{\mu}^* + \mu_r^*}$, et $(\underline{\varepsilon}_{0m}, \underline{\varepsilon}_0)$ la partie hydrostatique et déviatorique de la déformation moyenne du milieu de référence du problème d'*Eshelby*.

En utilisant la loi de comportement moyenne par phase (Cf. equation 10.5), les relations de moyenne suivantes $\sum_r A_r^{m*} \underline{\varepsilon}_{0m}^* = \bar{\underline{\varepsilon}}_m^*$ et $\sum_r A_r^{d*} \underline{\varepsilon}_0^* = \bar{\underline{\varepsilon}}^*$, et l'expression des modules effectifs \tilde{k}^* et $\tilde{\mu}^*$ on a :

$$\underline{\sigma}_{rm}^* = 3k_r^* \frac{\hat{k}^* + \tilde{k}^*}{\hat{k}^* + k_r^*} \bar{\underline{\varepsilon}}_m^* \quad , \quad \underline{\underline{s}}_r^* = 2\mu_r^* \frac{\hat{\mu}^* + \tilde{\mu}^*}{\hat{\mu}^* + \mu_r^*} \bar{\underline{\varepsilon}}^* \quad (10.20)$$

Chaque expression peut être décomposée en une fonction rationnelle de p comme ci-dessous :

$$\underline{\sigma}_{rm}^*(p) = \sum_{i=1}^{N_p^{m+1}} l_{\hat{\tau}_{ri}^m} \frac{p}{p + \frac{1}{\hat{\tau}_{ri}^m}} \bar{\underline{\varepsilon}}_m^*(p) \quad , \quad \underline{\underline{s}}_r^*(p) = \sum_{i=1}^{N_p^{d+2}} l_{\hat{\tau}_{ri}^d} \frac{p}{p + \frac{1}{\hat{\tau}_{ri}^d}} \bar{\underline{\varepsilon}}^*(p) \quad (10.21)$$

où, pour la partie hydrostatique (phase r) :

- pour $i = 1..N_p^m$: $\hat{\tau}_{ri}^m = \bar{\tau}_{(HS)i}^m$, et $l_{\hat{\tau}_{ri}^m} = \frac{1}{1 + \frac{4\mu}{3k}} k \bar{\tau}_{(HS)i}^m \frac{\frac{1}{\bar{\tau}_{(HS)i}^m} - \frac{1}{\hat{\tau}_{ri}^m}}{\frac{1}{\bar{\tau}_{(HS)i}^m} - \frac{1}{\hat{\tau}_r^m}}$
- pour $i = N_p^{m+1}$: $\hat{\tau}_{ri}^m = \hat{\tau}_r^m$, et $l_{\hat{\tau}_r^m} = \frac{1}{1 + \frac{4\mu}{3k}} \left(\sum_{j=1}^{N_p^m} k \bar{\tau}_{(HS)i}^m \frac{\frac{1}{\bar{\tau}_{(HS)i}^m} - \frac{1}{\hat{\tau}_r^m}}{\frac{1}{\bar{\tau}_{(HS)i}^m} - \frac{1}{\hat{\tau}_r^m}} + \frac{4}{3}\mu \right)$

et pour la partie déviatorique :

- pour $i = 1..N_p^d$: $\hat{\tau}_{ri}^d = \bar{\tau}_{(HS)i}^d$, et $l_{\hat{\tau}_{ri}^d} = \frac{\mu_{\bar{\tau}_{(HS)i}^d}}{\gamma} \frac{(\frac{1}{\bar{\tau}_{(HS)i}^d} - \frac{1}{\hat{\tau}_{ri}^d})(\frac{1}{\bar{\tau}_{(HS)i}^d} - \frac{1}{\hat{\tau}_{ra/b}^d})}{(\frac{1}{\bar{\tau}_{(HS)i}^d} - \frac{1}{\hat{\tau}_{ra/b}^d})(\frac{1}{\bar{\tau}_{(HS)i}^d} - \frac{1}{\hat{\tau}_{rb/a}^d})}$
- pour $i = N_p^{(d+1)}$ et $N_p^{(d+2)}$:

$$\hat{\tau}_{ri}^d = \hat{\tau}_{ra/b}^d \text{ et } l_{\hat{\tau}_{ra/b}^d} = \frac{1}{\gamma} \left(\frac{(\frac{1}{\bar{\tau}_{(HS)2}^d} - \frac{1}{\hat{\tau}_{ra/b}^d})(\frac{1}{\bar{\tau}_{(HS)1}^d} - \frac{1}{\hat{\tau}_{ra/b}^d})}{\frac{1}{\hat{\tau}_{rb/a}^d} - \frac{1}{\hat{\tau}_{ra/b}^d}} \sum_{j=1}^{N_p^d} \frac{\mu_{\bar{\tau}_{(HS)j}^d}}{\frac{1}{\bar{\tau}_{(HS)j}^d} - \frac{1}{\hat{\tau}_{ra/b}^d}} + \mu \frac{9k+8\mu}{6(k+2\mu)} \frac{\frac{1}{\hat{\tau}_{ra/b}^d} - \frac{1}{\hat{\tau}_{ra/b}^d}}{\frac{1}{\hat{\tau}_{rb/a}^d} - \frac{1}{\hat{\tau}_{ra/b}^d}} \right)$$

Comme pour le comportement effectif, à partir du principe de correspondance de *Mandel* [MANDEL, 1966] l'évolution des contraintes moyennes par phase sont données par une formulation en variables internes. Une nouvelle variable interne β_r^m apparaît pour obtenir la contrainte hydrostatique moyenne par

phase. Celle-ci est associée à $\hat{\tau}_r^m$. Deux nouvelles variables tensorielles apparaissent pour la contrainte déviatorique moyenne par phase, $\beta_{=ra}^d$ et $\beta_{=rb}^d$, associées à $\hat{\tau}_{ra}^d$ et $\hat{\tau}_{rb}^d$. Les lois d'évolutions sont les suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} \sigma_r^m(t) = 3k(\bar{\varepsilon}^m(t) - \sum_{i=1}^{N_p^m} \frac{l_{\tau_{ri}^m}}{k_{\tau_{(HS)i}^m}} \alpha_i^m - \beta_r^m) \\ \dot{\beta}_r^m(t) + \frac{1}{\hat{\tau}_r^m} \beta_r^m(t) = \frac{1}{\hat{\tau}_r^m} \frac{l_{\tau_r^m}}{k} \bar{\varepsilon}_m(t) \end{array} \right. , \left\{ \begin{array}{l} \underline{s}_r(t) = 2\mu(\bar{\underline{\varepsilon}}(t) - \sum_{i=1}^{N_p^d} \frac{l_{\tau_{ri}^d}}{\mu_{\tau_{(HS)i}^d}} \underline{\alpha}_i^d - \beta_{=ra}^d - \beta_{=rb}^d) \\ \dot{\beta}_{=ra/b}^d(t) + \frac{1}{\hat{\tau}_{ra/b}^d} \beta_{=ra/b}^d(t) = \frac{1}{\hat{\tau}_{ra/b}^d} \frac{l_{\tau_{ra/b}^d}}{\mu} \bar{\underline{\varepsilon}}(t) \end{array} \right. \quad (10.22)$$

10.3 Bilan du chapitre

Le modèle, récemment développé par [RICAUD and MASSON, 2009], a retenu notre attention au chapitre 3. Ce modèle, basé sur un schéma d'homogénéisation *Mori-Tanaka* incrémental et optimisé en temps de calcul (modèle avec un faible nombre de variables internes α), donne accès au comportement effectif et moyen par phase. Celui-ci est parfaitement adapté au comportement des constituants du combustible *MOX* en service, mais il ne remplit pas pleinement le cahier des charges fixé au paragraphe 1.4 du chapitre 1. En effet, il ne nous donne pas accès aux champs locaux. Néanmoins, du fait de ses performances (rapidité, précision...) pour les composites particuliers biphasés, nous avons décidé, dans le cadre de cette thèse, de l'étudier et de le comparer théoriquement et numériquement au modèle NTFA développé dans la partie 3. Le modèle (Cf. [RICAUD and MASSON, 2009]) ne s'appliquant qu'à des composites particuliers bi-phasés, nous avons réalisé dans ce chapitre une extension de celui-ci aux composites particuliers triphasés. **Pour cela nous avons utilisé le schéma d'homogénéisation de *Hasin-Shtrikman*** [HASHIN and SHTRIKMAN, 1963] et nous avons été contraints de réévaluer les temps de relaxations effectifs respectifs ($\bar{\tau}_{(HS)i}^m, \bar{\tau}_{(HS)i}^d$) et les amplitudes ($k_{\tau_{(HS)i}^m}, \mu_{\tau_{(HS)i}^d}$) des modules effectifs $\tilde{k}_{HS}(t)$ et $\tilde{\mu}_{HS}(t)$. **En prenant en compte cette troisième phase du combustible *MOX* nous sommes alors passés d'un modèle de 17 à 34 variables internes pour un comportement des constituants : visco-élastique linéaire compressible.** Les aspects déformation libre et vieillissant sont résolus de la même façon qu'aux paragraphes 3.5.2.3 et 3.5.2.4 du chapitre 3. Mais, par manque de temps nous n'avons pas pu les intégrer dans le modèle «Mori-Tanaka incrémental» triphasé.

Dans le chapitre suivant nous allons donc comparer théoriquement et numériquement ce modèle semi-analytique au modèle NTFA développé dans la partie 3. Dans la suite de ce mémoire, nous continuerons à appeler ce modèle :«Mori-Tanaka incrémental». On parlera soit de «Mori-Tanaka incrémental» biphasé ou «Mori-Tanaka incrémental» triphasé.

Chapitre 11

Comparaisons théoriques et numériques des approches NTFA et « Mori-Tanaka incrémental »

Objet du chapitre :

L'objectif de ce chapitre est de positionner l'approche NTFA, développée dans la partie trois, par rapport au modèle d'homogénéisation semi-analytique développé dans le chapitre 10, nommé « Mori-Tanaka incrémental » triphasé. Dans le premier paragraphe nous réalisons une comparaison théorique de ces deux approches, l'objectif étant d'essayer de donner un sens physique aux variables internes du modèle « Mori-Tanaka incrémental » triphasé. Dans le deuxième paragraphe, une comparaison des comportements effectifs et moyens par phase des deux modèles par rapport aux éléments finis est menée. Ces méthodes d'homogénéisation (Mori-Tanaka incrémental et NTFA) sont très rapides en temps de calcul et donc très intéressantes à intégrer dans un code de calcul industriel. L'objectif de ce chapitre est donc d'orienter le choix de l'utilisateur.

Sommaire

11.1 Comparaison théorique NTFA vs «Mori-Tanaka incrémental»	230
11.1.1 NTFA - Formulation en variables internes	230
11.1.2 «Mori-Tanaka incrémental» - Formulation en variables internes	232
11.1.3 Comparaisons théoriques	232
11.2 Comparaisons numériques NTFA vs «Mori-Tanaka incrémental»	233
11.2.1 VER et propriétés matériaux	233
11.2.2 Comportement effectif	234
11.2.3 Comportement moyen par phase	236
11.3 Bilan du chapitre	237

Dans ce chapitre nous considérons un comportement simplifié des constituants du combustible MOX : comportement visco-élastique linéaire incompressible. L'objectif étant d'alléger les expressions pour réaliser la comparaison théorique des deux approches : NTFA et «Mori-Tanaka incrémental».

11.1 Comparaison théorique NTFA vs «Mori-Tanaka incrémental»

11.1.1 NTFA - Formulation en variables internes

Du point de vue comportement, nous sommes donc dans le cas du chapitre 6. La contrainte réduite τ_k associée au mode k est définie par :

$$\tau_k = 2G^r(e_k - e_k^{vp}) \quad (11.1)$$

mais elle est aussi définie par la relation suivante (Cf. paragraphe 6.1 du chapitre 6) :

$$\tau_k = 2G_r^{vp} \dot{e}_k^{vp} \quad (11.2)$$

On a donc en remplaçant (11.2) dans (11.1) :

$$\dot{e}_k^{vp} = \frac{1}{\tau_r}(e_k - e_k^{vp}) \quad (11.3)$$

avec $\frac{1}{\tau_r} = \frac{G_r^{vp}}{G_r}$. On suppose que les propriétés élastiques sont homogènes $G = G_r$. On pose $\mu = G$ ainsi que $\mu_r^{vp} = G_r^{vp}$ pour avoir une homogénéité des notations entre les approches NTFA et «Mori-Tanaka incrémental». On a e_k qui est définie par la relation suivante :

$$\begin{cases} e_k = \underline{\underline{a_k}} : \underline{\underline{E}} + \sum_{l=1}^M D_{kl} \underline{\underline{\epsilon_l}}^{vp} , \\ \underline{\underline{\epsilon_k}}^{vp} = e_k^{vp} \langle \underline{\underline{\mu^k}} : \underline{\underline{\mu^k}} \rangle^{-1} . \end{cases} \quad (11.4)$$

Ce qui donne :

$$e_k = \underline{\underline{a_k}} : \underline{\underline{E}} + \sum_{l=1}^M D_{kl} e_l^{vp} \langle \underline{\underline{\mu^l}} : \underline{\underline{\mu^l}} \rangle^{-1} . \quad (11.5)$$

En injectant (11.5) dans (11.3) on obtient :

$$\dot{e}_k^{vp} = \frac{1}{\tau_r} (\underline{\underline{a_k}} : \underline{\underline{E}} + \sum_{l=1}^M D_{kl} e_l^{vp} \langle \underline{\underline{\mu^l}} : \underline{\underline{\mu^l}} \rangle^{-1} - e_k^{vp}) \quad (11.6)$$

Au final, côté NTFA, nous avons donc le système différentiel suivant en e_k^{vp} :

$$\dot{e}_k^{vp} + \frac{1}{\tau_r} \sum_{l=1}^M \left(\delta_{kl} - D_{kl} \langle \underline{\underline{\mu^l}} : \underline{\underline{\mu^l}} \rangle^{-1} \right) e_l^{vp} = \frac{1}{\tau_r} \underline{\underline{a_k}} : \underline{\underline{E}} \quad (11.7)$$

On pose $\underline{\underline{E}} = \underline{\underline{e}}$ pour avoir une homogénéité des notations entre les deux approches. Et comme $\underline{\underline{a}}_k = \langle \underline{\underline{\mu}}^k \rangle$ (les propriétés élastiques sont homogènes), l'équation différentielle (11.7) devient :

$$\dot{e}_k^{vp} + \frac{1}{\tau_r} \sum_{l=1}^M \left(\delta_{kl} - D_{kl} \langle \underline{\underline{\mu}}^l : \underline{\underline{\mu}}^l \rangle^{-1} \right) e_l^{vp} = \frac{1}{\tau_r} \langle \underline{\underline{\mu}}^k \rangle : \underline{\underline{e}} \quad (11.8)$$

avec $D_{kl} = \langle \underline{\underline{\mu}}^k : (\underline{\underline{D}} * \underline{\underline{\mu}}^l) \rangle$. On pose $\Gamma_{kl} = \delta_{kl} - D_{kl} \langle \underline{\underline{\mu}}^l : \underline{\underline{\mu}}^l \rangle^{-1}$, on a donc :

$$\dot{e}_k^{vp} + \frac{1}{\tau_r} \sum_{l=1}^M \Gamma_{kl} e_l^{vp} = \frac{1}{\tau_r} \langle \underline{\underline{\mu}}^k \rangle : \underline{\underline{e}} \quad (11.9)$$

Les déformations réduites visqueuses sont donc solutions d'un système différentiel couplé. Il nous reste à définir les variables internes macroscopiques $\underline{\underline{\alpha}}_k^{NTFA}$ telle que la contrainte macroscopique déviatorique $\underline{\underline{s}}$ soit donnée par la loi de comportement suivante :

$$\underline{\underline{s}}(t) = 2\mu \left(\underline{\underline{e}}(t) - \sum_{k=1}^M \underline{\underline{\alpha}}_k^{NTFA}(t) \right) \quad (11.10)$$

La contrainte locale déviatorique est donnée par la loi de comportement :

$$\underline{\underline{s}}(\underline{\underline{x}}, t) = 2\mu \left(\underline{\underline{\epsilon}}(\underline{\underline{x}}, t) - \underline{\underline{\epsilon}}^{vp}(\underline{\underline{x}}, t) \right) \quad (11.11)$$

avec $\underline{\underline{\epsilon}}(\underline{\underline{x}}, t) = \underline{\underline{A}}(\underline{\underline{x}}) : \underline{\underline{e}}(t) + \sum_{k=1}^M (\underline{\underline{D}} * \underline{\underline{\mu}}^k)(\underline{\underline{x}}) : \underline{\underline{\epsilon}}_k^{vp}(t)$ et $\underline{\underline{\epsilon}}^{vp}(\underline{\underline{x}}, t) = \sum_{k=1}^M \underline{\underline{\epsilon}}_k^{vp}(t) \underline{\underline{\mu}}^k(\underline{\underline{x}})$. Avec $\underline{\underline{A}} = \underline{\underline{I}}$ car les propriétés élastiques sont homogènes. On a donc la relation (11.11) qui devient :

$$\underline{\underline{s}}(\underline{\underline{x}}, t) = 2\mu \left(\underline{\underline{I}}(\underline{\underline{x}}) : \underline{\underline{e}}(t) - \sum_{k=1}^M \left(\underline{\underline{\mu}}^k(\underline{\underline{x}}) - \underline{\underline{D}} * \underline{\underline{\mu}}^k(\underline{\underline{x}}) \right) \underline{\underline{\epsilon}}_k^{vp}(t) \right) \quad (11.12)$$

On obtient donc la contrainte macroscopique $\underline{\underline{s}}(t)$ en moyennant la relation (11.12) sur tout le VER ce qui donne :

$$\underline{\underline{s}}(t) = 2\mu \left(\underline{\underline{e}}(t) - \sum_{k=1}^M \left\langle \left(\underline{\underline{\mu}}^k(\underline{\underline{x}}) - \underline{\underline{D}} * \underline{\underline{\mu}}^k(\underline{\underline{x}}) \right) \right\rangle \underline{\underline{\epsilon}}_k^{vp}(t) \right) \quad (11.13)$$

Or $\left\langle \underline{\underline{D}} * \underline{\underline{\mu}}^k(\underline{\underline{x}}) \right\rangle = 0$, on a donc :

$$\underline{\underline{s}}(t) = 2\mu \left(\underline{\underline{e}}(t) - \sum_{k=1}^M \left\langle \underline{\underline{\mu}}^k(\underline{\underline{x}}) \right\rangle \underline{\underline{\epsilon}}_k^{vp}(t) \right) \quad (11.14)$$

Les variables internes macroscopiques $\underline{\underline{\alpha}}_k^{NTFA}$ sont donc définies par :

$$\begin{cases} \underline{\underline{\alpha}}_k^{NTFA}(t) = \left\langle \underline{\underline{\mu}}^k(\underline{\underline{x}}) \right\rangle \underline{\underline{\epsilon}}_k^{vp}(t) \\ = \left\langle \underline{\underline{\mu}}^k(\underline{\underline{x}}) \right\rangle \frac{1}{\left\langle \underline{\underline{\mu}}^k(\underline{\underline{x}}) : \underline{\underline{\mu}}^k(\underline{\underline{x}}) \right\rangle} e_k^{vp}(t) \end{cases} \quad (11.15)$$

On voit donc que c'est l'évolution des déformations viscoplastiques réduites $e_k^{vp}(t)$, donnée par la relation (11.9), qui donnent l'évolution des variables internes macroscopiques $\underline{\underline{\alpha}}_k^{NTFA}(t)$ à une constante tensorielle près $\frac{1}{\langle \underline{\underline{\mu}}^k(\underline{x}) : \underline{\underline{\mu}}^k(\underline{x}) \rangle} \langle \underline{\underline{\mu}}^k(\underline{x}) \rangle$.

On a donc $e_k^{vp}(t) = \langle \underline{\underline{\mu}}^k(\underline{x}) : \underline{\underline{\mu}}^k(\underline{x}) \rangle \langle \underline{\underline{\mu}}^k(\underline{x}) \rangle^{-1} : \underline{\underline{\alpha}}_k^{NTFA}(t)$. En remplaçant $e_k^{vp}(t)$ dans (11.9) on obtient :

$$\dot{\underline{\underline{\alpha}}}_k^{NTFA} + \frac{1}{\tau_r} \sum_{l=1}^M \Gamma_{kl} \underline{\underline{\alpha}}_l^{NTFA} = \frac{1}{\tau_r} \langle \underline{\underline{\mu}}^k(\underline{x}) : \underline{\underline{\mu}}^k(\underline{x}) \rangle^{-1} \langle \underline{\underline{\mu}}^k(\underline{x}) \rangle : \langle \underline{\underline{\mu}}^k(\underline{x}) \rangle \bar{\underline{\underline{e}}} \quad (11.16)$$

Le comportement effectif est donc donné par les relations suivantes :

$$\begin{cases} \bar{\underline{\underline{s}}}(t) = 2\mu \left(\bar{\underline{\underline{e}}}(t) - \sum_{k=1}^M \underline{\underline{\alpha}}_k^{NTFA}(t) \right) , \\ \dot{\underline{\underline{\alpha}}}_k^{NTFA} + \frac{1}{\tau_r} \sum_{l=1}^M \Gamma_{kl} \underline{\underline{\alpha}}_l^{NTFA} = \frac{1}{\tau_r} \Psi^k \bar{\underline{\underline{e}}} , \quad 1 \leq k \leq M , \quad \underline{\underline{\alpha}}^{NTFA}(0) = \underline{\underline{0}} \end{cases} \quad (11.17)$$

avec $\Psi^k = \langle \underline{\underline{\mu}}^k : \underline{\underline{\mu}}^k \rangle^{-1} \langle \underline{\underline{\mu}}^k \rangle : \langle \underline{\underline{\mu}}^k \rangle$ et $\Gamma_{kl} = \delta_{kl} - D_{kl} \langle \underline{\underline{\mu}}^l : \underline{\underline{\mu}}^l \rangle^{-1}$.

11.1.2 «Mori-Tanaka incrémental» - Formulation en variables internes

Pour ce type d'approche la formulation en variables internes a été établie dans le chapitre précédent mais dans le cas compressible (Cf. relation (10.18)). Dans le cas incompressible nous avons le comportement effectif qui est donné par les relations suivantes :

$$\begin{cases} \bar{\underline{\underline{s}}} = 2\mu \left(\bar{\underline{\underline{e}}}(t) - \sum_{i=1}^{N^d(HS)} \underline{\underline{\alpha}}_{\tau_{(HS)i}^d}^d(t) \right) \\ \text{avec } \dot{\underline{\underline{\alpha}}}_i^d(t) + \frac{1}{\tau_{(HS)i}^d} \underline{\underline{\alpha}}_i^d(t) = \frac{1}{\tau_{(HS)i}^d} \frac{\mu_{\tau_{(HS)i}^d}}{\mu} \bar{\underline{\underline{e}}}(t) , \quad 1 \leq i \leq N^d(HS) , \quad \underline{\underline{\alpha}}_i^d(0) = \underline{\underline{0}} \end{cases} \quad (11.18)$$

11.1.3 Comparaisons théoriques

En comparant les relations (11.17) et (11.18), on constate une très grande similitude entre la formulation du comportement effectif avec ces deux approches : pour les deux approches, les variables internes tensorielles obéissent à des lois d'évolution similaires (système d'équations différentielles du premier ordre). En identifiant les paramètres des équations différentielles des deux approches on obtient (si les variables internes sont ordonnées de la même façon) :

$$\frac{1}{\tau_{(HS)i}^d} = \frac{1}{\tau_r} \sum_{l=1}^M \Gamma_{il} \quad \text{et} \quad \mu_{\tau_{(HS)i}^d} = \frac{\mu \Psi^i}{\sum_{l=1}^M \Gamma_{il}} , \quad (r \text{ étant l'indice de la phase associée au mode } i). \quad (11.19)$$

La différence majeure entre l'approche NTFA et l'approche «Mori-Tanaka incrémental» vient du fait que les variables internes issues de l'approche NTFA $\underline{\underline{\alpha}}_k^{NTFA}(t)$ sont solution d'un système différentiel couplé. Le terme de couplage entre la variable interne k et la variable interne l est d'intensité :

$$\Gamma_{kl} - \delta_{kl} = -\frac{D_{kl}}{\langle \underline{\underline{\mu}}^l : \underline{\underline{\mu}}^l \rangle} = -\frac{\langle \underline{\underline{\mu}}^k : (\underline{\underline{D}} * \underline{\underline{\mu}}^l) \rangle}{\langle \underline{\underline{\mu}}^l : \underline{\underline{\mu}}^l \rangle}$$
. Ce terme de couplage est loin d'être négligeable numériquement : $\max |\Gamma_{kl} - \delta_{kl}| = 0.7$ alors que $\max |\Gamma_{kk} - \delta_{kk}| = 0.8$.

En perspective de cette comparaison théorique, il serait intéressant de regarder si les temps de relaxation effectifs obtenus par la méthode «Mori-Tanaka incrémental» ne seraient pas des temps pertinents pour sélectionner les modes plastiques de l'approche NTFA. Pour cela, il faudrait diagonaliser le système (11.17) et comparer ces nouvelles variables internes par rapport au modèle «Mori-Tanaka incrémental». Il serait également intéressant de mener cette comparaison théorique sur le modèle NTFA optimisé, exposé au chapitre 10.

11.2 Comparaisons numériques NTFA vs «Mori-Tanaka incrémental»

Dans ce paragraphe nous allons maintenant comparer numériquement l'approche NTFA, développée dans la partie 3, et l'approche «Mori-Tanaka incrémental» triphasée (développée dans le chapitre précédent) mais également l'approche «Mori-Tanaka incrémental» biphasée. Pour cette étude deux microstructures sont étudiées : microstructure biphasée et triphasée. Le comportement local des constituants est visco-élastique linéaire incompressible : Le potentiel de dissipation est celui utilisé dans la partie 3 du chapitre 6. Deux types d'essais sont réalisés : fluage et relaxation uniaxiaux. Ces essais ont été présentés dans la partie 3 de ce mémoire :

1. Fluage uniaxial : direction 33 - $\Sigma_{33} = 100MPa$.
2. Relaxation uniaxiale : direction 33 - $E_{33} = 2\%$.

11.2.1 VER et propriétés matériaux

Le modèle NTFA bi-phasé a été identifié sur la microstructure suivante :

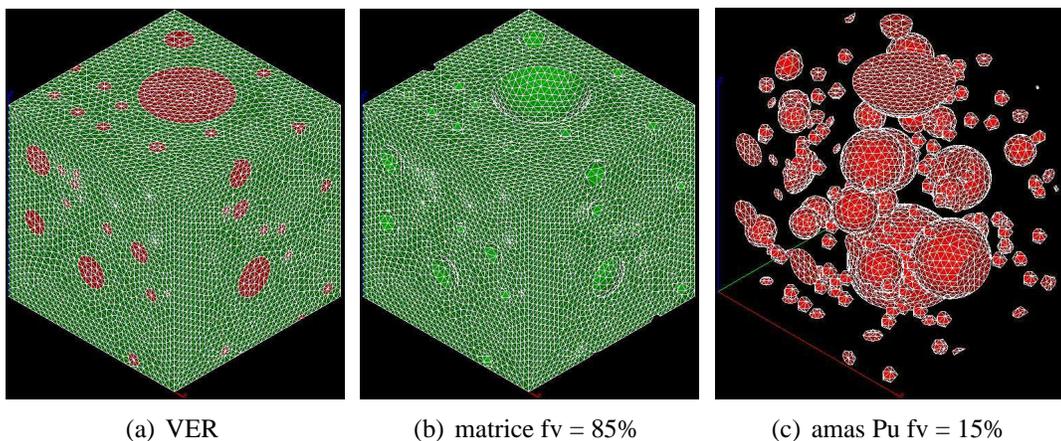


FIG. 11.1: VER «polydispersés» biphasés Maillage périodique en 3D - Tétraèdres à 4 noeuds

Tandis que le modèle NTFA tri-phasé a été identifié sur la microstructure présentée dans la partie 3 (Cf. figure 6.1). Les paramètres matériaux utilisés (pour l'identification et les calculs) étaient les suivants

pour la microstructure biphasée (NTFA et «Mori-Tanaka incrémental») :

VER Biphasé	E (GPa)	ν (-)	G_r^{vp} (GPa.s)
Amas Pu	200	0.3	21.43
Matrice	200	0.3	64.30

TAB. 11.1: Propriétés inclusions Pu et matrice

Les paramètres matériaux utilisés (identification et calculs) étaient les suivants pour la microstructure triphasée (NTFA et «Mori-Tanaka incrémental») :

VER Triphasé	E (GPa)	ν (-)	G_r^{vp} (GPa.s)
Amas Pu	200	0.3	21.43
Matrice	200	0.3	52.94
Amas U	200	0.3	158.83

TAB. 11.2: Propriétés inclusions Pu, U et de la matrice

Pour chaque essai la réponse des éléments finis sera notée FEM, celle de l'approche NTFA sera notée NTFA, celle de «Mori-Tanaka incrémental» biphasé sera notée MT et celle de «Mori-Tanaka incrémental» triphasé sera notée HS si le milieu de référence correspond à la matrice, HS+ si le milieu de référence correspond à la phase la plus raide et HS- si le milieu de référence correspond à la phase la plus souple.

11.2.2 Comportement effectif

Microstructure biphasée :

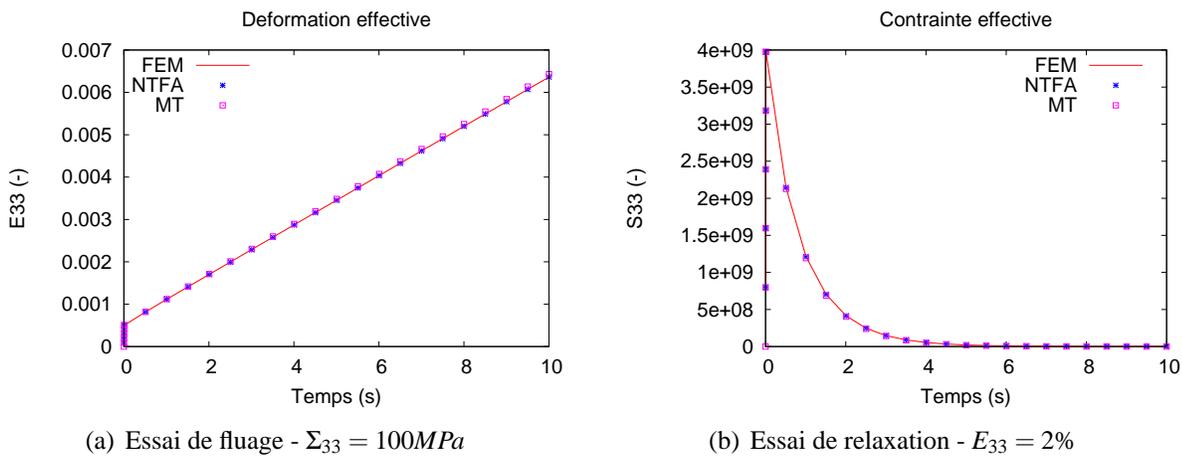


FIG. 11.2: Essais de fluage et de relaxation (microstructure biphasée)

La figure 11.2(a) présente les prédictions macroscopiques des modèles NTFA et «Mori-Tanaka incrémental» biphasé pour un essai de fluage à contrainte uniaxiale (direction 33 - $\Sigma_{33} = 100MPa$), tandis que la figure 11.2(b) présente les prédictions macroscopiques des modèles pour un essai de relaxation uniaxiale (direction 33 - $E_{33} = 2\%$). On constate toujours une très bonne prédiction effective du modèle NTFA par rapport aux éléments finis quel que soit le type d'essais. La prédiction effective du modèle semi-analytique «Mori-Tanaka incrémental» biphasé est également correcte avec un très léger écart du modèle par rapport aux éléments finis pour l'essai de fluage. Cet écart est beaucoup moins évident pour l'essai de relaxation. On peut dès lors s'interroger sur la prédiction effective de ce modèle dans le cas de composite triphasé. Les résultats sont présentés ci-dessous.

Microstructure triphasée :

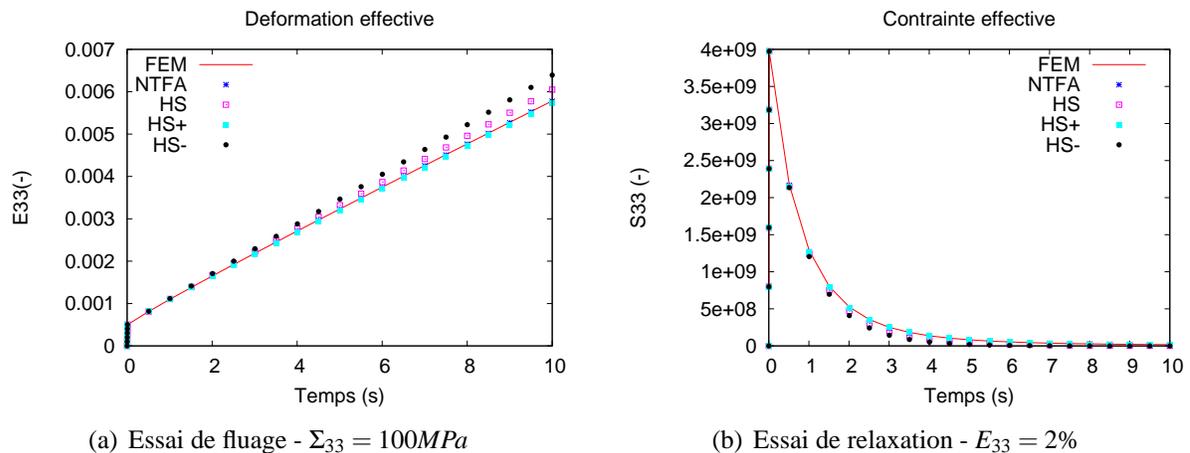


FIG. 11.3: Essais de fluage et de relaxation (microstructure triphasée)

Pour un composite particulière triphasé, on constate toujours une très bonne prédiction effective du modèle NTFA par rapport aux éléments finis quel que soit le type d'essais. La prédiction effective du modèle semi-analytique «Mori-Tanaka incrémental» triphasé est bien moins bonne en fluage ou en relaxation si on prend comme milieu de référence la matrice (courbe nommée HS). On constate en revanche que cette prédiction effective est de très bonne qualité si on utilise la borne supérieure du modèle de *Hashin et Shtrikman* (courbe nommée HS+), c'est à dire si on considère comme milieu de référence la phase la plus raide (les inclusions U). Ce résultat n'est pas systématique et est réellement propre à notre cas d'étude. La borne inférieure étant quant à elle plus éloignée (courbe nommée HS-).

On constate donc que la prise en compte de cette troisième phase a réellement eu un impact sur la qualité prédictive de ce modèle : «Mori-Tanaka incrémental». La fraction volumique supplémentaire de la phase inclusionnaire uranifère (amas U), le comportement rigide de cette phase et la déformation hétérogène au sein de cette phase peuvent être à l'origine de cette dégradation. En effet, le VER triphasé considéré contient près de 40 % d'inclusions, ce qui est sans doute élevé pour le modèle de *Hashin et Shtrikman*. Pour simuler correctement le comportement effectif du combustible MOX ADU (composite particulière triphasé) avec ce modèle, il est donc judicieux de prendre comme milieu de référence la phase la plus raide.

Pour ce cas d'étude, les comportements moyens par phase ont également été analysés. C'est donc l'objet du paragraphe suivant.

11.2.3 Comportement moyen par phase

Microstructure biphasée :

La figure 11.4(a) présente la prédiction moyenne par phase des modèles NTFA et «Mori-Tanaka incrémental» biphasé pour l'essai de fluage précédent (direction 33 - $\Sigma_{33} = 100MPa$) et la figure 11.4(b) présente la prédiction moyenne par phase des modèles pour l'essai de relaxation précédent (direction 33 - $E_{33} = 2\%$).

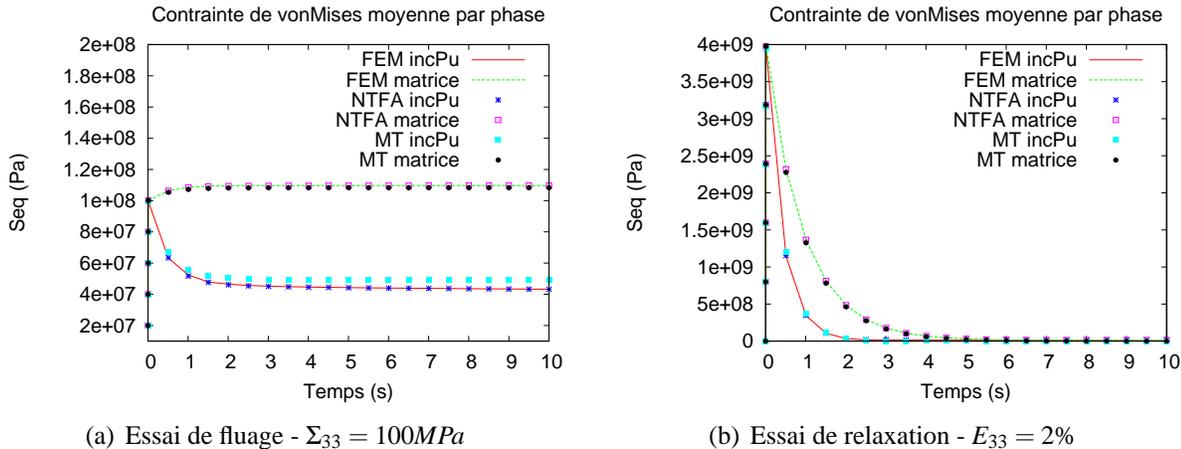


FIG. 11.4: Essais de fluage et de relaxation (microstructure biphasée)

On constate toujours une très bonne prédiction du comportement moyen par phase du modèle NTFA par rapport aux éléments finis, et ce quel que soit le type d'essais. La prédiction du comportement moyen par phase du modèle semi-analytique «Mori-Tanaka incrémental» biphasé est correcte dans la phase matricielle mais bien moins bonne dans la phase amas plutonifère. Cet écart est moins évident pour l'essai de relaxation. Il est néanmoins nécessaire de remarquer que la prédiction du comportement moyen par phase reste tout de même de bonne qualité. De plus, il est également important de souligner que ce genre d'approche, «Mori-Tanaka incrémental», nécessite beaucoup moins de travail en amont que l'approche NTFA. En effet, pour l'approche NTFA la phase d'identification des modes est un travail numérique très lourd et très coûteux.

Microstructure triphasée :

Pour le composite particulière triphasé (MOX ADU), on constate, sur les figures 11.5 et 11.6, toujours une très bonne prédiction du comportement moyen par phase du modèle NTFA par rapport aux éléments finis et ce quel que soit le type d'essais. Comme pour le comportement effectif, la prédiction du comportement moyen par phase du modèle semi-analytique «Mori-Tanaka incrémental» triphasé est moins bonne en fluage ou en relaxation si on prend comme milieu de référence la matrice (HS) (Cf. figures 11.5(a) et 11.6(a)), surtout dans la phase uranifère (incU). Par contre, on constate, sur les figures 11.5(b) et 11.6(b), que cette prédiction est de bonne qualité si on utilise la borne supérieure du modèle de Hashin et Shtrikman, c'est à dire si on considère comme milieu de référence la phase la plus raide (les inclusions U).

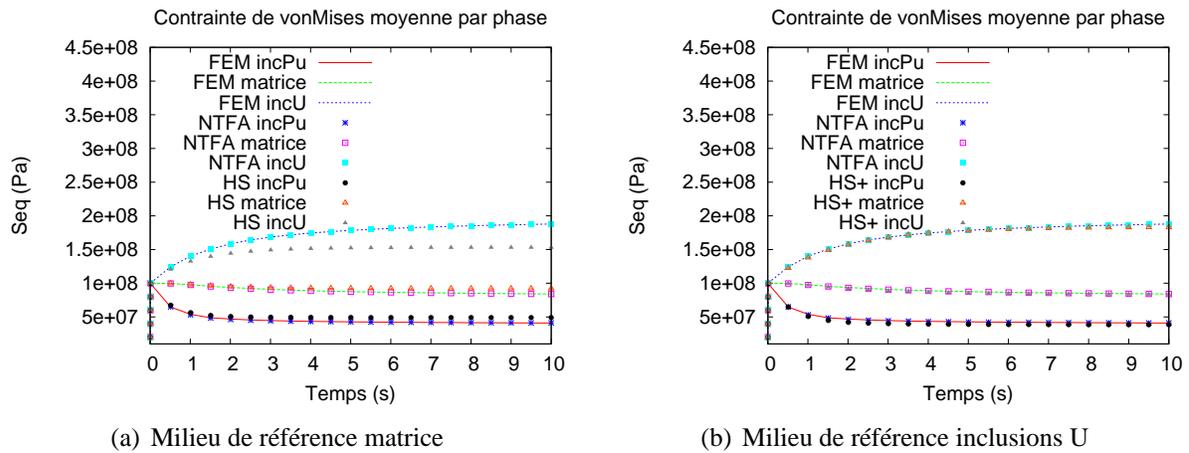


FIG. 11.5: Essais de fluage $\Sigma_{33} = 100 \text{ MPa}$ (microstructure triphasée)

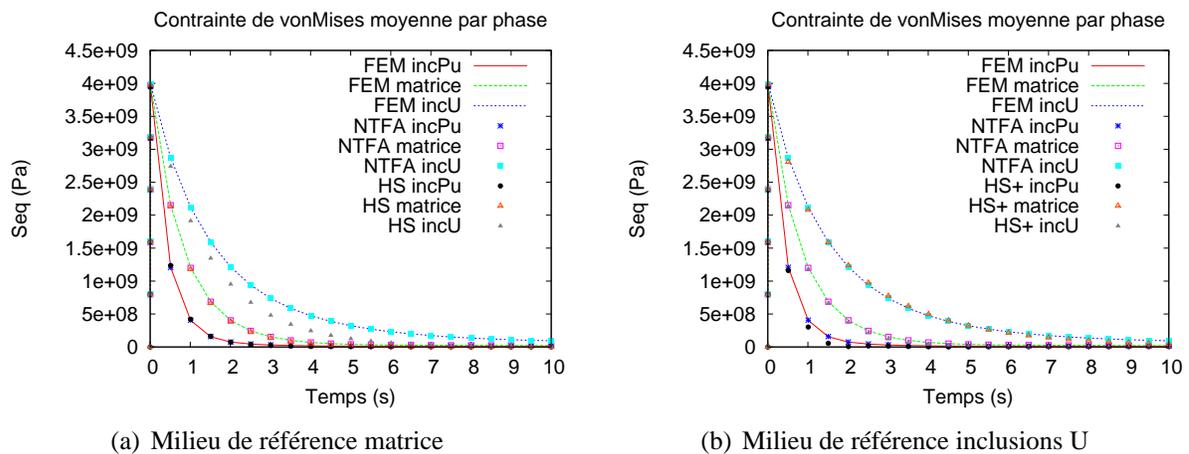


FIG. 11.6: Essais de relaxation $E_{33} = 2\%$ (microstructure triphasée)

Finalement, pour ce cas d'étude (comportement visco-élastique linéaire incompressible des constituants du composite particulaire triphasé), nous recommandons de prendre comme milieu de référence la phase la plus raide pour simuler correctement le comportement effectif et moyen par phase du combustible MOX ADU.

11.3 Bilan du chapitre

Dans ce chapitre nous avons comparé théoriquement et numériquement le modèle semi-analytique «Mori-Tanaka incrémental» au modèle NTFA développé dans la partie 3. Ce modèle semi-analytique a été développé par [RICAUD and MASSON, 2009] pour les composites particuliers biphasés. Dans le cadre de cette thèse, nous l'avons étendu aux composites particuliers triphasés (Cf. chapitre précédent et [BLANC et al., 2011]), ce qui conduit à un modèle à 34 variables internes scalaires.

Pour réaliser la comparaison nous avons considéré un comportement simplifié des constituants du combustible MOX : comportement visco-élastique linéaire incompressible. Cette comparaison théorique a été réalisée dans le premier paragraphe. **En comparant les formulations en variables internes, nous observons une très grande similitude entre les formulations du comportement effectif de ces deux approches : pour les deux approches, les variables internes tensorielles obéissent à des lois d'évolution similaires (système d'équations différentielles du premier ordre). La différence majeure entre l'approche NTFA et l'approche «Mori-Tanaka incrémental» vient du fait que les variables internes issues de l'approche NTFA $\underline{\alpha}^{NTFA}(t)$ sont solution d'un système différentiel couplé.** Ce terme de couplage est loin d'être négligeable numériquement, ce qui conduit à des variables internes différentes. **En perspective de cette comparaison théorique, il serait intéressant de regarder si les temps de relaxation effectifs obtenus par la méthode «Mori-Tanaka incrémental» ne seraient pas des temps pertinents pour sélectionner les modes plastiques de l'approche NTFA. Pour cela, il faudrait diagonaliser le système (11.17) et comparer ces nouvelles variables internes par rapport au modèle «Mori-Tanaka incrémental». Il serait également intéressant de mener cette comparaison théorique sur le modèle NTFA optimisé, exposé au chapitre 10.** Dans le deuxième paragraphe, nous avons réalisé la comparaison numérique entre les deux approches. Deux essais ont été réalisés : fluage et relaxation uniaxiaux. **Pour le composite particulaire biphasé ou triphasé, nous constatons une très bonne prédiction du comportement effectif et moyen par phase du modèle NTFA par rapport aux éléments finis et ce quel que soit le type d'essais. Pour le composite biphasé, la prédiction effective du modèle semi-analytique «Mori-Tanaka incrémental» biphasé est correcte.** La prédiction du comportement moyen par phase du modèle est quant à elle correcte dans la phase matricielle mais bien moins bonne dans la phase amas plutonifère. **Pour le composite particulaire triphasé, la prédiction effective du modèle semi-analytique «Mori-Tanaka incrémental» triphasé est bien moins bonne en fluage ou en relaxation si on prend comme milieu de référence la matrice. Par contre on constate une prédiction effective de très bonne qualité si on utilise la borne supérieure du modèle de Hashin et Shtrikman, c'est à dire si on considère comme milieu de référence la phase la plus raide (les inclusions U).** Comme pour le comportement effectif, la prédiction du comportement moyen par phase du modèle semi-analytique «Mori-Tanaka incrémental» triphasé est bonne si on utilise la borne supérieure du modèle de Hashin et Shtrikman. Ce résultat n'est pas systématique et est réellement propre à notre cas d'étude. On constate donc que **la prise en compte de cette troisième phase a réellement eu un impact sur la qualité prédictive de ce modèle : «Mori-Tanaka incrémental». La fraction volumique supplémentaire de la phase inclusionnaire uranifère, le comportement rigide et la déformation hétérogène au sein de celle-ci peuvent être à l'origine de cette dégradation.** Le VER triphasé considéré contient près de 40 % d'inclusions, ce qui est sans doute élevé pour le modèle de Hashin et Shtrikman. Finalement, pour ce cas d'étude (comportement visco-élastique linéaire incompressible des constituants) et si on utilise le modèle «Mori-Tanaka incrémental» triphasé, nous recommandons de prendre comme milieu de référence la phase la plus raide pour simuler correctement le comportement effectif et moyen par phase du combustible MOX ADU. Les deux approches NTFA et «Mori-Tanaka incrémental» sont deux méthodes très performantes en temps de calcul et donc très intéressantes à intégrer dans des codes de calculs industriels. **L'approche NTFA est la plus précise du point de vue du comportement effectif et moyen par phase. De plus, elle nous donne accès à une information supplémentaire : les champs locaux. Mais, il est important de souligner que l'approche «Mori-Tanaka incrémental», nécessite beaucoup moins de travail en amont que l'approche NTFA.** En effet, pour l'approche NTFA la phase d'identification des modes est un travail numérique très lourd et très coûteux. Par conséquent, nous pouvons conclure ce chapitre en affirmant que le choix d'intégration de l'une ou l'autre approche dans un code de structure sera souvent gouverné par le degré de précision et d'informations souhaitées par l'utilisateur mais également par le temps de travail amont disponible.

BILAN PARTIE 4 :

Orientation sur le choix de la méthode à intégrer dans un code de calcul industriel

Avant intégration dans un code de structure, nous avons souhaité positionner notre modèle NTFA par rapport à un autre modèle d'homogénéisation récemment développé dans la littérature pour simuler le comportement du combustible *MOX* en fonctionnement normal (Cf. [RICAUD and MASSON, 2009]).

Ce modèle, qui a retenu notre attention au chapitre 3, est basé sur un schéma d'homogénéisation *Mori-Tanaka* incrémental et optimisé en temps de calcul (modèle avec un faible nombre de variables internes α). Il donne accès au comportement effectif et moyen par phase. Celui-ci est parfaitement adapté au comportement des constituants du combustible *MOX* en service, mais il ne remplit pas pleinement le cahier des charges fixé au paragraphe 1.4 du chapitre 1. En effet, il ne nous donne pas accès aux champs locaux. Néanmoins, du fait de ses performances (rapidité, précision...) pour les composites particuliers biphasés, nous avons décidé, dans le cadre de cette thèse, de l'étudier et de le comparer théoriquement et numériquement par rapport au modèle NTFA développé dans la partie 3. Le modèle (Cf. [RICAUD and MASSON, 2009]) ne s'appliquant qu'à des composites particuliers bi-phasés, nous avons, dans un premier temps, réalisé au chapitre 10 une extension de celui-ci aux composites particuliers triphasés. **Pour cela nous avons utilisé le schéma d'homogénéisation de Hasin-Shtrikman** [HASHIN and SHTRIKMAN, 1963] et nous avons été **contraints de réévaluer les temps de relaxations effectifs respectifs** $(\bar{\tau}_{(HS)i}^m, \bar{\tau}_{(HS)i}^d)$ **et les amplitudes** $(k_{\bar{\tau}_{(HS)i}^m}, \mu_{\bar{\tau}_{(HS)i}^d})$ **des modules effectifs** $\tilde{k}_{HS}(t)$ et $\tilde{\mu}_{HS}(t)$. **En prenant en compte cette troisième phase du combustible *MOX* nous sommes alors passés d'un modèle de 17 à 34 variables internes pour un comportement visco-élastique linéaire compressible des constituants.** Les aspects déformation libre et vieillissant sont résolus de la même façon qu'aux paragraphes 3.5.2.3 et 3.5.2.4 du chapitre 3. Mais, par manque de temps nous n'avons pas pu les intégrer dans le modèle «Mori-Tanaka incrémental» triphasé.

Dans le chapitre 11 nous avons donc, dans un deuxième temps, comparé théoriquement et numériquement ce modèle semi-analytique par rapport au modèle NTFA développé dans la partie 3. Pour réaliser la comparaison entre l'approche NTFA et «Mori-Tanaka incrémental» nous avons considéré un comportement simplifié des constituants du combustible *MOX* : comportement visco-élastique linéaire incompressible. Cette comparaison théorique a été réalisée dans le premier paragraphe. **En comparant les formulations en variables internes, nous observons une très grande similitude entre les formulations du comportement effectif de ces deux approches : pour les deux approches, les variables internes tensorielles obéissent à des lois d'évolution similaires (système d'équations différentielles du premier ordre).** La différence majeure entre l'approche NTFA et l'approche «Mori-Tanaka incrémental» vient du fait que les variables internes issues de l'approche NTFA $\underline{\alpha}^{NTFA}(t)$ sont solution d'un système différentiel couplé. Ce terme de couplage est loin d'être négligeable numériquement, ce qui conduit à des variables internes différentes. **En perspective de cette comparaison théorique, il serait intéressant de regarder si les temps de relaxation effectifs obtenus par la méthode «Mori-Tanaka incrémental» ne seraient pas des temps pertinents pour sélectionner les modes plastiques de l'approche NTFA. Pour cela, il faudrait diagonaliser le système (11.17) et comparer ces nouvelles variables internes par rapport au modèle «Mori-Tanaka incrémental». Il serait également intéressant de mener cette comparaison théorique sur le modèle NTFA optimisé, exposé au chapitre 10.** Dans le deuxième paragraphe, nous avons réalisé la comparaison numérique entre les deux approches. Deux essais ont été réalisés : fluage et relaxation uniaxiaux. **Pour le composite particulier biphasé ou triphasé, nous constatons une très bonne prédiction du comportement effectif et moyen par phase du modèle NTFA par rapport aux éléments finis et ce quel que soit le type d'essais. Pour le composite biphasé, la prédiction effective du modèle semi-analytique «Mori-Tanaka incrémental» biphasé est correcte : un très léger écart du modèle par rapport aux éléments finis est observé pour l'essai**

de fluage. La prédiction du comportement moyen par phase du modèle est quant à elle correcte dans la phase matricielle mais bien moins bonne dans la phase amas plutonifère. Il est néanmoins important de souligner que **la prédiction du comportement moyen par phase reste tout de même de bonne qualité. Pour le composite particulière triphasé, la prédiction effective du modèle semi-analytique «Mori-Tanaka incrémental» triphasé est bien moins bonne en fluage ou en relaxation si on prend comme milieu de référence la matrice. Par contre on constate une prédiction effective de très bonne qualité en utilisant la borne supérieure du modèle de Hashin et Shtrikman, c'est à dire en considérant comme milieu de référence la phase la plus raide (les inclusions U).** Comme pour le comportement effectif, **la prédiction du comportement moyen par phase du modèle semi-analytique «Mori-Tanaka incrémental» triphasé est moins bonne en fluage ou en relaxation si on prend comme milieu de référence la matrice. Par contre, on constate toujours une bonne prédiction si on utilise la borne supérieure du modèle de Hashin et Shtrikman.** Ce résultat n'est pas systématique et est réellement propre à notre cas d'étude. On constate donc que **la prise en compte de cette troisième phase a réellement eu un impact sur la qualité prédictive de ce modèle : «Mori-Tanaka incrémental».** La fraction volumique supplémentaire de la phase inclusionnaire uranifère (amas U), le comportement rigide de celle-ci et la déformation hétérogène au sein de cette phase peuvent être à l'origine de cette dégradation. Le VER triphasé considéré contient près de 40 % d'inclusions, ce qui est sans doute élevé pour le modèle de Hashin et Shtrikman. Finalement, pour ce cas d'étude (comportement visco-élastique linéaire incompressible des constituants) et **si on utilise le modèle «Mori-Tanaka incrémental» triphasé, nous recommandons de prendre comme milieu de référence la phase la plus raide pour simuler correctement le comportement effectif et moyen par phase du combustible MOX ADU.** Les deux approches NTFA et «Mori-Tanaka incrémental» sont deux méthodes très performantes en temps de calcul et donc très intéressantes à intégrer dans des codes de calculs industriels. **L'approche NTFA est la plus précise du point de vue du comportement effectif et moyen par phase. De plus, elle nous donne accès à une information supplémentaire : les champs locaux. Mais, il est important de souligner que l'approche «Mori-Tanaka incrémental», nécessite beaucoup moins de travail en amont que l'approche NTFA.** En effet, pour l'approche NTFA la phase d'identification des modes est un travail numérique très lourd et très coûteux. Par conséquent, nous pouvons conclure ce chapitre en affirmant que **le choix d'intégration de l'une ou l'autre approche dans un code de structure sera souvent gouverné par le degré de précision et d'informations souhaitées par l'utilisateur mais également par le temps de travail amont disponible.**

CONCLUSION - PERSPECTIVES :
Intégration dans un code de calcul industriel

La première partie de ce mémoire nous a, tout d'abord, permis de définir le cadre et l'objectif de ces travaux de thèse. Nous nous sommes intéressés ici au **comportement du combustible MOX sous irradiation, en fonctionnement normal**. Ce combustible est **hétérogène en répartition de plutonium**. En effet, dans un **MOX MIMAS ADU**, on observe **trois phases** : une phase inclusionnaire à forte concentration en plutonium (25 à 30 % de teneur massique moyenne en plutonium), nommée **amas plutonifères**, une autre phase inclusionnaire à faible teneur en plutonium (inférieure à 1 % de teneur massique moyenne), nommée **amas uranifères** et une phase d'**enrobage** à teneur modérée en plutonium (environ 6 à 10 % de teneur massique moyenne en plutonium). **Sous irradiation la réaction de fission dépend directement de la teneur en plutonium au sein de chacune de ces phases**. Par exemple, **celle-ci est deux à trois fois plus élevée dans les amas plutonifères, ce qui conduit à une accélération des mécanismes de déformation induits par l'irradiation au sein de cette phase**. Nous avons donc conclu que **la compréhension du comportement du combustible MOX, durant l'irradiation et en fonctionnement normal, passait par la construction de lois macroscopiques faisant intervenir les effets microstructuraux**. L'objectif de nos travaux de thèse était donc de **développer une modélisation par changement d'échelles permettant d'estimer plus précisément la distribution des champs mécaniques locaux au sein du combustible MOX et en régime de fonctionnement normal**. Pour être en adéquation avec les attentes industrielles, ce **modèle devait remplir le cahier des charges** suivant :

- **Un modèle donnant accès aux grandeurs mécaniques :**
 - **locales par phases ;**
 - **moyennes par phases ;**
 - **macroscopiques.**
- Un modèle peu consommateur en temps de calcul (CPU) :
 - cela implique donc **un modèle avec un faible nombre de variables internes**.
- **Un modèle devant avoir un schéma d'intégration numérique «simple», c'est à dire cohérent avec les schémas que l'on trouve dans les codes industriels.**

Les intérêts industriels étaient :

- **simuler correctement le comportement macroscopique du combustible MOX dans les codes industriels** (en fonctionnement normal) ;
- **analyser ce qui se passe dans chaque phase**, afin de **progresser dans la compréhension de l'apparition de certains mécanismes locaux** : par exemple l'amorçage de micro-fissures au sein d'une phase (phénomène déjà observé sur un lot de fabrication de combustibles MOX) ;
- **prévoir le comportement numérique, macroscopique et local, du combustible MOX dès sa conception** afin d'**orienter les choix de microstructures à la fabrication**.

Pour définir le comportement local que nous allions appliquer, au sein de chacune des phases constitutives du combustible *MOX*, nous avons analysé l'ensemble des mécanismes qui pouvaient apparaître sous les effets de l'irradiation et toujours dans des conditions de fonctionnement normal. D'un point de vue formel, **la loi de comportement locale, proposée ici, était de nature visco-élastique linéaire compressible vieillissante avec des déformations libres imposées**. Nous avons alors rappelé la démarche générale pour construire un modèle d'homogénéisation et nous avons ensuite réalisé un état de l'art sur des modèles d'homogénéisation susceptibles d'être en adéquation avec le comportement local des constituants du combustible MOX en service et avec le cahier des charges fixé précédemment. Cette analyse nous a permis de dégager deux approches intéressantes :

1. Le modèle Mori-Tanaka incrémental biphasé développé par [RICAUD and MASSON, 2009].
2. La méthode NTFA développée par [MICHEL and SUQUET, 2003].

Pour homogénéiser le problème local nous avons décidé de développer, dans un premier temps, l'approche NTFA car elle remplissait parfaitement le cahier des charges précédent.

Pour réaliser ces développements, **la représentation et la localisation constituaient la première étape de notre travail de thèse. Ces travaux ont été exposés dans la deuxième partie de ce mémoire. Dans cette partie, nous avons établi une méthodologie et développé plusieurs outils pour représenter géométriquement et numériquement le combustible MOX en 3D, composite particulaire multiphasé.** Trois étapes ont été réalisées :

1. **Acquisition et traitement de l'image expérimentale bi-dimensionnelle MOX** à l'aide des logiciels développés par *Oudinet* (Cf. [OUDINET, 2003]) dans le cadre de sa thèse, à savoir **LANTINUM et ANACONDA**.
2. **Stéréologie** : dans le cadre de notre étude, nous souhaitions représenter notre milieu hétérogène en trois dimensions. Or, les grandeurs caractéristiques fournies par les logiciels LANTINUM et ANACONDA étaient bi-dimensionnelles. Pour ce faire, il était nécessaire de pouvoir générer des informations sur des objets 3D (trois dimensions) à partir d'un certain nombre d'informations en 2D. **Dans le cadre de nos travaux de thèse, nous avons utilisé la méthode analytique de Saltykov** (Cf. [SALTYKOV, 1967]) pour extrapoler les distributions bi-dimensionnelles en tailles des phases inclusionnaires aux tri-dimensionnelles. **Nous avons supposé que nos inclusions étaient sphériques, aussi bien pour la phase uranifère que plutonifère.**
3. **Génération du milieu - Validation - Discrétisation** : pour représenter géométriquement le milieu hétérogène et le discrétiser, les travaux suivants ont été réalisés :
 - **Côté représentation géométrique, nous avons développé un outil de génération du milieu hétérogène, type MOX, basé sur un schéma RSA (Random Sequential Absorption) et respectant les conditions de périodicité.**
 - **Côté discrétisation, nous avons discrétisé cette géométrie à l'aide d'un mailleur récemment développé dans la thèse de Blanc** [BLANC, 2009] pour les combustibles à particules des réacteurs HTR. **Nous avons été contraints d'adapter ce mailleur à notre cas d'étude : extension à deux phases inclusionnaires avec des particules de tailles différentes.**
 - **La validation de notre représentation géométrique a été réalisée à l'aide de la covariance appliquée sur les images bi-dimensionnelles numériques et expérimentales. Hormis le biais sur la portée de la covariance, les résultats étaient plutôt satisfaisants compte tenu de l'hypothèse morphologique (sphère).**

Puis, dans cette partie nous nous sommes interrogés sur la représentativité de notre VER. Pour cela plusieurs réalisations de microstructures aléatoires (représentatives du combustible MOX) ont été soumises à des analyses en champs complets. Ces analyses nous ont permis, non seulement d'établir les résultats de référence pour le développement de la méthode NTFA (Cf. partie 3), mais aussi et surtout de déterminer le VER (dimension, phases ...) retenu pour la suite de nos études. En plus du comportement effectif, nous avons également montré que le premier moment et l'écart type de la variable analysée (contrainte équivalente par exemple) étaient quasi invariants d'une microstructure à l'autre.

La deuxième étape de notre travail de thèse, exposée dans la partie 3 de ce mémoire, a été de développer l'approche NTFA pour le comportement local des constituants du combustible MOX en service : visco-élasticité linéaire compressible vieillissant avec déformations libres imposées.

En l'état, la méthode NTFA n'était pas applicable au comportement local des constituants du combustible MOX en service. Les aspects déformations libres et vieillissant étaient des axes d'études qui n'avaient jamais été abordés jusqu'à présent. De plus, la majorité des études NTFA (Cf. [MICHEL and SUQUET, 2003], [ROUSETTE, 2005]) avaient été réalisées en 2D, pour des composites bi-phasés avec des inclusions ayant souvent un comportement élastique, et pour des essais à vitesse de

déformation et à direction de contrainte imposées. **Dans le cadre de cette thèse (Cf. partie 3), nous avons donc étendu la NTFA aux aspects déformations libres et vieillissant pour un composite particulière tridimensionnel (3D) et triphasé.** Pour identifier les modes, nous avons vu qu'en 3D et pour le comportement local étudié (visco-élasticité linéaire compressible vieillissant avec déformations libres imposées) nous considérons 7 trajets de chargements élémentaires. L'orthogonalisation et la sélection des modes prépondérants ont été réalisées par la transformée de *Karhunen-Loève*. Nous avons donc abouti à un modèle à 57 variables internes déviatoriques et 21 variables internes sphériques. Les prédictions de celui-ci par rapport à des calculs de référence en champs complets ont été exposées. Ces analyses ont été menées sur le comportement effectif, sur les comportements moyens par phase et sur les champs locaux, et ce pour différents types d'essais (essais à vitesse de déformation et à direction de contrainte imposées, de fluage, relaxation, tournant). Pour la microstructure ayant servi à identifier les modes, **les résultats ont été très satisfaisants : l'erreur commise par le modèle sur le comportement effectif et moyen par phase était inférieure à 1.%. Concernant les champs locaux dans chaque phase, l'erreur la plus importante commise sur l'écart type de la variable analysée était égale à 6.%. Nous avons également démontré que la vitesse de déformation, ayant servi à identifier les modes, n'avait pas ou peu d'impact sur la prédiction du modèle.** Cette remarque est à prendre avec beaucoup de précaution car elle est a priori fortement dépendante de la loi de comportement locale utilisée. **Des études de sensibilité à la microstructure considérée ont également été présentées. Nous avons montré que la réponse effective, les comportements moyens par phase et les écarts type de la variable analysée localement dans chaque phase étaient quasi indépendants de la microstructure sur laquelle le modèle NTFA avait été identifié. L'erreur maximale absolue commise par le modèle NTFA sur la moyenne des n tirages du premier moment de la variable analysée ne dépassait pas 1.51%, quant à celle commise sur l'écart type, elle ne dépassait pas 8.44%. Finalement, nous pouvons donc affirmer que l'extension de la NTFA au 3D, aux déformations libres et aux aspects vieillissant a été validée avec succès.** De plus, dans cette partie nous avons également présenté deux démarches prospectives : l'une portait sur l'étude de la prise en compte de la non linéarité dans les approches NTFA en 3D pour le comportement local visco-élastique non linéaire incompressible avec déformations libres imposées et l'autre portait sur le développement de méthodes d'optimisation (réduction du nombre de variables internes) des modèles NTFA dans le cas d'un comportement linéaire. En fonctionnement normal, le combustible *MOX* n'a pas un comportement non linéaire. Pour la première démarche prospective, nous sortions donc du cadre de cette thèse et du problème local établi au chapitre 2 paragraphe 2.3. Ce comportement est typiquement celui que le combustible *MOX* subit en fonctionnement dit de classe 2 : transitoire ou rampe de puissance. Ces fonctionnements sont modélisés dans les codes de calculs industriels. Par conséquent, il était intéressant d'étudier la qualité prédictive des approches NTFA pour ce type de comportement. **Pour des essais à vitesse et à direction de contrainte imposées ayant servi ou pas à identifier les modes plastiques, nous avons pu montrer une bonne prédiction du comportement effectif et des comportements moyens par phase du modèle NTFA.** Par contre, nous avons constaté une prédiction des champs locaux de moins bonne qualité que dans les cas des études linéaires. En effet, l'erreur absolue la plus importante commise par le modèle NTFA sur l'écart type de la variable analysée est de l'ordre de 24.0% dans la phase plutonifère. Au final, cette étude a permis de montrer que la non linéarité n'était pas du tout un point bloquant dans les approches NTFA. Si les comportements effectif et moyens par phase sont plutôt bien prédits, la prédiction des champs locaux est bien plus difficile que dans le cas des études linéaires. Néanmoins, par rapport aux modèles analytiques ou semi-analytiques, l'approche NTFA reste particulièrement intéressante. Cette étude, réalisée en fin de thèse, n'est donc pas complète. **En perspective de cette thèse, il serait intéressant d'analyser les prédictions effectives et locales du modèle NTFA pour d'autres essais : fluage, relaxation et essais tournants.** Dans la seconde démarche prospective nous

avons cherché à optimiser (réduction du nombre de variables internes) notre modèle NTFA. Cette phase d'optimisation a été réalisée sur le modèle NTFA exposé dans le chapitre 6 (comportement visco-élastique linéaire incompressible : modèle à 54 variables internes). Deux approches d'optimisation ont été développées dans le cadre de cette thèse :

1. Relaxation du critère numérique de sélection des modes - *Karhunen-Loève* : en relaxant le critère α de 10^{-4} à 10^{-3} , nous sommes passés d'un modèle de 54 variables internes scalaires à 36 variables internes scalaires. **Les prédictions effectives se sont avérées aussi bonnes qu'avec le modèle constitué de 54 variables internes scalaires, tandis que les prédictions des comportements moyens et des champs locaux par phase ont légèrement perdu en précision.**
2. Considération de modes sur tout le VER : dans cette démarche nous avons considéré des modes globaux sur tout le VER et non plus par phase. En appliquant cette démarche, nous sommes passés d'un modèle «complet» de 54 variables internes scalaires à un modèle «réduit» de 15 variables internes scalaires. Ce modèle NTFA optimisée prédit le comportement effectif, les comportements moyens par phase ainsi que les champs locaux avec une aussi bonne précision que le modèle NTFA non optimisé (54 variables internes scalaires). **Nous pouvons donc considérer que ce modèle «réduit» est de loin le plus performant (rapidité et précision).**

La deuxième méthode d'optimisation réduit considérablement le nombre de modes dans le cas de comportement linéaire puisqu'elle est indépendante du nombre de phases. Par conséquent, elle ouvre de nouvelles perspectives de recherche sur l'approche NTFA : réflexion et extension de cette méthode d'optimisation aux comportements non linéaires pour des composites particuliers multi-phasés et extension de la méthode aux polycristaux notamment.

Enfin, **le modèle NTFA, établi en partie 3, remplit donc parfaitement le cahier des charges fixé précédemment. Il est également en parfaite adéquation avec le problème mécanique local établi et il peut également être optimisé en temps de calcul grâce à la méthode d'optimisation présentée précédemment.** Ce modèle peut donc être intégré dans un code de calcul industriel.

Enfin, avant intégration dans un code de structure, nous avons souhaité positionner notre modèle NTFA par rapport au deuxième modèle d'homogénéisation qui avait suscité notre intérêt en première partie : Mori-Tanaka incrémental biphasé développé par [RICAUD and MASSON, 2009] pour simuler le comportement du combustible *MOX* en fonctionnement normal (Cf. [RICAUD and MASSON, 2009]). Ce travail a été réalisé et exposé dans la quatrième partie de ce mémoire de thèse. Ce modèle d'homogénéisation est basé sur un schéma d'homogénéisation dit *Mori-Tanaka* incrémental et est optimisé en temps de calcul (modèle avec un faible nombre de variables internes α). Il donne accès au comportement effectif et moyen par phase. Celui-ci est parfaitement adapté au comportement des constituants du combustible *MOX* en service, mais il ne remplit pas pleinement le cahier des charges fixé. En effet, il ne nous donne pas accès aux champs locaux. Néanmoins, du fait de ses performances (rapidité, précision...) pour les composites particuliers biphasés, nous avons décidé, dans le cadre de cette thèse, de l'étudier et de le comparer théoriquement et numériquement par rapport au modèle NTFA développé dans la partie 3. **Le modèle (Cf. [RICAUD and MASSON, 2009]) étant proposé pour des composites particuliers bi-phasés, nous avons, dans un premier temps, réalisé une extension de celui-ci aux composites particuliers triphasés. Pour cela nous avons considéré le schéma d'homogénéisation de *Hasin-Shtrikman* [HASHIN and SHTRIKMAN, 1963] et nous avons du réévaluer les temps de relaxations effectifs respectifs ($\bar{\tau}_{(HS)i}^m, \bar{\tau}_{(HS)i}^d$) et les amplitudes ($k_{\bar{\tau}_{(HS)i}^m}, \mu_{\bar{\tau}_{(HS)i}^d}$) des modules effectifs $\tilde{k}_{HS}(t)$ et $\tilde{\mu}_{HS}(t)$. En prenant en compte cette troisième phase du combustible *MOX* nous sommes alors passés d'un modèle de 17 à 34 variables internes pour un comportement des constituants : visco-élastique linéaire compressible. Les aspects déformation**

libre et vieillissant ont été résolus de la même façon que dans le cas biphasé, mais par manque de temps nous n'avons pas pu les intégrer dans le modèle «Mori-Tanaka incrémental» triphasé. Puis dans cette quatrième partie, nous avons comparé théoriquement et numériquement ce modèle semi-analytique au modèle NTFA développé dans la partie 3. Pour réaliser la comparaison entre l'approche NTFA et «Mori-Tanaka incrémental» nous avons considéré un comportement simplifié des constituants du combustible MOX : comportement visco-élastique linéaire incompressible. **En comparant les formulations en variables internes, nous avons observé une très grande similitude entre les formulations du comportement effectif de ces deux approches : pour les deux approches, les variables internes tensorielles obéissent à des lois d'évolution similaires (système d'équations différentielles du premier ordre).** La différence majeure entre l'approche NTFA et l'approche «Mori-Tanaka incrémental» vient du fait que les variables internes issues de l'approche NTFA $\underline{\alpha}^{NTFA}(t)$ sont solution d'un système différentiel couplé. Ce terme de couplage est loin d'être négligeable numériquement, ce qui conduit à des variables internes différentes. **En perspective de cette comparaison théorique, il serait intéressant de regarder si les temps de relaxation effectifs obtenus par la méthode «Mori-Tanaka incrémental» ne seraient pas des temps pertinents pour sélectionner les modes plastiques de l'approche NTFA. Pour cela, il faudrait diagonaliser le système (11.17) et comparer ces nouvelles variables internes par rapport au modèle «Mori-Tanaka incrémental». Il serait également intéressant de mener cette comparaison théorique sur le modèle NTFA optimisé, exposé au chapitre 10.** Nous avons réalisé ensuite la comparaison numérique entre les deux approches pour deux essais : fluage et relaxation uniaxiaux. **Pour le composite particulaire bi ou triphasé, nous constatons une très bonne prédiction du comportement effectif et moyen par phase du modèle NTFA par rapport aux éléments finis et ce quel que soit le type d'essais. Pour le composite biphasé, la prédiction effective du modèle semi-analytique «Mori-Tanaka incrémental» biphasé est correcte : un très léger écart du modèle par rapport aux éléments finis est observé pour l'essai de fluage. La prédiction du comportement moyen par phase du modèle est quant à elle correcte dans la phase matricielle mais bien moins bonne dans la phase amas plutonifère. Il est néanmoins important de souligner que la prédiction du comportement moyen par phase reste tout de même de bonne qualité. Pour le composite particulaire triphasé, la prédiction effective du modèle semi-analytique «Mori-Tanaka incrémental» triphasé est bien moins bonne en fluage ou en relaxation si on prend comme milieu de référence la matrice. Par contre on constate une prédiction effective de très bonne qualité en utilisant la borne supérieure du modèle de Hashin et Shtrikman, c'est à dire en considérant comme milieu de référence la phase la plus raide (les inclusions U). Comme pour le comportement effectif, la prédiction du comportement moyen par phase du modèle semi-analytique «Mori-Tanaka incrémental» triphasé est moins bonne en fluage ou en relaxation si on prend comme milieu de référence la matrice. Par contre, on constate toujours une bonne prédiction si on utilise la borne supérieure du modèle de Hashin et Shtrikman.** Ce résultat n'est pas systématique et est réellement propre à notre cas d'étude. On constate donc que la prise en compte de cette troisième phase a réellement eu un impact sur la qualité prédictive de ce modèle «Mori-Tanaka incrémental». La fraction volumique supplémentaire de la phase inclusionnaire uranifère (amas U), le comportement rigide de celle-ci et la déformation hétérogène au sein de cette phase peuvent être à l'origine de cette dégradation. Le VER triphasé considéré contient près de 40 % d'inclusions, ce qui est sans doute élevé pour le modèle de Hashin et Shtrikman. Finalement, pour ce cas d'étude (comportement visco-élastique linéaire incompressible des constituants) et si on utilise le modèle «Mori-Tanaka incrémental» triphasé, nous recommandons de prendre comme milieu de référence la phase la plus raide pour simuler correctement le comportement effectif et moyen par phase du combustible MOX ADU.

Les deux approches NTFA et «Mori-Tanaka incrémental» sont deux méthodes très performantes en temps de calcul et donc très intéressantes à intégrer dans des codes de calculs industriels. **L'approche NTFA est la plus précise du point de vue du comportement effectif et moyen par phase. De plus, elle nous donne accès à une information supplémentaire : les champs locaux. Mais, il est important de souligner que l'approche «Mori-Tanaka incrémental», nécessite beaucoup moins de travail en amont que l'approche NTFA.** En effet, pour l'approche NTFA la phase d'identification des modes est un travail numérique très lourd et très coûteux. Par conséquent, nous pouvons conclure en affirmant que **le choix d'intégration de l'une ou l'autre approche dans un code de structure sera souvent gouverné par le degré de précision et d'informations souhaitées par l'utilisateur mais également par le temps de travail amont disponible.**

Et outre les perspectives citées dans cette conclusion, on envisage à présent d'intégrer ces deux approches dans les codes de simulation des crayons combustibles (CYRANO3 code EDF et ALCYONE code CEA), de les coupler aux modèles de physico-chimie et de réaliser des études comparatives sur les différentes microstructures *MOX* envisagées dans les futures gestions combustibles : Parité MOX Nouvelle Teneur (PMOX-NT), Parité MOX Nouvelle Teneur Voie Sèche (PMOX-NT VS) ...

RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

Publications et communications personnelles

- BLANC, V., BARBIE, L., LARGENTON, R., and MASSON, R. (2011). Homogenization of linear viscoelastic three phase media : Internal variable formulation versus full-field computation. ICM11.
- LARGENTON, R., BLANC, V., BARON, D., and THEVENIN, P. (2010). Simulation and modelling the heterogeneous effects of the microstructure mox fuels on their effective properties in nominal pressure water reactor conditions. *Advances in Science and Technology*, 73 :91–96. CIMTEC Congress 5th Forum on New Materials, Session FF-5 :L05 Nuclear Fuel Materials.
- LARGENTON, R., MICHEL, J.-C., SUQUET, P., and MASSON, R. (2011a). Modélisation du comportement effectif du combustible mox par une analyse micro-mécanique en champs de transformation non uniforme. *Mécanique et Industries*, 12 :175–181.
- LARGENTON, R., MICHEL, J.-C., SUQUET, P., and MASSON, R. (2011b). Modélisation du comportement effectif du combustible mox par une analyse micro-mécanique en champs de transformation non uniforme. CSMA 10ème Colloque National en Calcul des Structures Presqu’île de Giens.
- LARGENTON, R., MICHEL, J.-C., SUQUET, P., and MASSON, R. (2011c). Modélisation du comportement effectif du combustible mox par une analyse micro-mécanique en champs de transformation non uniforme. CFM 20ème Congrès Français de Mécanique Besançon.
- SUQUET, P., LARGENTON, R., and MICHEL, J.-C. (2012). Plastic strain heterogeneity in composite materials and the nonuniform transformation field analysis. Euromech 537 Université Paris Est, Marne-La-Vallée.

Partie 1 : état de l'art sur le combustible MOX et les modèles d'homogénéisation

Le Réacteur à Eau Pressurisée

- [BAILLY et al., 1996] BAILLY, H., MÉNESSIER, D., and PRUNIER, C. (1996). *Le combustible nucléaire des réacteurs à eau sous pression et des réacteurs à neutrons rapides*. Série synthèses. CEA.
- [BARON, 2002] BARON, D. (2002). Notions de physique nucléaire et application aux réacteurs. Cours de l'école de Centrale Nantes, EDF.
- [BARON and BOUFFIOUX, 2002] BARON, D. and BOUFFIOUX, P. (2002). Le crayon combustible des réacteurs à eau pressurisée de grande puissance (tranches 900 et 1300 mwe. Cours de l'école de Centrale Nantes, EDF.

Fabrication

- [BELVA et al., 2007] BELVA, E., MARTINEZ, M.-A., AUFORE, L., and CHESNÉ, Y. (2007). Caractérisations microstructurales du lot mox industriel vierge parité mox haute teneur (9,77 % en pu/(u+pu)). communication interne.
- [DUBOIS, 2000] DUBOIS, S. (2000). Modélisation du procédé de fabrication du combustible mox. communication interne.
- [GOTTA, 1996] GOTTA, M.-J. (1996). Évolution de la microstructure du mox en liaison avec le développement des procédés de fabrication. communication interne.
- [GOTTA, 1999] GOTTA, M.-J. (1999). Connaissances des mox industriels : microstructure et densification. communication interne.
- [GUERIN et al., 1997] GUERIN, Y., LESPIAUX, D., and STRUZIK, C. (1997). Comportement sous irradiation des combustibles mox. communication interne.
- [HORN, 1990] HORN, R. (1990). Surface forces and their action in ceramic materials. *Journal of American Ceramic Society*, 73[5] :1117–1135.
- [WHITE et al., 2001] WHITE, R.-J., FISHER, S.-B., COOK, P.-M.-A., STRATTON, R., WALKER, C.-T., and PALMER, I.-D. (2001). Measurement and analysis of fission gaz release from bnf's sbr mox fuel. *Journal of nuclear materials (JNM)*, 228 :43–56.

Représentation numérique du comportement du crayon combustible

- [BARON et al., 1997] BARON, D., RUCK, J.-M., COUTY, J.-C., and BONNIÈRES, P. D. (1997). Cyrano3 : un logiciel de nouvelle génération pour simuler le comportement des crayons combustible en réacteur. *Epure*, 55 :29–40.
- [DIARD, 2001] DIARD, O. (2001). *Un exemple de couplage, comportement-environnement, dans les polycristaux - Application à l'interaction pastille Gaine*. PhD thesis, ENSMP, Paris.

Mécanismes au sein du combustible MOX

Densification

- [BLANPAIN et al.,] BLANPAIN, P., THIBAUT, X., and PAGÈS, J.-P. Recent results from the in-reactor mox fuel performance in france and improvement program. proceedings of the ANS International Topical Meeting on Light Water Reactor Fuel Performance, Porland, Oregon, USA, March 1997.
- [BOULORÉ, 2001] BOULORÉ, A. (15 mars 2001). *Étude et modélisation de la densification en pile des oxydes nucléaires UO₂ et MOX*. PhD thesis, thèse de l'Institut national polytechnique de Grenoble (INPG) et de l'École nationale supérieure des Mines de Saint-Étienne.
- [GARCIA et al., 2000] GARCIA, P., BOULORÉ, A., GUÉRIN, Y., TROTABAS, M., and GOEURIOT, P. (April 2000). In-pile densification of mox fuels in relation with their initial microstructure. Park City. ANS Conference proceedings, Park City, April 2000.

Gonflement Solide

- [ANSELIN, 1969] ANSELIN, F. (1969). The role of fission products in the swelling of irradiated uo₂ and (u-pu)₂ fuel. *GEAP*, (5583).
- [HARISSON and DAVIS, 1968] HARISSON, J.-W. and DAVIS, L.-M. (1968). The variation of solid fission product and gas swelling in uranium compounds with thermal neutron dose rate. *Journal of Nuclear Materials*, 27.

Restructuration

- [BOULORE, 2004a] BOULORE, A. (2004a). Dossier de validation du modèle margaret v3.2 pour les combustibles hétérogènes dans les situations d'irradiation de base, de rampes et de recuits thermiques. Technical report, CEA. Note Technique SESC/LSC 05-025 indice 0 septembre 2005.
- [BOULORE, 2004b] BOULORE, A. (2004b). Spécification physique et informatique du modèle de comportement des gaz de fission dans les combustibles hétérogène margaret. Technical report, CEA. Note Technique SESC/LSC 04-0140 indice 0 mai 2004.
- [LEMOINE and BARON, 2009] LEMOINE, F. and BARON, D. (2009). Structures haut taux de combustion dans les combustibles oxydes : Observations expérimentales et mécanismes de formation. Technical report, CEA, EDF. Note Technique SESC/LIPA 09-013 (DR) - indice 0.
- [NOIROT et al., 1998] NOIROT, J., PASQUET, B., ROCHAS, I., and CUISSET, V. (1998). Étude à la microsonde et au meb de la zone rim sur des combustibles irradiés 4 et 5 cycles à gravelines. Communication interne.
- [NOIROT, 2005] NOIROT, L. (2005). Description physique et numérique du modèle de gaz applicable à chaque milieu homogène d'un combustible uo₂ ou mox. Technical report, CEA. Note Technique SESC/LSC 04-040 indice 0 mai 2005.

Fluage induit par l'irradiation

- [GATT, 2004] GATT, J.-M. (2004). Comportement thermomécanique du combustible sous irradiation. Technical report, CEA. Note Technique SESC/LLCC 04-005 - indice 0.

Principe de la méthode de changement d'échelles et modèles d'homogénéisation en adéquation avec le comportement du combustible MOX en service

Principe de la méthode de changement d'échelles

- [BLANC et al., 2007] BLANC, V., MICHEL, B., RICAUD, J.-M., GARAJEU, M., and MICHEL, J.-C. (2007). Modélisation du comportement des combustibles à particules : caractérisation d'un volume Élémentaire représentatif pour un milieu hétérogène aléatoire. *In 18ème Congrès Français de Mécanique, Grenoble*.
- [BORNERT et al., 2001a] BORNERT, M., BRETHERAU, T., GILORMINI, P., JEULIN, D., MICHEL, J.-C., MOULINEC, H., SUQUET, P., and A.ZAOUI (2001a). *Mécanique et Ingénierie des Matériaux - Homogénéisation en mécanique des matériaux 1 - Matériaux aléatoires élastiques et milieux périodiques*. Hermes Science. Chapitre 1. Changement d'échelle : motivation et méthodologie par A. ZAOUI.
- [BORNERT et al., 2001b] BORNERT, M., BRETHERAU, T., GILORMINI, P., JEULIN, D., MICHEL, J.-C., MOULINEC, H., SUQUET, P., and A.ZAOUI (2001b). *Mécanique et Ingénierie des Matériaux - Homogénéisation en mécanique des matériaux 1 - Matériaux aléatoires élastiques et milieux périodiques*. Hermes Science. Chapitre 2. Théorie des modules effectifs par J.-C MICHEL.
- [FOREST, 2004] FOREST, S. (2004). *Milieux continus généralisés et matériaux hétérogènes*. PhD thesis, École Nationale Supérieure des Mines de Paris.
- [KANIT et al., 2003] KANIT, T., FOREST, S., GALLIET, I., MOUNOURY, V., and JEULIN, D. (2003). Determination of the size of the representative volume element for random composites : statistical and numerical approach. *International Journal of Solids and Structures*, 40 :3647–3679.
- [PIERARD et al., 2007] PIERARD, O., LLORCA, J., SEGURADO, J., and DOGHRI, I. (2007). Micromechanics of particle-reinforced elasto-viscoplastic composites : finite element simulations versus affine homogenization. *International Journal of Plasticity*, 23 :1041–1060.
- [SEGURADO and LLORCA, 2006] SEGURADO, J. and LLORCA, J. (2006). Computational micromechanics of composites : the effect of particle spatial distribution. *Mechanics of Materials*, 38 :873–883.
- [SUQUET, 1987] SUQUET, P. (1987). Elements of homogenization for inelastic solid mechanics. *In E.SANCHEZ-PALENCIA and A.ZAOUI, eds, Homogenization Techniques for Composite, Media*, volume 272 of Lecture Notes in Physics :193–278. Springer, Berlin.

Méthodes d'homogénéisation analytiques linéaires basées sur le principe d'Eshelby

- [BORNERT, 1996] BORNERT, M. (1996). *Morphologie microstructurale et comportement mécanique ; caractérisations expérimentales, approches par bornes et estimations autocohérentes généralisées*. PhD thesis, Thèse de doctorat, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées.
- [BORNERT et al., 2001] BORNERT, M., BRETHERAU, T., GILORMINI, P., JEULIN, D., MICHEL, J.-C., MOULINEC, H., SUQUET, P., and A.ZAOUI (2001). *Mécanique et Ingénierie des Matériaux - Homogénéisation en mécanique des matériaux 1 - Matériaux aléatoires élastiques et milieux périodiques*. Hermes Science. Chapitre 5. Homogénéisation des milieux aléatoires : bornes et estimations par M. BORNERT.
- [CHRISTENSEN, 1979] CHRISTENSEN, R.-M. (1979). *Mechanics of composite materials*. Wiley and sons. New York.

- [ESHELBY, 1957] ESHELBY, J.-D. (1957). The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion and related problems. *Proceeding of the Royal Society A*, 421 :376–396.
- [ESHELBY, 1961] ESHELBY, J.-D. (1961). Elastic inclusions and inhomogeneities. *In Progress in Solid Mechanics 2*, eds I. N. Sneddon and R. Hill, pages 89–140.
- [HILL, 1965] HILL, R. (1965). Continuum micro-mechanics of elastoplastic polycrystals. *J. Mech Phys. Solids*, 13 :89–101.
- [JEULIN, 2002] JEULIN, D. (2002). Morphology of condensed matter, chapter spatial statistics and micromechanics of materials. *Springer, Netherlands*, pages 3–36.
- [KRÖNER, 1958] KRÖNER, E. (1958). Berechnung der elastischen konstanten des vielkristall aus den konstanten des einkristalls. *Z. Physics*, 151 :504.
- [MORI and TANAKA, 1973] MORI, T. and TANAKA, K. (1973). Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions. *Acta Metall Mater*, 21 :597–629.
- [TORQUATO, 1991] TORQUATO, S. (1991). Random heterogeneous media : microstructure and improved bounds on effective properties. *Applied Mechanics Reviews*, 44 :37–76.
- [TORQUATO, 1997] TORQUATO, S. (1997). Effective stiffness tensor of composite media : I. exact series expansions. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 45 :1421–1448.
- [TORQUATO, 1998] TORQUATO, S. (1998). Effective stiffness tensor of composite media : II. application to isotropic dispersions. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 46 :1411–1440.
- [TORQUATO, 2002] TORQUATO, S. (2002). Random heterogeneous materials - microstructure and macroscopic properties. *Springer*.
- [WILLIS, 1981] WILLIS, J.-R. (1981). Variational and related methods for the overall properties of composites. *Adv Appl Mech*, 21 :1–78.

Méthodes d’homogénéisation analytiques linéaires : Bornes - Encadrements

- [HASHIN, 1962] HASHIN, Z. (1962). The elastic moduli of heterogeneous materials. *J. Appl. Mech*, 29 :143–150.
- [HASHIN and SHTRIKMAN, 1963] HASHIN, Z. and SHTRIKMAN, S. (1963). A variational approach to the theory of the elastic behaviour of multiphase materials. *J. Mech. Phys. Solids*, 11 :127–140.
- [PAUL, 1960] PAUL, B. (1960). Prediction of elastic constant of multiphase materials. *Trans A.S.M.E*, 218 :36–41.

Les matériaux standard généralisés

- [HALPHEN and NGUYEN, 1975] HALPHEN, B. and NGUYEN, Q.-S. (1975). Sur les matériaux standard généralisés. *Journal de Mécanique*, 14 :36–63.
- [MICHEL et al., 2000] MICHEL, J.-C., GALVANETTO, U., and SUQUET, P. (2000). Constitutive relation involving internal variables based on micromechanical analysis. *In Continuum Thermomechanics*, G.A Maugin, H. Drouot and F. Sidoroff (Eds), pages 301–312. Netherlands.
- [SUQUET, 1987] SUQUET, P. (1987). Éléments of homogénéisation for inelastic solid mechanics. *In Homogenization Techniques for Composites Media*, E. Sanchez-Palencia and A. Zaoui (eds), pages 193–278. Springer Verlag, New York, tome 272 de Lecture Notes in Physics.

Méthode d'homogénéisation, « Mori-Tanaka incrémental »

- [BLANC et al., 2011] BLANC, V., BARBIE, L., LARGENTON, R., and MASSON, R. (2011). Homogenization of linear viscoelastic three phase media : Internal variable formulation versus full-field computation. ICM11.
- [BLANC et al., 2009] BLANC, V., MASSON, R., and MICHEL, B. (2009). Intégration de la loi. Technical report, CEA. Note Technique SESC/LSC 09-0XX - Indice 0 - 2009.
- [CHRISTENSEN, 1969] CHRISTENSEN, R.-M. (1969). Viscoelastic properties of heterogeneous media. *J. Mech. Phys. Solids*, 17 :23–41.
- [FRANCOIS et al., 1993] FRANCOIS, A., PINEAU, A., and ZAOUI, A. (1991-1993). Comportement mécanique des matériaux. *Hermès, Volume I, Paris*.
- [LAHELLEC and SUQUET, 2007] LAHELLEC, N. and SUQUET, P. (2007). Effective behavior of linear viscoelastic composites : a time integration approach. *Int. J. Solids Struct*, 44 :507–529.
- [MANDEL, 1966] MANDEL, J. (1966). Cours de mécanique des milieux continus. *Gauthier-Villars Paris*.
- [MANDEL, 1974] MANDEL, J. (1974). Un principe de correspondance pour les corps viscoélastiques linéaires vieillissant. In : *Hult, J. (Ed), Mechanics of Visco-Elastic Media and Bodies. Springer, Berlin*, pages 44–55.
- [RICAUD, 2007] RICAUD, J.-M. (2007). Plan de développement logiciel pour le couplage me-teor/margaret dans le cadre de l'étude des combustibles mox. Technical report, CEA. Note Technique CEA Cadarache SESC/LSC 07-008 - Indice 0 - avril 2007.
- [RICAUD and MASSON, 2008] RICAUD, J.-M. and MASSON, R. (2008). Dossier de spécifications physiques et numériques d'une loi de comportement hétérogène couplée mécanique / margaret pour les combustibles mox. Technical report, CEA. Note Technique CEA Cadarache SESC/LSC 08-044 - Indice 0 - Octobre 2008.
- [RICAUD and MASSON, 2009] RICAUD, J.-M. and MASSON, R. (2009). Effective properties of linear viscoelastic heterogeneous media : Internal variables formulation and extension to ageing behaviours. *International Journal of Solids and Structures*, 46 :1599–1606.
- [SCHAPERLY, 1962] SCHAPERLY, R. (1962). Approximate methods of transform inversion for viscoelastic stress analysis. In : *US. Nat. Congr. Appl. Mech ASME 4th*, 2 :1075–1085.

Méthodes d'homogénéisation, les approches en champs de transformation

- [BERVEILLER et al., 2001] BERVEILLER, M., BESSON, J., BORNERT, M., BRETHEAU, T., CHABOCHE, J.-L., FOUGERES, R., GAUTIER, E., GILORMINI, P., MAIRE, E., SUQUET, P., and A.ZAOUI (2001). *Mécanique et Ingénierie des Matériaux - Homogénéisation en mécanique des matériaux 2 - Comportements non linéaires et problèmes ouverts*. Hermes Science. Chapitre 5. Rappels de calcul tensoriel et d'élasticité par P. SUQUET et M. BORNERT.
- [BORNERT et al., 2001] BORNERT, M., BRETHEAU, T., GILORMINI, P., JEULIN, D., MICHEL, J.-C., MOULINEC, H., SUQUET, P., and A.ZAOUI (2001). *Mécanique et Ingénierie des Matériaux - Homogénéisation en mécanique des matériaux 1 - Matériaux aléatoires élastiques et milieux périodiques*. Hermes Science. Chapitre 3. Composites à microstructure périodique par J.-C. MICHEL et H. MOULINEC et P. SUQUET.
- [CHABOCHE et al., 2001] CHABOCHE, J.-L., KRUCH, S., MAIRE, J.-F., and POTTIER, T. (2001). Towards a micromechanics based inelastic and damage modelling composites. *International Journal of Plasticity*, 17 :411–439.

- [DUVA and HUTCHINSON, 1984] DUVA, J.-M. and HUTCHINSON, J.-W. (1984). Constitutive potentials for dilutely voided nonlinear materials. *Mechanics of Materials*, 3 :41–54.
- [DVORAK, 1992] DVORAK, G.-J. (1992). Transformation field analysis of inelastic composite materials. *Proceedings of the Royal Society of London A*, 437 :311–327.
- [DVORAK et al., 1994] DVORAK, G.-J., BAHEI-EL-DIN, Y., and Wafa, A. (1994). The modelling of inelastic composite materials with the transformation field analysis. *Model. Simulat. Mater. Sci. Eng.*, 2 :571–586.
- [DVORAK and BENVENISTE, 1992] DVORAK, G.-J. and BENVENISTE, Y. (1992). On transformation strains and uniform fields in multiphase elastic media. *Proceedings of the Royal Society of London A*, 437 :291–310.
- [FRITZEN and BOHLKE, 2010] FRITZEN, F. and BOHLKE, T. (2010). Three-dimensional finite element implementation of the nonuniform transformation field analysis. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 84 :803–829.
- [FRITZEN and BOHLKE, 2011] FRITZEN, F. and BOHLKE, T. (2011). Nonuniform transformation field analysis of materials with morphological anisotropy. *Composites Science and Technology*. doi :10.1016/j.compscitech.2010.12.013.
- [MICHEL et al., 2000] MICHEL, J.-C., GALVANETTO, U., and SUQUET, P. (2000). Constitutive relation involving internal variables based on micromechanical analysis. In *Continuum Thermomechanics*, G.A Maugin, H. Drouot and F. Sidoroff (Eds), pages 301–312. Netherlands.
- [MICHEL and SUQUET, 2003] MICHEL, J.-C. and SUQUET, P. (2003). Nonuniform transformation field analysis. *International Journal of Solids and Structures*, 40 :6937–6955.
- [MICHEL and SUQUET, 2004] MICHEL, J.-C. and SUQUET, P. (2004). Computational analysis of nonlinear composite structures using the nonuniform transformation field analysis. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 193 :5477–5502.
- [MICHEL and SUQUET, 2007] MICHEL, J.-C. and SUQUET, P. (2007). Nonuniform transformation field analysis : a reduced model for multiscale nonlinear problems in solid mechanics. In F. ALIABADI and U. GALVANETTO, editors «*Multiscale Modelling in Solid Mechanics - Computational Approaches*», Chapter 4 :46 pages. To be published by Imperial College Press.
- [ROUSETTE, 2005] ROUSETTE, S. (2005). *Analyse par champs de transformation de matériaux élastoviscoplastiques multiphasés – Application aux combustibles MOX*. PhD thesis, Thèse de Doctorat de l’Université de la Méditerranée. Bourse CEA-EDF Dir. de thèse J.-C. MICHEL Co-encadrant CEA : J.-M. GATT.

Partie 2 : Représentation et analyse en champ complet d’un composite multiphasé particulaire

Représentation 3D de la microstructure : méthodologie et outils développés

Acquisition et traitement de l’image

- [AUFORÉ, 2004] AUFORÉ, L. (2004). Recommandation pour la caractérisation microstructurale des mox standards et avancés : état de réflexion sur les grandeurs caractéristiques pertinentes. Technical report, CEA. Note Technique LMPC 2004-061 CEA Cadarache.
- [OUDINET, 2003] OUDINET, G. (24 mars 2003). *Analyse d’images et modélisation 2D/3D de la microstructure du combustible MOX*. PhD thesis, Université Jean Monnet - Saint Étienne.

[OUDINET et al., 2000] OUDINET, G., MUNOZ, I., and CHESNE, Y. (2000). Développement de méthodes d'analyse semi-quantitatives à la microsonde électronique. Technical report, CEA. Note technique LCN 2000-121 CEA Cadarache.

Stéréologie

- [A.CAUCHY, 1850] A.CAUCHY (1850). *Mémoire sur la rectification des courbes et la quadrature des surfaces courbes*. PhD thesis, Mémoire de l'Académie des sciences, Paris.
- [CHAROLAIS et al., 1997] CHAROLAIS, F., BAUER, M., COSTER, M., JEULIN, D., and TROTABAS, M. (1997). Modelling the structure of a nuclear ceramic obtained by solid phase sintering. *Acta stereologica*, 16(3) :315–321.
- [CHERMANT, 1999] CHERMANT, J.-L. (1999). Morphology of ceramic matrix composites. *Key Engineering materials*, 164-165 :429–434.
- [CRUZ-ORIVE, 1978] CRUZ-ORIVE, L. (1978). *Journal Microscopy*, 112 :153.
- [CRUZ-ORIVE, 1983] CRUZ-ORIVE, L. (1983). Distribution-free estimation of sphere size distributions from slabs showing overprojection and truncation, with a review of previous methods. *Journal of microscopy*, 131 :265–290.
- [GUNDERSEN and JENSEN, 1987] GUNDERSEN, H. and JENSEN, E. (1987). The efficiency of systematic sampling in stereology and its prediction. *Journal of microscopy*, 147 :229–263.
- [HARAYAMA, 1985] HARAYAMA, Y. (1985). Determining the size distribution of spherical particles dispersed in a material from the measured diameter distribution of sections on a sample plane. *Res mechanica*, 16 :263–277.
- [Holland, 1975] Holland, J.-H. (1975). Adaptation in natural and artificial systems. *University of Michigan Press*.
- [KARLSSON and CRUZ-ORIVE,] KARLSSON, L. and CRUZ-ORIVE, L. Estimation of pore size in aluminium using the dissector, the selector and cavalieri's principle. *Micon 90 : advances in video technology for microstructural control*, ASTM STP 1094 :277–291.
- [KARLSSON and CRUZ-ORIVE, 1997] KARLSSON, L. and CRUZ-ORIVE, L. (1997). Estimation of mean particle size from single sections. *Journal of Microscopy*, 186 :121–132.
- [KARLSSON and CRUZ-ORIVE, 1992] KARLSSON, L. and CRUZ-ORIVE, L. (1992). The new stereological tools in metallography : estimation of pore size and number in aluminium. *Journal of microscopy*, 165 :391–415.
- [LANTUEJOUL, 1980] LANTUEJOUL, C. (1980). *Microscopica Acta*, S4, 266, Vienne.
- [MATHERON, 1967] MATHERON, G. (1967). Morphologie mathématique et granulométries en place. Technical report, Ecole de Morphologie Mathématique de Fontainebleau. Note 70.
- [MILES, 1974] MILES, R.-E. (1974). Stochastic geometry. John Wiley and sons, New York.
- [MITCHELL, 1996] MITCHELL, M. (1996). An introduction to genetic algorithm. *MIT Press*.
- [OUDINET et al., 2001] OUDINET, G., MUNOZ, I., and BECKER, J.-M. (2001). A genetic algorithm for the modeling of plutonium particles distribution in a nuclear fuel. *8th european congress for stereology and image analysis (ECS-IA)*.
- [R.DEHOFF and RHINES, 1961] R.DEHOFF and RHINES, F. (1961). Determination of number of particles per unit volume from measurements made on random plane sections : the general cylinder and the ellipsoid. *Transactions of the metallurgical society of AIME*, 221 :975–982.

- [R.MICHEL and L.CRUZ-ORIVE, 1988] R.MICHEL and L.CRUZ-ORIVE (1988). Application of the cavalieri principe and vertical sections method to lung : estimation of volume and pleural surface area. *Journal of microscopy*, 150 :117–136.
- [SALTYKOV, 1967] SALTYKOV, S. (1967). The determination of the size distribution of particles in an opaque material from a measurement of the size distribution of their sections. Stereology proceedings of the second International congress for stereology, Chicago.
- [SCHEIL, 1931] SCHEIL, E. (1931). Die berechnung der anzahl und grossenverteilung kugelformiger kristalle in undurchsichtigen körpern mit hilfe der durch einen ebenen schnitt erhaltenen schittkreise. *Z. Anorg Allgem Chem*, 201 :259.
- [SCHEIL, 1935] SCHEIL, E. (1935). Statistische gefügeuntersuchungen i. *Z. Metallk*, 27 :199.
- [VERWERFT, 2000] VERWERFT, M. (2000). Multiple voltage electron probe microanalysis of fission gaz bubbles in irradiated nuclear fuel. *Journal of nuclear materials (JNM)*, 282 :97–111.
- [WATSON, 1971] WATSON, G. (1971). Estimating functionals of particle size distributions. *Biometrika*, 58(3) :483–490.
- [ZHANG et al., 1999] ZHANG, Y., INOUE, M., UCHIDA, N., and UEMATSU, K. (1999). Characterization of processing pores and their relevance to the strength in the alumina ceramics. *J. Mater. Res.*, 14(8).

Modèles de génération de microstructures aléatoires à inclusions sphériques

- [BLANC, 2009] BLANC, V. (2009). *Modélisation du comportement thermomécanique des combustibles à particules par une approche multi-échelle*. PhD thesis, Université de Provence en Mécanique du Solide.
- [BOHM and HAN, 2001] BOHM, H.-J. and HAN, W. (2001). Comparisons between three-dimensional and two dimensional multi-particle unit cell models for particle reinforced metal matrix composites. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 9 :47–65.
- [BORNERT et al., 2000] BORNERT, M., BRETHERAU, T., GILORMINI, P., JEULIN, D., MICHEL, J.-C., MOULINEC, H., SUQUET, P., and A.ZAOUI (2000). *Mécanique et Ingénierie des Matériaux - Homogénéisation en mécanique des matériaux 1 - Matériaux aléatoires élastiques et milieux périodiques*. Hermes Science. Chapitre 4. Caractérisation morphologique et modèles de structures aléatoires par D. JEULIN.
- [COOPER, 1988] COOPER, D.-W. (1988). Random-sequential-packing simulations in three dimensions for spheres. *Physical Review A*, 38 :522–524.
- [EVANS, 1993] EVANS, J.-W. (1993). Random and cooperative sequential adsorption. *Reviews of Modern Physics*, 65 :1281–1329.
- [FEDER, 1980] FEDER, J. (1980). Random sequential adsorption. *Journal of Theoretical Biology*, 87 :237–254.
- [GUSEV, 1997] GUSEV, A.-A. (1997). Representative volume element size for elastic composites - a numerical study. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 45 :1449–1459.
- [GUSEV et al., 2000] GUSEV, A.-A., HINE, P.-J., and WARD, I.-M. (2000). Fiber packing and elastic properties of a transversely random unidirectional glass epoxy composite. *Composites Science and Technology*, 60 :535–541.
- [HINRICHSEN et al., 1986] HINRICHSEN, E.-L., FEDER, J., and JOSSANG, T. (1986). Geometry of random sequential adsorption. *Journal of Statistical Physics*, 44 :783–827.

- [KANIT et al., 2003] KANIT, T., FOREST, S., GALLIET, I., MOUNOURY, V., and JEULIN, D. (2003). Determination of the size of the representative volume element for random composites : statistical and numerical approach. *International Journal of Solids and Structures*, 40 :3647–3679.
- [LIPPMANN et al., 1997] LIPPMANN, N., STEINKOPFF, T., SCHMAUDER, S., and P.GUMBSCH (1997). 3d-finite-element-modelling of microstructures with the method of multiphase elements. *Computational Materials Science*, 9 :28–35.
- [RINTOUL and TORQUATO, 1997] RINTOUL, M.-D. and TORQUATO, S. (1997). Reconstruction of the structure of dispersions. *Journal of Colloid and Interface Science*, 186 :467–476.
- [SEGURADO and LLORCA, 2002] SEGURADO, J. and LLORCA, J. (2002). A numerical approximation to the elastic properties of sphere-reinforced composites. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 50 :2107–2121.
- [SHERWOOD, 1997] SHERWOOD, J.-D. (1997). Packing of spheroids in three-dimensional space by random sequential addition. *Journal of Physics A : Mathematical and General*, 30 :L839–L843.
- [STEINKOPFF and SAUTTER, 95 Aa] STEINKOPFF, T. and SAUTTER, M. (1995 Aa). Simulating the elasto-plastic behavior of multiphase materials by advanced finite element techniques. part i : a rezoning technique and the multiphase element method. *Computational Material Science*, 4 :10–14.
- [STEINKOPFF and SAUTTER, 95 Ab] STEINKOPFF, T. and SAUTTER, M. (1995 Ab). Simulating the elasto-plastic behavior of multiphase materials by advanced finite element techniques. part ii : simulation of the deformation behavior of ag-ni composites. *Computational Material Science*, 4 :15–22.
- [TANEMURA, 1981] TANEMURA, M. (1981). On random complete parking of spheres in 2d and 3d spaces. *In Proceedings of the International Roundtable Congress*, pages 216–229. 50-th Anniversary of Japan Statistical Society.
- [TANEMURA, 1988a] TANEMURA, M. (1988a). On the density of strict random complete parking by discs : Research memorandum. *The institute of Statistical Mathematics*, 339 :1–24.
- [TANEMURA, 1988b] TANEMURA, M. (1988b). Random packing and random tessellation in relation to the dimension of space. *Journal of Microscopy*, 151 :247–255.
- [TORQUATO, 2002] TORQUATO, S. (2002). Random heterogeneous materials - microstructure and macroscopic properties. *Springer*.
- [TOULEMONDE et al., 2008] TOULEMONDE, C., MASSON, R., and EL-GHARIB, J. (2008). Modelling the effective elastic behavior of composites : a mixed finite element and homogenisation approach. *Comptes Rendus Mécaniques*, 336/3 :275–282.
- [WIDOM, 1966] WIDOM, B. (1966). Random sequential addition of hard spheres to a volume. *The Journal of Chemical Physics*, 44 :3888–3894.

Caractérisation morphologique du milieu hétérogène

- [MATHERON, 1967] MATHERON, G. (1967). *Éléments pour une théorie des milieux poreux*. Masson et Cie.

Outils numériques utilisés

- [<http://www.cast3m.cea.fr>,] <http://www.cast3m.cea.fr>.

- [<http://www.hpfem.jku.at/netgen/>,] <http://www.hpfem.jku.at/netgen/>.
- [<http://www.python.org>,] <http://www.python.org>. PYTHON 2.5.2.
- [<http://www.salome-plaform.fr>,] <http://www.salome-plaform.fr>. SALOME 4.1.
- [KANIT et al., 2003] KANIT, T., FOREST, S., GALLIET, I., Mounoury, V., and JEULIN, D. (2003). Determination of the size of the representative volume element for random composites : statistical and numerical approach. *Int. J. Solids Structures*.
- [STAWIASKI, 2005] STAWIASKI, J. (2005). Caractérisation et modélisation 2d/3d du combustible MOX par analyse d'image. Technical report, CEA. Note Technique LMPC 2005-072.

ANNEXES

Annexe A

Annexe 1 : Thermique et élasticité homogène au sein d'un *MOX* biphasé

Sommaire

A.1 Données amont aux études	270
A.1.1 Choix des microstructures	270
A.1.2 Facteurs d'hétérogénéités	270
A.1.3 Conditions aux limites périodiques	272
A.1.4 Conclusion	272
A.2 Analyse de l'aspect homogène ou hétérogène	273
A.2.1 Etude thermique linéaire avec sources	273
A.2.2 Etude élastique linéaire	285
A.3 Conclusion	294

A.1 Données amont aux études

A.1.1 Choix des microstructures

Pour réaliser ces études nous avons décidé de simplifier la représentation numérique tri-dimensionnelle du combustible *MOX* MIMAS ADU. En effet, uniquement la phase inclusionnaire plutonifère $(U - Pu)O_2$ sera représentée. Nous sommes donc plus proche d'un combustible *MOX* MIMAS AUC (Cf. chapitre 1 paragraphe 1.2). Le choix de cette phase n'est pas anodin : elle subit le taux de combustion le plus élevé et voit donc l'ensemble des mécanismes, présentés au chapitre 2, être exacerbés. La phase inclusionnaire uranifère UO_2 fera donc partie intégrante de la matrice. Les propriétés matériaux et le comportement de cette matrice bis seront mis à jour en conséquence.

Pour étudier l'influence de la distribution et de la taille des inclusions sur le comportement local et effectif du combustible *MOX*, nous avons généré les trois VER présentés sur la figure A.1.

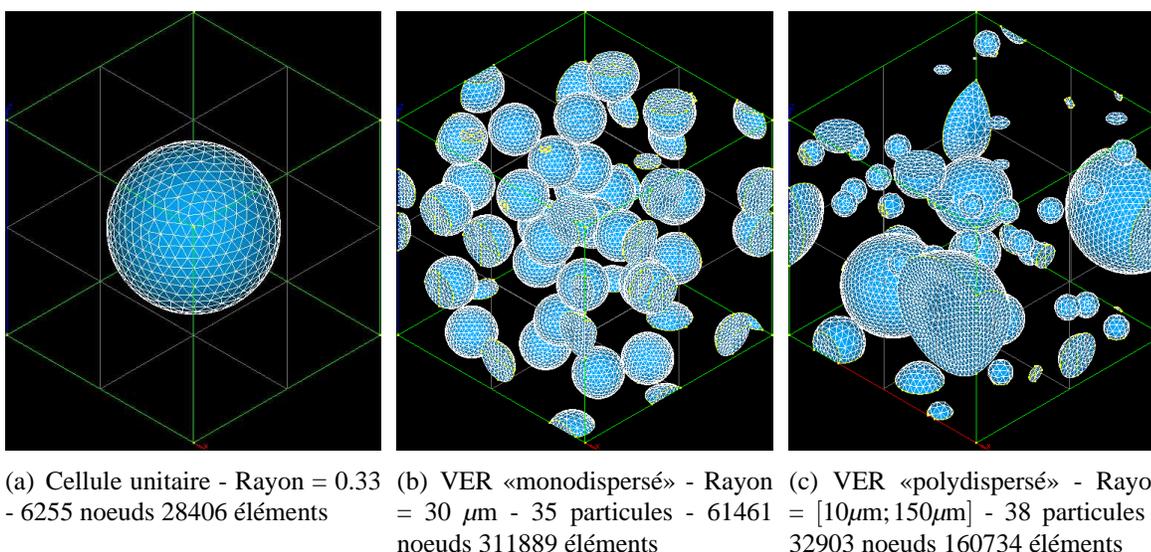


FIG. A.1: Maillage périodique des VER - 1 seule phase inclusionnaire amas plutonifère $(U - Pu)O_2$ - Tétraèdres à 4 noeuds - Fraction volumique = 15 %

Pour chaque VER, la fraction volumique des inclusions est de 15 %. De plus, pour le VER, dit «polydispersé», celui-ci respecte la granulométrie de la phase inclusionnaire plutonifère $(U - Pu)O_2$ obtenue par la méthode de *Saltykov* au chapitre 4 (Cf. figure 4.12(a)). Pour analyser, également, l'influence de la fraction volumique sur la réponse locale et effective du matériau, les trois VER précédents (Cellule unitaire, «monodispersé» et «polydispersé») ont été générés pour des fractions volumiques de 10 et 20 %.

A.1.2 Facteurs d'hétérogénéités

L'évaluation des propriétés matériaux et la cinétique des mécanismes, au sein des différentes phases du combustible *MOX*, nécessitent de connaître, en amont, la densité de fission locale, le taux de combustion local et la source de chaleur locale (puissance). Pour cela, nous avons eu recours à un calcul de neutronique simplifié : il s'agit d'un module, à un groupe d'énergie, nommé RADAR, et appliqué dans chaque phase du combustible *MOX*. Ce module est intégré dans le code CYRANO3.

Le calcul (réalisé avec CYRANO3) a été effectué sur un crayon MOX complet (Cf. figures 1.3 et 1.16), dont la microstructure est représentative de celle sélectionnée dans notre thèse : le rayon moyen des amas $(U - Pu)O_2$ a été fixé à $30 \mu\text{m}$ et celui des amas UO_2 à $12.5 \mu\text{m}$. La fraction volumique des amas plutonifères était de 15 % et celle des amas uranifères de 24 %. L'historique de puissance linéique (suivant l'axe z) subi par le crayon est présenté par la figure A.2. Celui-ci correspond à un historique de conception de la gestion actuelle des combustibles MOX, à savoir la gestion PARITE MOX.

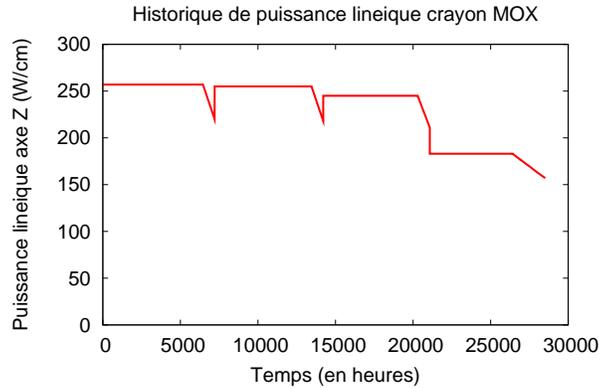
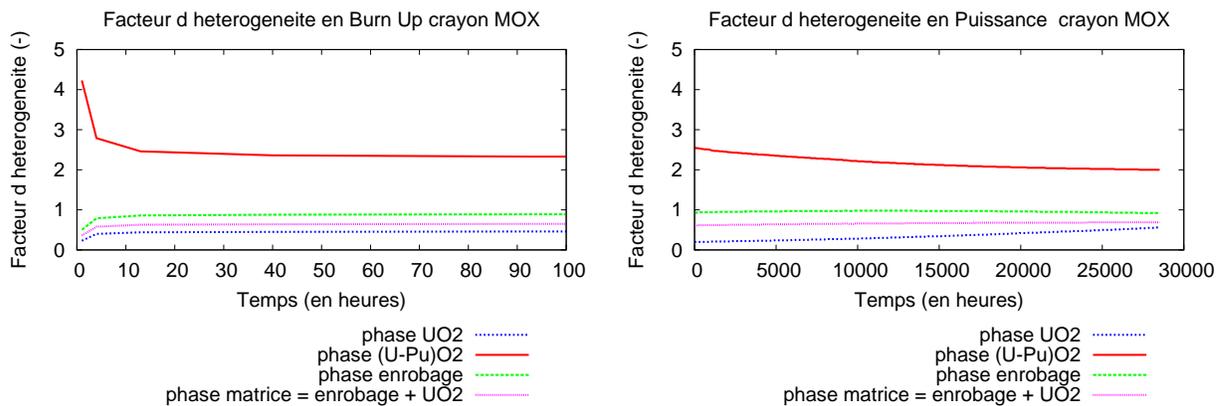


FIG. A.2: Historique de puissance linéique du crayon MOX

Les facteurs d'hétérogénéités moyens pastilles (facteurs d'hétérogénéités en puissance et en taux de combustion) entre les phases ont été évalués sur la tranche axiale (tranche 16) du crayon la plus sollicitée en puissance : côtes axiales du crayon comprises entre 269.15 et 287.09 cm. Les évolutions de ces facteurs en fonction du temps sont présentées sur les figures A.3(a) et A.3(b) :



(a) Facteurs d'hétérogénéités moyens pastille en taux de combustion (Burn Up) - tranche 16

(b) Facteurs d'hétérogénéités moyens pastille en Puissance - tranche 16

FIG. A.3: Facteurs d'hétérogénéités entre les phases

Hormis au début de l'irradiation, nous constatons que ces facteurs sont relativement constants que ce soit en puissance ou en taux de combustion. Le facteur le plus élevé se trouve dans la phase plutonifère $(U - Pu)O_2$: facteur compris entre 2 et 3 (hors début d'irradiation). Tandis que le moins élevé se trouve dans la phase uranifère UO_2 : facteur compris entre 0.4 et 0.6 (hors début d'irradiation). Pour

nos calculs simplifiés (une seule phase inclusionnaire : amas plutonifère $(U - Pu)O_2$), nous avons évalué le facteur d'hétérogénéité dans la phase dite matricielle bis qui englobe la phase uranifère UO_2 et l'enrobage. Ce facteur est compris entre 0.6 et 0.7 (hors début d'irradiation). La connaissance de ces facteurs permet d'évaluer les taux de combustion locaux, les densités de fission locales, et les puissances locales, au sein de chaque phase. Ils permettent, également, d'en déduire les contrastes en taux de combustion et en puissance entre les phases (Cf. figure A.4).

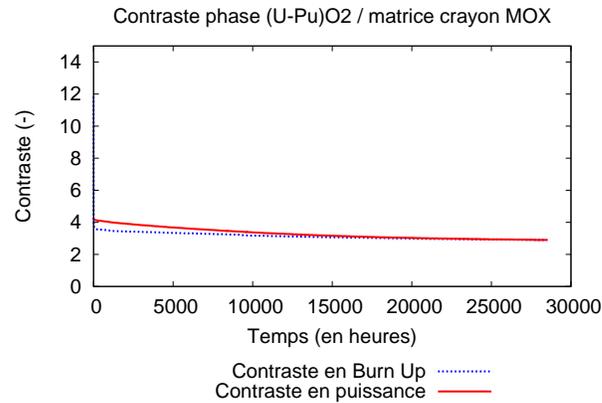


FIG. A.4: Contraste entre phase plutonifère et matrice (enrobage + amas UO_2) - tranche 16

A.1.3 Conditions aux limites périodiques

Dans toutes les études qui vont suivre, nous avons décidé d'appliquer des conditions aux limites de périodicité (Cf. chapitre 3 paragraphe 3.3.2). L'objectif de cette étape est de relier les points des faces opposées. Pour cela, nous avons imposé une relation entre deux noeuds en vis-à-vis par l'opérateur RELA de Cast3M. Cette opérateur permet, lorsqu'un maillage 2 est inclu dans un maillage 1, de créer une rigidité qui contraint les inconnues (T : température, et UX, UY, UZ composantes du champ de déplacement \underline{U}) des noeuds du maillage 2 à être une combinaison linéaire des inconnues des noeuds de l'élément du maillage 1 qui les contiennent.

A.1.4 Conclusion

Au final, nos études vont porter sur 9 VER simplifiés (phase inclusionnaire uranifère UO_2 intégrée dans la phase d'enrobage = phase matricielle) : cellule unitaire, VER «monodispersé» et VER «polydispersé» pour trois fractions volumiques 10, 15 et 20 % de la phase inclusionnaire plutonifère. Ces fractions volumiques couvrent la plage des fractions que l'on peut trouver pour cette phase dans les combustibles MOX actuels. Pour connaître les contrastes à appliquer entre les phases nous avons, également, évalué les facteurs d'hétérogénéités en puissance et en taux de combustion entre celles-ci. Ces calculs ont été réalisés sur la tranche du crayon la plus sollicitée en puissance.

Les études qui sont présentées ci-dessous ont toutes été réalisées avec le solveur thermo-mécanique de Cast3M [<http://www.cast3m.cea.fr>,] en appliquant des conditions aux limites périodiques.

A.2 Analyse de l'aspect homogène ou hétérogène

A.2.1 Etude thermique linéaire avec sources

L'homogénéité ou l'hétérogénéité de la température au sein de la microstructure du combustible *MOX* a été vérifiée en réalisant une étude de thermique linéaire avec sources de chaleur. Mais, souhaitant quantifier l'impact de la source de chaleur locale sur le champ de température, nous avons été contraints de réaliser un développement asymptotique à double échelle et à l'ordre 2. Ci-dessous, nous en rappelons le principe

Principe du développement asymptotique à l'ordre 2 :

Les équations de base du problème d'homogénéisation en thermique, qui font intervenir les hypothèses de périodicité et le rapport d'échelle, sont les suivantes :

$$(P_{ther}) \left\{ \begin{array}{l} \operatorname{div} \underline{q}^\varepsilon(\underline{x}) + s^\varepsilon(\underline{x}) = 0 \quad \forall \underline{x} \in \Omega \\ \underline{q}^\varepsilon(\underline{x}) = -\underline{\lambda}^\varepsilon(\underline{x}) \cdot \underline{\operatorname{grad}}(T^\varepsilon(\underline{x})) \quad \forall \underline{x} \in \Omega \\ \underline{q}^\varepsilon(\underline{x}) \cdot \underline{n}(\underline{x}) = \underline{\Phi} \quad \forall \underline{x} \in \partial\Omega^1 \\ T^\varepsilon(\underline{x}) = \bar{T} \quad \forall \underline{x} \in \partial\Omega^2 \end{array} \right. \quad (\text{A.1})$$

avec Ω le milieu périodique de période V , \underline{x} le vecteur position au sein de ce milieu, $\varepsilon = \frac{x}{y}$ le rapport de changement d'échelles entre \underline{x} et y (le vecteur position au sein du VER V), s^ε la source de chaleur locale V -périodique, $\underline{q}^\varepsilon$ le flux de chaleur relié au gradient de température via la conductivité du milieu $\underline{\lambda}^\varepsilon$ (tenseur symétrique défini positif V -périodique) par la loi de *Fourier*. Le milieu, décrit par la figure A.5, est soumis sur une partie de sa frontière, notée $\partial\Omega^1$, à une température imposée \bar{T} et sur le reste de sa frontière $\partial\Omega^2$ à un flux imposé $\underline{\Phi}$. \underline{n} étant la normale sortante au contour.

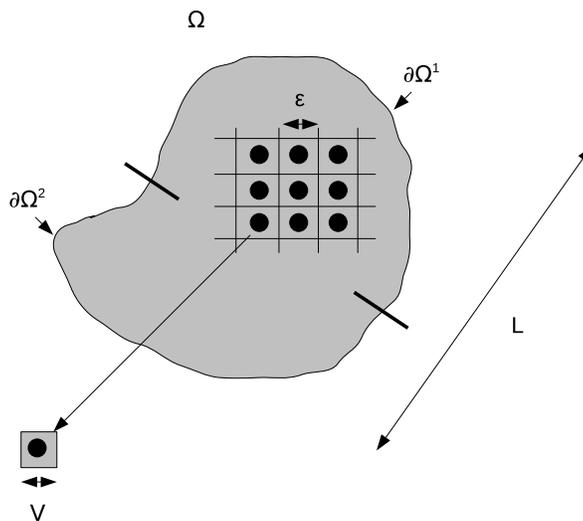


FIG. A.5: Représentation schématique du milieu

Dans le cas d'un milieu périodique, pour lequel les échelles sont suffisamment séparées ($\varepsilon \ll L$), nous pouvons chercher T^ε et $\underline{q}^\varepsilon$ sous la forme d'un développement asymptotique à double échelle :

$$\begin{cases} T^\varepsilon(\underline{x}) = T^0(\underline{x}, \underline{y}) + \varepsilon T^1(\underline{x}, \underline{y}) + \varepsilon^2 T^2(\underline{x}, \underline{y}) \\ \underline{q}^\varepsilon(\underline{x}) = \underline{q}^0(\underline{x}, \underline{y}) + \varepsilon \underline{q}^1(\underline{x}, \underline{y}) + \varepsilon^2 \underline{q}^2(\underline{x}, \underline{y}) \end{cases} \quad (\text{A.2})$$

où les $T^\alpha(\underline{x}, \underline{y})$ et $\underline{q}^\alpha(\underline{x}, \underline{y})$ ($\alpha = 0, 1$ ou 2) sont des fonctions V -périodiques par rapport à \underline{y} . On a également $\underline{\lambda}^\varepsilon(\underline{x}) = \underline{\lambda}(\underline{y})$ et $s^\varepsilon(\underline{x}) = s(\underline{y})$ qui sont V -périodiques.

La dérivation spatiale sépare donc maintenant la composante à grande échelle \underline{x} de la composante périodique \underline{y} , ce qui donne :

$$\frac{dT^\alpha}{dx_i}(\underline{x}, \underline{y}) = \frac{\partial T^\alpha}{\partial x_i}(\underline{x}, \underline{y}) + \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial T^\alpha}{\partial y_i}(\underline{x}, \underline{y}) \quad (\text{A.3})$$

ce qui revient à :

$$\begin{cases} \underline{div} = \underline{div}_x + \frac{1}{\varepsilon} \underline{div}_y \\ \underline{grad} = \underline{grad}_x + \frac{1}{\varepsilon} \underline{grad}_y \end{cases} \quad (\text{A.4})$$

On a donc à l'ordre 2 :

$$\begin{cases} \underline{grad} T^\varepsilon = \underline{grad}_x T^0 + \frac{1}{\varepsilon} \underline{grad}_y T^0 + \varepsilon \underline{grad}_x T^1 + \underline{grad}_y T^1 + \varepsilon^2 \underline{grad}_x T^2 + \varepsilon \underline{grad}_y T^2 \\ = \frac{1}{\varepsilon} \underline{grad}_y T^0 + (\underline{grad}_x T^0 + \underline{grad}_y T^1) + \varepsilon (\underline{grad}_x T^1 + \underline{grad}_y T^2) + \varepsilon^2 \underline{grad}_x T^2 \end{cases} \quad (\text{A.5})$$

Si on utilise la loi de comportement (Fourier), nous obtenons alors :

$$\begin{cases} \underline{q}^\varepsilon = \frac{1}{\varepsilon} (-\underline{\lambda}^\varepsilon \cdot \underline{grad}_y T^0) - \underline{\lambda}^\varepsilon \cdot (\underline{grad}_x T^0 + \underline{grad}_y T^1) + \varepsilon (-\underline{\lambda}^\varepsilon) \cdot (\underline{grad}_x T^1 + \underline{grad}_y T^2) \\ + \varepsilon^2 (-\underline{\lambda}^\varepsilon) \cdot \underline{grad}_x T^2 = \frac{1}{\varepsilon} \underline{q}^{-1} + \underline{q}^0 + \varepsilon \underline{q}^1 + \varepsilon^2 \underline{q}^2 \end{cases} \quad (\text{A.6})$$

En identifiant les différentes puissances de ε , il vient :

$$\begin{cases} \text{ordre } -1 : & \underline{q}^{-1} = -\underline{\lambda} \cdot \underline{grad}_y T^0 = 0 \\ \text{ordre } 0 : & \underline{q}^0 = -\underline{\lambda} \cdot (\underline{grad}_x T^0 + \underline{grad}_y T^1) \\ \text{ordre } 1 : & \underline{q}^1 = -\underline{\lambda} \cdot (\underline{grad}_x T^1 + \underline{grad}_y T^2) \\ \text{ordre } 2 : & \underline{q}^2 = -\underline{\lambda} \cdot \underline{grad}_x T^2 \end{cases} \quad (\text{A.7})$$

On constate que l'ordre -1 implique que $T^0(\underline{x}, \underline{y}) = T^0(\underline{x})$.

Si l'on procède de la même façon avec l'équation d'équilibre, il vient :

$$\begin{cases} \underline{q}^\varepsilon = \operatorname{div}_x \underline{q}^0 + \frac{1}{\varepsilon} \operatorname{div}_y \underline{q}^0 + \varepsilon \operatorname{div}_x \underline{q}^1 + \operatorname{div}_y \underline{q}^1 + \varepsilon^2 \operatorname{div}_x \underline{q}^2 + \varepsilon \operatorname{div}_y \underline{q}^2 \\ = \frac{1}{\varepsilon} \operatorname{div}_y \underline{q}^0 + (\operatorname{div}_x \underline{q}^0 + \operatorname{div}_y \underline{q}^1) + \varepsilon (\operatorname{div}_x \underline{q}^1 + \operatorname{div}_y \underline{q}^2) + \varepsilon^2 \operatorname{div}_x \underline{q}^2 \end{cases} \quad (\text{A.8})$$

En identifiant les différentes puissances de ε , il vient :

$$\begin{cases} \text{ordre -1 : } \operatorname{div}_y \underline{q}^0 = 0 \\ \text{ordre 0 : } \operatorname{div}_x \underline{q}^0 + \operatorname{div}_y \underline{q}^1 + s = 0 \\ \text{ordre 1 : } \operatorname{div}_x \underline{q}^1 + \operatorname{div}_y \underline{q}^2 = 0 \\ \text{ordre 2 : } \operatorname{div}_x \underline{q}^2 = 0 \end{cases} \quad (\text{A.9})$$

Si on prend la moyenne de l'ordre 0 de l'équation (A.9) dans V , on obtient :

$$\operatorname{div}_x \bar{q} + \langle s \rangle_V = 0 \quad (\text{A.10})$$

car :

$$\langle \operatorname{div}_y \underline{q}^1 \rangle_V = \frac{1}{V} \int_V \frac{\partial q_i^1}{\partial x_i} dV = \frac{1}{V} \int_{\partial V} \underline{q}^1 \cdot \underline{n} dS = 0 \quad (\text{A.11})$$

En effet, \underline{q}^1 est V -périodique et \underline{n} est anti-périodique. Notons que $\bar{q}(x) = \langle \underline{q}^0(x, y) \rangle_V$. Par ailleurs :

$$\begin{cases} \underline{q}^\varepsilon \cdot \underline{n} = \underline{\Phi} \quad \forall \underline{x} \in \partial\Omega^1 \\ \Rightarrow \underline{q}^0 \cdot \underline{n} = \underline{\Phi} \quad \forall \underline{x} \in \partial\Omega^1 \\ \text{et } \underline{q}^1 \cdot \underline{n} = 0 \quad \forall \underline{x} \in \partial\Omega^1 \end{cases} \quad (\text{A.12})$$

(A.12) implique aussi :

$$\begin{cases} T^\varepsilon = \bar{T} \quad \forall \underline{x} \in \partial\Omega^2 \\ \Rightarrow T^0 = \bar{T} \quad \forall \underline{x} \in \partial\Omega^2 \\ \text{et } T^1 = 0 \quad \forall \underline{x} \in \partial\Omega^2 \end{cases} \quad (\text{A.13})$$

Ainsi, résoudre le problème (A.1) par un développement asymptotique à double échelle et à l'ordre 2 revient à résoudre une série de trois problèmes élémentaires qui nous permettent de reconstruire la solution hétérogène. Nous allons maintenant décrire ces trois problèmes élémentaires.

Problème élémentaire à l'ordre 1 :

Avec l'ordre 0 de l'équation (A.7) et l'ordre -1 de l'équation (A.9), le couple (T^1, \underline{q}^0) est solution du problème :

$$(P_{ordre1}) \left\{ \begin{array}{l} \operatorname{div}_y \underline{q}^0 = 0 \quad \text{dans } V \\ \underline{q}^0 = -\underline{\lambda} \cdot \left(\underline{\operatorname{grad}}_x T^0 + \underline{\operatorname{grad}}_y T^1 \right) \quad \forall \underline{x} \in V \\ \underline{q}^0 \cdot \underline{n} \quad \# \quad \text{sur } \partial V \\ T^1 \quad \# \quad \text{sur } \partial V \end{array} \right. \quad (\text{A.14})$$

Par linéarité du problème on écrit :

$$T^1(\underline{x}, y) = \frac{\partial T^0}{\partial x_k} \theta^k(y) \quad (\text{A.15})$$

avec $\theta^k(\underline{y})$ solution de :

$$(P_{ordre1}(\theta^k)) \left\{ \begin{array}{l} \operatorname{div}_y \underline{\phi}^k(\underline{y}) = 0 \quad \text{dans } V \\ \underline{\phi}^k(\underline{y}) = -\underline{\lambda}(\underline{y}) \cdot \left(\underline{i}^k + \underline{\operatorname{grad}}_y \theta^k(\underline{y}) \right) \quad \forall \underline{x} \in V \\ \underline{\phi}^k \cdot \underline{n} \quad \# \quad \text{sur } \partial V \\ \theta^k \quad \# \quad \text{sur } \partial V \end{array} \right. \quad (\text{A.16})$$

avec \underline{i}^k le tenseur d'identité d'ordre 1 : $i_i^k = \delta_{ki}$ (δ_{ki} étant le symbole de Kronecker). On a donc

$$\underline{q}^0 = -\underline{\lambda} \cdot \left(\underline{\operatorname{grad}}_x T^0 + \frac{\partial T^0}{\partial x_k} \underline{\operatorname{grad}}_y \theta^k \right) \quad (\text{A.17})$$

On remarque que :

$$\left\{ \begin{array}{l} \phi_i^k \frac{\partial T^0}{\partial x_k} = -\lambda_{ij} \left(i_i^k + \frac{\partial \theta^k}{\partial y_j} \right) \frac{\partial T^0}{\partial x_k} \\ = -\lambda_{ij} \left(\frac{\partial T^0}{\partial x_j} + \frac{\partial T^1}{\partial y_j} \right) \\ = q_i^0 \\ \Rightarrow \bar{q}_i = \langle \phi_i^k \rangle_V \frac{\partial T^0}{\partial x_k} = -\tilde{\lambda}_{ik} \frac{\partial T^0}{\partial x_k} \end{array} \right. \quad (\text{A.18})$$

On a donc :

$$\tilde{\lambda}_{ik} = -\langle \phi_i^k \rangle_V = \left\langle \lambda_{ij} \left(i_i^k + \frac{\partial \theta^k}{\partial y_j} \right) \right\rangle_V \quad (\text{A.19})$$

On voit donc qu'à partir du problème (A.16) (problème à l'ordre 1) nous pouvons évaluer les θ^k et en déduire $\tilde{\lambda}$ à partir de la relation (A.19). Par contre, nous ne pouvons déterminer le couple (T^1, \underline{q}^0) de ce problème que si nous connaissons le couple (T^0, \bar{q}) . Nous devons alors résoudre un deuxième problème élémentaire, décrit ci-dessous.

Problème élémentaire à l'ordre 0 :

Ce problème s'obtient à partir des équations (A.10), (A.12) et (A.13) :

$$(P_{ordre0}) \left\{ \begin{array}{l} \text{div}_x \bar{q} + \langle s \rangle_V = 0 \quad \text{dans } \Omega \\ \bar{q} = -\tilde{\lambda} \cdot \text{grad}_x T^0 \quad \text{dans } \Omega \\ \bar{q} \cdot \underline{n} = \Phi \quad \text{sur } \partial\Omega^1 \\ T^0 = \bar{T} \quad \text{sur } \partial\Omega^2 \end{array} \right. \quad (\text{A.20})$$

Le couple (T^0, \bar{q}) est solution de ce problème. On peut alors évaluer le couple (T^1, \underline{q}^0) et donc les fluctuations du champ de température à l'ordre 1. Il reste alors à évaluer les fluctuations du champ de température à l'ordre 2 : fluctuation essentiellement liée à la source de chaleur locale. Le problème est exposé ci-dessous.

Problème élémentaire à l'ordre 2 :

Avec l'ordre 1 de l'équation (A.7) et l'ordre 0 de l'équation (A.9), le couple (T^2, \underline{q}^1) est solution du problème suivant :

$$(P_{ordre2}) \left\{ \begin{array}{l} \text{div}_y \underline{q}^1 + \text{div}_x \underline{q}^0 + s = 0 \quad \text{dans } V \\ \underline{q}^1 = -\underline{\lambda} \cdot (\text{grad}_x T^1 + \text{grad}_y T^2) \quad \forall \underline{x} \in V \\ \underline{q}^1 \cdot \underline{n} = \# \quad \text{sur } \partial V \\ T^2 = \# \quad \text{sur } \partial V \end{array} \right. \quad (\text{A.21})$$

Nous pouvons vérifier rapidement que l'équilibre des flux est réalisé :

$$\left\{ \begin{array}{l} 0 = \langle \text{div}_y \underline{q}^1 + \text{div}_x \underline{q}^0 + s \rangle_V = \frac{1}{|V|} \left(\int_V \frac{\partial q_i^1}{\partial y_i} dV + \int_V \frac{\partial q_i^0}{\partial x_i} dV + \int_V s dV \right) \\ = \frac{1}{|V|} \left(\int_{\partial V} \frac{\partial q_i^1}{\partial y_i} dS + \frac{\partial}{\partial x_i} \int_V q_i^0 dV + \int_V s dV \right) = \frac{1}{|V|} \left(\int_{\partial V} \frac{\partial q_i^1}{\partial y_i} dS + |V| (\langle s \rangle_V + \text{div}_x \bar{q}) \right) \\ = 0 \\ \text{car } \underline{q}^1 \cdot \underline{n} = \# \quad \text{et} \quad (\langle s \rangle_V + \text{div}_x \bar{q}) \text{ correspond à l'équilibre macroscopique} = 0 \end{array} \right. \quad (\text{A.22})$$

Nous avons donc bien équilibre des flux. Pour résoudre le problème (A.21), on a tout d'abord :

$$\begin{cases} \frac{\partial q_i^1}{\partial y_i}(\underline{x}, \underline{y}) + \frac{\partial q_i^0}{\partial x_i}(\underline{x}, \underline{y}) + s(\underline{y}) = 0 \\ q_i^1(\underline{x}, \underline{y}) = -\lambda_{ij}(\underline{y}) \left(\frac{\partial T^1}{\partial x_j}(\underline{x}, \underline{y}) + \frac{\partial T^2}{\partial y_j}(\underline{x}, \underline{y}) \right) \end{cases} \quad (\text{A.23})$$

avec :

$$\begin{cases} T^1(\underline{x}, \underline{y}) = \frac{\partial T^0}{\partial x_k}(\underline{x}) \theta^k(\underline{y}) \\ q_i^0(\underline{x}, \underline{y}) = \frac{\partial T^0}{\partial x_k}(\underline{x}) \varphi_i^k(\underline{y}) \end{cases} \quad (\text{A.24})$$

ce qui donne :

$$\begin{cases} \frac{\partial q_i^1}{\partial y_i}(\underline{x}, \underline{y}) + \frac{\partial^2 T^0}{\partial x_i \partial x_k}(\underline{x}) \varphi_i^k(\underline{y}) + s(\underline{y}) = 0 \\ q_i^1(\underline{x}, \underline{y}) = -\lambda_{ij}(\underline{y}) \left(\frac{\partial^2 T^0}{\partial x_j \partial x_k}(\underline{x}) \theta^k(\underline{y}) + \frac{\partial T^2}{\partial y_j}(\underline{x}, \underline{y}) \right) \end{cases} \quad (\text{A.25})$$

Dans le cas sans terme source, c'est à dire $s(\underline{y}) = 0$, par linéarité du problème, on écrirait :

$$T^2(\underline{x}, \underline{y}) = \frac{\partial^2 T^0}{\partial x_i \partial x_k}(\underline{x}) \tau^{ik}(\underline{y}) \quad (\text{A.26})$$

On peut se ramener à un problème, tout à fait analogue avec le terme source, en utilisant l'équilibre macroscopique de la manière suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{On sait que : } \operatorname{div}_x \bar{q} + \langle s \rangle_V = 0 \text{ dans } \Omega \\ \text{i.e : } \frac{\partial \bar{q}_i}{\partial x_i}(\underline{x}) + \langle s \rangle_V = 0 \text{ dans } \Omega \\ \text{avec : } \bar{q}_i(\underline{x}) = -\tilde{\lambda}_{ik} \frac{\partial T^0}{\partial x_k}(\underline{x}) \\ \Rightarrow -\tilde{\lambda}_{ik} \frac{\partial^2 T^0}{\partial x_i \partial x_k}(\underline{x}) + \langle s \rangle_V = 0 \\ \Rightarrow \tilde{\lambda}_{ik} \frac{\partial^2 T^0}{\partial x_i \partial x_k}(\underline{x}) = \langle s \rangle_V \\ \Rightarrow \frac{\tilde{\lambda}_{ik}}{\langle s \rangle_V} \frac{\partial^2 T^0}{\partial x_i \partial x_k}(\underline{x}) = 1 \end{array} \right. \quad (\text{A.27})$$

Ainsi si on multiplie maintenant $s(\underline{y})$ par ce rapport unité, dans l'équation (A.25), on a :

$$\begin{cases} \frac{\partial q_i^1}{\partial y_i}(\underline{x}, \underline{y}) + \frac{\partial^2 T^0}{\partial x_i \partial x_k}(\underline{x}) \varphi_i^k(\underline{y}) + \frac{s(\underline{y})}{\langle s \rangle_V} \tilde{\lambda}_{ik} \frac{\partial^2 T^0}{\partial x_i \partial x_k}(\underline{x}) = 0 \\ \Rightarrow \frac{\partial q_i^1}{\partial y_i}(\underline{x}, \underline{y}) + \frac{\partial^2 T^0}{\partial x_i \partial x_k}(\underline{x}) \left[\varphi_i^k(\underline{y}) + \frac{s(\underline{y})}{\langle s \rangle_V} \tilde{\lambda}_{ik} \right] = 0 \end{cases} \quad (\text{A.28})$$

On voit donc que l'on peut écrire :

$$T^2(\underline{x}, \underline{y}) = \frac{\partial^2 T^0}{\partial x_i \partial x_k}(\underline{x}) \tau^{ik}(\underline{y}) \quad (\text{A.29})$$

où un τ^{ik} est solution du problème :

$$\begin{cases} \frac{\partial j_m^{ik}}{\partial y_m}(\underline{y}) + i_{mn}^{ik} \left(\varphi_n^m(\underline{y}) + \frac{s(\underline{y})}{\langle s \rangle_V} \tilde{\lambda}_{mn} \right) = 0 & \text{dans } V \\ j_m^{ik}(\underline{y}) = -\lambda_{mn}(\underline{y}) \left(i_{np}^{ik} \theta^p(\underline{y}) + \frac{\partial \tau^{ik}}{\partial y_p}(\underline{y}) \right) & \text{dans } V \\ \tau^{ik} \quad \# \quad \text{sur } \partial V \\ \underline{j}^{ik} \cdot \underline{n} \quad -\# \quad \text{sur } \partial V \end{cases} \quad (\text{A.30})$$

avec $i_{mn}^{ik} = \frac{1}{2} (\delta_{im} \delta_{kn} + \delta_{in} \delta_{km})$. La résolution de ce troisième problème permet finalement d'aboutir au couple (T^2, q^1) et d'en déduire les fluctuations du champ de température à l'ordre 2. Ces trois problèmes élémentaires ont été résolus pour nos cas d'étude (Cf. *figure A.1*). La mise en donnée et les résultats sont exposés ci-dessous.

Application du développement asymptotique à double échelle et à l'ordre 2 sur nos microstructures MOX :

Le développement asymptotique de l'équation de la chaleur sur le milieu périodique permet donc d'obtenir une série d'équations de la chaleur, formulée soit sur le milieu homogénéisé Ω pour le terme T^0 , dans notre cas il s'agit de la pastille nucléaire (nous verrons plus loin que nous l'avons modélisée par un barreau dans la direction radiale), soit sur la cellule V , dans notre cas il s'agit des VER (Cf. *figure A.1*), pour les termes T^1 et T^2 . Les données matériaux que nous avons prises sont les suivantes :

- Source de chaleur uniforme par phase : pour la matrice nous avons pris 0.51 GWm^{-3} et dans la phase inclusionnaire plutonifère 1.53 GWm^{-3} . Ce facteur trois est représentatif des conditions subies par les combustibles *MOX*, irradiés dans les REP en fonctionnement normal (Cf. *figure A.4*). Suivant la position radiale du VER V dans le milieu Ω (la pastille), les sources de chaleur locales ne sont pas réellement constantes (accentuation de la source de chaleur en périphérie de pastille). Mais, pour simplifier nos études nous avons choisi de les considérer constantes quelque soit la position radiale du VER dans la pastille. Le cas le plus pénalisant a été choisi.
- Tenseur des conductivités isotrope et uniforme par phase : pour la matrice nous avons pris $2.5 \text{ Wm}^{-1}\text{°K}$ et $0.83 \text{ Wm}^{-1}\text{°K}$ pour les inclusions. Ces valeurs sont représentatives d'un combustible *MOX* en fin de quatrième cycle d'irradiation.

Tout d'abord, nous avons réalisé nos calculs sur la cellule unitaire avec une fraction volumique de 15 %. Dans notre étude, la pastille est représentée par un barreau radial comme le montre la figure A.6. Les résultats aux différents ordres sont présentés sur la figure A.7.

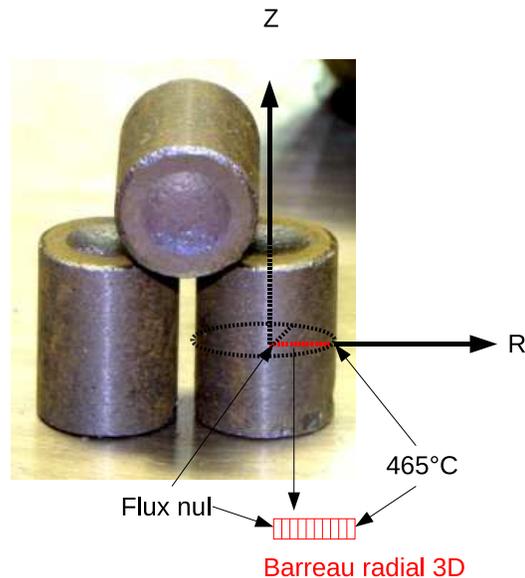


FIG. A.6: Representation macroscopique de la pastille Ω : barreau radial 3D

A l'ordre 0, le champ de température T^0 oscille de 465 °C en périphérie de pastille (haut du barreau) à 1310 °C au centre de la pastille (bas du barreau). La forme radiale, parabole inversée, et les valeurs de ce champ sont cohérentes avec ce que peut subir une pastille MOX en fonctionnement normal (Cf. figure 1.11). Les fluctuations à l'ordre 2, dues principalement à la source locale de chaleur, sont constantes quelle que soit la position radiale du VER (hypothèse posée : source indépendante de la position radiale) et de faibles amplitudes : inférieure à 0.28 °C. Or, il est important de souligner que l'incertitude de mesure que nous avons sur la température (mesure réalisée par un thermocouple) est de l'ordre de plus ou moins 10 %. Ces fluctuations sont donc couvertes par ces incertitudes. Dès lors, nous pouvons considérer la source de chaleur comme homogène au sein d'un combustible MOX. Les fluctuations du champ de température à l'ordre 1 varie également peu, de -1.51 à 1.4 °C. Ces variations ont surtout lieu en périphérie de pastille, là où le gradient de température T^0 est le plus important. Néanmoins, ces variations restent très faibles par rapport au gradient macroscopique et sont largement couvertes par les incertitudes de mesure. Dans ce cas, nous pouvons également considérer le champ de température comme homogène au sein du combustible MOX.

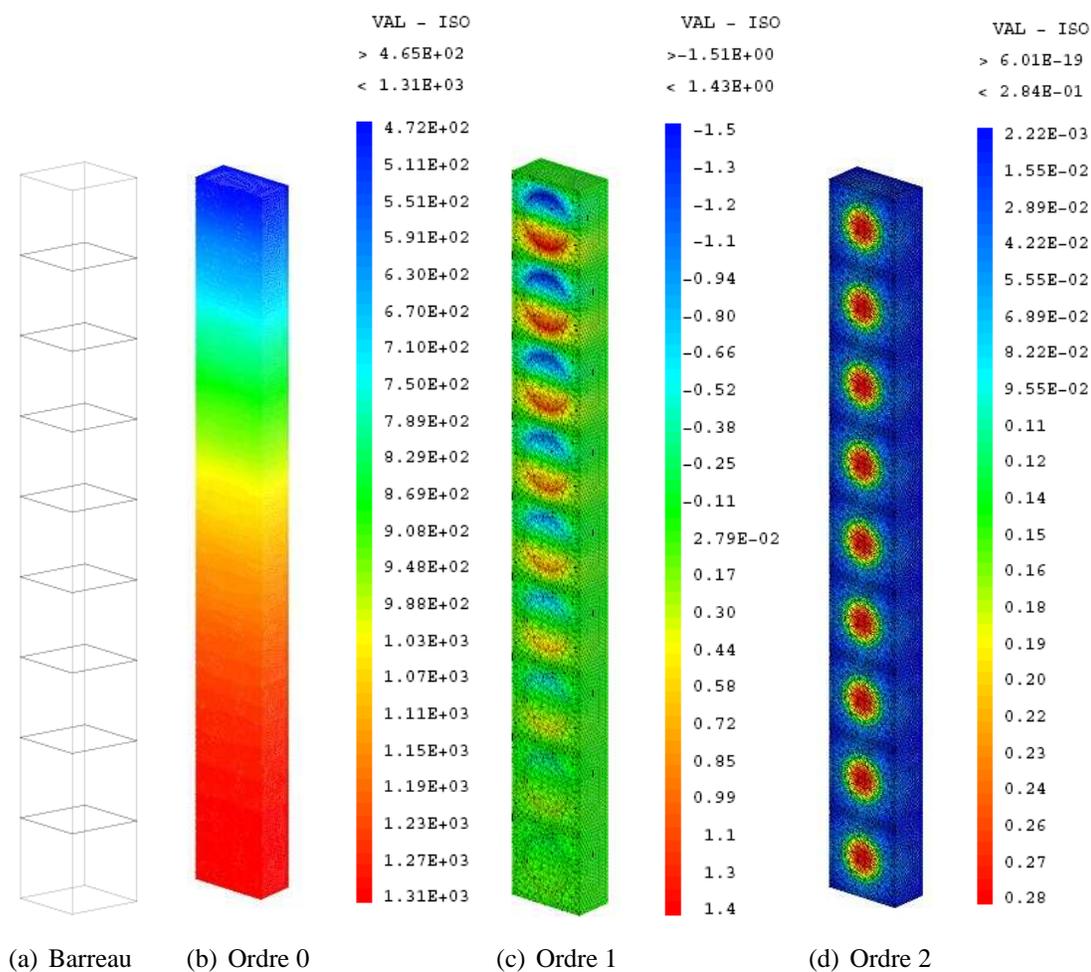


FIG. A.7: Champ de T $^{\circ}\text{C}$ aux différents ordres - Cellule unité - Différentes positions radiales de la pastille MOX - Coupe dans le barreau 3D

Cependant, la microstructure du combustible *MOX* est loin d'être comparable à une cellule unitaire. Dès lors, des études similaires ont été réalisées sur le VER «monodispersé» (Cf. figure A.1(b)) et sur le VER «polydispersé» (Cf. figure A.1(c)), pour une fraction volumique d'inclusions de 15 %. Pour des raisons de mémoire et de temps de calcul, ces études ont été réalisées uniquement à une position radiale de la pastille : en périphérie de pastille. C'est à dire là où le gradient de température T^0 est important : gradient de 700 à 800 °C. Ces études sont donc conservatives. Les résultats obtenus, à l'ordre 1 et 2, pour le VER «monodispersé» sont exposés sur la figure A.8 et ceux du VER «polydispersé» sur la figure A.9.

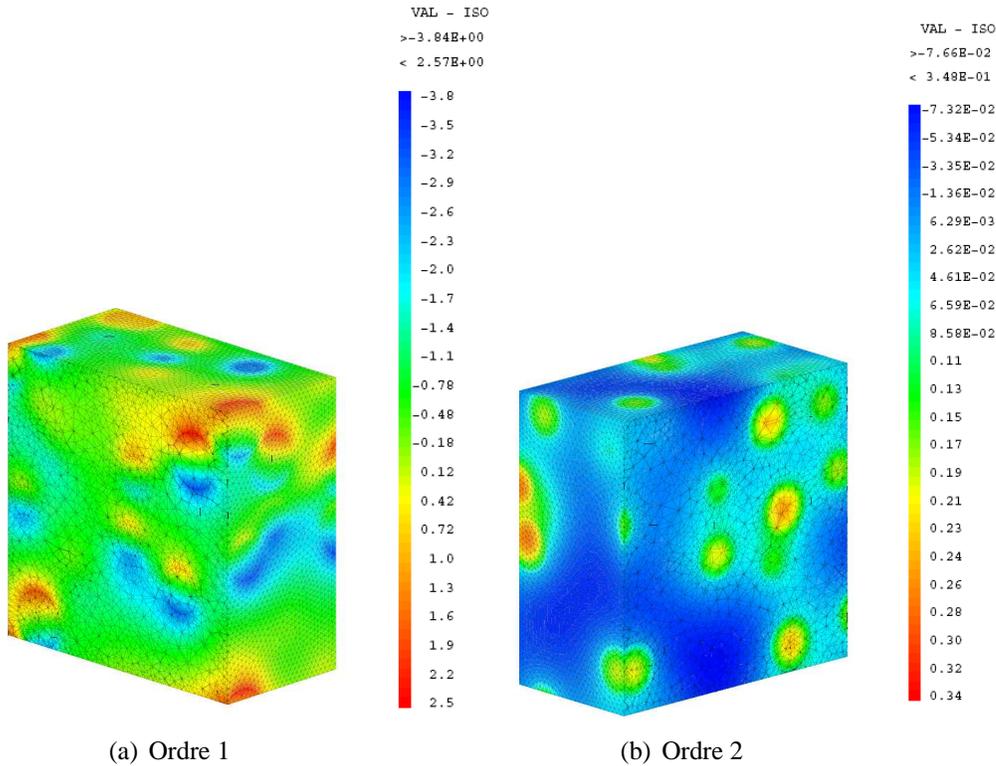


FIG. A.8: Champ de T °C aux différents ordres - Monodispersé - Périphérie de la pastille MOX - Coupe

La distribution (VER «monodispersé») et la taille des inclusions (VER «polydispersé») font que les amplitudes, aussi bien à l'ordre 1 qu'à l'ordre 2, sont plus importantes qu'avec la cellule unitaire. Mais, ces fluctuations restent toujours très faibles et largement couvertes par les incertitudes de mesure. Par conséquent, nous pouvons définitivement considérer la source de chaleur comme homogène au sein d'un combustible *MOX* type AUC, ainsi que le champ de température. De plus, dans la mesure où le tenseur de la dilatation thermique ne dépend pas des effets de l'irradiation, la déformation thermique sera aussi considérée comme homogène.

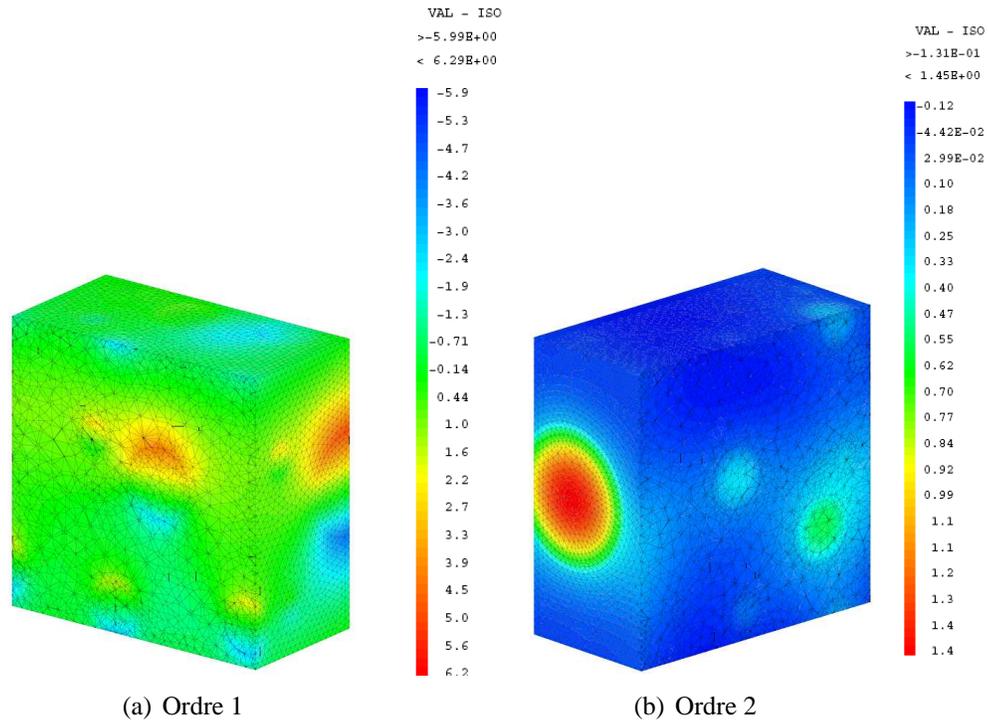


FIG. A.9: Champ de T °C aux différents ordres - Polydispersé - Périphérie de la pastille MOX - Coupe

Néanmoins, afin d'évaluer correctement le champ de température homogène T^0 au sein du combustible *MOX*, notamment dans les codes industriels, il est important d'estimer correctement $\underline{\tilde{\lambda}}$. Ainsi, nous avons, tout d'abord, évalué $\underline{\tilde{\lambda}}$ à partir de la relation (A.19) sur le VER «polydispersé» pour trois fractions volumiques d'inclusions plutonifères. Les trois tenseurs sont présentés ci-dessous :

$$\underline{\tilde{\lambda}} = \begin{pmatrix} 2.30 & 2.15e-3 & 3.53e-3 \\ 2.15e-3 & 2.30 & 2.22e-3 \\ 3.53e-3 & 2.22e-3 & 2.30 \end{pmatrix} \quad \text{fraction volumique 10 \%} \quad (\text{A.31})$$

$$\underline{\tilde{\lambda}} = \begin{pmatrix} 2.21 & 9.23e-4 & 1.24e-3 \\ 9.23e-4 & 2.20 & 9.21e-4 \\ 1.24e-3 & 9.21e-4 & 2.20 \end{pmatrix} \quad \text{fraction volumique 15 \%} \quad (\text{A.32})$$

$$\underline{\tilde{\lambda}} = \begin{pmatrix} 2.13 & 8.76e-4 & 2.15e-3 \\ 8.76e-4 & 2.13 & 7.91e-3 \\ 2.15e-3 & 7.91e-3 & 2.13 \end{pmatrix} \quad \text{fraction volumique 20 \%} \quad (\text{A.33})$$

On constate que l'isotropie du comportement en thermique est vérifiée pour les trois tenseurs. On observe, également, que l'écart entre les termes égaux non nuls est inférieur au pourcent, de même pour le rapport avec les termes nuls. Des résultats identiques ont été observés pour le VER «monodispersé». Les tenseurs effectifs du VER «monodispersé» étaient, également, très proches de celui

du VER «polydispersé» (écart inférieur au pourcent pour chaque composante). Pour ce cas d'étude (thermique linéaire avec source locale de chaleur - contraste de 3 sur les propriétés matériaux et la source locale de chaleur - fraction volumique inférieure ou égale à 20 %), la distribution et la taille des inclusions n'ont pas d'impact sur la propriété effective. La conductivité effective du VER «polydispersé» est évaluée à $2.30 \text{ Wm}^{-1}\text{°K}$ pour 10% de fraction volumique d'inclusions, $2.20 \text{ Wm}^{-1}\text{°K}$ pour 15 % et $2.13 \text{ Wm}^{-1}\text{°K}$ pour 20 %.

Ces conductivités effectives, obtenues par les éléments finis, ont ensuite été comparées à celles obtenues avec le schéma d'homogénéisation autocohérent de *Christensen* [CHRISTENSEN, 1979]. La figure A.10 illustre les résultats :

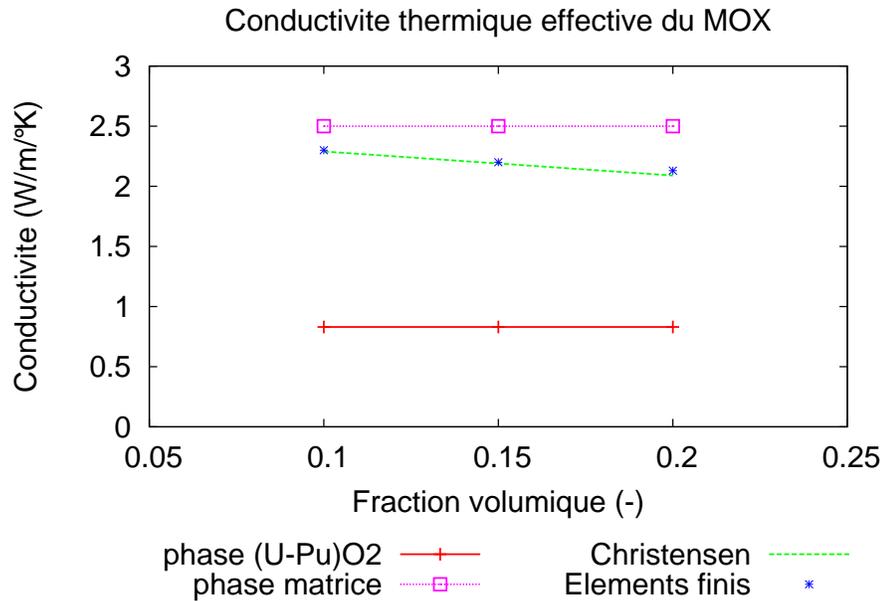


FIG. A.10: VER «polydispersé» - Influence de la fraction volumique sur la conductivité effective du combustible *MOX* - Comparaison éléments finis / schéma autocohérent de *Christensen*

Le schéma autocohérent, proposé par *Christensen* [CHRISTENSEN, 1979], estime parfaitement la conductivité effective du combustible *MOX*. Un léger écart est observé avec les éléments finis pour une fraction volumique d'inclusions de 20 %. Cependant, celui-ci reste couvert par les incertitudes que l'on a sur la mesure de la conductivité. Finalement, dans toute la suite de notre mémoire, nous considérons le champ de température et la source de chaleur comme homogène au sein du combustible *MOX* AUC ou ADU (Rappel : il sera intéressant en perspective de cette thèse de s'assurer que ces conclusions s'appliquent également au combustible *MOX* type ADU. A priori il y a peu de doute à avoir car les contrastes de la conductivité et de la source de chaleur locale entre la troisième phase, phase uranifère, et la matrice sont très faibles). Le champ de température homogène T^0 est solution du problème (A.20). Le modèle autocohérent de *Christensen* est utilisé pour évaluer le tenseur des conductivités effectives $\tilde{\lambda}$ de ce problème. Nous recommandons, également, l'utilisation de ce schéma d'homogénéisation dans les codes industriels $1D_{1/2}$ du crayon combustible. Comme en thermique, nous pouvons nous interroger sur l'hétérogénéité élastique du combustible *MOX*. C'est donc l'objet du paragraphe suivant.

A.2.2 Etude élastique linéaire

Suivant sa position radiale au sein de la pastille *MOX*, le VER peut être soumis à trois types de chargements, illustrés par la figure A.11 :

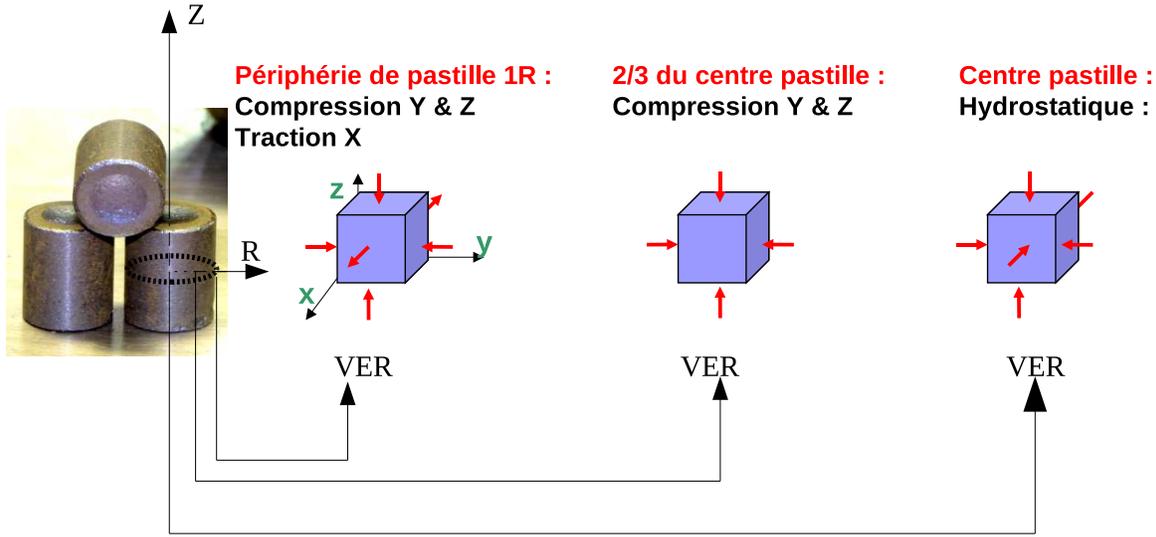


FIG. A.11: Trois chargements radiaux possibles - plan médian pastille - Fonctionnement normal

L'aspect homogène ou hétérogène du comportement élastique de la microstructure du combustible *MOX* a donc été testé pour ces trois types de chargement, en résolvant le problème suivant :

$$(P_{meca-el}) \left\{ \begin{array}{l} \underline{\underline{\text{div}}} \underline{\underline{\sigma}}(\underline{x}) = 0 \quad \text{dans } V, \\ \underline{\underline{\sigma}}(\underline{x}) = \underline{\underline{C}}(\underline{x}) : \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{x}) \quad \text{et} \quad \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{x}) = \frac{1}{2} \left(\underline{\underline{\text{grad}}}(\underline{u}(\underline{x})) + {}^T \underline{\underline{\text{grad}}}(\underline{u}(\underline{x})) \right) \quad \forall \underline{x} \in V, \\ \underline{u}(\underline{x}) = \underline{E} \cdot \underline{x} + \underline{\tilde{u}}(\underline{x}) \quad \text{avec} \quad \underline{\tilde{u}}(\underline{x}) \cdot \underline{n} \quad \# \quad \text{et} \quad \underline{\underline{\sigma}}(\underline{x}) \cdot \underline{n}(\underline{x}) \quad \# \quad \forall \underline{x} \in \partial V \end{array} \right. \quad (\text{A.34})$$

On désigne par :

- \underline{E} la déformation macroscopique, $\underline{\underline{\sigma}}$ le champ local de contrainte élastique et $\underline{\underline{\varepsilon}}$ le champ local de déformation élastique ;
- V le volume du VER et ∂V les contours de celui-ci ;
- \underline{x} le vecteur position au sein du VER, \underline{n} la normale sortante et \underline{u} le vecteur déplacement local ;
- $\underline{\underline{C}}$ le tenseur élastique, considéré comme isotrope dans chaque phase. Il est donc défini par $\underline{\underline{C}}(k, \mu)$ (k module de compressibilité et μ module de cisaillement) ou par $\underline{\underline{C}}(E, \nu)$ (E module d'Young et ν coefficient de Poisson). On a $k = \frac{E}{3(1-2\nu)}$ et $\mu = \frac{E}{2(1+\nu)}$. Dans notre cas, nous avons pris les valeurs suivantes pour la phase matricielle et les inclusions :
 - Matrice :
 - $k = 132 \text{ GPa}$ et $\mu = 57.3 \text{ GPa}$ ce qui correspond à $E = 150 \text{ GPa}$ et $\nu = 0.31$.
 - Inclusions :
 - $k = 94.2 \text{ GPa}$ et $\mu = 51.2 \text{ GPa}$ ce qui correspond à $E = 130.0 \text{ GPa}$ et $\nu = 0.27$.

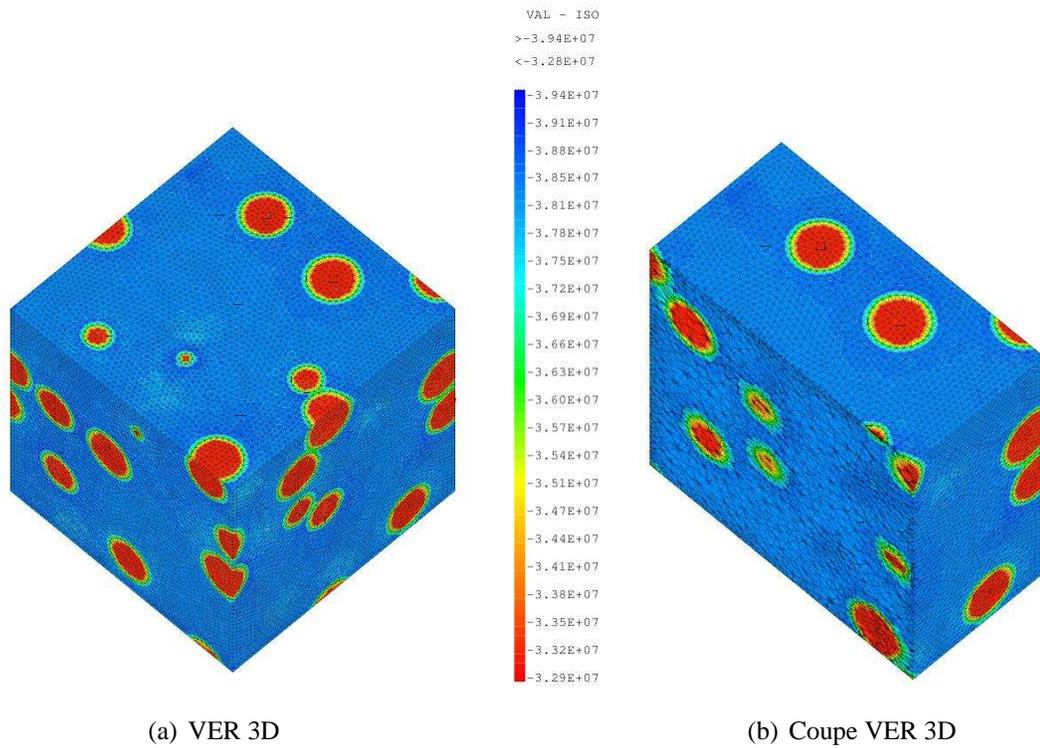


FIG. A.13: VER «monodispersé» - Fraction volumique inclusions = 15 % - Contrainte hydrostatique

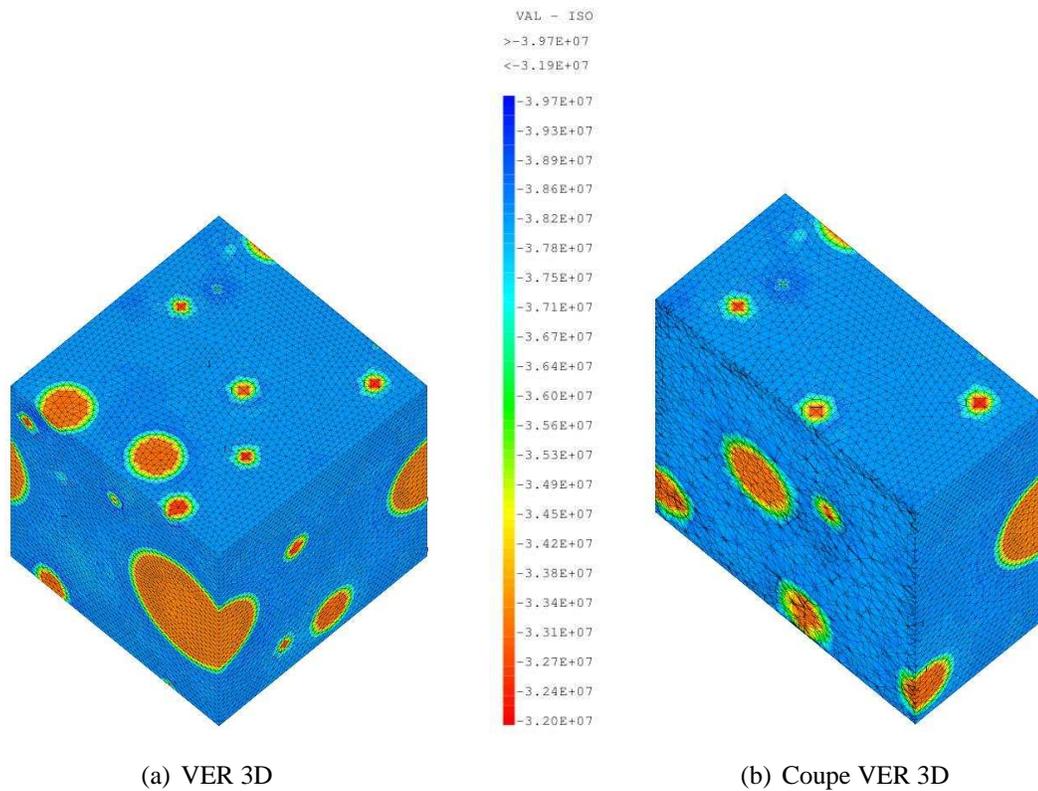


FIG. A.14: VER «polydispersé» - Fraction volumique inclusions = 15 % - Contrainte hydrostatique

Puis la contrainte équivalente au sens de *Von Mises* (Cf. figures A.15, A.16 et A.17) :

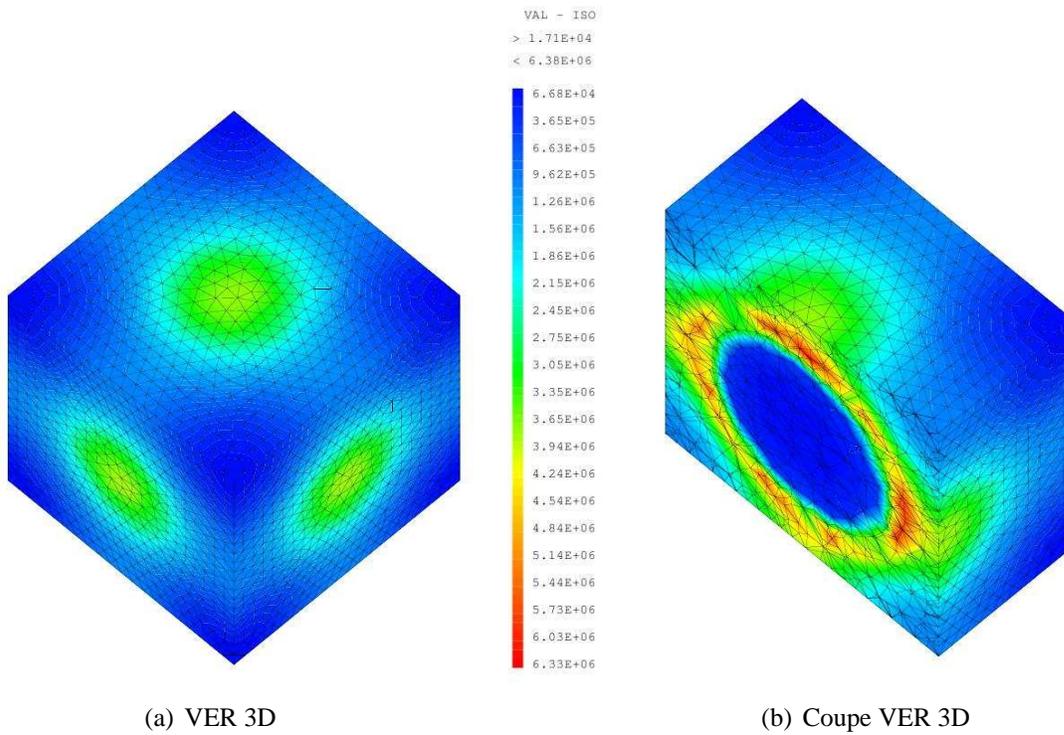


FIG. A.15: Cellule unitaire - Fraction volumique inclusions = 15 % - Contrainte équivalente (Von-Mises)

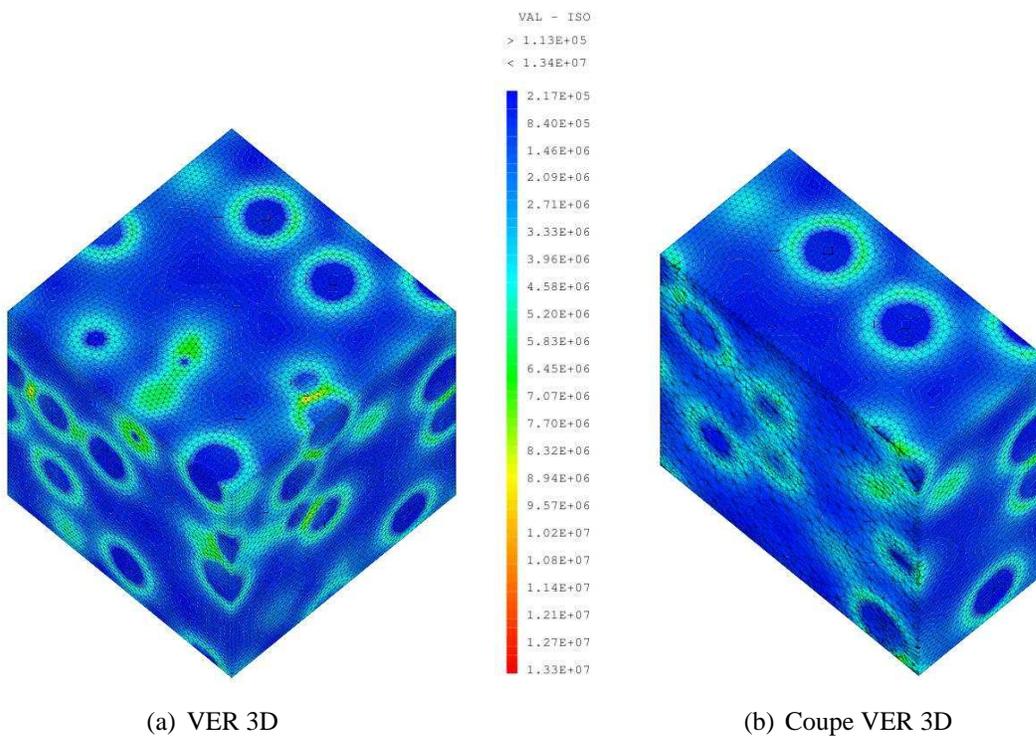


FIG. A.16: VER «monodispersé» - Fraction volumique inclusions = 15 % - Contrainte équivalente (Von-Mises)

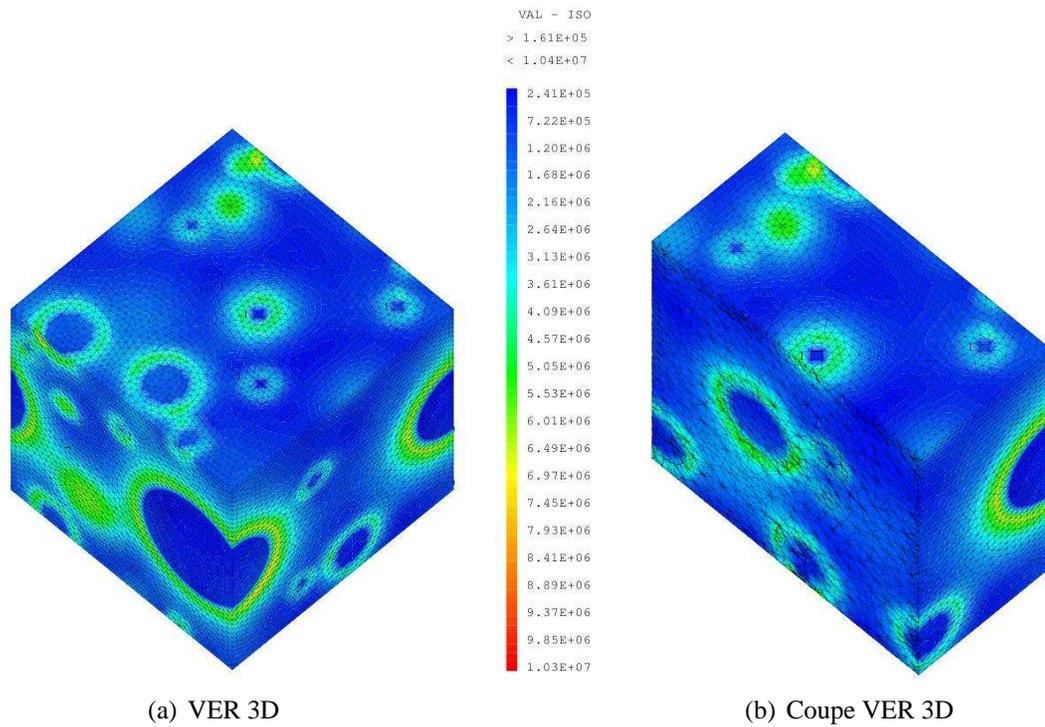


FIG. A.17: VER «polydispersé» - Fraction volumique inclusions = 15 % - Contrainte équivalente (Von-Mises)

Quelque soit le VER (cellule unitaire, monodispersé et polydispersé), la contrainte locale hydrostatique varie de -32 à -40 MPa environ. Il y a donc peu d'effet de la distribution et de la taille des inclusions. Ces fluctuations sont quasi nulles au coeur des inclusions et dans la phase matricielle. C'est surtout en périphérie des inclusions qu'elles se produisent. Elles restent donc très faibles par rapport aux fluctuations que peuvent induire les autres mécanismes (densification, gonflement solide, fluage d'irradiation, restructuration...). Les mêmes observations sont faites pour la contrainte équivalente. Pour les autres cas de chargement et de fraction volumique, des conclusions similaires ont été tirées. Par conséquent, dans le cadre de notre étude, nous avons décidé de considérer les champs élastiques homogènes, au sein de la microstructure du combustible *MOX*.

Mais, pour évaluer correctement ces champs homogènes, notamment dans les codes industriels, il est important d'estimer correctement le tenseur élastique effectif $\tilde{\underline{\underline{C}}}$. Ainsi, nous avons, tout d'abord, évalué $\tilde{\underline{\underline{C}}}$ sur le VER «polydispersé» pour trois fractions volumiques d'inclusions plutonifères. Nous avons vu au chapitre 3 paragraphe 3.4.1 que la réponse macroscopique d'un milieu hétérogène à une sollicitation est obtenue en utilisant la relation de comportement suivante :

$$\underline{\underline{\Sigma}} = \tilde{\underline{\underline{C}}} : \underline{\underline{E}} \quad (\text{A.36})$$

avec $\underline{\underline{\Sigma}}$ le tenseur des contraintes macroscopiques et $\underline{\underline{E}}$ le tenseur des déformations macroscopiques.

Cette relation peut être mise sous forme matricielle en utilisant la notation de Voigt modifiée. Nous avons alors $\tilde{\underline{\underline{C}}}$ qui s'écrit sous la forme suivante :

$$\tilde{\underline{\underline{C}}} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{23} & C_{23} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{24} & C_{24} & C_{43} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{25} & C_{25} & C_{53} & C_{54} & C_{55} & C_{56} \\ C_{26} & C_{26} & C_{63} & C_{64} & C_{65} & C_{66} \end{pmatrix} \quad (\text{A.37})$$

$\underline{\underline{\Sigma}}$ et $\underline{\underline{E}}$ sont définies par :

$$\underline{\underline{\Sigma}} = \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle = \begin{pmatrix} \Sigma_{11} \\ \Sigma_{22} \\ \Sigma_{33} \\ \Sigma_{12} \\ \Sigma_{23} \\ \Sigma_{13} \end{pmatrix}, \quad \underline{\underline{E}} = \langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle = \begin{pmatrix} E_{11} \\ E_{22} \\ E_{33} \\ E_{12} \\ E_{23} \\ E_{13} \end{pmatrix} \quad (\text{A.38})$$

Et comme le tenseur $\tilde{\underline{\underline{C}}}$ est symétrique $C_{ij} = C_{ji}$, celui-ci est entièrement déterminé par 21 coefficients indépendants. Ces coefficients sont déterminés par 6 chargements de déformation unitaire $\underline{\underline{E}}$:

$$\underline{\underline{E}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.39})$$

Nous imposons ces chargements par des déplacements périodiques entre les points des bords opposés du VER. La résolution du problème nous fournit le tenseur des contraintes locales $\underline{\underline{\sigma}}$. La moyenne de ce tenseur sur le volume du VER nous donne $\underline{\underline{\Sigma}}$ (l'opérateur INTG a été utilisé sous Cast3M pour réaliser l'opération de moyenne dans chaque élément). Ainsi, chaque cas de chargement (i fixé) fournit 6 coefficients C_{ij} , avec j variant de 1 à 6. Les trois tenseurs, évalués sur le VER polydispersé, sont présentés ci-dessous :

$$\tilde{\underline{\underline{C}}} = \begin{pmatrix} 2.0258e+11 & 8.9349e+10 & 8.9349e+10 & 1.3050e-04 & 5.2359e-06 & 1.3094e-04 \\ 8.9349e+10 & 2.0258e+11 & 8.9349e+10 & 3.5300e-06 & 1.5384e-05 & 3.4387e-06 \\ 8.9349e+10 & 8.9349e+10 & 2.0258e+11 & 1.8427e-05 & 1.6928e-06 & 1.8526e-05 \\ 1.2985e-04 & 3.5055e-06 & 1.8335e-05 & 1.1322e+11 & 2.2887e+04 & 2.3639e+04 \\ 5.2047e-06 & 1.5292e-05 & 1.6827e-06 & 2.2773e+04 & 1.1322e+11 & 1.6745e+05 \\ 1.3003e-04 & 3.4216e-06 & 1.8397e-05 & 2.3452e+04 & 1.6662e+05 & 1.1322e+11 \end{pmatrix} \text{fv 10 \%} \quad (\text{A.40})$$

$$\underset{\equiv}{\underset{\equiv}{\tilde{C}}} = \begin{pmatrix} 2.0030e+11 & 8.7627e+10 & 8.7625e+10 & 1.9221e-05 & 1.0366e-03 & 5.0059e-04 \\ 8.7627e+10 & 2.0028e+11 & 8.7616e+10 & 7.8269e-06 & 2.1714e-05 & 3.9272e-06 \\ 8.7625e+10 & 8.7616e+10 & 2.0028e+11 & 7.9333e-05 & 7.8851e-06 & 9.3051e-05 \\ 1.9126e-05 & 7.7244e-06 & 7.8939e-05 & 1.1266e+11 & 1.59285+04 & 3.8002e+04 \\ 1.0305e-03 & 2.1584e-05 & 7.8381e-06 & 1.5849e+04 & 1.1266e+11 & 2.9255e+05 \\ 4.9711e-04 & 3.9077e-06 & 9.2404e-05 & 3.7700e+04 & 2.9023e+05 & 1.1266e+11 \end{pmatrix} \text{fv 15 \%} \quad (\text{A.41})$$

$$\underset{\equiv}{\underset{\equiv}{\tilde{C}}} = \begin{pmatrix} 1.9784e+11 & 8.5760e+10 & 8.5760e+10 & 8.4537e-05 & 1.8941e-05 & 8.4712e-05 \\ 8.5760e+10 & 1.9784e+11 & 8.5760e+10 & 2.7295e-05 & 2.7517e-05 & 2.7250e-05 \\ 8.5760e+10 & 8.5760e+10 & 1.9784e+11 & 1.2288e-05 & 4.3550e-06 & 1.2309e-05 \\ 8.4117e-05 & 2.7105e-05 & 1.2227e-05 & 1.1204e+11 & 7.5928e+03 & 2.2095e+03 \\ 1.8828e-05 & 2.7353e-05 & 4.3290e-06 & 7.5550e+03 & 1.1204e+11 & 1.7823e+04 \\ 8.4123e-05 & 2.7114e-05 & 1.2224e-05 & 2.1920e+03 & 1.7734e+04 & 1.1204e+11 \end{pmatrix} \text{fv 20 \%} \quad (\text{A.42})$$

Dans un premier temps, on constate que ces tenseurs présentent les symétries majeures. En effet, l'écart entre les C_{ij} et les C_{ji} est inférieur au pourcent. De plus, dans le cas du combustible *MOX*, nous avons vu au chapitre 2 paragraphe 2.3 que son comportement macroscopique était isotrope. Le tenseur des modules élastiques d'un milieu isotrope s'écrit simplement en fonction des coefficients de Lamé (λ, μ) :

$$\underset{\equiv}{\underset{\equiv}{\tilde{C}}} = \begin{pmatrix} \lambda+2\mu & \lambda & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ & \lambda+2\mu & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ & & \lambda+2\mu & 0 & 0 & 0 \\ & & & 2\mu & 0 & 0 \\ & & & & 2\mu & 0 \\ & & & & & 2\mu \end{pmatrix} \quad (\text{A.43})$$

On peut décomposer ce tenseur en une partie sphérique et une partie déviatorique en utilisant les tenseurs isotropes $\underset{\equiv}{I}$, $\underset{\equiv}{J}$ et $\underset{\equiv}{K}$. $\underset{\equiv}{I}$, le tenseur identité, est défini par :

$$I_{ijkl} = \frac{1}{2}(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}) \quad (\text{A.44})$$

avec δ le symbole de *Kronecker*. $\underset{\equiv}{J}$, le tenseur sphérique, est défini par :

$$J_{ijkl} = \delta_{ij}\delta_{kl} \quad (\text{A.45})$$

D'où le tenseur déviatorique s'obtient en retranchant à $\underline{\underline{I}}$ le tenseur sphérique $\underline{\underline{J}}$:

$$\underline{\underline{K}} = \underline{\underline{I}} - \underline{\underline{J}} \quad (\text{A.46})$$

Le tenseur élastique effectif isotrope est alors défini par la relation suivante :

$$\underline{\underline{\tilde{C}}} = 3\lambda\underline{\underline{J}} + 2\mu\underline{\underline{I}} \quad (\text{A.47})$$

En substituant $\underline{\underline{I}}$, dans la relation (A.47), par la relation (A.46) on obtient :

$$\underline{\underline{\tilde{C}}} = 3k\underline{\underline{J}} + 2\mu\underline{\underline{K}} \quad (\text{A.48})$$

avec k le module de compressibilité et μ le module de cisaillement.

Nous avons donc, dans un deuxième temps, directement comparé nos résultats (Cf. tenseurs A.40, A.41 et A.42) avec l'expression du tenseur élastique effectif isotrope A.43. On observe une erreur maximale de un pourcent entre les coefficients qui devraient être identiques et non nuls, ainsi qu'entre ceux qui devraient être nuls et ceux non nuls. Ces résultats sont une validation de l'isotropie du comportement de notre modèle de structure aléatoire.

Des résultats identiques ont été observés pour le VER «monodispersé» (trois fractions volumiques testées : 10, 15 et 20 %). Les tenseurs effectifs du VER «monodispersé» étaient, également, très proches de celui du VER «polydispersé» (écart inférieur au pourcent pour chaque composante). Ainsi, pour ce cas d'étude (élasticité linéaire - contraste inférieur à 2 sur les propriétés matériaux - fraction volumique inférieure ou égale à 20 %), la taille des inclusions n'a pas d'impact sur le tenseur élastique effectif. Les modules de compressibilité et de cisaillement effectifs du VER «polydispersé» sont évalués à $1.27e + 11$ et $5.66e + 10$ Pa pour 10% de fraction volumique d'inclusions, $1.25e + 11$ et $5.63e + 10$ Pa pour 15 % et $1.23e + 11$ et $5.60e + 10$ Pa pour 20 %.

Ces modules effectifs, obtenus par les éléments finis, ont ensuite été comparés à ceux obtenus par le schéma d'homogénéisation analytique de *Mori-Tanaka* (Cf. annexe B paragraphe B.4). Les figures A.18 et A.19 illustrent les résultats.

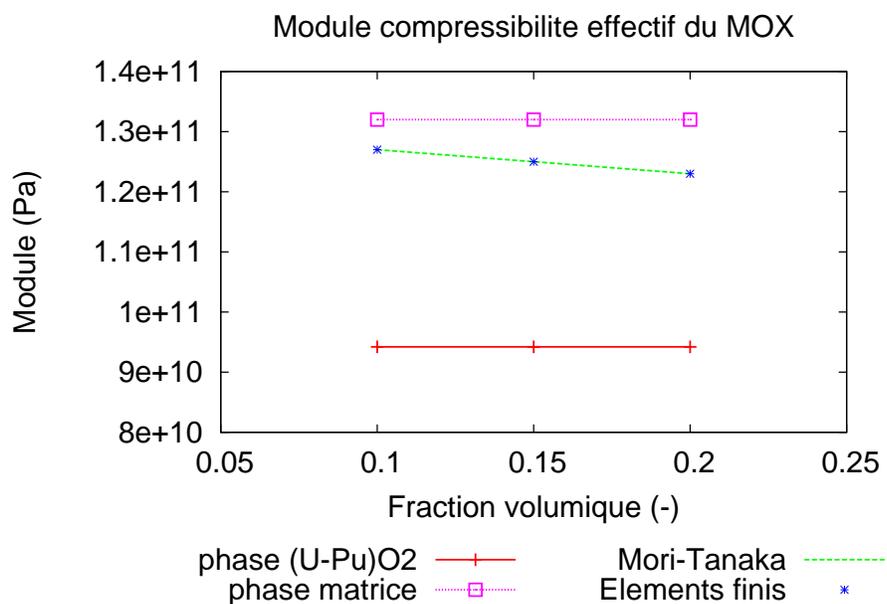


FIG. A.18: VER «polydispersé» - Influence de la fraction volumique sur le module de compressibilité effectif du combustible *MOX* - Comparaison éléments finis / schéma de *Mori-Tanaka*

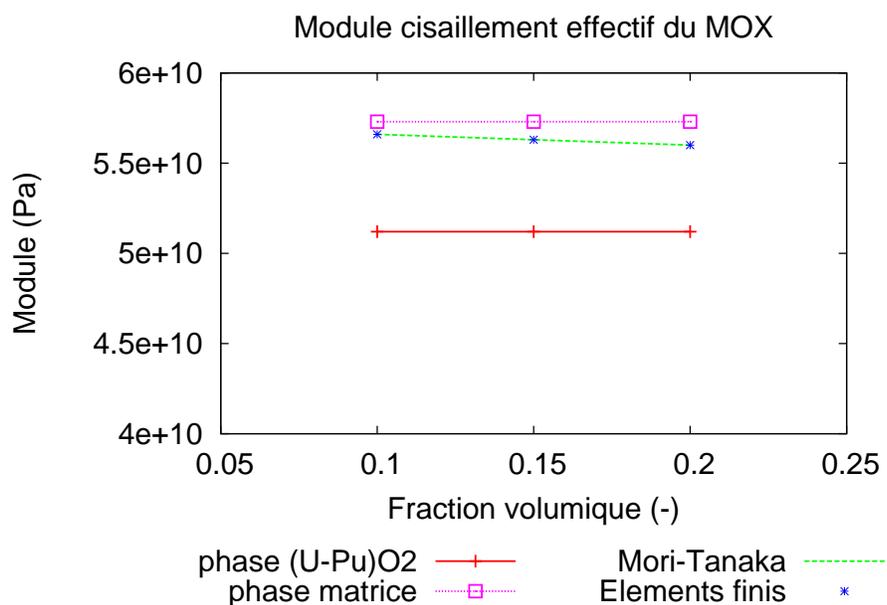


FIG. A.19: VER «polydispersé» - Influence de la fraction volumique sur le module de cisaillement effectif du combustible *MOX* - Comparaison éléments finis / schéma de *Mori-Tanaka*

On remarque que le schéma d'homogénéisation analytique, proposé par *Mori-Tanaka*, estime parfaitement les modules élastiques effectifs du combustible *MOX*. Finalement, dans toute la suite de nos études, nous considérons les champs de déformations et de contraintes élastiques comme homogènes au sein du combustible *MOX* type AUC ou ADU (Rappel : il sera intéressant en perspective de cette thèse de s'assurer que ces conclusions s'appliquent également au combustible *MOX* type ADU. A priori il y a peu de doute à avoir car les contrastes des propriétés élastiques entre la troisième phase, phase uranifère, et la matrice sont très faibles). Le modèle d'homogénéisation de *Mori-Tanaka* est utilisé pour évaluer le tenseur élastique effectif $\underline{\underline{\tilde{C}}}$ du problème d'équilibre élastique. Nous recommandons, également, l'utilisation de ce schéma d'homogénéisation dans les codes industriels $1D_{1/2}$ du crayon combustible.

Comme en élasticité, nous nous sommes interrogés sur l'hétérogénéité des autres mécanismes du combustible *MOX* (densification, gonflement solide, fluage athermique sous irradiation, restructuration). Plusieurs études de localisation ont été menées sur les trois VER (Cf. figures A.1) et pour les trois fractions volumiques retenues (10, 15 et 20 %). L'ensemble de ces études a mis en évidence des champs de déformations et de contraintes, particulièrement, hétérogènes au sein de la microstructure du combustible *MOX*, notamment dans la phase matricielle. Ces études ont donc confirmé la nécessité de prendre en compte ces déformations dans le développement du modèle NTFA. D'un point de vue formel, **la loi de comportement proposée ici est de nature viscoélastique linéaire compressible vieillissante avec des déformations libres imposées.**

A.3 Conclusion

Les études, menées dans cette annexe, nous ont permis de montrer que les champs thermiques (température et source de chaleur) et élastiques (contraintes et déformations) pouvaient être considérés comme homogènes au sein du combustible *MOX* type AUC. Dans le cadre de cette thèse, nous avons décidé également d'appliquer ces remarques au combustible *MOX* type ADU. Néanmoins, en perspective il sera intéressant vérifier ces conclusions. A priori il y a peu de doute à avoir car les contrastes entre la troisième phase, phase uranifère, et la matrice sont très faibles.

Dans les codes industriels $1D_{1/2}$ du crayon combustible, **le schéma autocohérent, proposé par *Christensen* [CHRISTENSEN, 1979], est recommandé côté thermique car il permet d'évaluer parfaitement la conductivité effective du combustible *MOX* AUC.** Côté élastique, nous recommandons le schéma d'homogénéisation analytique proposé par *Mori-Tanaka*.

Au final, pour le développement de notre modèle NTFA, le comportement des constituants du combustible *MOX* se réduit à un comportement viscoélastique linéaire compressible vieillissant avec des déformations libres imposées.

Annexe B

Annexe 2 : Principe d'*Eshelby* et quelques modèles d'homogénéisation en élasticité linéaire

Sommaire

B.1	Principe d'Eshelby	296
B.1.1	Problème d'Eshelby homogène [ESHELBY, 1957]	296
B.1.2	Problème d'Eshelby inhomogène [ESHELBY, 1961]	298
B.2	Schéma des distributions diluées	299
B.3	Schéma auto-cohérent [KRÖNER, 1958], [HILL, 1965]	300
B.4	Schéma de Mori-Tanaka [MORI and TANAKA, 1973]	300
B.5	Encadrement -Bornes	301
B.5.1	Bornes de Voigt et de Reuss [PAUL, 1960]	301
B.5.2	Bornes de Hashin et Shtrikman [HASHIN and SHTRIKMAN, 1963]	303
B.5.3	Bornes du troisième ordre	307
B.6	Conclusion	307

B.1 Principe d'Eshelby

Le problème de l'inclusion est un problème de base en mécanique des milieux hétérogènes. *Eshelby* (Cf. [ESHELBY, 1957]) a traité le problème dans le cas d'une inclusion ellipsoïdale élastique dans une matrice infinie élastique.

B.1.1 Problème d'Eshelby homogène [ESHELBY, 1957]

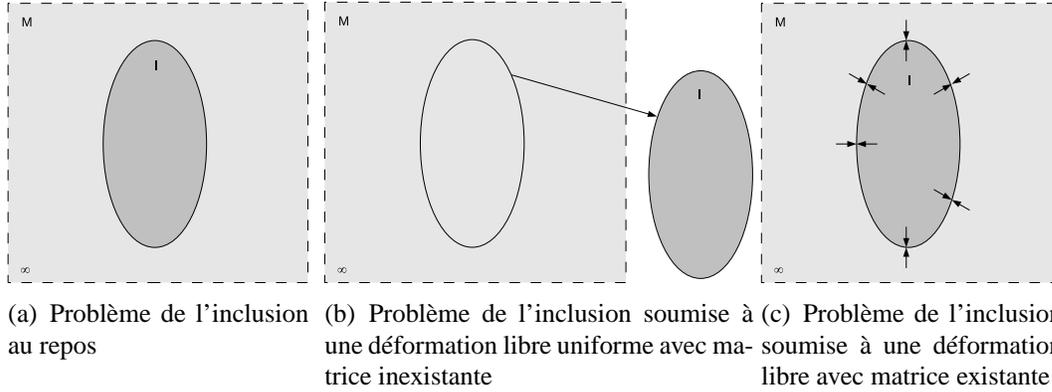


FIG. B.1: Problème d'Eshelby homogène sans chargement macroscopique [ESHELBY, 1957]

1. *État au repos* : soit M un milieu infini homogène élastique linéaire de module $\underline{\underline{C}}$, sans contrainte, ni déformation résiduelle, et I un domaine ellipsoïdal fini de ce milieu infini qu'on appelle inclusion. L'état du système est alors défini par les relations (B.1) et (B.2) et la figure B.1(a).

$$\text{Dans l'inclusion : } \begin{cases} \underline{\underline{\sigma}}^I = 0 \\ \underline{\underline{\epsilon}}^I = 0 \end{cases} \quad (\text{B.1})$$

$$\text{Dans la matrice : } \begin{cases} \underline{\underline{\sigma}}^M = 0 \\ \underline{\underline{\epsilon}}^M = 0 \end{cases} \quad (\text{B.2})$$

2. *Déformation libre et uniforme de l'inclusion - matrice inexistante* : supposons maintenant que l'inclusion subit une déformation libre uniforme (dilatation thermique, changement de phase ...). En l'absence de matrice, l'inclusion se déformerait librement sans contrainte. L'état du système est alors défini par les relations (B.3) et la figure B.1(b).

$$\text{Dans l'inclusion : } \begin{cases} \underline{\underline{\sigma}}^I = 0 \\ \underline{\underline{\epsilon}}^I = \underline{\underline{\epsilon}}^L \end{cases} \quad (\text{B.3})$$

3. *Déformation libre et uniforme de l'inclusion - matrice existante* : dans ce cas la matrice s'oppose à la déformation de l'inclusion. Un état d'équilibre s'installe : l'inclusion se trouve dans un état déformé différent de celui de déformation libre, mais la matrice se déforme également. L'état du système est donc défini par les relations (B.4) et la figure B.1(c).

$$\text{Champs de contraintes : } \begin{cases} \underline{\underline{\sigma}}^I = \underline{\underline{C}} : (\underline{\underline{\epsilon}}^I - \underline{\underline{\epsilon}}^L) \\ \underline{\underline{\sigma}}^M = \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{\epsilon}}^M \end{cases} \quad (\text{B.4})$$

4. *Matrice chargée uniformément à l'infini* : dans le cas où la matrice est chargée uniformément à l'infini :

- déformation homogène $\underline{\underline{E}}^0$
- contrainte homogène $\underline{\underline{\Sigma}}^0$

on peut écrire, par superposition, la déformation ou la contrainte dans l'inclusion (dans le cas homogène $\underline{\underline{\Sigma}}^0 = \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{E}}^0$), de la façon suivante :

$$\text{Dans l'inclusion : } \begin{cases} \underline{\underline{\epsilon}}^I = \underline{\underline{E}}^0 + \underline{\underline{S}}^E : \underline{\underline{\epsilon}}^L \\ \underline{\underline{\sigma}}^I = \underline{\underline{\Sigma}}^0 + \underline{\underline{C}} : (\underline{\underline{S}}^E - \underline{\underline{I}}) : \underline{\underline{\epsilon}}^L \end{cases} \quad (\text{B.13})$$

avec $\underline{\underline{I}}$ le tenseur identité d'ordre 4.

En injectant dans la seconde équation de (B.13) $\underline{\underline{\epsilon}}^L$ (obtenue de la première équation), on obtient la relation suivante :

$$\underline{\underline{\sigma}}^I = \underline{\underline{\Sigma}}^0 + \underline{\underline{C}} : (\underline{\underline{S}}^E - \underline{\underline{I}}) : (\underline{\underline{S}}^E)^{-1} : (\underline{\underline{\epsilon}}^I - \underline{\underline{E}}^0) = \underline{\underline{\Sigma}}^0 + \underline{\underline{C}}^* : (\underline{\underline{E}}^0 - \underline{\underline{\epsilon}}^I) \quad (\text{B.14})$$

On note $\underline{\underline{C}}^*$ le tenseur d'influence de Hill $\underline{\underline{C}}^* = \underline{\underline{C}} : \left((\underline{\underline{S}}^E)^{-1} - \underline{\underline{I}} \right)$.

B.1.2 Problème d'Eshelby inhomogène [ESHELBY, 1961]

La solution du problème de l'inclusion, cité ci-dessus, peut être utilisée pour aborder d'autres situations, dont en particulier le problème d'Eshelby inhomogène. On considère le problème suivant une inclusion ellipsoïdal H , de rigidité $\underline{\underline{C}}^H = \underline{\underline{C}} + \Delta \underline{\underline{C}}^H$ et non soumise à une déformation libre $\underline{\underline{\epsilon}}^L$, noyée dans une matrice infinie M , de rigidité $\underline{\underline{C}}$, soumise à une déformation homogène sur son contour $\underline{\underline{E}}^0$ (Cf. figure B.2(b)). La contrainte de polarisation $\underline{\underline{p}} = -\underline{\underline{C}} : \underline{\underline{\epsilon}}^L$ qui apparaît dans le problème de l'inclusion homogène, peut être remplacée par l'expression suivante dans le problème hétérogène :

$$\underline{\underline{p}} = (\underline{\underline{C}}^H - \underline{\underline{C}}) : \underline{\underline{\epsilon}}^H \quad (\text{B.15})$$

$\underline{\underline{\epsilon}}^H$ désignant la déformation de l'inclusion. On a donc les relations suivantes :

$$\begin{cases} -\underline{\underline{C}} : \underline{\underline{\epsilon}}^L = (\underline{\underline{C}}^H - \underline{\underline{C}}) : \underline{\underline{\epsilon}}^H \\ \underline{\underline{\epsilon}}^L = -\underline{\underline{C}}^{-1} : (\underline{\underline{C}}^H - \underline{\underline{C}}) : \underline{\underline{\epsilon}}^H \end{cases} \quad (\text{B.16})$$

En remplaçant $\underline{\underline{\epsilon}}^L$ de l'équation (B.16) dans l'équation (B.14) on obtient la solution du problème hétérogène :

$$\underline{\underline{\epsilon}}^H = \underline{\underline{E}}^0 - \underline{\underline{S}}^E : \underline{\underline{C}}^{-1} : (\underline{\underline{C}}^H - \underline{\underline{C}}) : \underline{\underline{\epsilon}}^H \quad (\text{B.17})$$

soit,

$$\underline{\underline{\epsilon}}^H = \left(\underline{\underline{I}} + \underline{\underline{S}}^E : \underline{\underline{C}}^{-1} : (\underline{\underline{C}}^H - \underline{\underline{C}}) \right)^{-1} : \underline{\underline{E}}^0 \quad (\text{B.18})$$

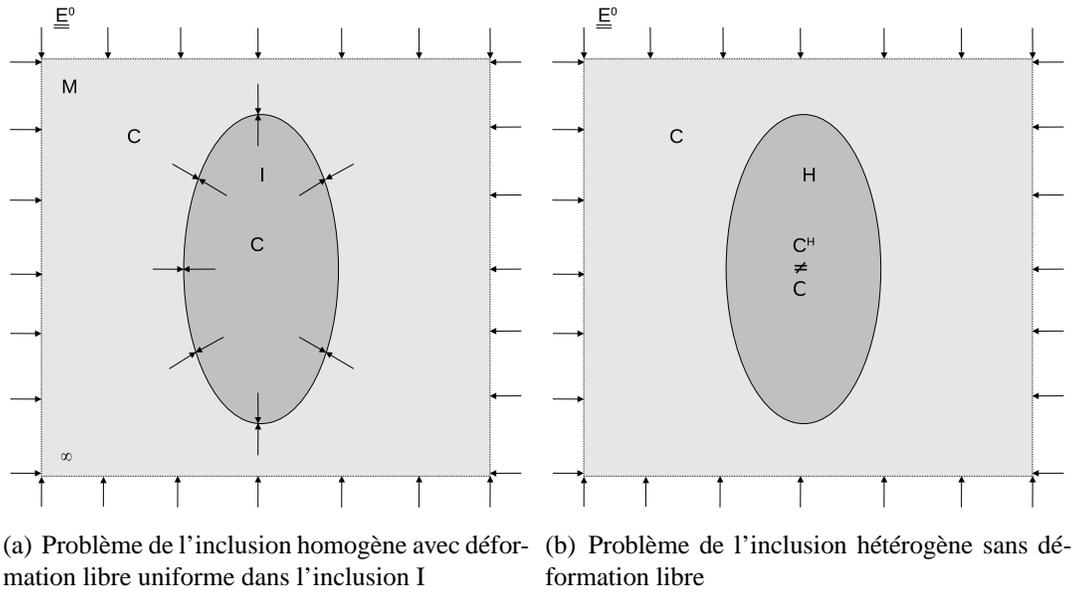


FIG. B.2: Problème de l'inclusion d'Eshelby Homogène avec déformation libre et Hétérogène sans déformation libre Chargement en déformation homogène à l'infini

On voit donc apparaître le tenseur de localisation dans l'hétérogénéité :

$$\underline{\underline{A}}^H = \left(\underline{\underline{I}} + \underline{\underline{S}}^E : \underline{\underline{C}}^{-1} : (\underline{\underline{C}}^H - \underline{\underline{C}}) \right)^{-1} \quad (\text{B.19})$$

La résolution du problème de localisation peut utiliser la solution élémentaire de l'inclusion, en considérant que les grandeurs locales sont affectées à diverses configurations successives d'inclusions, la matrice jouant le rôle de l'ensemble des éléments autres que ceux individualisés en inclusions. $\underline{\underline{C}}$ est ce qui est fait dans de nombreux modèles analytiques en élasticité linéaire. Ils consistent à remplacer le milieu M par un milieu de référence possédant des rigidités judicieusement choisies. Dans les paragraphes suivants, nous présentons certains de ces schémas linéaires d'homogénéisation basés sur le problème de l'inclusion.

B.2 Schéma des distributions diluées

Ce schéma s'applique aux milieux hétérogènes constitués de n inclusions (phase dont l'indice commence à 2) dans une matrice (phase d'indice 1). Ce schéma considère que chaque inclusion est noyée, seule, dans la matrice de rigidité $\underline{\underline{C}}_m$. On applique donc le résultat du problème précédent (Cf. equation B.19) à chaque inclusion afin d'obtenir les tenseurs de localisation de chaque phase :

$$\underline{\underline{A}}_i = \left(\underline{\underline{I}} + \underline{\underline{S}}_i^E : \underline{\underline{C}}_m^{-1} : (\underline{\underline{C}}_i - \underline{\underline{C}}_m) \right)^{-1} \quad (\text{B.20})$$

avec i l'indice de la phase inclusionnaire. Le comportement homogénéisé est donné par l'équation (3.26) et en utilisant le tenseur de localisation défini par l'équation (B.20) :

$$\underline{\underline{\tilde{C}}} = \underline{\underline{C}}_m + \sum_{i=2}^n c_i (\underline{\underline{C}}_i - \underline{\underline{C}}_m) : \underline{\underline{A}}_i = \underline{\underline{C}}_m + \sum_{i=2}^n c_i (\underline{\underline{C}}_i - \underline{\underline{C}}_m) : \left(\underline{\underline{I}} + \underline{\underline{S}}_i^E : \underline{\underline{C}}_m^{-1} : (\underline{\underline{C}}_i - \underline{\underline{C}}_m) \right)^{-1} \quad (\text{B.21})$$

Il est important de noter que ce schéma **ne prend pas en compte les interactions entre les inclusions** ce qui le limite à de faibles fractions volumiques.

B.3 Schéma auto-cohérent [KRÖNER, 1958], [HILL, 1965]

On considère que chaque phase est tour à tour, rassemblée dans un inclusion ellipsoïdale, et on assimile le milieu hétérogène qui l'entoure, *le milieu de référence*, au *milieu homogène équivalent recherché*.

Le modèle autocohérent peut s'appliquer à des matériaux multiphasés dans lesquels aucune des phases ne joue le rôle de la matrice (par exemple les matériaux polycristallins). Le comportement du milieu homogène équivalent est identifié en faisant jouer à chaque phase le rôle de l'inclusion, le comportement de la matrice restant le même, et en réalisant les opérations de moyenne adéquates entre les diverses configurations (avec comme poids relatifs les fractions volumiques de chaque phase).

Si $\underline{\underline{\tilde{C}}}$ correspond au tenseur de rigidité effectif, alors le tenseur de localisation de la phase i s'écrit, d'après l'équation (B.19) :

$$\underline{\underline{A}}_i = \left(\underline{\underline{I}} + \underline{\underline{S}}_i^E : \underline{\underline{\tilde{C}}}^{-1} : (\underline{\underline{C}}_i - \underline{\underline{\tilde{C}}}) \right)^{-1} \quad (\text{B.22})$$

On a donc le tenseur des rigidités homogénéisé qui est donné par l'équation (3.25) :

$$\underline{\underline{\tilde{C}}} = \sum_{i=1}^n c_i \underline{\underline{C}}_i : \underline{\underline{A}}_i = \sum_{i=1}^n c_i \underline{\underline{C}}_i : \left(\underline{\underline{I}} + \underline{\underline{S}}_i^E : \underline{\underline{\tilde{C}}}^{-1} : (\underline{\underline{C}}_i - \underline{\underline{\tilde{C}}}) \right)^{-1} \quad (\text{B.23})$$

Il s'agit d'une équation implicite en $\underline{\underline{\tilde{C}}}$. L'équation est, généralement, résolue de manière numérique.

B.4 Schéma de Mori-Tanaka [MORI and TANAKA, 1973]

Ce schéma correspond à des milieux hétérogènes constitués d'inclusions dans une matrice (cas des combustibles *MOX*). Le principe est le suivant : les inclusions sont réparties de manière isotrope et se comportent en moyenne comme des inclusions isolées dans une matrice infinie soumise à l'infini à la déformation moyenne de la matrice, notée $\underline{\underline{\epsilon}}_m$. Cette déformation est une inconnue du problème. On relie alors les déformations de chaque inclusion à cette déformation moyenne par des pseudo-tenseurs de localisation $\underline{\underline{W}}_i$ solution du problème (B.19) :

$$\underline{\underline{\epsilon}}_i = \underline{\underline{W}}_i : \underline{\underline{\epsilon}}_m \quad (\text{B.24})$$

$$\text{avec } \underline{\underline{W}}_i = \left(\underline{\underline{I}} + \underline{\underline{S}}_i^E : \underline{\underline{C}}_m^{-1} : (\underline{\underline{C}}_i - \underline{\underline{C}}_m) \right)^{-1}.$$

Sachant que $\langle \underline{\underline{\epsilon}} \rangle = \underline{\underline{E}}$, le tenseur de localisation de chaque phase s'écrit alors :

$$\underline{\underline{A}}_i = \underline{\underline{W}}_i : \left(\sum_{j=1}^n c_j \underline{\underline{W}}_j \right)^{-1} \quad (\text{B.25})$$

On en déduit le tenseur de rigidité homogénéisé par l'équation (3.26) :

$$\underline{\underline{\tilde{C}}} = \underline{\underline{C}}_m + \sum_{i=2}^n c_i (\underline{\underline{C}}_i - \underline{\underline{C}}_m) : \underline{\underline{A}}_i = \underline{\underline{C}}_m + \sum_{i=2}^n c_i (\underline{\underline{C}}_i - \underline{\underline{C}}_m) : \underline{\underline{W}}_i : \left(\sum_{j=1}^n c_j \underline{\underline{W}}_j \right)^{-1} \quad (\text{B.26})$$

Dans ce cas, le calcul de $\underline{\underline{\tilde{C}}}$ est explicite et non plus implicite comme dans le cas du modèle auto-cohérent car le milieu de référence est connu : la matrice. Contrairement au modèle de distributions diluées, les interactions entre les inclusions sont prises en compte mais de manière simplifiée. Par conséquent, suivant le contraste des constituants et la précision souhaitée, ce modèle reste correct jusqu'à des fractions volumiques d'inclusions ne dépassant pas 10 à 20 % (Cf. [BORNERT et al., 2001]).

B.5 Encadrement -Bornes

La détermination de bornes ou d'encadrement des propriétés effectives du milieu hétérogène est une approche complémentaire à la recherche d'estimation de leur comportement effectif. Celles-ci sont obtenues en ayant recours à la formulation variationnelle du problème mécanique.

B.5.1 Bornes de Voigt et de Reuss [PAUL, 1960]

1. *Formulation variationnelle - Problème élastique* : soit V le VER et ∂V sa surface de normale extérieure \underline{n} . Le chargement mécanique est constitué de déplacement imposé \underline{u}^d sur une partie de sa surface ∂V^u , de contrainte imposée $\underline{\underline{\Sigma}}^0$ sur la partie complémentaire ∂V^Σ et de force volumique \underline{f} dans V .

La résolution du problème élastique, ainsi défini, consiste à trouver les champs \underline{u} , $\underline{\underline{\varepsilon}}$ et $\underline{\underline{\sigma}}$ sur V , tels que :

- \underline{u} et $\underline{\underline{\varepsilon}}$ soient cinématiquement admissibles (**CA**) avec les conditions aux limites cinématiques,

$$\underline{u} \text{ et } \underline{\underline{\varepsilon}} \text{ sont CA avec } \underline{u}^d : \begin{cases} \underline{\underline{\varepsilon}} = \frac{1}{2} (\underline{\underline{gradu}} + {}^T \underline{\underline{gradu}}) \\ \underline{u} \text{ continu dans } V \\ \underline{u} = \underline{u}^d \text{ sur } \partial V^u \end{cases} \quad (\text{B.27})$$

- $\underline{\underline{\sigma}}$ soit statistiquement admissible (**SA**) avec les données statiques,

$$\underline{\underline{\sigma}} \text{ est SA avec } \underline{\underline{\Sigma}}^0 \text{ et } \underline{f} : \begin{cases} \text{div} \underline{\underline{\sigma}} + \underline{f} = 0 \text{ dans } V \\ \underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{n} = \underline{\underline{\Sigma}}^0 \text{ sur } \partial V^\Sigma \end{cases} \quad (\text{B.28})$$

- $\underline{\underline{\varepsilon}}$ et $\underline{\underline{\sigma}}$ vérifient la loi de comportement en tout point de V :

$$\text{Lois de comportement} : \begin{cases} \underline{\underline{\sigma}}(\underline{x}) = \frac{\partial w}{\partial \underline{\underline{\varepsilon}}} (\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{x})) \\ \text{ou, } \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{x}) = \frac{\partial \phi}{\partial \underline{\underline{\sigma}}} (\underline{\underline{\sigma}}(\underline{x})) \end{cases} \quad (\text{B.29})$$

avec ϕ le potentiel dual de w . w étant l'énergie libre.

Les équations peuvent être réécrites sous une forme faible équivalente. On obtient alors les inégalités suivantes :

$$-\Phi(\underline{\underline{\sigma}}^*) \leq -\Phi(\underline{\underline{\sigma}}) = W(\underline{u}) \leq W(\underline{u}^*) \quad (\text{B.30})$$

avec :

$$\Phi(\underline{\underline{\sigma}}^*) = \int_V \phi(\underline{\underline{\sigma}}^*, \underline{x}) dV - \int_{\partial V^u} \underline{n} \cdot \underline{\underline{\sigma}}^* \cdot \underline{u}^d dS \quad (\text{B.31})$$

($\underline{\underline{\sigma}}^*$ est **SA**) et :

$$W(\underline{u}^*) = \int_V w(\underline{\underline{\epsilon}}^*, \underline{x}) dV - \int_V \underline{u}^* \cdot \underline{f} dV - \int_{\partial V^\Sigma} \underline{n} \cdot \underline{\underline{\Sigma}}^0 \cdot \underline{u}^* dS \quad (\text{B.32})$$

(\underline{u}^* est **CA**) W et Φ sont l'énergie potentielle et l'énergie complémentaire.

Dans le cas où $\underline{\underline{\Sigma}}^0 = 0$, $\underline{f} = 0$, $\underline{u}^d = \underline{E}^0 \cdot \underline{x}$ (déformation homogène au bord) et sachant que $\left\langle \underline{\underline{\epsilon}} : \underline{\underline{c}} : \underline{\underline{\epsilon}} \right\rangle = \underline{E}^0 : \underline{\underline{\tilde{C}}} : \underline{E}^0$ (lemme de Hill), on trouve l'encadrement suivant :

$$2\langle \underline{\underline{\sigma}}^* \rangle : \underline{E}^0 - \left\langle \underline{\underline{\sigma}}^* : \underline{\underline{s}} : \underline{\underline{\sigma}}^* \right\rangle \leq \underline{E}^0 : \underline{\underline{\tilde{C}}} : \underline{E}^0 \leq \left\langle \underline{\underline{\epsilon}}^* : \underline{\underline{c}} : \underline{\underline{\epsilon}}^* \right\rangle \quad (\text{B.33})$$

avec $\underline{\underline{\tilde{C}}}$ le tenseur des modules effectifs, $\underline{\underline{c}}$ est le tenseur des modules de rigidité locaux, $\underline{\underline{s}}$ le tenseur des modules de souplesse locaux et \underline{E}^0 la déformation macroscopique.

Le choix de champs de contraintes **SA** $\underline{\underline{\sigma}}^*$ et de déformations **CA** $\underline{\underline{\epsilon}}^*$ adéquates permet d'encadrer l'énergie W du système et conduit aux différentes bornes.

2. *Bornes de Voigt et de Reuss* : ces bornes sont d'ordre un car elles nécessitent uniquement la connaissance de la fraction volumique des constituants. On considère les champs homogènes :

$$\begin{cases} \underline{\underline{\epsilon}}^* = \underline{\underline{\epsilon}}^0 \\ \underline{\underline{\sigma}}^* = \underline{\underline{\sigma}}^0 \end{cases} \quad (\text{B.34})$$

En choisissant $\underline{\underline{\epsilon}}^0 = \underline{E}^0$ et $\underline{\underline{\sigma}}^0 = \left\langle \underline{\underline{s}} \right\rangle^{-1} : \underline{E}^0$, l'équation (B.33) donne l'inégalité suivante (inégalité au sens des formes quadratiques associées) :

$$\text{borne de Reuss } \left\langle \underline{\underline{s}} \right\rangle^{-1} \leq \underline{\underline{\tilde{C}}} \leq \left\langle \underline{\underline{c}} \right\rangle \text{ borne de Voigt} \quad (\text{B.35})$$

Ces bornes ne prennent pas en compte la distribution des déformations et des contraintes au niveau local. De plus, lorsque le contraste entre les phases est grand, les deux bornes donnent un encadrement très large. Elles n'ont qu'une utilité restreinte (toute estimation doit être comprise entre ces bornes).

En supposant isotrope la répartition spatiale des constituants, les bornes de *Hashin et Shtrikman* (Cf. [HASHIN, 1962],[HASHIN and SHTRIKMAN, 1963]), basées sur le problème de l'inclusion, constituent des bornes plus resserrées que les bornes de *Voigt et Reuss*. L'évaluation de ces bornes est présentée dans le paragraphe suivant.

B.5.2 Bornes de Hashin et Shtrikman [HASHIN and SHTRIKMAN, 1963]

1. *Formulation variationnelle de Hashin et Shtrikman* : comme précédemment, l'objectif est de construire des estimations et des encadrements des modules effectifs en cherchant à résoudre le problème de localisation, c'est à dire qu'on cherche à déterminer les champs locaux $\underline{\underline{\varepsilon}}$ et $\underline{\underline{\sigma}}$ induits dans V par un chargement macrohomogène appliqué sur ∂V tel que la déformation macroscopique soit égale à $\underline{\underline{E}}$.

On pose :

$$\underline{\underline{\sigma}}(x) = \underline{\underline{C}}(x) : \underline{\underline{\varepsilon}}(x) = \underline{\underline{C}}^0 : \underline{\underline{\varepsilon}}(x) + \left(\underline{\underline{C}}(x) - \underline{\underline{C}}^0 \right) : \underline{\underline{\varepsilon}}(x) = \underline{\underline{C}}^0 : \underline{\underline{\varepsilon}}(x) + \underline{\underline{p}}(x) \quad (\text{B.36})$$

où $\underline{\underline{C}}^0$ est homogène et $\underline{\underline{p}}(x)$ le champ de polarisation.

La construction de ces champs est en général difficile. La formulation de *Hashin et Shtrikman* (Cf. [HASHIN, 1962],[HASHIN and SHTRIKMAN, 1963]) permet de surmonter cette difficulté. Les champs admissibles $\underline{\underline{\varepsilon}}^*(x)$ et $\underline{\underline{\sigma}}^*(x)$ sont construits par la résolution du problème auxiliaire défini à partir de la même géométrie que le problème initial, les mêmes chargements et conditions aux limites, mais sur un milieu homogène de référence arbitraire de tenseur des modules d'élasticité $\underline{\underline{C}}^0$, qui subit, en plus, des déformations de transformation hétérogènes caractérisées par un champ de polarisation $\underline{\underline{p}}^*(x)$ défini par :

$$\forall x \in V \quad \underline{\underline{p}}(x) = \left(\underline{\underline{C}}(x) - \underline{\underline{C}}^0 \right) : \underline{\underline{\eta}}^*(x) \quad (\text{B.37})$$

avec $\underline{\underline{\eta}}^*(x)$ tenseur d'ordre deux, ayant la dimension d'une déformation.

Les champs $\left(\underline{\underline{u}}^*(x), \underline{\underline{\varepsilon}}^*(x), \underline{\underline{\sigma}}^*(x) \right)$ tels que :

$$\left\{ \begin{array}{l} \underline{\underline{u}}^*(x) \text{ et } \underline{\underline{\varepsilon}}^*(x) \text{ sont CA avec } \underline{\underline{u}}^d \\ \underline{\underline{\sigma}}^*(x) \text{ est SA avec } \underline{\underline{\Sigma}}^0 \text{ et } \underline{\underline{f}}(x) \\ \underline{\underline{\sigma}}^*(x) = \underline{\underline{C}}^0 : \underline{\underline{\varepsilon}}^*(x) + \left(\underline{\underline{C}}(x) - \underline{\underline{C}}^0 \right) : \underline{\underline{\eta}}^*(x) \end{array} \right. \quad (\text{B.38})$$

sont admissibles pour le problème initial. De plus, si $\underline{\underline{p}}^*(x) = \left(\underline{\underline{C}}(x) - \underline{\underline{C}}^0 \right) : \underline{\underline{\varepsilon}}^*(x)$ alors ils sont uniques (Cf. [BORNERT, 1996]).

Soient $(\underline{\underline{U}}, \underline{\underline{E}}, \underline{\underline{\Sigma}})$ la solution du problème auxiliaire avec polarisation nulle :

$$\left\{ \begin{array}{l} \underline{\underline{U}} \text{ et } \underline{\underline{E}} \text{ sont CA avec } \underline{\underline{u}}^d \\ \underline{\underline{\Sigma}} \text{ est SA avec } \underline{\underline{\Sigma}}^0 \text{ et } \underline{\underline{f}}(x) \\ \underline{\underline{\Sigma}} = \underline{\underline{C}}^0 : \underline{\underline{E}} \end{array} \right. \quad (\text{B.39})$$

L'énergie potentielle s'écrit :

$$W^0(\underline{\underline{U}}) = \frac{1}{2} \int_V \underline{\underline{E}} : \underline{\underline{C}}^0 : \underline{\underline{E}} - \int_V \underline{\underline{f}} \cdot \underline{\underline{U}} dV - \int_{\partial V \Sigma} \underline{\underline{\Sigma}}^0 \cdot \underline{\underline{U}} dS \quad (\text{B.40})$$

et l'énergie complémentaire :

$$\Phi^0(\underline{\underline{\Sigma}}) = \frac{1}{2} \int_V \underline{\underline{\Sigma}} : \underline{\underline{S}}^0 : \underline{\underline{\Sigma}} - \int_{\partial V^u} \underline{n} \cdot \underline{\underline{\Sigma}} \cdot \underline{u}^d dS \quad (\text{B.41})$$

On note $(\underline{u}^*(x), \underline{\underline{\epsilon}}^*(x), \underline{\underline{\sigma}}^*(x))$ l'écart à la solution $(\underline{u}^*(x), \underline{\underline{\epsilon}}^*(x), \underline{\underline{\sigma}}^*(x))$:

$$\begin{cases} \underline{u}^*(x) = \underline{U} + \underline{u}^{*'}(x) \\ \underline{\underline{\epsilon}}^*(x) = \underline{\underline{E}} + \underline{\underline{\epsilon}}^{*'}(x) \\ \underline{\underline{\sigma}}^*(x) = \underline{\underline{\Sigma}} + \underline{\underline{\sigma}}^{*'}(x) \end{cases} \quad (\text{B.42})$$

On a :

$$\int_V \underline{\underline{\sigma}}^{*'} : \underline{\underline{\epsilon}}^{*'} dV = \int_V \left[\underline{\underline{C}}^0 : (\underline{\underline{\epsilon}}^* - \underline{\underline{E}}) + (\underline{\underline{C}} - \underline{\underline{C}}^0) : \underline{\underline{\eta}}^* \right] : [\underline{\underline{\epsilon}}^* - \underline{\underline{E}}] dV = 0 \quad (\text{B.43})$$

et par le principe des travaux virtuels :

$$\int_V \underline{\underline{\Sigma}} : \underline{\underline{\epsilon}}^{*'} dV = \int_V \underline{\underline{E}} : \underline{\underline{C}}^0 : [\underline{\underline{\epsilon}}^* - \underline{\underline{E}}] dV = \int_V \underline{f} \cdot (\underline{u}^* - \underline{U}) dV + \int_{\partial V^{\Sigma}} \underline{\underline{\Sigma}}^0 \cdot (\underline{u}^* - \underline{U}) dS \quad (\text{B.44})$$

On obtient alors l'écart entre l'énergie potentielle du problème initial et celle du problème auxiliaire à polarisation nulle :

$$2 [W(\underline{u}^*) - W^0(\underline{U})] = \int_V \underline{\underline{\epsilon}}^* : (\underline{\underline{C}} - \underline{\underline{C}}^0) : \underline{\underline{\epsilon}}^* dV - \int_V \underline{\underline{\epsilon}}^{*'} : (\underline{\underline{C}} - \underline{\underline{C}}^0) : \underline{\underline{\eta}}^* dV \quad (\text{B.45})$$

On peut alors écrire l'énergie potentielle sous la forme :

$$W(\underline{u}^*) = HS^0(\underline{\underline{\eta}}^*) + \frac{1}{2} \int_V (\underline{\underline{\eta}}^* - \underline{\underline{\epsilon}}^*) : (\underline{\underline{C}} - \underline{\underline{C}}^0) : (\underline{\underline{\eta}}^* - \underline{\underline{\epsilon}}^*) dV \quad (\text{B.46})$$

avec $HS^0(\underline{\underline{\eta}}^*)$ la fonctionnelle de Hashin et Shtrikman associée au milieu de référence $\underline{\underline{C}}^0$, à la géométrie et au chargement considérés :

$$HS^0(\underline{\underline{\eta}}^*) = W^0(\underline{U}) + \frac{1}{2} \int_V \underline{\underline{\eta}}^* : (\underline{\underline{C}} - \underline{\underline{C}}^0) : (\underline{\underline{E}} + \underline{\underline{\epsilon}}^* - \underline{\underline{\eta}}^*) dV \quad (\text{B.47})$$

De la même façon, on obtient une relation pour l'énergie complémentaire :

$$\begin{cases} \Phi(\underline{\underline{\sigma}}^*) = \Phi^0(\underline{\underline{\Sigma}}) + \frac{1}{2} \int_V \underline{\underline{\eta}}^* : \underline{\underline{C}} : (\underline{\underline{S}} - \underline{\underline{S}}^0) : (\underline{\underline{\Sigma}} - \underline{\underline{\sigma}}^* - \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{\eta}}^*) dV \\ + \frac{1}{2} \int_V (\underline{\underline{C}} : \underline{\underline{\eta}}^* - \underline{\underline{\sigma}}^*) : (\underline{\underline{S}} - \underline{\underline{S}}^0) : (\underline{\underline{C}} : \underline{\underline{\eta}}^* - \underline{\underline{\sigma}}^*) dV \end{cases} \quad (\text{B.48})$$

soit

$$\begin{cases} \Phi(\underline{\underline{\sigma}}^*) = \Phi^0(\underline{\underline{\Sigma}}) - \frac{1}{2} \int_V \underline{\underline{\eta}}^* : (\underline{\underline{C}} - \underline{\underline{C}}^0) : (\underline{\underline{E}} - \underline{\underline{\epsilon}}^* - \underline{\underline{\eta}}^*) dV \\ + \frac{1}{2} \int_V (\underline{\underline{C}} : \underline{\underline{\eta}}^* - \underline{\underline{\sigma}}^*) : (\underline{\underline{S}} - \underline{\underline{S}}^0) : (\underline{\underline{C}} : \underline{\underline{\eta}}^* - \underline{\underline{\sigma}}^*) dV \end{cases} \quad (\text{B.49})$$

Or comme $\Phi^0(\underline{\underline{\Sigma}}) = -W^0(\underline{U})$, on a alors :

$$\Phi(\underline{\underline{\underline{\sigma}}}) = -HS^0(\underline{\underline{\underline{\eta}}}) + \frac{1}{2} \int_V (\underline{\underline{\underline{C}}} : \underline{\underline{\underline{\eta}}}) - \underline{\underline{\underline{\sigma}}}) : (\underline{\underline{\underline{S}}} - \underline{\underline{\underline{S}}}) : (\underline{\underline{\underline{C}}} : \underline{\underline{\underline{\eta}}}) - \underline{\underline{\underline{\sigma}}}) dV \quad (\text{B.50})$$

On établit alors les inégalités suivantes pour tout champ $\underline{\underline{\underline{\eta}}}$ et pour tout milieu de référence $\underline{\underline{\underline{C}}}$:

$$HS^0(\underline{\underline{\underline{\eta}}}) - \Delta_\phi^0(\underline{\underline{\underline{\eta}}}) \leq -\Phi(\underline{\underline{\underline{\sigma}}}) = W = W(u) \leq HS^0(\underline{\underline{\underline{\eta}}}) + \Delta_w^0(\underline{\underline{\underline{\eta}}}) \quad (\text{B.51})$$

avec :

$$\Delta_\phi^0(\underline{\underline{\underline{\eta}}}) = \frac{1}{2} \int_V (\underline{\underline{\underline{C}}} : \underline{\underline{\underline{\eta}}}) - \underline{\underline{\underline{\sigma}}}) : (\underline{\underline{\underline{S}}} - \underline{\underline{\underline{S}}}) : (\underline{\underline{\underline{C}}} : \underline{\underline{\underline{\eta}}}) - \underline{\underline{\underline{\sigma}}}) dV \quad (\text{B.52})$$

et

$$\Delta_w^0(\underline{\underline{\underline{\eta}}}) = \frac{1}{2} \int_V (\underline{\underline{\underline{\eta}}}) - \underline{\underline{\underline{\varepsilon}}}) : (\underline{\underline{\underline{C}}} - \underline{\underline{\underline{C}}}) : (\underline{\underline{\underline{\eta}}}) - \underline{\underline{\underline{\varepsilon}}}) dV \quad (\text{B.53})$$

Ces termes Δ_ϕ^0 et Δ_w^0 ne peuvent en général pas être calculés explicitement. Cependant ce sont des formes quadratiques en $(\underline{\underline{\underline{\eta}}}) - \underline{\underline{\underline{\varepsilon}}})$ dont on peut contrôler le signe en choisissant judicieusement le milieu de référence $\underline{\underline{\underline{C}}}$. On peut préserver les inégalités sans avoir besoin de calculer les deux termes :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Si } \underline{\underline{\underline{C}}^0} \geq \underline{\underline{\underline{C}}}(x) \quad \forall x \in V \quad \text{alors } HS^0(\underline{\underline{\underline{\eta}}}) \geq W \\ \text{Si } \underline{\underline{\underline{C}}^0} \leq \underline{\underline{\underline{C}}}(x) \quad \forall x \in V \quad \text{alors } HS^0(\underline{\underline{\underline{\eta}}}) \leq W \end{array} \right. \quad (\text{B.54})$$

(l'inégalité entre tenseurs d'ordre 4 doit être comprise au sens des formes quadratiques associées).

Dans le cas d'un problème élastique de la forme :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{div}(\underline{\underline{\underline{\sigma}}}) = 0 \quad \text{dans } V \\ \underline{\underline{\underline{\sigma}}} = \underline{\underline{\underline{C}}} : \underline{\underline{\underline{\varepsilon}}} \quad \text{dans } V \\ \underline{\underline{\underline{u}}} = \underline{\underline{\underline{E}}}.x \quad \text{sur } \partial V \end{array} \right. \quad (\text{B.55})$$

le problème variationnel de Hashin et Shtrikman s'écrit :

$$HS^0(\underline{\underline{\underline{\eta}}}) - \Delta_\phi^0(\underline{\underline{\underline{\eta}}}) \leq \frac{1}{2} \underline{\underline{\underline{E}}} : \underline{\underline{\underline{C}}} : \underline{\underline{\underline{E}}} \leq HS^0(\underline{\underline{\underline{\eta}}}) + \Delta_w^0(\underline{\underline{\underline{\eta}}}) \quad (\text{B.56})$$

avec :

$$HS^0(\underline{\underline{\underline{\eta}}}) = \frac{1}{2} \underline{\underline{\underline{E}}} : \underline{\underline{\underline{C}}^0} : \underline{\underline{\underline{E}}} + \frac{1}{2} \left\langle \underline{\underline{\underline{\eta}}}) : (\underline{\underline{\underline{C}}} - \underline{\underline{\underline{C}}^0}) : (\underline{\underline{\underline{E}}} + \underline{\underline{\underline{\varepsilon}}}) - \underline{\underline{\underline{\eta}}}) \right\rangle \quad (\text{B.57})$$

et les termes Δ_ϕ^0 et Δ_w^0 définis par les équation (B.52) et (B.53).

Les meilleures approximations sont obtenues lorsque la polarisation $\underline{\underline{\underline{p}}}$ approche au mieux la polarisation réelle $\underline{\underline{\underline{p}}}^* = (\underline{\underline{\underline{C}}} - \underline{\underline{\underline{C}}^0}) : \underline{\underline{\underline{\varepsilon}}}$ ou, ici, lorsque la champ $\underline{\underline{\underline{\eta}}}$ approche au mieux le champ réel $\underline{\underline{\underline{\varepsilon}}}$.

L'optimisation de l'encadrement est assurée par une maximisation ou une minimisation de la fonctionnelle $HS^0(\underline{\underline{\eta}}^*)$ suivant que $\underline{\underline{C}}^0$ est plus grand ou plus petit que $\underline{\underline{C}}(x)$.

2. *Bornes de Hashin et Shtrikman* : pour évaluer ces bornes on donne au milieu de référence des modules connus. On obtient des bornes supérieures C^{max} ou inférieures C^{min} suivant que le module choisi est plus raide ou plus souple que l'ensemble des modules des différentes phases constitutives.

On a vu, paragraphe B.1.2, que le tenseur de localisation des déformations est défini par : $\underline{\underline{A}} = (\underline{\underline{c}} + \underline{\underline{C}}^*)^{-1} : (\underline{\underline{C}}^0 + \underline{\underline{C}}^*)$ avec $\underline{\underline{C}}^0$ le tenseur des modules du milieu de référence, $\underline{\underline{C}}^*$ le tenseur d'influence de Hill défini par $\underline{\underline{C}}^* = \underline{\underline{C}}^0 : \left((\underline{\underline{S}}^E)^{-1} - \underline{\underline{I}} \right)$ et $\underline{\underline{c}}$ le tenseur des modules locaux.

2.1 *Borne supérieure de Hashin et Shtrikman* : on donne donc ici au milieu de référence, de tenseur de modules $\underline{\underline{C}}^0$, le tenseur des modules $\underline{\underline{C}}^{max}$ qui est connu. En d'autres termes, on affecte à la matrice les propriétés de la phase la plus rigide. On pose : $\underline{\underline{A}}_+$ le tenseur de localisation pour évaluer la borne supérieure. On a donc $\underline{\underline{\varepsilon}} = \underline{\underline{A}}_+ : \underline{\underline{E}}$ et :

$$\begin{cases} \underline{\underline{A}}_+ = (\underline{\underline{c}} + \underline{\underline{C}}_+^*)^{-1} : (\underline{\underline{C}}^{max} + \underline{\underline{C}}_+^*) \\ \underline{\underline{C}}_+^* = \underline{\underline{C}}^{max} : \left((\underline{\underline{S}}^{E_{max}})^{-1} - \underline{\underline{I}} \right) \end{cases} \quad (\text{B.58})$$

On a donc $\langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle = \langle \underline{\underline{A}}_+ : \underline{\underline{E}} \rangle = \langle \underline{\underline{A}}_+ \rangle : \underline{\underline{E}}$. Soit $\underline{\underline{E}} = \langle \underline{\underline{A}}_+ \rangle^{-1} : \langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle$, ce qui donne :

$$\underline{\underline{\varepsilon}} = \underline{\underline{A}}_+ : \langle \underline{\underline{A}}_+ \rangle^{-1} : \langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle \quad (\text{B.59})$$

L'expression de $\underline{\underline{\sigma}}$ est alors la suivante $\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{c}} : \underline{\underline{\varepsilon}} = \underline{\underline{c}} : \underline{\underline{A}}_+ : \langle \underline{\underline{A}}_+ \rangle^{-1} : \langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle$. On obtient donc la borne supérieure de *Hashin et Shtrikman* du tenseur des modules effectifs :

$$\underline{\underline{C}}_+ = \langle \underline{\underline{c}} : \underline{\underline{A}}_+ \rangle : \langle \underline{\underline{A}}_+ \rangle^{-1} \quad (\text{B.60})$$

2.2 *Borne inférieure de Hashin et Shtrikman* : de la même façon, on trouve l'expression de $\underline{\underline{C}}_-$:

$$\underline{\underline{C}}_- = \langle \underline{\underline{c}} : \underline{\underline{A}}_- \rangle : \langle \underline{\underline{A}}_- \rangle^{-1} \quad (\text{B.61})$$

avec :

$$\begin{cases} \underline{\underline{A}}_- = (\underline{\underline{c}} + \underline{\underline{C}}_-^*)^{-1} : (\underline{\underline{C}}^{min} + \underline{\underline{C}}_-^*) \\ \underline{\underline{C}}_-^* = \underline{\underline{C}}^{min} : \left((\underline{\underline{S}}^{E_{min}})^{-1} - \underline{\underline{I}} \right) \end{cases} \quad (\text{B.62})$$

$\underline{\underline{C}}^{min}$ étant le tenseur des modules de la phase la plus souple. Remarque : lorsque le milieu de référence correspond à la matrice, on retrouve le schéma de Mori-Tanaka présenté au paragraphe B.4.

2.3 *Matériau bi-phasé* : on considère le cas d'un matériau constitué de deux phases présentant un comportement isotrope. Dans le cas d'un comportement effectif isotrope, il est alors possible d'écrire de façon explicite l'expression des bornes de *Hashin et Shtrikman*. L'encadrement est donné par les expressions suivantes pour le module de compressibilité k et le module de cisaillement μ . Nous ne précisons pas quelle est la phase la plus rigide et la phase la plus souple, il faut échanger les indices un et deux puis comparer les valeurs de k et μ pour déterminer les bornes supérieures et inférieures :

$$k_{+/-} = k_j + \frac{c_i}{\frac{1}{k_i - k_j} + \frac{c_j}{k_j + \frac{4}{3}\mu_j}} \quad \text{avec } (i,j) = (1,2) \text{ ou } (2,1) \quad (\text{B.63})$$

$$\mu_{+/-} = \mu_j + \frac{c_i}{\frac{1}{\mu_i - \mu_j} + \frac{2c_j(k_j + 2\mu_j)}{5\mu_j\left(k_j + \frac{4}{3}\mu_j\right)}} \quad \text{avec } (i,j) = (1,2) \text{ ou } (2,1) \quad (\text{B.64})$$

B.5.3 Bornes du troisième ordre

Les bornes de *Voigt et Reuss* et de *Hashin et Shtrikman* ne dépendent que des fractions volumiques de chacun des constituants. Elles ne contiennent pas d'information sur la morphologie des phases. Néanmoins il est possible de construire des encadrements intégrant plus d'informations morphologiques, c'est le but des bornes du troisième ordre. Pour un milieu hétérogène biphasé et isotrope, ces bornes peuvent être évaluées. Nous renvoyons le lecteur aux références [JEULIN, 2002], [TORQUATO, 1991], [TORQUATO, 1997], [TORQUATO, 1998], [TORQUATO, 2002].

B.6 Conclusion

En élasticité linéaire, on trouve des **modèles d'homogénéisation analytiques basés sur le principe d'Eshelby ou bien encore des modèles proposant des encadrements des propriétés effectives**. Dans le cadre de notre étude, ces modèles ne permettent pas de remplir l'objectif et le cahier des charges fixé au chapitre 1 paragraphe 1.4. Néanmoins, nous avons exposé ces approches dans cette annexe car **les modèles d'homogénéisation qui suscitent notre intérêt, NFTA [MICHEL and SUQUET, 2003] et Mori-Tanaka incremental [RICAUD and MASSON, 2009], sont issues de ces approches proposées dans le cadre de l'élasticité linéaire**.

Résumé.

Parmi les combustibles nucléaires irradiés dans les Réacteurs à Eau Pressurisée d'Électricité de France, on trouve le combustible *MOX*, acronyme anglais de Mixed Oxide car il combine du dioxyde de plutonium et d'uranium. On y distingue trois phases, correspondant à des teneurs massiques en plutonium différentes. La teneur en matière fissile y étant différente, ces phases évoluent différemment sous irradiation, tant du point de vue mécanique que du point de vue chimique. Pour modéliser correctement le comportement macroscopique du combustible *MOX* dans un code de calcul industriel, les modèles ont besoin d'être alimentés de façon pertinente en propriétés effectives, mais il est aussi intéressant de disposer d'informations sur les champs locaux afin d'établir des couplages entre les mécanismes (couplage mécanique physico-chimie).

L'objectif de la thèse fut donc de développer une modélisation par changement d'échelles, basée sur l'approche NTFA [MICHEL and SUQUET, 2003]. Ces développements ont été réalisés sur des microstructures tridimensionnelles (3D) représentatives du combustible *MOX* et pour un comportement local visco-élastique vieillissant avec déformations libres.

Dans un premier temps, pour représenter le combustible *MOX* en 3D nous avons utilisé des méthodes existantes pour traiter et segmenter les images expérimentales 2D, puis nous avons remonté les informations 2D indispensables (fuseau diamétral des inclusions et fractions surfaciques respectives) en 3D par la méthode stéréologique de *Saltykov* [SALTYKOV, 1967] et enfin nous avons développé des outils pour représenter (représentation géométrique 3D périodique par un schéma RSA) et discrétiser (maillage 3D périodique) un composite multiphasé particulaire, type *MOX*. Dans un deuxième temps, les développements, réalisés sur le modèle NTFA et sur le composite particulaire triphasé retenu précédemment, ont nécessité des études théoriques (les aspects tri-dimensionnel, déformation libre et vieillissant n'avaient jamais été abordés jusqu'à présent) et numériques (choix de la décomposition modale, réduction du nombre de modes, sensibilité à la microstructure considérée). Le modèle a ensuite été validé avec succès par rapport à des calculs de référence en champs complets, aussi bien sur le comportement effectif que sur les champs locaux et pour différents types d'essais (essais à vitesse de déformation imposée, de fluage, de relaxation et tournants). Dans un troisième temps, nous avons également positionné notre approche par rapport à une méthode d'homogénéisation récemment développée [RICAUD and MASSON, 2009] : modèle semi-analytique « Mori-Tanaka incrémental ». Des similitudes théoriques entre les deux approches ont été révélées et nous ont permis de montrer que suivant le degré d'informations souhaitées par l'utilisateur, celui-ci choisira l'intégration de l'une ou l'autre méthode dans son code de calcul. Ces méthodes sont très rapides en temps CPU d'exécution mais la méthode NTFA reste par définition la méthode fournissant le plus d'informations (accès aux grandeurs effectives, moyennes par phase et aussi locales contrairement aux méthodes semi-analytiques), la plus précise mais nécessitant un travail amont bien plus conséquent (identification des modes).

Mots clés : combustible / nucléaire / *MOX* / microstructure / hétérogène / trois-phases / visco-élasticité / déformation libre / vieillissant / 3D / homogénéisation / modèle NTFA / modèle Mori-Tanaka incrémental