



THÈSE

présentée à :

ÉCOLE CENTRALE DE LYON

pour obtenir le

grade de docteur de l'École Centrale de Lyon
Spécialité : Mécanique

ÉTUDE DE L'IMPACT DE LA FISSURATION DES COMBUSTIBLES NUCLÉAIRES OXYDE SUR LE COMPORTEMENT NORMAL ET INCIDENTEL DES CRAYONS COMBUSTIBLE

par :

Helfer Thomas

Soutenue publiquement le 17 Mars 2006

Commission d'examen :

Président du jury
Directeur de thèse
Rapporteurs

Examineurs

Invité

Jean-Jacques Marigo, Université de Paris VI
François Sidoroff, École Centrale Lyon
Nicolas Wæckel, EDF-Septen
Olivier Débordes, EGIM
Christophe Garnier, FRAMATOME
Clément Lemaignan, CEA
Étienne Castelier, CEA

Laboratoire des Lois de Comportement du Combustible
Centre d'études de CADARACHE
13 108 St-Paul lez Durance Cedex



THÈSE

présentée à :

ÉCOLE CENTRALE DE LYON

pour obtenir le

grade de docteur de l'École Centrale de Lyon
Spécialité : Mécanique

ÉTUDE DE L'IMPACT DE LA FISSURATION DES COMBUSTIBLES NUCLÉAIRES OXYDE SUR LE COMPORTEMENT NORMAL ET INCIDENTEL DES CRAYONS COMBUSTIBLE

par :

Helfer Thomas

Soutenue publiquement le 17 Mars 2006

Commission d'examen :

Président du jury
Directeur de thèse
Rapporteurs

Examineurs

Invité

Jean-Jacques Marigo, Université de Paris VI
François Sidoroff, École Centrale Lyon
Nicolas Wæckel, EDF-Septen
Olivier Débordes, EGIM
Christophe Garnier, FRAMATOME
Clément Lemaignan, CEA
Étienne Castelier, CEA

Laboratoire des Lois de Comportement du Combustible
Centre d'études de CADARACHE
13 108 St-Paul lez Durance Cedex

À Virginie

REMERCIEMENTS

Ce travail a été réalisé au Commissariat à l'Énergie Atomique de Cadarache au sein du Laboratoire des Lois de Comportement du Combustible sous la direction de Mme Carole Valot que je remercie sincèrement pour son aide précieuse et active au cours de ces trois années. De manière générale, je remercie ceux et celles que j'ai eu le privilège chance de côtoyer au SESC et qui ont su m'apporter leur expérience et leur amitié pendant ces trois années.

Malgré l'éloignement, je remercie F. Sidoroff d'avoir accepté d'être le responsable universitaire de cette thèse et de m'avoir fait profiter de son expérience et ses conseils.

Je tiens à saluer le travail effectué par M. Olivier Desbordes et à M. Nicolas Waeckle en tant que rapporteurs de ce mémoire. Leurs remarques et leurs questions furent précieuses.

Je remercie également Clément Lemaignan d'avoir fait partie de mon jury.

Bien qu'il n'ait pas été associé directement au suivi de cette thèse, Christophe Garnier a rapidement fait parti de personnes les plus intéressés. J'ai énormément apprécié les échanges que nous avons eu.

J'ai été plus qu'honorer que Jean-Jacques Marigo soit le président de mon jury. Bien que nous ne nous soyons jamais rencontré avant la soutenance, son influence a été considérable. Ses articles ont été des guides d'une valeur inestimable, ont forgé ma vision de la fissuration des matériaux fragiles et m'ont amené aux progrès les plus récents de cette partie de la mécanique.

L'encadrement de ma thèse fut doublement exceptionnel car j'ai eu la chance d'être suivi par Philippe Garcia et Étienne Castelier. Philippe a été à l'origine de cette thèse et son influence et sa connaissance du combustible ont marqué tout ce travail. Étienne Castelier a repris le suivi quotidien de mon travail en cours de route et l'a marqué de sa rigueur. Leurs apports ont largement dépassé le cadre professionnel. Je ne connais pas les mots pour leur exprimer ma gratitude.

Enfin, je remercie mes amis, ma famille, et en particulier mes parents, mes grands-parents et ma sœur pour m'avoir entouré pendant toutes ces années. Enfin, mes derniers remerciements vont à Virginie qui m'a offert les deux plus belles joies de ma vie, en acceptant d'être ma femme et en me donnant Éloïse, le plus beau des trésors.

Table des matières

TABLE DES MATIÈRES	7
Acronymes utilisés dans le texte	11
Notations utilisées	12
Introduction	15
I BIBLIOGRAPHIE	17
1 Contexte général	19
1.1 Quelques généralités _____	20
1.1.1 Les réacteurs à eau pressurisée _____	20
1.1.2 Le crayon combustible _____	21
1.2 Comportement du crayon combustible sous irradiation _____	22
1.2.1 Comportement sous irradiation de la pastille combustible _____	23
1.2.2 Comportement sous irradiation de la gaine _____	26
1.2.3 Interaction pastille-gaine _____	27
1.3 Simulation du comportement des crayons combustibles _____	27
1.3.1 Objectifs de l'étude du comportement des crayons combustibles _____	28
1.3.2 Simulation expérimentale du fonctionnement incidentel des REP _____	28
1.3.3 Codes de modélisation du comportement du crayon combustible _____	29
2 Fissuration des matériaux fragiles	33
2.1 Comportements locaux, matériaux standards généralisés _____	34
2.1.1 Description locale de l'état thermodynamique d'un matériau _____	34
2.1.2 Lois d'état _____	36
2.1.3 Lois complémentaires, matériaux standards généralisés _____	39
2.1.4 Évolution des variables internes, intégration locale _____	44
2.2 Du comportement local au calcul de structure _____	47
2.2.1 Équilibre mécanique en quasi-statique, principe des travaux virtuels _____	47
2.2.2 Lagrangien mécanique incrémental _____	49
2.3 Approche globale de la rupture _____	52
2.3.1 Description d'une fissure _____	52
2.3.2 Mécanique linéaire de la rupture, taux de restitution de l'énergie _____	54
2.3.3 Singularité des contraintes en pointe de fissure _____	56

2.4	Mécanique de l'endommagement local	57
2.4.1	Application du formalisme standard généralisé à l'endommagement des matériaux	57
2.4.2	Prise en compte du caractère unilatéral de l'endommagement	61
2.4.3	Difficultés mathématiques associées aux structures endommageables	64
2.4.4	Énergie dissipée par la propagation d'une bande de localisation	67
2.4.5	Développements récents de l'approche locale de la rupture	69
2.4.6	Propagation instable	73

II	OUTILS DE MODÉLISATION, MISE EN ŒUVRE	75
-----------	--	-----------

3	Modélisations du crayon combustible	77
3.1	Intérêt comparé des différentes modélisations du crayon combustible	78
3.2	Modélisation 1D du crayon combustible	78
3.2.1	Modélisation mécanique d'une unique tranche axiale	78
3.3	Modélisation 2D du crayon combustible	80
3.4	Modélisation 3D du crayon combustible	81
4	Modèles de comportement mécanique du combustible	83
4.1	Le modèle d'endommagement MEFISTO	84
4.1.1	Présentation du modèle d'endommagement MEFISTO en 1D	84
4.1.2	Extension du modèle d'endommagement MEFISTO en 2D	93
4.2	Modèles de comportement pour la modélisation 3D	94
4.2.1	Le modèle de seuillage des contraintes par écoulement plastique	94
4.2.2	Extension du modèle de LORENTZ	95
4.3	Lois viscoplastiques d'OTTER et LPCC	98
4.3.1	Loi viscoplastique d'OTTER	98
4.3.2	Loi viscoplastique du LPCC	99
4.4	Représentation de la mise en diabolo des fragments en 1D	99
5	Études préliminaires du modèle MEFISTO	101
5.1	Réponse du modèle MEFISTO dans une modélisation 1D	102
5.1.1	Cas traité	102
5.1.2	Résultats obtenus	102
5.1.3	Observations numériques	103
5.2	Réponse du modèle MEFISTO en 2D	105
5.2.1	Le cas étudié : une montée en puissance nominale	105
5.2.2	Prise en compte de l'endommagement axial et orthoradial	106
5.2.3	Prise en compte du seul endommagement orthoradial	112
5.3	Méthodes numériques	114

III	SIMULATION DU CRAYON I04-4	117
------------	-----------------------------------	------------

6	Modélisation du crayon I04-4	119
6.1	Description du crayon I04-4, historique de puissance	120
6.2	Modélisation 2D du crayon I04-4 en irradiation de base	120

6.2.1	Phénoménologie en irradiation de base	121
6.2.2	Évolution des contraintes dans la gaine en irradiation de base	122
6.2.3	Profilométrie de la gaine après l'irradiation en base	123
6.3	Modélisation 2D du crayon I04-4 en transitoire de puissance	123
6.3.1	Phénoménologie détaillée	124
6.3.2	Évolution des contraintes dans la gaine en transitoire de puissance	125
6.3.3	Profilométrie de la gaine après le transitoire de puissance	126
6.3.4	Capacités de la modélisation 2D	127
6.4	Comparaisons des résultats obtenus par différentes modélisations	127
6.4.1	Comparaison des résultats 3D aux résultats 2D au cours de l'irradiation de base	127
6.4.2	Comparaison des résultats 3D aux résultats 2D au cours du transitoire de puissance	129
6.4.3	Comparaison des modélisations 1D et 2D en irradiation de base	132
7	Sensibilité de la modélisation 2D	135
7.1	Influence de la loi de comportement viscoplastique	136
7.1.1	Influence sur l'évolution des rayons extérieurs de la pastille au cours de l'irradiation de base	136
7.1.2	Influence sur la profilométrie de la gaine	136
7.1.3	Influence sur l'évolution des contraintes dans la gaine en transitoire de puissance	137
7.2	Influence du gonflement gazeux	138
7.3	Autres combustibles	138
	Conclusions et perspectives	141
ANNEXES		145
Annexe A	Conditions aux limites mécaniques	145
A.1	Modélisation 2D (r, z) du crayon combustible	145
A.2	Modélisation 3D du crayon combustible	146
Annexe B	La méthode des éléments finis	147
B.1	Discrétisation spatiale	147
B.2	Principe de la méthode des éléments finis	148
B.3	Principe de la méthode de NEWTON-RAPHSON	149
B.4	Algorithme de résolution du code CAST3M	150
Annexe C	Intégration numérique des différentes lois de comportement	153
C.1	Intégration implicite des lois viscoplastiques de l'UO ₂	153
C.2	Intégration implicite du modèle MEFISTO	154
C.3	Intégration implicite du modèle de plasticité instantanée couplé aux lois viscoplastique de l'UO ₂	155
C.3.1	Description du modèle de plasticité instantanée	156
C.3.2	Intégration implicite	156
C.4	Intégration implicite du modèle d'endommagement proposé pour la modélisation 3D du crayon combustible	156

C.4.1	Choix des variables d'intégration	156
C.4.2	Intégration de la loi de comportement	157

Annexe D : Instabilité temporelle **159**

D.1	Cas particulier du barreau en traction	159
D.1.1	Description du cas traité	159
D.1.2	Analyse à l'aide du lagrangien	160
D.1.3	Illustrations à l'aide du modèle de TVERGAARD	160
D.2	Snap-back	162
D.2.1	Retour sur l'exemple du paragraphe D.1	162

LISTE DES TABLEAUX	167
---------------------------	------------

RÉFÉRENCES	170
-------------------	------------

ACRONYMES UTILISÉS DANS LE TEXTE

Sigles

CEA Commissariat à l'Énergie atomique

EDF Électricité De France

INSA Institut National des Sciences Appliquées

LLCC Laboratoire des Lois de Comportement du Combustible

LSC Laboratoire d'études et de Simulation du comportement des Combustibles

ONERA Office National d'Études et de Recherches Aérospatiales

Acronymes divers

DDI Double Déformation Inélastique

IPG Interaction Pastille Gaine

MEFISTO Modèle Éléments FInis pour le calcul de STructure des Oxydes

METEOR Mécanique et Thermique des Oxydes en Réacteur

MOX Mixed OXyde

PLEIADES Plate-forme Logiciel pour les Éléments Irradiés dans les Assemblages, en Démonstration, en Expérimentation, ou en Service

REP Réacteurs à Eau Pressurisée

NOTATIONS UTILISÉES

Tenseurs d'ordre 4	
$\underline{\underline{\mathbb{K}}}$	matrice de raideur
$\underline{\underline{\mathbb{K}^e}}$	matrice de raideur élémentaire
$\underline{\underline{\mathbb{L}}}$	matrice associée aux multiplicateurs de LAGRANGE
$\underline{\underline{\mathbb{M}}}$	matrice associée aux multiplicateurs de LAGRANGE
$\underline{\underline{\mathbb{D}}}$	tenseur d'élasticité non endommagé
$\underline{\underline{\mathbb{D}}}(\underline{\underline{\mathbf{d}}})$	tenseur d'élasticité endommagé
$\underline{\underline{\mathbb{D}}}^{tang}$	tenseur d'élasticité tangent cohérent
$\underline{\underline{\mathbb{D}}}^{sec}$	tenseur d'élasticité sécant
$\underline{\underline{\mathbb{M}}}(\underline{\underline{\mathbf{d}}})$	tenseur décrivant l'effet de l'endommagement
$\underline{\underline{\mathbf{d}}}$	tenseur d'endommagement

Tenseurs d'ordre 2	
$\underline{\underline{\epsilon}}^{el}$	tenseur des déformations élastiques
$\underline{\underline{\epsilon}}^{fis}$	tenseur des déformations de fissuration
$\underline{\underline{\epsilon}}^p$	tenseur des déformations plastiques
$\underline{\underline{\tilde{\epsilon}}}^{to}$	tenseur des déformations totales dans le matériau sain équivalent
$\underline{\underline{\epsilon}}^{to}$	tenseur des déformations totales
$\langle \underline{\underline{\epsilon}}^{to} \rangle^+$	partie positive du tenseur des déformations totales
$\langle \underline{\underline{\epsilon}}^{to} \rangle^-$	partie négative du tenseur des déformations totales
$\underline{\underline{\epsilon}}^{vis}$	tenseur des déformations viscoplastiques
$\underline{\underline{\tilde{\sigma}}}$	tenseur des contraintes dans le matériau sain équivalent
$\underline{\underline{\sigma}}$	tenseur des contraintes
$\underline{\underline{\sigma}}^{P.I.}$	tenseur représentant des contraintes exercées sur les lèvres de la fissure par le gaz contenu dans le crayon dans le modèle d'endommagement MEFISTO
$\underline{\underline{\mathbf{n}}}$	tenseur normal
$\underline{\underline{\mathbf{s}}}$	partie déviatorique des contraintes

Vecteurs	
$\vec{\mathbb{F}}_e$	forces extérieures nodales
$\vec{\mathbb{F}}_i$	forces intérieures nodales
$\vec{\mathbb{F}}_i^e$	forces intérieures élémentaires
$\vec{\mathbb{R}}$	résidu nodal
$\vec{\mathbb{U}}^h$	champ nodal associé à l'approximée du champ de déplacements réel
$\vec{\mathbb{V}}^h$	champ nodal associé à l'approximée d'un champ de déplacements cinématiquement admissible
$\vec{\lambda}$	multiplicateurs de LAGRANGE
\vec{T}	vecteur de tractions
\vec{f}	forces volumiques
\vec{n}	normale extérieure à une surface
\vec{p}	impulsion volumique
\vec{u}	champ de déplacements réel

Suite à la page suivante

Suite de la page précédente	
\vec{u}^h	approximée du champ de déplacements réel
\vec{v}	champ de déplacements cinématiquement admissible
\vec{v}^h	approximée d'un champ de déplacements cinématiquement admissible
\vec{x}	position spatiale

Scalaires	
\mathcal{K}	énergie cinétique de la structure considérée
\mathcal{L}	lagrangien mécanique incrémental total (incluant la dissipation)
\mathcal{P}	lagrangien mécanique
\mathcal{P}_i	puissance des forces intérieures
\mathcal{P}_e	puissance des forces extérieures
\mathcal{P}_{lin}	puissance linéique
\mathcal{P}_{lin}^{max}	puissance linéique maximale atteinte au cours d'un transitoire de puissance
$-\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial A}$	taux de restitution de l'énergie
$-\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial l}$	taux de restitution de l'énergie (2D)
Ψ	énergie libre spécifique
Ψ^{el}	énergie libre spécifique élastique
Ψ^{inl}	énergie libre spécifique inélastique
ϵ_R	déformation à rupture
$\Delta \epsilon$	paramètre numérique
Φ	potentiel de dissipation
Φ^*	potentiel de dissipation dual
λ	coefficient de LAMÉ
λ_c	taille de maillage caractéristique
μ	module de cisaillement
ν	coefficient de POISSON
$\dot{\phi}$	taux de dissipation
ρ	masse volumique
σ_{eq}	contrainte équivalente
σ_{max}	contrainte maximale en traction
χ^p	variable d'écrouissage
ΔE^ϕ	Incrément d'énergie dissipée sur l'ensemble de la structure
E	module d'YOUNG
	énergie interne totale de la structure considérée
G_f	taux de restitution de l'énergie critique
H	module d'écrouissage
I_K	fonction indicatrice du domaine K
K_α	facteur d'intensité des contraintes dans le mode α
L_c	longueur caractéristique
P_i	pression interne au crayon combustible
R	force thermodynamique associée à la variable d'écrouissage
\tilde{S}	Surface effective (non endommagée)
S	Surface
$S_{[\vec{u}]}$	Surface de discontinuité du champ de déplacement
T	température (K)
T_{coeur}	température au cœur de la pastille
Y	opposé de la force thermodynamique associée à l'endommagement

Suite à la page suivante

Suite de la page précédente	
Z_i	opposés des forces thermodynamiques associées aux variables d'états \vec{z}
d	variable d'endommagement
d_θ	variable d'endommagement orthoradiale
d_z	variable d'endommagement axiale
e	énergie interne spécifique
f	fonction de charge
h	taille maximale des éléments finis utilisés
k	paramètre du modèle de LORENTZ conductivité thermique
n	exposant de NORTON
p	pression hydrostatique
p_i	variables internes
s	entropie spécifique
z_i	ensemble des variables d'état à l'exception des déformations totales
t	temps
Δt	incrément de temps
w	énergie volumique dissipée pour un endommagement total

Symboles divers	
\mathbb{R}	ensemble des nombres réels
\mathbb{R}^+	ensemble des nombres réels positifs
Ω	structure considérée
Ω^h	approximation de la structure considérée
$\partial\Omega$	frontière de la structure considérée
$\partial\Omega_{\vec{T}}$	frontière de la structure considérée sur laquelle sont imposées des tractions
$\partial\Omega_{\vec{u}}$	frontière de la structure considérée sur laquelle sont imposées les déplacements

TAB. 1: Notations utilisées dans le corps du texte.

INTRODUCTION

Ce mémoire porte sur la modélisation du comportement mécanique du crayon combustible. Dans les réacteurs à eau pressurisée, ce crayon est constitué d'un empilement de pastilles de combustible insérées dans une gaine cylindrique. Les pastilles combustible génèrent de la chaleur par réactions nucléaires, chaleur qui est le moteur de nombreux phénomènes mécaniques et physico-chimiques couplés qui influencent le comportement du crayon en réacteur.

Nous nous intéressons dans ce travail de manière plus spécifique à la fissuration des pastilles dont l'effet sur le comportement mécanique de la structure est de toute première importance. Elle conduit, d'une part, à une importante relaxation des contraintes dont dépendent la plupart des autres phénomènes mécaniques et physico-chimiques. Elle conduit, d'autre part, à la fragmentation de la pastille, ce qui exacerbe ses déformations géométriques et influence directement le chargement mécanique de la gaine. En réacteur, le comportement des fissures dans la pastille est complexe : leurs trajets ne sont pas rectilignes, leurs propagations instables, elles peuvent se refermer et éventuellement guérir.

Les codes de calculs utilisés pour décrire le comportement du crayon combustible se différencient par les hypothèses géométriques utilisées pour décrire le crayon. Avant la thèse, deux modélisations avaient essentiellement été développées au CEA. La modélisation appelée « $1,5D$ » repose sur une division du crayon en tranches axiales pouvant représenter plusieurs pastilles dont elle représente le comportement moyen. Cette modélisation requiert des temps de calcul peu importants compatibles avec un usage industriel. La modélisation $3D$ du crayon combustible décrit le comportement du crayon combustible à l'échelle d'un fragment de pastille mais nécessite des temps de calcul qui en font essentiellement un outil de recherche. Les travaux décrits dans le cadre de ce mémoire ont entre autres contribué au développement d'une modélisation intermédiaire appelée $2D(r, z)$ autour de laquelle nous avons choisi de centrer plus spécifiquement ce mémoire. Pour chacune de ces modélisations, l'objet de la thèse est de décrire la fissuration du combustible et de vérifier dans quelle mesure elle en reproduit les principaux effets.

Les recherches en mécanique ont mis en avant deux approches de la rupture, appelées respectivement globale et locale. Pour décrire la propagation d'une fissure, l'approche globale se base sur un bilan d'énergie entre l'énergie restituée par la propagation de la fissure et l'énergie dissipée par cette propagation. Ce bilan est essentiel pour comprendre la physique sous-jacente à la fissuration des structures. Son application au combustible semble plus délicate. L'approche locale de la rupture décrit l'apparition de fissures par une perte de rigidité locale du matériau. Elle constitue un cadre général regroupant de nombreuses théories et a fait l'objet de nombreux travaux de recherche. Nous en proposons un état de l'art qui en présente les principaux aspects mécaniques, mathématiques et numériques. Des considérations pratiques nous ont amenés à privilégier une description quasi-statique de la fissuration du combustible à l'aide de modèles d'endommagement local. Il est cependant connu qu'une telle description présente des difficultés de mise en œuvre, telles que des dépendances des résultats au maillage éléments finis et des évolutions discontinues de la structure entre deux états d'équilibre lors de propagations instables. Ces points ont donc fait l'objet d'une attention particulière.

Les modèles d'endommagement proposés sont jugés sur leur pertinence à décrire le comportement du crayon combustible sous irradiation. Nous avons choisi de ne rapporter les résultats d'un unique crayon expérimental représentatif d'une gamme de fonctionnement assez large. Chacune des modélisations du crayon combustible considérée est associée à une application du code ALCYONE du projet PLEIADES. Ces applications permettent de confronter les prédictions des modèles proposés aux résultats expérimentaux. Ils permettent également de comparer ces différents niveaux de modélisation en s'appuyant sur un code commun. Il est alors possible de s'assurer de la *cohérence* de ces différentes modélisations.

Organisation de ce mémoire

La première partie de ce mémoire est consacrée à la bibliographie. Le premier chapitre présente le contexte général de l'étude en donnant les notions principales relatives au crayon combustible des réacteurs à eau pressurisée et à son comportement sous irradiation en fonctionnement normal ou incidentel. Le second chapitre propose ensuite une revue bibliographique sur la modélisation de la fissuration des structures fragiles.

La seconde partie est dédiée aux moyens développés pour décrire le crayon combustible dans les différentes modélisations utilisées. Le premier chapitre décrit les hypothèses mécaniques qui sous-tendent ces différentes modélisations. Le second chapitre présente les modèles mécaniques utilisés pour décrire le comportement de la pastille combustible. Un intérêt particulier est porté au modèle d'endommagement MEFISTO auquel le troisième chapitre est consacré.

La troisième partie décrit la simulation d'un crayon particulier à l'aide des différentes modélisations décrites dans ce mémoire.

PREMIÈRE PARTIE

BIBLIOGRAPHIE



CHAPITRE 1

CONTEXTE GÉNÉRAL

Objet du chapitre :

L'objet de ce chapitre est de décrire le contexte de l'étude et ainsi d'introduire le vocabulaire qui lui est spécifique. Le premier paragraphe donne les notions essentielles concernant le fonctionnement des réacteurs à eau pressurisée et présente le crayon combustible.

Les principaux phénomènes, tant mécaniques que physico-chimiques, influençant le comportement des crayons combustible sous irradiation sont présentés dans le second paragraphe. L'effet de la fissuration des pastilles combustible sur le comportement en pile des crayons combustibles est mis en avant.

Les phénomènes présentés étant non-linéaires et fortement couplés, la compréhension du comportement des crayons combustible en fonctionnement normal et incidentel nécessite à la fois de mener des programmes expérimentaux et de développer des codes de calcul spécifiques. Le troisième paragraphe décrit ces moyens. Nous y introduisons les codes de calcul présents dans l'environnement immédiat de la thèse.

Sommaire du chapitre 1

1.1 Quelques généralités	20
1.1.1 Les réacteurs à eau pressurisée	20
1.1.2 Le crayon combustible	21
1.2 Comportement du crayon combustible sous irradiation	22
1.2.1 Comportement sous irradiation de la pastille combustible	23
1.2.2 Comportement sous irradiation de la gaine	26
1.2.3 Interaction pastille-gaine	27
1.3 Simulation du comportement des crayons combustibles	27
1.3.1 Objectifs de l'étude du comportement des crayons combustibles	28
1.3.2 Simulation expérimentale du fonctionnement incidentel des REP	28
1.3.3 Codes de modélisation du comportement du crayon combustible	29

1.1 Quelques généralités

Nous introduisons ici quelques notions générales sur les réacteurs à eau pressurisée, leur structure et leurs conditions de fonctionnement. Le crayon combustible, qui est l'objet central de la thèse, est ensuite décrit.

1.1.1 Les réacteurs à eau pressurisée

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 . Ils représentent près de 90 % de la production d'électricité en France.

1.1.1.1 Structure d'un réacteur à eau pressurisée

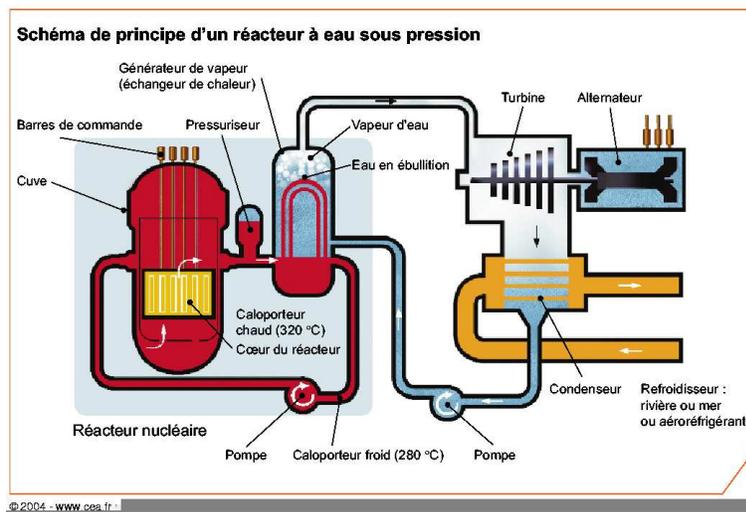


FIG. 1.1 – Schéma de principe d'un réacteur à eau pressurisée. Figure tirée du site internet <http://www.cea.fr/fr/pedagogie/Reacteur/types.html>.

Le principe de fonctionnement d'un REP est illustré sur la figure 1.1. Ce fonctionnement est organisé autour du **cœur** du réacteur qui est le lieu de génération de l'énergie par fissions nucléaires. Le cœur baigne dans le **fluide caloporteur**, qui, dans le cas des REP, est de l'**eau pressurisée** à 15,5 MPa. Le rôle de cette eau est d'une part d'évacuer la chaleur produite ainsi que de ralentir (thermaliser) les neutrons, et ainsi d'entretenir les réactions nucléaires. Cette eau circule dans le **circuit primaire** du réacteur. 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 (figure 1.1). L'eau du circuit secondaire y est vaporisée. Ceci permet l'activation de turbines qui produisent *in fine* l'électricité. Nous renvoyons à la référence [Baron 02] pour plus de détails.

Assemblage combustible Le cœur d'un REP est constitué d'un ensemble d'**assemblages combustible**. Les assemblages combustibles sont une structure rigide contenant de longs tubes cylindriques, les *crayons combustible*. Ces crayons contiennent le *combustible* nucléaire. Ils seront décrits au paragraphe 1.1.2. Un assemblage combustible contient 264 crayons combustible. Le nombre d'assemblages combustible d'un cœur varie selon la puissance du réacteur. Un réacteur d'une puissance de 900 MW_e contient 157 assemblages combustible, soit plus de 41 000 crayons.

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

1.1.1.2 Conditions de fonctionnement d'un réacteur à eau pressurisée

Deux conditions de fonctionnement d'un REP sont envisagées dans la cadre de cette étude :

- le **fonctionnement normal** ;
- le **fonctionnement incidentel**.

Le fonctionnement normal d'un REP est caractérisé par une puissance générée variant peu au cours du temps. Ces variations de puissance sont liées aux opérations normales dans le réacteur, le suivi de la demande par exemple. Ces variations de puissances sont appelées **transitoires de puissance de classe I**. Cette phase de fonctionnement est divisée en **cycles d'irradiation** dont la durée est de l'ordre de l'année.

Le fonctionnement incidentel est envisagé dans le cadre des études de sûreté. Ce fonctionnement correspond à une variation de puissance de plus grande amplitude. Nous ne nous intéresserons dans la suite qu'à un type particulier de fonctionnement incidentel, appelé **transitoire de puissance de classe II**. Ces transitoires sont reproduits en réacteurs expérimentaux dans lesquels le crayon, après une **irradiation de conditionnement** de quelques dizaines d'heures en puissance nominale, voit la puissance linéique augmenter rapidement à une vitesse de $100 W.cm^{-1}.min^{-1}$ pour atteindre des puissances maximales supérieures à $400 W.cm^{-1}$, soit environ deux fois la puissance nominale. Le crayon est maintenu à cette puissance pendant des durées allant de quelques minutes à plusieurs heures.

La modélisation du comportement d'un réacteur dans ces deux modes de fonctionnement a fait l'objet de nombreuses études. Nous nous concentrerons au paragraphe 1.3 sur les études portant spécifiquement sur le comportement du crayon combustible.

1.1.2 Le crayon combustible

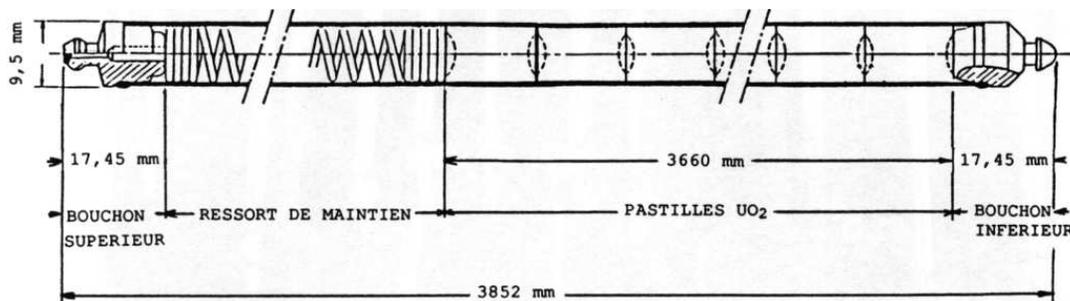


FIG. 1.2 – Dimensions caractéristiques d'un crayon combustible utilisé dans les REP (figure extraite de la référence [Baron 02])

Le **crayon combustible** est un ensemble cylindrique formé d'un **tube de gainage** en alliage de zirconium, le Zircaloy, dans lequel sont empilées des **pastilles de combustible**. Le crayon est fermé par deux bouchons en Inconel. Un ressort de maintien permet de comprimer les pastilles. Les dimensions caractéristiques d'un crayon combustible sont données à la figure 1.2. Initialement, les pastilles et la gaine ne sont pas en contact. L'espace qui les sépare est appelé **jeu pastille-gaine**.

Le crayon est également rempli d'hélium sous pression. La **pression interne** initiale dans le crayon varie entre 1,5 et 3 MPa.

1.1.2.1 La gaine

La gaine est un tube en alliage de zirconium, matériau choisi pour ses propriétés neutroniques, ses propriétés mécaniques et sa résistance à la corrosion par le fluide caloporteur à haute température. Le premier rôle de la gaine est d'être la *première barrière de protection de l'environnement vis à vis des produits de fissions* générés par les réactions nucléaires dans le combustible.

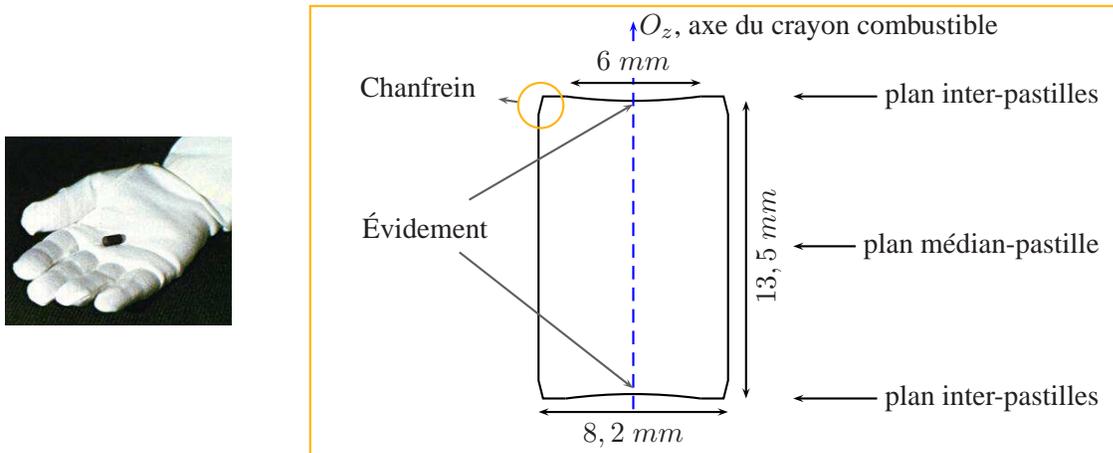


FIG. 1.3 – Dimensions caractéristiques des pastilles combustibles utilisées dans les REP.

1.1.2.2 La pastille combustible

Dans les REP, le combustible est conditionné sous forme de **pastilles** cylindriques. La figure 1.3 en donne les caractéristiques géométriques principales. Les pastilles présentent un **évidement** hémisphérique à leurs extrémités. Son but est d'accommoder les déformations de la pastille. Les pastilles sont **chanfreinées** pour faciliter leur introduction dans la gaine.

Cette géométrie est telle que le crayon, constitué d'un empilement de pastilles identiques, présente initialement un axe de symétrie qui sera identifié avec l'axe O_z des coordonnées cylindriques dans la suite. Au cours des applications, une pastille particulière de l'empilement est décrite, ce qui conduit à introduire deux plans particuliers de cote axiale constante (figure 1.3) :

- le **plan médian-pastille**, qui divise la pastille considérée en deux parties égales ;
- le **plan inter-pastilles**, qui sépare la pastille considérée des pastilles avec lesquelles elle est en contact.

1.1.2.3 Le combustible nucléaire

Le combustible est le lieu des fissions nucléaires. Ces fissions génèrent de l'énergie thermique. Cette énergie est le moteur des centrales nucléaires. Le combustible utilisé dans les REP est une céramique de dioxyde d'uranium UO_2 faiblement enrichi ($< 5\%$) en noyaux d'uranium ^{235}U fissiles.

Le combustible est mis sous forme de pastille par pressage et frittage de poudre de dioxyde d'uranium UO_2 . Après ce procédé, le combustible présente une **porosité** résiduelle de l'ordre de 4%. Cette porosité évolue sous irradiation.

Le recyclage du plutonium a conduit à introduire dans les réacteurs un oxyde mixte $(U, Pu)O_2$ appelé combustible MOX (voir [Bailly 96]). Les combustibles MOX ne seront pas considérés dans ce mémoire.

1.2 Comportement du crayon combustible sous irradiation

En réacteur, les éléments du crayon combustible subissent de nombreux changements. Les sollicitations subies par la pastille et la gaine sont d'origines diverses. Nous distinguerons celles d'origines thermomécaniques, proches des préoccupations de cette thèse, de celles d'origine physico-chimiques. Ces sollicitations sont couplées à des degrés divers. Nous verrons au paragraphe 1.3 que ceci nécessite l'utilisation de codes spécifiques pour la description du comportement en réacteur du crayon combustible.

1.2.1 Comportement sous irradiation de la pastille combustible

Ce paragraphe est consacré au comportement sous irradiation de la pastille combustible. Nous dressons ici une liste des principaux phénomènes apparaissant dans le combustible. Nous renvoyons à la référence [Bailly 96] pour une liste plus complète.

1.2.1.1 Comportement thermo-mécanique de la pastille combustible

Gradient thermique dans la pastille En assimilant la pastille à un cylindre infini et en supposant la conductivité thermique k du combustible indépendante de la température, le profil de température dans la pastille est donné par l'expression suivante :

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

où r désigne la distance à l'axe de symétrie et R le rayon de la pastille.

Le centre de la pastille (partie chaude) est à température plus élevée que la périphérie (partie froide). La faible conductivité thermique k du combustible nucléaire conduit à de forts *gradients thermiques*. En utilisant l'équation (1.1) et les valeurs des coefficients thermiques dans la pastille données sur la figure 1.4 b), il est possible de montrer que ce gradient thermique est supérieur à 100 K.mm^{-1} .

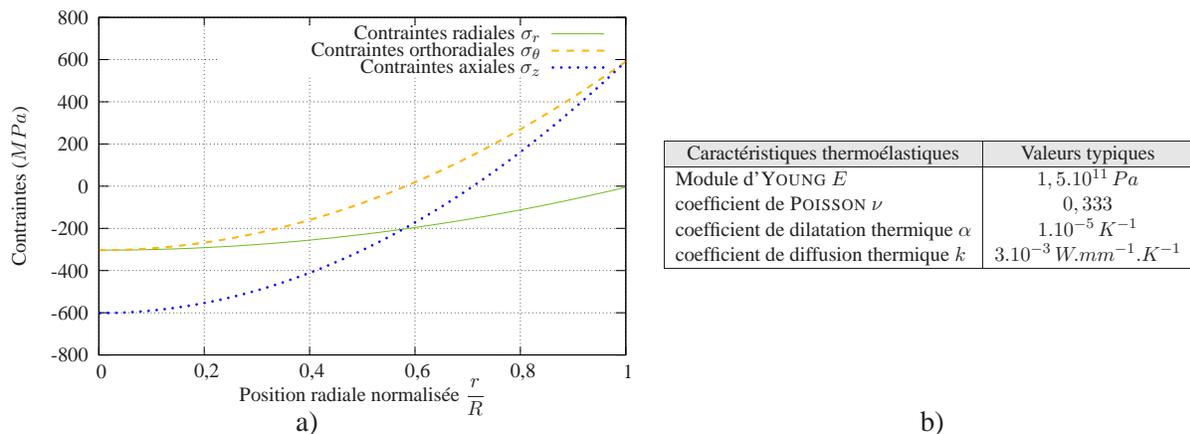


FIG. 1.4 – a) Contraintes thermoélastiques dans la pastille combustible pour une puissance linéique nominale de 200 W.cm^{-1} . b) Valeurs typiques des coefficients thermoélastiques du combustible UO_2 .

Contraintes thermoélastiques dans la pastille Le cœur étant à température plus élevée que la périphérie, celui-ci se dilate plus. Ce différentiel de dilatation thermique est le moteur des principaux changements structuraux dans la pastille. Il génère des contraintes importantes dans la pastille. Une analyse thermoélastique permet

d'obtenir le champ de contrainte suivant :

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

où $\Delta T = \frac{\mathcal{P}_{lin}}{4\pi k}$ est la différence de température entre le cœur de la pastille et sa périphérie, donnée par l'équation (1.1). E , ν , α et k sont respectivement le module d'YOUNG, le coefficient de POISSON, la dilatation thermique et la conductivité thermique du combustible.

Ce champ de contraintes est tracé sur la figure 1.4 a) pour une puissance linéique nominale de 200 W.cm^{-1} correspondant au fonctionnement nominal du réacteur. Les valeurs des différents coefficients thermoélastiques utilisés pour obtenir cette courbe sont données sur la figure 1.4 b). Les contraintes radiales sont toujours en compression. Les champs de contraintes orthoradiales et axiales permettent de distinguer le centre de la pastille, sollicité en compression, de sa périphérie, sollicité en traction.

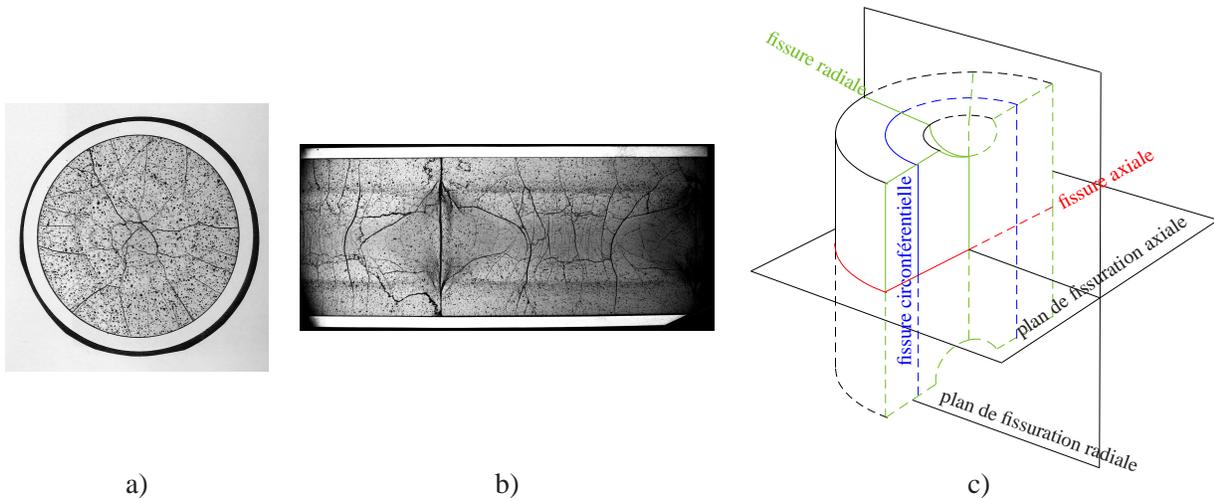


FIG. 1.5 – Réseau de fissures dans la pastille combustible après irradiation. a) coupe transversale (perpendiculaire à l'axe de symétrie) b) coupe longitudinale (le long de l'axe de symétrie) c) représentation schématique.

Fragmentation de la pastille Les contraintes atteintes sur la figure 1.4 ne sont pas réalistes. En effet, une analyse thermoélastique ne prend pas en compte le caractère fragile du combustible. Celui-ci est une céramique **fragile**. Sa **contrainte à rupture** σ_{max} est comprise entre 100 et 150 MPa ([Guérin 85]). Cette valeur est au moins 5 fois inférieure aux contraintes maximales indiquées sur la figure 1.4 a). En conséquence, des fissures s'initient dans la pastille. L'énergie de fissuration de l'oxyde étant très faible, quelques $J.m^{-2}$, ces premières fissures sont *traversantes*. Elles conduisent à la **fragmentation** de la pastille. La contrainte à rupture σ_{max} est atteinte pour une différence de température entre le cœur et la périphérie de la pastille d'une centaine de Kelvins. Ceci correspond à une puissance linéique d'environ 50 W.cm^{-1} (soit le quart de la puissance nominale). En conséquence, les pastilles présentent toujours après irradiation un *réseau de fissures*.

Ce réseau de fissures est visible sur les coupes transversale et longitudinale d'un crayon combustible présentées sur les figures 1.5 a) et 1.5 b). La coupe transversale montre des fissures s'étant propagées dans un plan contenant l'axe de symétrie et parallèlement à un rayon de la pastille. Ces fissures sont appelées **radiales**. La coupe longitudinale montre des fissures s'étant propagées dans un plan perpendiculaire à l'axe de symétrie. Ces fissures sont appelées **axiales**. La figure 1.5 c) résume schématiquement le réseau de fissures observé.

Si l'on admet que les fissures s'initient dans des plans perpendiculaires aux directions de plus fortes contraintes en traction, les champs de contraintes présentés sur la figure 1.4 permettent de supposer que seules des fissures axiales et radiales vont s'initier au cours de l'irradiation.

Des fissures circonférentielles, représentées sur la figure 1.5 c), apparaissent lors du **retour à froid**, c'est à dire à puissance nulle, après irradiation. Elles ne jouent aucun rôle sur le comportement du crayon et ne seront pas considérées dans la suite.

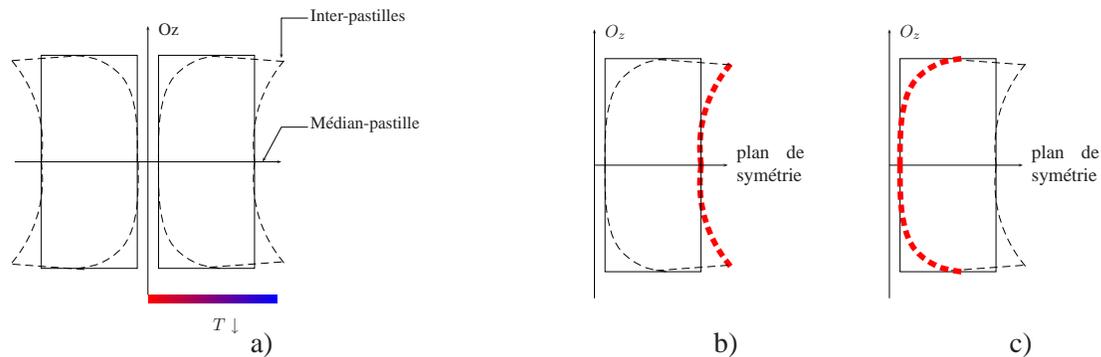


FIG. 1.6 – a) Illustration de la mise en diabolos de la pastille combustible. b) Mise en valeur du déplacement des points situés sur la surface externe de la pastille. c) Mise en valeur du déplacement des points situés initialement sur l'axe de symétrie.

Mise en diabolos de la pastille Le différentiel de température entre le cœur de la pastille et sa périphérie conduit les fragments de pastille à prendre une forme spécifique appelée **diabolos**, décrite sur la figure 1.6. En l'absence de fissures axiales, cette dilatation différentielle se traduit en surface extérieure de pastille par un sur-déplacement des points situés au **plan inter-pastilles** par rapport aux points situés au **plan médian-pastille**. Ceci est représenté sur la figure 1.6 b). La mise en diabolos est exacerbée par la fragmentation de la pastille. La fragmentation permet le déplacement des points situés initialement sur l'axe de symétrie. Ce déplacement est représenté sur la figure 1.6 c).

Comportement viscoplastique du combustible La fragmentation relaxe considérablement les contraintes dans la pastille. Cette relaxation n'est pas totale. Sous irradiation, le combustible a un **comportement viscoplastique** permettant de relaxer les contraintes restantes. Deux lois de comportement viscoplastique seront considérées dans cette thèse :

- la loi viscoplastique du LPCC, introduite dans la référence [Sladkoff 99]. Cette loi est couramment utilisée pour les analyses 3D.
- la loi viscoplastique d'OTTER, introduite dans les références [Bahoboy 69, Otter 75]. Cette loi est utilisée pour les analyse 1D ([Struzik 00]).

La forme analytique de ces lois est décrite au paragraphe 4.3. Une comparaison des comportements des crayons combustible obtenus par ces deux lois est donnée au paragraphe 7.1 dans le cas d'une modélisation 2D (r, z).

Outre les lois d'OTTER et du LPCC, une loi de comportement viscoplastique a récemment été proposée dans la référence [Monerie 02]. Cette loi se distingue des deux lois précédentes par une prise en compte du caractère poreux du combustible. Cette loi étant récente, elle n'a pas encore été validée pour des études combustible. Pour cette raison, elle ne sera pas utilisée dans la suite, nous en avons cependant proposé une implantation dans la référence [Helfer 05b].

Toutes ces lois décrivent des mécanismes similaires. Hors irradiation, deux mécanismes de déformation ont été mis en évidence :

- la diffusion sous contraintes. Ce mécanisme est prépondérant à basses températures et basses contraintes ;
- le déplacement de dislocations (défauts cristallins plans). Ce mécanisme est prépondérant à hautes températures et hautes contraintes.

Ces deux mécanismes sont dits *thermiques*. L'irradiation a deux effets principaux. Le premier est d'amplifier les mécanismes thermiques. L'autre effet de l'irradiation est l'apparition d'un mécanisme de déformation spécifique, dit d'**irradiation**. Ce mécanisme est prépondérant en irradiation de base. L'ensemble de ces mécanismes sont décrits dans la référence [Guérin 85].

1.2.1.2 Comportement physico-chimique

Nous décrivons maintenant quelques phénomènes physico-chimiques importants influençant le comportement du combustible en réacteur. Nous renvoyons à la référence [Bailly 96] pour une description plus précise de ces phénomènes.

Densification Le procédé de fabrication par frittage utilisé pour la mise en forme des pastilles conduit à un combustible présentant de fines porosités, d'une taille de l'ordre du micromètre. En réacteur, cette porosité diminue : c'est le phénomène de **densification**.

Gonflement dû aux produits de fission L'apparition de produits de fissions conduit à une dilatation isotrope du combustible appelée **gonflement**. En fonction de la nature de ces produits de fissions, deux types de gonflement sont distingués : le gonflement dû aux produits de fissions solides et le gonflement dû aux produits de fissions gazeux. L'influence du gonflement gazeux sur le comportement des crayons en situation incidentelle a déjà été démontrée, par exemple dans la référence [Garcia 98a]. Son influence sera étudiée de manière spécifique au paragraphe 7.2 lorsque nous présenterons les résultats obtenus par une modélisation $2D(r, z)$ du crayon combustible.

1.2.2 Comportement sous irradiation de la gaine

Ce paragraphe décrit brièvement les différents phénomènes qui affectent le comportement sous irradiation de la gaine. Nous renvoyons à [Bailly 96] pour une description plus précise de ces phénomènes. Une implantation des différentes lois mécaniques de la gaine a été proposée dans la référence [Helfer 05c]. Les expressions de ces différentes lois utilisées dans la thèse peuvent être trouvées dans les références [Struzik 00] et [Bentejac 97].

Comportement viscoplastique En réacteur, la gaine relaxe les contraintes auxquelles elle est soumise en s'écoulant par viscoplasticité. En l'absence d'irradiation, ce comportement se décompose en deux phases primaire et secondaire (ou stationnaire). Ce comportement est décrit dans la référence [Bentejac 97].

Comportement plastique Lorsque la gaine est fortement sollicitée, en situation incidentelle notamment, la gaine se déforme de manière plastique. La modélisation de ce type de comportement est décrite au paragraphe 2.1.3.2.

Effet de l'irradiation En fonctionnement normal, l'irradiation de la gaine a pour effet d'accélérer l'écoulement viscoplastique. Par ailleurs, les dégâts d'irradiation dûs aux neutrons rapides ont pour effet de durcir le matériau. Ce durcissement n'est sensible qu'en situation incidentelle quand la gaine est fortement sollicitée. Deux lois de comportements viscoplastiques distinctes sont alors utilisées en fonction de la situation décrite ([Michel 05]).

Grandissement sous flux Après fabrication, le matériau de gainage présente une texture. Les dégâts d'irradiation conduisent à la formation de boucles de dislocations dans des plans cristallographiques liés à cette texturation du matériau. Ceci se traduit par un grandissement de la gaine dans la direction du crayon.

1.2.3 Interaction pastille-gaine

Au début de la phase d'irradiation du crayon, le jeu pastille-gaine est ouvert. Ce jeu se réduit sous l'effet combiné de la déformation thermique de la pastille et du comportement viscoplastique sous irradiation de la gaine. Celle-ci est en effet comprimée par le fluide caloporteur. Une fois le jeu comblé, la gaine prend appui sur la pastille : c'est le phénomène d'**interaction pastille-gaine** (IPG). La mise en diabolo de la pastille conduit à une refermeture du jeu plus rapide au niveau du plan inter-pastilles qu'au niveau du plan médian-pastille.

En fonctionnement normal, une fois le jeu refermé, la pression de contact et la pression interne dans le crayon équilibrent progressivement la pression du fluide caloporteur. Cet équilibre est atteint en fin de second cycle d'irradiation. Les contraintes dans la gaine peuvent devenir légèrement positives pour des crayons ayant subi plusieurs cycles d'irradiation.

En situation accidentelle, l'IPG conduit à une sollicitation extrêmement forte de la gaine qui peut conduire à sa rupture par corrosion sous contraintes. Ce phénomène est donc particulièrement étudié.

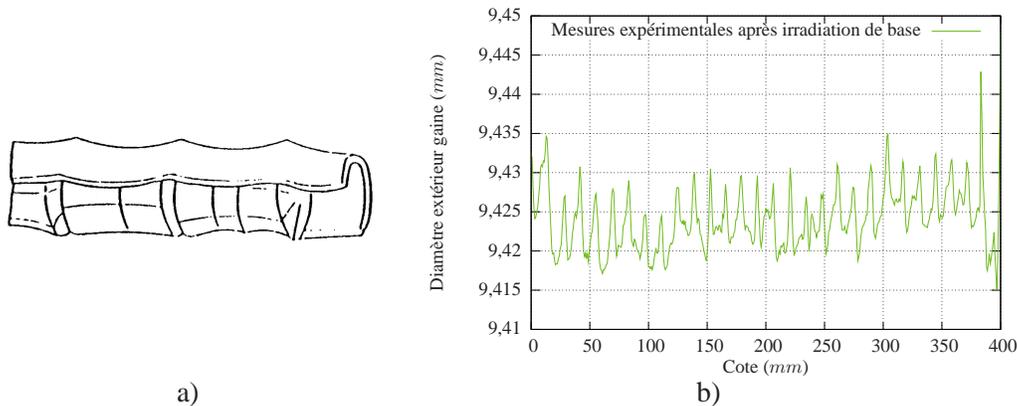


FIG. 1.7 – Illustration de l'effet bambou sur la gaine. a) Représentation schématique mettant en regard les surdéformations observées et les pastilles combustibles. b) Exemple de profilométrie de la gaine après une irradiation de base de deux cycles (L'historique de cette irradiation est donné sur la figure 6.1).

Plis primaires, plis secondaires, effet bambou Une conséquence de l'interaction pastille-gaine est que la pastille imprime ses déformations à la gaine. Après irradiation, les **profilométries**, c'est à dire les mesures de diamètre de la gaine le long du crayon, montrent que ce diamètre varie régulièrement avec la cote axiale. Ces variations se font sur une distance qui correspond à la hauteur des pastilles. Ceci est illustré sur la figure 1.7 b). La gaine prend une forme de **bambou** (voir figure 1.7 a)). Des surdéformations sont observées aux plans médian pastille et inter-pastilles. Au plan inter-pastilles, ces surdéformations sont appelées **plis primaires**. Ils se forment généralement au cours de l'irradiation de base et sont dus à la mise en diabolo de la pastille. Au plan médian-pastille, ces surdéformations sont appelées **plis secondaires**. *Ces profilométries sont les principales données expérimentales dont nous nous servirons pour juger de la pertinence des modèles proposés dans cette thèse.*

Influence de la fragmentation du combustible sur le chargement de la gaine Il est maintenant admis que la sollicitation est maximale au droit des fragments de la pastille (figure 1.8). Les ruptures de gaine en situation accidentelle sont généralement observées au plan inter-pastilles. Ces deux constatations permettent de définir le **point triple**. Ce point est l'intersection des plans de fragmentation radiale de la pastille et du plan inter-pastilles en peau interne de gaine.

1.3 Simulation du comportement des crayons combustibles

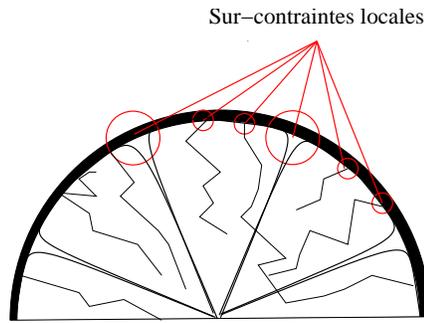


FIG. 1.8 – Effets de surcontraintes locales dans la gaine au droit des fissures dans la pastille.

Ce paragraphe présente les objectifs de la simulation du comportement des crayons combustible. Un classement des approches possibles en fonction de la représentation géométrique du crayon combustible est donné. Ce paragraphe sera l'occasion de décrire l'ensemble des codes existant dans l'environnement immédiat de la thèse.

1.3.1 Objectifs de l'étude du comportement des crayons combustibles

L'intégrité de la gaine doit être assurée quelques soient les conditions de fonctionnement, normal ou incidentel, du réacteur. Cette exigence est liée au rôle de la gaine d'être la première barrière de protection de l'environnement face au risque de dissémination des produits de fission (paragraphe 1.1.2.1).

Cette exigence a de nombreuses conséquences sur les conditions de fonctionnement des réacteurs, lourdes pour l'exploitant ([Béguin 04]) :

- elles limitent la manœuvrabilité des centrales en particulier au cours des suivis de charge ;
- elles limitent la durée d'irradiation des assemblages ;
- elles demandent des études importantes de qualification des nouveaux combustibles ;
- elles demandent des études importantes de simulation des situations incidentelles.

Leur réduction a conduit à de nombreuses études du comportement des crayons combustibles et du phénomène d'interaction pastille-gaine en particulier. Le risque de rupture de la gaine par corrosion sous contrainte étant maximal en situation incidentelle, cette situation doit être prise en compte dans les études de sûreté. Deux voies complémentaires sont suivies :

- la mise en place de programmes expérimentaux ;
- le développement de codes de simulation des crayons combustibles.

Ces deux voies vont maintenant être présentées.

1.3.2 Simulation expérimentale du fonctionnement incidentel des REP

Afin de *simuler* le fonctionnement incidentel, une méthodologie expérimentale spécifique a été mise en place.

Des crayons ayant subi plusieurs cycles d'irradiation en réacteur industriel, appelé aussi **réacteur de puissance**, sont sélectionnés. Cette première étape est appelée l'**irradiation en base**.

Les crayons étudiés sont reconditionnés pour pouvoir être introduits en **réacteur expérimental**. Les crayons d'origine sont appelés **crayons père**. Les réacteurs expérimentaux dont il est fait mention dans ce mémoire sont les réacteurs Siloë, en cours de démantèlement, et Osiris, situés respectivement sur les sites CEA de Grenoble et de Saclay. Dans ces réacteurs, les crayons reconditionnés subissent un transitoire de puissance de classe *II*, appelée aussi une **rampe de puissance**. Après une phase de **conditionnement** de quelques dizaines d'heures à puissance nominale, la puissance linéique augmente rapidement. La variation de puissance a été fixée à $100 \text{ W.cm}^{-1}.\text{min}^{-1}$. Les puissances maximales sont supérieures à 400 W.cm^{-1} . Ce niveau de puissance est maintenu pendant une durée variant de quelques minutes à plusieurs heures.

Ces irradiations permettent d'avoir accès à de nombreux paramètres expérimentaux. Pour cette thèse, les

plus importants sont les *profilométries* de la gaine après l'irradiation de base et après la rampe de puissance.

Nous avons choisi de ne décrire dans ce mémoire qu'un seul crayon expérimental. Ce crayon est étudié au chapitre 6. Ce cas sert de base à la confrontation à l'expérience des différents modèles proposés dans la thèse. Son historique de puissance en irradiation de base et en rampe de puissance est donné sur la figure 6.1 page 120.

1.3.3 Codes de modélisation du comportement du crayon combustible

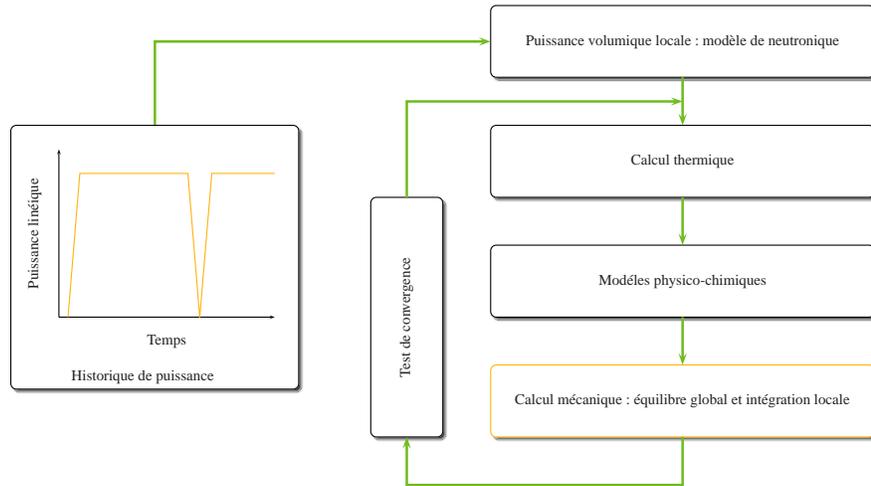


FIG. 1.9 – Principe schématique utilisé pour les codes de calcul de crayon combustible.

Les différents phénomènes étudiés au paragraphe 1.2 sont *non-linéaires*. Ils sont par ailleurs fortement *couplés*. Le recours à des codes de calcul spécifiques au crayon combustible est donc nécessaire. De nombreux codes ont été développés, [Lassmann 87] en propose une revue.

L'ensemble des codes utilisés pendant la thèse sont basés sur des schémas numériques proches. Ce schéma est illustré dans ses grandes lignes sur la figure 1.9. Nous nous intéresserons dans la suite uniquement à la partie mécanique.

Les codes de comportement du crayon combustible se différencient par les hypothèses de modélisation et les phénomènes pris en compte. La géométrie utilisée pour décrire le crayon combustible est une hypothèse particulièrement importante. Deux géométries de pastille sont le plus souvent utilisées :

- un cylindre plein infini. Cette modélisation est appelée *1D* dans la suite. Elle permet de décrire le comportement moyen de la pastille. Elle peut être enrichie pour décrire un crayon combustible entier en le divisant en *tranches axiales* représentant plusieurs pastilles. Chaque tranche est modélisée en *1D*. L'équilibre des forces axiales dans le crayon et l'augmentation de température axiale du fluide caloporteur permettent de coupler les différentes tranches. Cette modélisation est alors appelée *1,5D*. Elle sera décrite de manière plus précise au paragraphe 3.2 ;
- un fragment de pastille. Cette modélisation, appelée *3D* dans la suite, permet de prendre en compte les effets géométriques les plus importants, la mise en diabolisme de la pastille, le comblement de son évidement ainsi que la formation des plis primaire et secondaire sur la gaine. Elle fournit donc une description locale et précise du comportement de la pastille combustible. Les temps de calculs qu'elle implique sont cependant importants.

Nous avons particulièrement étudié dans ce mémoire une modélisation intermédiaire, dite *2D* (r, z), du crayon combustible permettant de retrouver les principaux effets de structure observés en *3D* avec des temps de calcul nettement moindres. Les apports comparés de chacune de ces modélisations sont décrits au paragraphe 3.1.

1.3.3.1 Modélisation 1D du crayon combustible

La modélisation 1D du crayon combustible est souvent utilisée. Elle est décrite au paragraphe 3.2. Trois de ces logiciels ont fait partie de l'environnement de la thèse :

- METEOR (Mécanique et Thermique des Oxydes en Réacteur), décrit dans les références [Garcia 97, Garcia 02]. METEOR est un code développé au CEA. La partie mécanique de ce code est appelée MEFISTO (Modèle Éléments Finis pour le calcul de STRucture des Oxydes) et contient un modèle d'endommagement, appelé lui aussi MEFISTO par la suite. Ce modèle est actuellement utilisé pour décrire le comportement des combustibles dans les modélisations 1D et 2D (r, z). Il sera décrit de manière spécifique au paragraphe 4.1 ;
- COPERNIC, décrit dans la référence [Garnier 04]. Développé par Framatome-ANP, ce code a repris la partie mécanique MEFISTO du code METEOR.
- CYRANO3, décrit dans la référence [Baron 97]. Le code CYRANO3, dont le nom est un anagramme de crayon, a été développé par EDF. Il est actuellement intégré au projet PLEIADES décrit au paragraphe 1.3.3.3.

Les calculs faits avec des codes industriels permettent de simuler le comportement d'un quart de cœur de réacteur, soit environ 10 000 crayons combustible, en une dizaine d'heure.

1.3.3.2 Modélisation 3D du crayon combustible

La modélisation 3D du crayon combustible est décrite au paragraphe 3.4. À cause des temps de calcul qu'elle nécessite, cette modélisation est avant tout un outil de recherche. Au CEA, elle a été longtemps portée par l'application Toutatis. Cette application est décrite dans [Bentejac 04]. À l'heure actuelle, une nouvelle application 3D, ALCYONE3D, est développé dans le cadre du projet PLEIADES.

1.3.3.3 Le projet PLEIADES

Le projet PLEIADES (Plate-forme Logiciel pour les Éléments Irradiés dans les Assemblages, en Démonstration, en Expérimentation, ou en Service), initié par le CEA, et auquel s'est joint EDF, a pour but le développement d'une plateforme de simulation du comportement des combustibles de toutes les filières nucléaires ([Plancq 04]).

L'application ALCYONE L'application ALCYONE, en cours de développement, est destinée à la modélisation du comportement des REP en fonctionnement normal et incidentel. Cette application recouvre trois modélisations du crayon combustible :

- ALCYONE1D, destiné à la modélisation monodimensionnelle du crayon combustible, et qui doit remplacer à terme le code METEOR ;
- ALCYONE2D, destiné à une modélisation 2D (r, z) du crayon combustible à laquelle une importante partie de ce mémoire est consacré ;
- ALCYONE3D, destiné à une modélisation 3D du crayon combustible.

Ces différentes applications nous ont permis d'aborder les différentes modélisations du crayon combustible dans un environnement commun mutualisant les différents modèles et paramètres décrivant les phénomènes physico-chimiques et mécaniques présentés au paragraphe 1.2.

Codes éléments finis utilisés au cours de la thèse Le projet est *a priori* indépendant du code de calcul thermo-mécanique utilisé. Au cours de la thèse, nous avons pu utiliser deux codes éléments finis :

- ZEBULON, développé à l'école des Mines de Paris, l'Office National d'Études et de Recherches Aérospatiales (ONERA) et l'INSA (Institut National des Sciences Appliquées) de Rouen. Son support commercial est assuré par Northwest Numerics Software (<http://www.nwnumerics.com>) ;
- CAST3M, <http://www-cast3m.cea.fr/>, développé par le CEA.

Le code choisi pour débiter la thèse a été **ZEBULON**. Afin d'assurer la pérennité au sein de la plateforme logicielle **PLEIADES**, les modèles développés au cours de la thèse ont ensuite été intégrés à **CAST3M**.

Bilan du chapitre

Ce chapitre a permis de décrire le contexte de l'étude, *la simulation du comportement du crayon combustible en fonctionnement normal et incidentel*, et nous a permis de mettre en place le vocabulaire spécifique à ce contexte. Les différents phénomènes influençant le comportement du crayon combustible en fonctionnement normal et incidentel ont été décrits et ont mis en lumière le rôle particulier de la fissuration de la pastille. Ces phénomènes étant fortement couplés, le recours à des codes de simulation est nécessaire. Ces codes se classent suivant la dimension du calcul. Le projet **PLEIADES** fournit le code **ALCYONE** qui englobe 3 applications décrivant le crayon combustible en $1D$, $2D (r, z)$ et $3D$. Quelque soit cette dimension, les effets de la fissuration et de la fragmentation de la pastille combustible doivent être pris en compte. Nous proposons maintenant une revue bibliographique des modèles de fissuration des matériaux fragiles en quasi-statique. Cette étude servira de socle théorique au reste de la thèse.



CHAPITRE 2

FISSURATION DES MATÉRIAUX FRAGILES

Objet du chapitre :

Ce chapitre propose une revue bibliographique sur la fissuration des matériaux fragiles en vue de la description de la fissuration du combustible nucléaire UO_2 . Il commence par rappeler un cadre théorique classique, celui des matériaux standards généralisés. Nous y verrons l'occasion d'introduire différents comportements rencontrés dans la suite de ce mémoire, la viscoplasticité, la plasticité instantanée. Le paragraphe 2.2 fait le lien entre ces comportements locaux et le calcul de structure. Ces bases rappelées, les différentes approches de la rupture, appelées globale et locale, sont décrites aux paragraphes 2.3.3 et 2.4. Leurs principales idées physiques sont décrites. Leur capacité à traiter des situations complexes telles que celles rencontrées dans la pastille est évaluée.

La mécanique de l'endommagement local, utilisée dans la suite de ce mémoire, soulève des difficultés qui rendent son application délicate. L'origine physique de ces difficultés est étudiée avec les outils introduits dans les deux premiers paragraphes du chapitre.

Sommaire du chapitre 2

2.1	Comportements locaux, matériaux standards généralisés	34
2.1.1	Description locale de l'état thermodynamique d'un matériau	34
2.1.2	Lois d'état	36
2.1.3	Lois complémentaires, matériaux standards généralisés	39
2.1.4	Évolution des variables internes, intégration locale	44
2.2	Du comportement local au calcul de structure	47
2.2.1	Équilibre mécanique en quasi-statique, principe des travaux virtuels	47
2.2.2	Lagrangien mécanique incrémental	49
2.3	Approche globale de la rupture	52
2.3.1	Description d'une fissure	52
2.3.2	Mécanique linéaire de la rupture, taux de restitution de l'énergie	54
2.3.3	Singularité des contraintes en pointe de fissure	56
2.4	Mécanique de l'endommagement local	57
2.4.1	Application du formalisme standard généralisé à l'endommagement des matériaux	57
2.4.2	Prise en compte du caractère unilatéral de l'endommagement	61
2.4.3	Difficultés mathématiques associées aux structures endommageables	64
2.4.4	Énergie dissipée par la propagation d'une bande de localisation	67
2.4.5	Développements récents de l'approche locale de la rupture	69
2.4.6	Propagation instable	73

2.1 Comportements locaux, matériaux standards généralisés

Nous introduisons ici un cadre thermodynamique pratique que nous utiliserons dans la suite de ce mémoire. Nous supposons néanmoins que le lecteur a quelques notions d'élasticité. Le lecteur pourra se référer à [Chaboche 96] et [Besson 01] pour une étude plus générale.

De plus, nous limiterons notre présentation aux **matériaux standards généralisés**. Notons que les comportements standards généralisés ne sont pas plus *physiques* que d'autres. L'avantage de ce formalisme abstrait est double :

- il permet de construire de manière systématique des lois de comportements simples vérifiant le second principe de la thermodynamique ;
- il permet de traiter dans un cadre mathématique rigoureux les problèmes d'évolution, de stabilité et de bifurcation des systèmes mécaniques ([Halphen 73, Halphen 75, Nguyen 87]).

Nous illustrerons ce paragraphe par des applications à la viscoplasticité et à la plasticité à écrouissage positif. En effet, la viscoplasticité est un comportement important pour décrire le comportement du combustible (paragraphe 1.2.1). Par ailleurs, il est d'usage de décrire un seuillage des contraintes en 3D par de la plasticité à écrouissage positif (paragraphe 4.2.1). Les comportements endommageables, bien qu'ils constituent le cœur de ce mémoire, seront traités de manière spécifique, au paragraphe 2.4.

Hypothèses préalables Pour simplifier la présentation, nous ferons de plus les hypothèses suivantes :

- l'évolution du système est supposée *isotherme* : aucune production, ni conduction de chaleur, ni dilatation thermique n'a lieu. Cette hypothèse est critiquable au vu du sujet traité. Il apparaît cependant que le traitement de situation anisotherme peut facilement être intégré au formalisme décrit ici. Nous n'avons cependant pas voulu alourdir la présentation. Nous nous en tenons donc à considérer le champ de température via la déformation thermique qu'il induit et à traiter ce terme comme un chargement externe du problème de mécanique ;
- nous ferons l'hypothèse des *petites déformations*. Les **déformations totales** $\underline{\epsilon}^{to}(\vec{u})$ sont un champ de tenseurs défini en chaque point par :

$$\epsilon_{ij}^{to}(\vec{u}) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$$

Nous les noterons généralement $\underline{\epsilon}^{to}$. Par définition, ce tenseur est *symétrique*. Parfois, nous devons introduire la déformation $\underline{\epsilon}^{to}(\vec{v})$ associée à des champs quelconques \vec{v} ;

- à chaque mécanisme de déformation est associé un tenseur ($\underline{\epsilon}^{el}$ pour l'élasticité, $\underline{\epsilon}^p$ pour la plasticité et $\underline{\epsilon}^{vis}$ pour la viscoplasticité). En chaque point de la structure, la déformation totale $\underline{\epsilon}^{to}$ est la somme de chacune des déformations (c'est l'hypothèse de **partitionnement des déformations**) :

$$(2.1) \quad \underline{\epsilon}^{to} = \underline{\epsilon}^{el} + \underline{\epsilon}^p + \underline{\epsilon}^{vis} + \dots$$

2.1.1 Description locale de l'état thermodynamique d'un matériau

Hypothèse de l'état local L'état thermodynamique d'un matériau en tout point est supposé entièrement caractérisé par les valeurs *actuelles* en *ce point* d'un ensemble de **variables d'état indépendantes**. Pour décrire le comportement mécanique d'un matériau, le jeu de variables d'état choisi contient :

- la température T ;
- les déformations totales $\underline{\epsilon}^{to}$;
- les déformations inélastiques ($\underline{\epsilon}^p, \underline{\epsilon}^{vis}, \dots$) ;
- un ensemble de **variables internes** (variable d'écrouissage, d'endommagement, ...) notées symboliquement p_i .

La connaissance des valeurs *actuelles* des variables internes p_i est supposée suffisante pour caractériser l'histoire du matériau, c'est à dire les changements microstructuraux qu'il a subit (écrouissage, endommagement...).

Notons que les déformations élastiques $\underline{\epsilon}^{el}$ ne font pas partie des variables d'état choisies : en effet, ces déformations dépendent linéairement des déformations totales $\underline{\epsilon}^{to}$ et inélastiques $\underline{\epsilon}^{inl}$ par la relation (2.1).

Potentiels thermodynamiques Soit Ω un corps. L'**énergie interne** de ce corps est notée E et son **entropie** S . Suivant l'hypothèse de l'état local, nous introduisons les potentiels spécifiques locaux e et s tels que :

$$(2.2) \quad E = \int_{\Omega} \rho e \, dV \quad \text{et} \quad S = \int_{\Omega} \rho s \, dV$$

où ρ est la masse volumique. Le potentiel thermodynamique le plus utilisé en mécanique est l'**énergie libre spécifique de HELMHOLTZ** Ψ . Ce potentiel se déduit des 2 potentiels précédents par la relation :

$$\Psi = e - T s$$

Forces thermodynamiques, lois d'état L'énergie libre permet d'associer à chaque variable d'état X une **force thermodynamique** \mathcal{F}_X définie par :

$$(2.3) \quad \mathcal{F}_X = \rho \frac{\partial \Psi}{\partial X}$$

L'ensemble des relations entre les variables d'état et leurs forces thermodynamiques constitue les **lois d'état** du matériau.

2.1.1.1 Premier et second principe de la thermodynamique

L'énergie totale d'une structure Ω se décompose en son énergie cinétique \mathcal{K} , due à son mouvement par rapport au référentiel dans lequel son mouvement est décrit, et son énergie interne E . Nous décrivons ici comment évoluent ces énergies.

Conservation de l'énergie mécanique La variation $\dot{\mathcal{K}}$ d'énergie cinétique \mathcal{K} est donnée par ([Coirier 01]) :

$$(2.4) \quad \dot{\mathcal{K}} = \mathcal{P}_i + \mathcal{P}_e$$

La puissance mécanique intérieure \mathcal{P}_i s'écrit en introduisant en chaque point le **tenseur des contraintes** mécaniques $\underline{\sigma}$:

$$(2.5) \quad \mathcal{P}_i = - \int_{\Omega} \underline{\sigma} : \underline{\dot{\epsilon}}^{to} \, dV$$

$\underline{\dot{\epsilon}}^{to}$ est la vitesse de déformation¹. Le tenseur des contraintes $\underline{\sigma}$ décrit la réaction locale du matériau aux sollicitations mécaniques qu'il subit. Il s'agit d'un tenseur d'ordre 2. En l'absence de moments volumiques, ce que nous supposons dans la suite, il s'agit d'un tenseur *symétrique* (voir la référence [Coirier 01]). La quantité $\underline{\sigma} : \underline{\dot{\epsilon}}^{to}$ représente le produit contracté du tenseur des contraintes par le tenseur de vitesse de déformation $\underline{\dot{\epsilon}}^{to}$:

$$\underline{\sigma} : \underline{\dot{\epsilon}}^{to} = \sum_{i,j} \sigma_{ij} \dot{\epsilon}_{ji}^{to}$$

La puissance mécanique extérieure \mathcal{P}_e s'écrit :

$$\mathcal{P}_e = \int_{\Omega} \vec{f} \cdot \vec{u} \, dV + \int_{\partial\Omega_{\vec{T}}} \vec{T} \cdot \vec{u} \, dS$$

où \vec{f} sont les forces volumiques appliquées à la structure (la gravité par exemple) et \vec{T} les tractions appliquées sur une partie $\partial\Omega_{\vec{T}}$ de la frontière $\partial\Omega$ de la structure Ω (nous avons supposé \dot{u} nul sur le complémentaire $\partial\Omega_{\vec{u}}$ à $\partial\Omega_{\vec{T}}$). L'équation (2.4) est en fait une conséquence du principe des travaux virtuels que nous examinerons au paragraphe 2.2.1 (équation (2.54)).

¹Dans la suite, nous noterons à la dérivée par rapport au temps de la quantité a .

Premier principe Le premier principe de la thermodynamique est l'expression de la *conservation de l'énergie*. Il indique que les variations \dot{E} et \dot{K} des énergies internes et cinétiques d'un système Ω sont dues à la puissance des forces mécaniques extérieures \mathcal{P}_e et du taux de chaleur reçue \mathcal{Q} :

$$(2.6) \quad \dot{K} + \dot{E} = \mathcal{P}_e + \mathcal{Q}$$

Avec la relation (2.4), l'équation (2.6) prend la forme suivante :

$$\dot{E} = \mathcal{P}_i + \mathcal{Q}$$

Nous faisons l'hypothèse que \mathcal{Q} est nul (pas de production de chaleur et pas d'échange thermique), ce qui nous conduit à l'expression suivante :

$$\int_{\Omega} (\rho \dot{e} - \underline{\sigma} : \underline{\dot{\epsilon}}^{to}) dV = 0$$

Localement, nous pouvons écrire le premier principe ainsi :

$$\boxed{\rho \dot{e} = \underline{\sigma} : \underline{\dot{\epsilon}}^{to}}$$

Second principe En l'absence de création et d'échange de chaleur, le second principe de la thermodynamique exprime que la production d'entropie doit être positive :

$$\boxed{\rho \dot{s} \geq 0}$$

Inégalité de CLAUSIUS-DUHEM En introduisant l'énergie libre Ψ dans l'expression des premier et second principes, nous obtenons l'expression de l'**inégalité de CLAUSIUS-DUHEM** :

$$(2.7) \quad \boxed{\underline{\sigma} : \underline{\dot{\epsilon}}^{to} - \rho \dot{\Psi} \geq 0}$$

Taux de dissipation L'inégalité de CLAUSIUS-DUHEM (2.7) peut s'écrire de manière équivalente en introduisant le **taux de dissipation** $\dot{\phi}$:

$$(2.8) \quad \dot{\phi} = \underline{\sigma} : \underline{\dot{\epsilon}}^{to} - \rho \dot{\Psi}$$

Le second principe est alors équivalent à la positivité du taux de dissipation :

$$(2.9) \quad \boxed{\dot{\phi} \geq 0}$$

2.1.2 Lois d'état

Notons z_i les variables d'état autres que les déformations totales $\underline{\epsilon}^{to}$ (c'est à dire les déformations inélastiques et les variables internes p_i) :

$$\boxed{z_i = (\underline{\epsilon}^p, \underline{\epsilon}^{vis}, p_i)}$$

Nous pouvons développer l'équation (2.8) avec la définition (2.3) des forces thermodynamiques :

$$(2.10) \quad \dot{\phi} = \left(\underline{\sigma} - \rho \frac{\partial \Psi}{\partial \underline{\epsilon}^{to}} \right) : \underline{\dot{\epsilon}}^{to} - \sum_i \rho \frac{\partial \Psi}{\partial z_i} \cdot \dot{z}_i$$

où $\rho \frac{\partial \Psi}{\partial z_i}$ est un vecteur regroupant l'ensemble des forces thermodynamiques associées aux variables d'état z_i . Dans la suite, il sera pratique de noter Z_i l'opposé de ce vecteur :

$$(2.11) \quad \boxed{Z_i = -\rho \frac{\partial \Psi}{\partial z_i}}$$

Normalité des déformations Les équations (2.9) et (2.10) conduisent à :

$$(2.12) \quad \left(\underline{\sigma} - \rho \frac{\partial \Psi}{\partial \underline{\epsilon}^{to}} \right) : \dot{\underline{\epsilon}}^{to} + \sum_i Z_i \cdot \dot{z}_i = \dot{\phi}$$

Il est alors classique de faire l'hypothèse de la **normalité des déformations totales** $\underline{\epsilon}^{to}$: autour de tout point d'équilibre, il est possible de faire varier la déformation totale sans évolution des autres variables internes. D'après l'équation (2.12) et la positivité de la dissipation (équation (2.9)), nous pouvons en déduire que :

$$(2.13) \quad \boxed{\underline{\sigma} = \rho \frac{\partial \Psi}{\partial \underline{\epsilon}^{to}}}$$

Nous renvoyons à [Coussy 91] pour une discussion de cette hypothèse en plasticité. Une conséquence directe de l'hypothèse de normalité des déformations totales $\underline{\epsilon}^{to}$ est l'expression suivante du taux de dissipation :

$$(2.14) \quad \boxed{\dot{\phi} = \sum_i Z_i \cdot \dot{z}_i}$$

2.1.2.1 Application au comportement élastique

- L'énergie libre Ψ est généralement décomposée en deux parties :
- l'énergie libre stockée de manière *réversible* Ψ^{el} ;
 - l'énergie libre stockée de manière *irréversible* Ψ^{inl} .

En supposant que Ψ^{inl} ne dépend pas de la déformation totale mais uniquement des variables internes et des déformations inélastiques, cette décomposition s'écrit sous la forme suivante :

$$\Psi(\underline{\epsilon}^{to}, z_i) = \Psi^{el}(\underline{\epsilon}^{to}, z_i) + \Psi^{inl}(z_i)$$

Le terme d'énergie libre réversible décrit le **comportement élastique** du matériau. En supposant la réponse du matériau *linéaire*, ce terme s'écrit sous la forme classique :

$$(2.15) \quad \rho \Psi^{el}(\underline{\epsilon}^{to}, z_i) = \frac{1}{2} (\underline{\epsilon}^{to} - \underline{\epsilon}^p - \underline{\epsilon}^{vis}) : \underline{\underline{\mathbf{D}}}(p_i) : (\underline{\epsilon}^{to} - \underline{\epsilon}^p - \underline{\epsilon}^{vis})$$

Le tenseur $\underline{\underline{\mathbf{D}}}(p_i)$, d'ordre 4, est le **tenseur d'élasticité** du matériau. La paramétrisation de ce tenseur par les variables internes p_i permet de décrire les phénomènes d'endommagement que nous décrivons au paragraphe 2.4. En tenant compte de l'hypothèse de normalité (équations (2.12) et (2.13)), nous pouvons écrire que :

$$(2.16) \quad \boxed{\underline{\sigma} = \rho \frac{\partial \Psi}{\partial \underline{\epsilon}^{to}} = \rho \frac{\partial \Psi^{el}}{\partial \underline{\epsilon}^{to}} = \underline{\underline{\mathbf{D}}}(p_i) : (\underline{\epsilon}^{to} - \underline{\epsilon}^p - \underline{\epsilon}^{vis})}$$

L'équation (2.16) est la loi de HOOKE. L'équation de partition des déformations (2.1) permet de retrouver l'expression usuelle de la loi de HOOKE :

$$(2.17) \quad \underline{\sigma} = \underline{\underline{\mathbf{D}}}(p_i) : \underline{\epsilon}^{el}$$

où apparaissent les déformations élastiques $\underline{\epsilon}^{el}$. Si nous supposons maintenant que l'énergie libre stockée de manière irréversible Ψ^{inl} ne dépend pas des déformations inélastiques $\underline{\epsilon}^{vis}$ et $\underline{\epsilon}^p$, nous pouvons exprimer les forces thermodynamiques qui leur sont associées :

$$(2.18) \quad \rho \frac{\partial \Psi}{\partial \underline{\epsilon}^{vis}} = \rho \frac{\partial \Psi}{\partial \underline{\epsilon}^p} = -\rho \frac{\partial \Psi^{el}}{\partial \underline{\epsilon}^{to}} = -\underline{\sigma}$$

Ainsi, les forces thermodynamiques associées aux déformations inélastiques sont l'opposée des contraintes.

Tenseur d'élasticité de matériaux isotropes Pour nos applications, nous traiterons des matériaux isotropes. Le tenseur d'élasticité doit refléter cette isotropie. Les tenseurs d'ordre 4 isotropes s'écrivent sous la forme :

$$(2.19) \quad \underline{\underline{D}} = \lambda \underline{\underline{I}} \otimes \underline{\underline{I}} + 2\mu \underline{\underline{I}}$$

où $\underline{\underline{I}}$ et $\underline{\underline{I}}$ sont respectivement les tenseurs identité d'ordre 2 et d'ordre 4. \otimes désigne le produit tensoriel. En élasticité, les coefficients λ et μ sont appelées **coefficients de LAMÉ**. μ est aussi appelé le module de cisaillement.



FIG. 2.1 – Barreau en traction uniaxiale

Caractérisation de la réponse d'un matériau, l'essai de traction uniaxiale Afin d'appréhender le comportement d'un matériau, il est d'usage de décrire des structures simples et soumises à des chargements simples. L'**essai de traction uniaxiale** est le plus simple et sera régulièrement utilisé dans la suite. La structure considérée est un barreau de longueur L et de section homogène. Le barreau est fixé à l'une de ses extrémités. L'autre extrémité est soumise à un déplacement imposé U (figure 2.1). Cet essai est tel que :

- la contrainte σ_{xx} dans la direction de traction est uniforme. Les autres composantes du tenseur des contraintes sont nulles ;
- les déformations totales ϵ_{xx}^{to} et ϵ_{yy}^{to} dans la direction de traction et perpendiculairement à la direction de traction sont supposées uniformes². La déformation ϵ_{xx}^{to} est égale à $\frac{U}{L}$.

La réponse du barreau est caractérisée par sa **courbe de traction** représentant la contrainte σ en fonction de la déformation ϵ_{xx}^{to} . Dans le cas de l'élasticité linéaire, cette courbe est une droite indépendante de la vitesse de sollicitation. Sa pente est le **module d'YOUNG** E du matériau :

$$(2.20) \quad \sigma_{xx} = E \epsilon_{xx}^{to}$$

La déformation transverse ϵ_{yy}^{to} est elle aussi proportionnelle à la déformation ϵ_{xx}^{to} dans la direction de traction :

$$(2.21) \quad \epsilon_{yy}^{to} = -\nu \epsilon_{xx}^{to}$$

ν est le **coefficient de POISSON** du matériau. Nous parlerons d'effet POISSON pour décrire cette contraction transverse à la direction de traction.

Ces nouveaux coefficients sont reliés aux coefficients de LAMÉ par la relation :

$$(2.22) \quad \begin{cases} \lambda = \frac{\nu E}{(1 + \nu)(1 - 2\nu)} \\ \mu = \frac{E}{2(1 + \nu)} \end{cases}$$

Énergie libre d'un matériau élastique isotrope À partir des équations (2.15) et (2.19), il est possible d'exprimer l'énergie libre Ψ d'un matériau élastique isotrope sous la forme suivante :

$$(2.23) \quad \rho \Psi (\underline{\underline{\epsilon}}^{to}) = \frac{1}{2} \left(\lambda (\text{tr } \underline{\underline{\epsilon}}^{to})^2 + 2\mu \underline{\underline{\epsilon}}^{to} : \underline{\underline{\epsilon}}^{to} \right)$$

où $\text{tr } \underline{\underline{\epsilon}}^{to}$ désigne la trace du tenseur $\underline{\underline{\epsilon}}^{to}$:

$$\text{tr } \underline{\underline{\epsilon}}^{to} = \sum_{i=1}^3 \epsilon_{ii}^{to}$$

²La déformation ϵ_I^{to} dans le barreau est homogène pour tout comportement non adoucissant. Dans le cas de matériaux endommageables, l'uniformité des déformations n'est plus assurée à cause du phénomène de localisation, voir le paragraphe 2.4.3.2.

2.1.3 Lois complémentaires, matériaux standards généralisés

Après avoir précisé la définition des forces thermodynamiques *via* les lois d'état, il nous faut préciser l'évolution des variables internes, c'est à dire les **lois complémentaires** pour compléter la description du comportement du matériau étudié. Afin d'assurer de manière systématique l'inégalité (2.7), le cadre théorique des *matériaux standards généralisés*, prenant sa source dans les travaux de [Moreau 70] puis de [Halphen 73], a été mis en place.

Matériaux standards généralisés Dans le cas de matériaux viscoplastiques, un matériau est dit **standard généralisé** si il existe une fonction $\Phi(Z_i)$ appelée **potentiel de dissipation** *convexe et minimale en 0* telle que la vitesse \dot{z}_i vérifie :

$$(2.24) \quad \dot{z}_i = \frac{\partial \Phi}{\partial Z_i}$$

Il est possible de montrer qu'un matériau standard généralisé respecte l'inégalité (2.7) de CLAUSIUS-DUHEM pour toute évolution des variables internes (voir [Helfer 05c] pour une démonstration).

Potentiel de dissipation dual La loi complémentaire (2.24) peut être écrite de manière duale en introduisant la transformée de LEGENDRE Φ^* du potentiel de dissipation Φ :

$$(2.25) \quad \Phi^*(\dot{z}_i) = Z_i \cdot \dot{z}_i - \Phi(Z_i)$$

Le potentiel Φ^* ainsi défini est appelé le **potentiel de dissipation dual**. Φ^* est une fonction convexe de la variable \dot{z}_i . La force thermodynamique Z_i associée à la vitesse \dot{z}_i :

$$(2.26) \quad Z_i = \frac{\partial \Phi^*}{\partial \dot{z}_i}$$

En pratique, il est équivalent de se donner soit le potentiel de dissipation Φ soit son dual Φ^* . En effet, il est possible de montrer que la transformée de LEGENDRE du potentiel de dissipation dual Φ^* est le potentiel de dissipation Φ .

2.1.3.1 Application au comportement viscoplastique

La **viscoplasticité** décrit l'évolution du matériau sous charge au cours du temps, généralement à températures élevées. Sa prise en compte est extrêmement importante dans le cas du combustible. Les lois viscoplastiques utilisées dans la suite de thèse sont décrites au paragraphe 4.3.

La déformation associée, la **déformation viscoplastique**, est notée $\underline{\epsilon}^{vis}$. La force thermodynamique associée à la déformation viscoplastique étant l'opposée de la contrainte (équation (2.18)), l'équation (2.24) nous conduit à rechercher un potentiel de dissipation de la forme $\Phi(\underline{\sigma})$. La loi complémentaire s'écrit alors :

$$(2.27) \quad \underline{\epsilon}^{vis} = \frac{\partial \Phi}{\partial \underline{\sigma}}$$

Pour un matériau isotrope, les lois de comportement doivent être invariantes par changement de référentiel : le potentiel de dissipation ne doit dépendre que des invariants du tenseur des contraintes. Pour les applications à l'UO₂, seuls deux des trois invariants de ce tenseur sont utilisés, la **pression hydrostatique** p et la **contrainte équivalente** σ_{eq} de VON-MISES, définies par :

$$(2.28) \quad \begin{cases} p = \frac{1}{3} \text{tr } \underline{\sigma} \\ \sigma_{eq} = \sqrt{\frac{3}{2} \underline{\mathbf{s}} : \underline{\mathbf{s}}} \end{cases} \quad \text{avec} \quad \underline{\mathbf{s}} = \underline{\sigma} - \frac{1}{3} (\text{tr } \underline{\sigma}) \underline{\mathbf{I}}$$

où \underline{s} est la partie **déviatorique** du tenseur des contraintes. Dans la majorité des lois, l'écoulement ne dépend pas de la pression hydrostatique. Le potentiel de dissipation peut donc se mettre sous la forme :

$$\Phi(\underline{\sigma}) = F(\sigma_{eq}(\underline{\sigma}))$$

Il est possible de montrer qu'un tel potentiel est une fonction des contraintes convexe et minimale en 0 si F est convexe et strictement croissante.

La loi complémentaire (2.27) s'écrit alors :

$$(2.29) \quad \underline{\dot{\epsilon}}^{vis} = \frac{\partial \Phi}{\partial \sigma_{eq}} \frac{\partial \sigma_{eq}}{\partial \underline{\sigma}} = \frac{\partial \Phi}{\partial \sigma_{eq}} \underline{\mathbf{n}} \quad \text{avec } \underline{\mathbf{n}} = \frac{3}{2} \frac{\underline{\mathbf{s}}}{\sigma_{eq}}$$

La fonction $\frac{\partial \Phi}{\partial \sigma_{eq}}$ et le tenseur $\underline{\mathbf{n}} = \frac{\partial \sigma_{eq}}{\partial \underline{\sigma}}$ caractérisent respectivement l'**intensité** et la **direction** d'écoulement.

Le tenseur $\underline{\mathbf{n}}$ étant proportionnel au déviateur des contraintes, le tenseur $\underline{\dot{\epsilon}}^{vis}$ est *déviatorique*. Cette propriété est importante, elle signifie que l'écoulement viscoplastique se fait en *conservant le volume*.

Taux de dissipation D'après l'équation (2.14), le taux de dissipation est égal à :

$$\dot{\phi} = \underline{\sigma} : \underline{\dot{\epsilon}}^{vis} = \frac{3}{2\sigma_{eq}} \underline{\mathbf{s}} : \underline{\mathbf{s}} \frac{\partial \Phi}{\partial \sigma_{eq}} = \sigma_{eq} \frac{\partial \Phi}{\partial \sigma_{eq}}$$

Le taux de dissipation est positif si l'intensité de l'écoulement est positive. La condition de convexité du potentiel de dissipation n'est pas nécessaire à assurer le second principe. Elle implique cependant que l'intensité de l'écoulement est une fonction croissante de la contrainte équivalente, ce qui est satisfaisant d'un point de vue physique.

Exemple de la loi viscoplastique de NORTON Ce type de loi permet de décrire le comportement viscoplastique secondaire du combustible UO₂. Les lois de type NORTON correspondent à une intensité de l'écoulement $\frac{\partial \Phi}{\partial \sigma_{eq}}$ égale à une puissance de la contrainte de VON MISES :

$$(2.30) \quad \Phi(\underline{\sigma}) = \frac{A}{n+1} (\sigma_{eq})^{n+1} \Rightarrow \underline{\dot{\epsilon}}^{vis} = A (\sigma_{eq})^n \underline{\mathbf{n}}$$

2.1.3.2 Application aux comportements indépendants du temps

Les matériaux viscoplastiques que nous venons d'étudier ont une évolution qui dépend de l'état actuel des forces thermodynamiques. Ces évolutions ne sont pas adaptées à décrire des comportements dits **indépendants du temps**, tels que la plasticité instantanée et l'endommagement fragile.

Variables internes et historique de chargement L'historique de chargement subi par un matériau modifie son état microstructural. En conséquence, le matériau garde une trace de cet historique de chargement. Nous supposons que cet état microstructural est décrit par des variables d'état z_i . Ces variables d'état seront :

- la déformation plastique et des variables d'écrouissage dans le cas de la plasticité ;
- des variables d'endommagement dans le cas de l'endommagement.

Cet effet de mémoire est primordial pour les matériaux indépendants du temps. En effet, ces matériaux n'évoluent plus lorsque le chargement qu'ils subissent :

- est égal au *chargement maximal* qu'ils ont subi au cours de leur histoire ;
- est *croissant*.

Si tel n'est pas le cas, leur comportement est *élastique*.

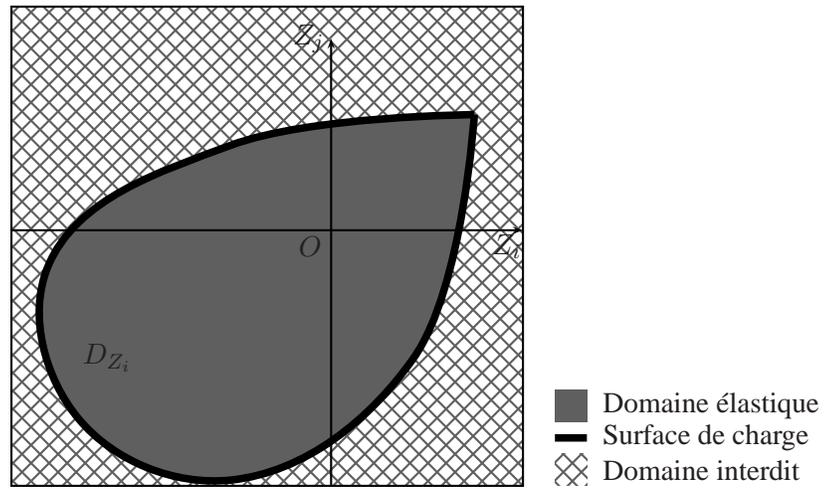


FIG. 2.2 – Illustration de la notion de domaine d'élasticité.

Domaine élastique, surface de charge Les comportements indépendants du temps peuvent être modélisés en introduisant, dans l'espace des variables Z_i , un domaine D_{Z_i} tel que :

- si Z_i appartient à l'intérieur de D_{Z_i} , il n'y a pas évolution des variables internes et le comportement du matériau est élastique ;
- si Z_i appartient à la frontière ∂D_{Z_i} du domaine D_{Z_i} , les variables internes peuvent évoluer en cas de chargement croissant.
- le domaine extérieur à D_{Z_i} soit interdit. Le matériau ne peut se trouver dans un état appartenant à l'extérieur de D_{Z_i} .

L'intérieur du domaine D_{Z_i} et sa frontière ∂D_{Z_i} sont respectivement appelés le **domaine d'élasticité** et la **surface de charge** du matériau (voir figure 2.2).

La taille du domaine d'élasticité est paramétrée par les variables d'état (z_i). Dans le cas de la plasticité, ceci correspond au phénomène d'**écrouissage**.

Description des comportements indépendants du temps dans le cadre standard généralisé Il est possible de décrire certains comportements indépendants du temps dans le formalisme standard généralisé. Les outils introduits plus haut doivent cependant être généralisés. Il est nécessaire d'utiliser un potentiel de dissipation Φ mathématiquement singulier. Le potentiel de dissipation Φ est construit à partir du domaine d'élasticité D_{Z_i} sous la forme :

$$(2.31) \quad \Phi(Z_i) = \begin{cases} 0 & \text{si } Z_i \in D_{Z_i} \\ +\infty & \text{si } Z_i \notin D_{Z_i} \end{cases}$$

Le potentiel de dissipation ainsi introduit s'identifie à la **fonction indicatrice** du domaine d'élasticité D_{Z_i} . La convexité du potentiel $\Phi(Z_i)$ est équivalente à la convexité du domaine d'élasticité D_{Z_i} . Le potentiel de dissipation étant non dérivable, la loi complémentaire (2.24) s'écrit sous une forme généralisée en introduisant la notion de **sous-différentiabilité** (voir [Demengel 99]) :

$$(2.32) \quad \dot{z}_i \in \partial_{Z_i} \Phi$$

Potentiers de dissipation duaux associés aux comportements indépendants du temps La définition du potentiel de dissipation dual nécessite de généraliser la relation (2.25). Φ^* est alors défini par la transformée de LEGENDRE-FENCHEL :

$$(2.33) \quad \Phi^*(\dot{z}_i) = \sup_{Z_i^*} [Z_i^* \cdot \dot{z}_i - \Phi(Z_i^*)]$$

Il est possible de montrer (voir [Lorentz 99a]) que le potentiel de dissipation dual au potentiel de dissipation défini en (2.31) est **positivement homogène de degré 1** :

$$\forall \lambda \in \mathbb{R}^+, \quad \Phi^*(\lambda \dot{z}_i) = \lambda \Phi^*(\dot{z}_i)$$

Il est possible de montrer qu'un tel potentiel Φ^* est égal au taux de dissipation $\dot{\phi}$:

$$(2.34) \quad \dot{\phi} = \Phi^*(\dot{z}_i) = \sum_i Z_i \cdot \dot{z}_i$$

2.1.3.3 Exemple de la plasticité instantanée isotrope à écrouissage positif

Il est d'usage d'utiliser dans une modélisation 3D du crayon combustible, un modèle de plasticité instantanée isotrope à écrouissage positif pour tenter de décrire un seuillage des contraintes représentant une partie des effets dus à la fissuration du combustible. Ce modèle est décrit au paragraphe 4.2.1.

La plasticité instantanée isotrope est décrite à l'aide de deux variables d'état : la déformation plastique $\underline{\epsilon}^p$ et une variable d'écrouissage χ^p . La force thermodynamique associée à la déformation plastique $\underline{\epsilon}^p$ est l'opposée des contraintes $-\underline{\sigma}$ (équation (2.18)). Définissons maintenant la force thermodynamique associée à la variable d'écrouissage :

$$R = \rho \frac{\partial \Psi^{inl}}{\partial \chi^p}$$

La loi d'état $R(\chi^p)$ décrit l'évolution de la surface de charge avec l'écrouissage du matériau. Nous supposons dans la suite l'écrouissage positif, c'est à dire que la dérivée $\frac{\partial R}{\partial \chi^p}$ est positive. $\Psi^{inl}(\chi^p)$ représente l'énergie stockée par écrouissage.

Fonction de charge, lois complémentaires Il est classique en plasticité de décrire le domaine d'élasticité D à l'aide d'une **fonction de charge** négative dans le domaine d'élasticité, positive ailleurs. Une forme particulièrement simple de la fonction de charge est choisie ici :

$$(2.35) \quad f(\underline{\sigma}, -R) = \sigma_{eq}(\underline{\sigma}) - R$$

Le potentiel de dissipation est alors défini par :

$$\Phi(\underline{\sigma}, -R) = I_D(\underline{\sigma}, -R) = \begin{cases} 0 & \text{si } f(\underline{\sigma}, -R) \leq 0 \\ +\infty & \text{si } f(\underline{\sigma}, -R) \geq 0 \end{cases}$$

Le sous-différentiel au potentiel de dissipation est réduit à 0 dans le domaine élastique (ϕ est différentiable dans cette zone). Sur la surface de charge, il est possible de montrer que l'expression du sous-différentiel (2.32) conduit à introduire un réel positif $\dot{\lambda}$ appelé le *multiplicateur plastique* tel que :

$$(2.36) \quad (\dot{\underline{\epsilon}}^p, \dot{\chi}^p) \in \partial_{(\underline{\sigma}, -R)} \Phi \Rightarrow \begin{cases} \dot{\underline{\epsilon}}^p = \dot{\lambda} \frac{\partial f}{\partial \underline{\sigma}} = \dot{\lambda} \underline{\mathbf{n}} \\ \dot{\chi}^p = \dot{\lambda} \frac{\partial f}{\partial (-R)} = -\dot{\lambda} \frac{\partial f}{\partial R} = \dot{\lambda} \end{cases}$$

Le tenseur $\underline{\mathbf{n}}$ a été défini plus haut, équation (2.29). Dans le cadre de la plasticité, $\underline{\mathbf{n}}$ est appelé le **tenseur normal**. En effet, par définition, $\underline{\mathbf{n}}$ est un tenseur normal aux isosurfaces de la contrainte équivalente σ_{eq} , et donc à la surface de charge d'après l'équation (2.35). Le tenseur normal étant déviatorique, l'écoulement plastique est *incompressible*.

Déformation plastique cumulée D'après l'équation (2.36) et en notant que la normale \underline{n} est telle que $(\underline{n} : \underline{n})^{1/2} = \sqrt{\frac{3}{2}}$, nous obtenons alors :

$$(2.37) \quad \dot{\chi}^p = \left(\frac{2}{3} \dot{\underline{\epsilon}}^p : \dot{\underline{\epsilon}}^p \right)^{1/2} \Rightarrow \chi^p = \int_0^t \left(\frac{2}{3} \dot{\underline{\epsilon}}^p(\tau) : \dot{\underline{\epsilon}}^p(\tau) \right)^{1/2} d\tau$$

ce qui montre que la variable d'érouissage χ^p s'identifie à la **déformation plastique cumulée**.

Condition de cohérence Nous utilisons le fait que la fonction f ne peut être positive. En cas de charge plastique, nous imposons la **condition de cohérence** $df = 0$, c'est à dire que le point représentatif de l'état du système reste sur la surface de charge. Cette condition est dérivée de l'équation (2.35) qui permet d'écrire

$$(2.38) \quad df = \frac{\partial f}{\partial \underline{\sigma}} : \dot{\underline{\sigma}} - \frac{dR}{d\chi^p} \dot{\chi}^p = 0 \Rightarrow \dot{\chi}^p = \frac{1}{\left(\frac{dR}{d\chi^p} \right)} \frac{\partial f}{\partial \underline{\sigma}} : \dot{\underline{\sigma}}$$

L'équation (2.36) impose que $\dot{\chi}^p$ soit positif, ce qui, avec la condition d'érouissage positif $\frac{dR}{d\chi^p} > 0$ et avec l'équation précédente, nous permet de distinguer trois cas :

$$(2.39a) \quad f(\underline{\sigma}, R) = 0, \frac{\partial f}{\partial \underline{\sigma}} : \dot{\underline{\sigma}} < 0 \quad \text{il n'y a pas d'écoulement plastique } (\dot{\chi}^p = 0), \text{ on parle de } \mathbf{d\acute{e}charge \acute{e}lastique} ;$$

$$(2.39b) \quad f(\underline{\sigma}, R) = 0, \frac{\partial f}{\partial \underline{\sigma}} : \dot{\underline{\sigma}} = 0 \quad \text{il n'y a pas d'écoulement plastique } (\dot{\chi}^p = 0), \text{ on parle de } \mathbf{charge neutre} ;$$

$$(2.39c) \quad f(\underline{\sigma}, R) = 0, \frac{\partial f}{\partial \underline{\sigma}} : \dot{\underline{\sigma}} > 0 \quad \text{il y a écoulement plastique } (\dot{\chi}^p > 0), \text{ on parle de } \mathbf{charge plastique} ;$$

Détermination du multiplicateur plastique Afin de fermer le système différentiel, il nous reste à déterminer l'expression du multiplicateur plastique. Dans les cas (2.39a) et (2.39b), celui-ci est nul :

$$(2.40) \quad \boxed{\dot{\lambda} = 0}$$

Dans le cas (2.39c), développons l'équation de cohérence (2.38) à l'aide de la loi de HOOKE (équation (2.17)) :

$$(2.41) \quad df = \frac{\partial \sigma_{eq}}{\partial \underline{\sigma}} : \frac{\partial \underline{\sigma}}{\partial \underline{\epsilon}^{el}} : d\underline{\epsilon}^{el} - \frac{dR}{d\chi^p} d\chi^p = \underline{n} : \underline{\underline{D}} : \dot{\underline{\epsilon}}^{el} - \frac{dR}{d\chi^p} d\chi^p = 0$$

Par ailleurs, nous avons :

$$(2.42) \quad \dot{\underline{\epsilon}}^{el} = \dot{\underline{\epsilon}}^{to} - \dot{\underline{\epsilon}}^p = \dot{\underline{\epsilon}}^{to} - \dot{\lambda} \underline{n}$$

En combinant les équations (2.41) et (2.42), nous obtenons l'expression recherchée :

$$(2.43) \quad \boxed{\dot{\lambda} = \frac{\underline{n} : \underline{\underline{D}} : \dot{\underline{\epsilon}}^{to}}{\underline{n} : \underline{\underline{D}} : \underline{n} + \frac{dR}{d\chi^p}}}$$

Expression pratique des lois complémentaires La connaissance du multiplicateur plastique $\dot{\lambda}$ permet de connaître l'évolution de la loi de comportement via l'équation (2.36) :

$$(2.44) \quad \begin{cases} \dot{\underline{\epsilon}}^p = \underline{0} & , \dot{\chi}^p = 0 & , \text{ en cas de décharge élastique ou de charge neutre} \\ \dot{\underline{\epsilon}}^p = \frac{\underline{n} : \underline{\underline{D}} : \dot{\underline{\epsilon}}^{to}}{\underline{n} : \underline{\underline{D}} : \underline{n} + \frac{dR}{d\chi^p}} \underline{n} & , \dot{\chi}^p = \frac{\underline{n} : \underline{\underline{D}} : \dot{\underline{\epsilon}}^{to}}{\underline{n} : \underline{\underline{D}} : \underline{n} + \frac{dR}{d\chi^p}} & , \text{ en cas de charge plastique} \end{cases}$$

Le comportement du matériau est alors complètement déterminé.

2.1.4 Évolution des variables internes, intégration locale

La réunion des lois d'état (2.11), de l'hypothèse de normalité (2.13) et des lois complémentaires (2.32) permet d'écrire la loi de comportement du matériau :

$$(2.45) \quad \begin{array}{ll} \underline{\sigma} = \rho \frac{\partial \Psi}{\partial \underline{\epsilon}^{to}} (\underline{\epsilon}^{to}, z_i) & \text{(Normalité, équation (2.13))} \\ Z_i = -\rho \frac{\partial \Psi}{\partial z_i} (\underline{\epsilon}^{to}, z_i) & \text{(Lois d'état, équation (2.11))} \\ \dot{z}_i \in \partial_{Z_i} \Phi & \text{(Lois complémentaires, équation (2.32))} \end{array}$$

2.1.4.1 Intégration locale de la loi de comportement

Expression de la loi de comportement (2.45) comme un système différentiel Dans les différents cas présentés (viscoplasticité et plasticité instantanée), il est possible d'exprimer les lois complémentaires (2.32) sous la forme d'un système différentiel. Ce résultat est général. Il nous est donc possible de déduire des lois de comportements (2.45) l'évolution des variables internes sous la forme suivante :

$$(2.46) \quad \dot{z}_i = \mathcal{G} (\underline{\epsilon}^{to}, \underline{\epsilon}^{to}, z_i)$$

où la fonction \mathcal{G} dépend des lois complémentaires (2.32) et des lois d'état (2.11). L'expression de \mathcal{G} découle de l'équation (2.29) pour la viscoplasticité et de l'équation (2.44) pour la plasticité.

Discrétisation temporelle La résolution du système différentiel (2.46) nécessite numériquement une discrétisation temporelle. Les valeurs des variables z_i sont connues à l'instant courant t et on désire connaître leur incrément Δz_i au cours d'un incrément de temps Δt .

Fermeture du système différentiel (2.45) Le système différentiel (2.46) est *incomplet* : il manque une équation donnant l'évolution de la déformation totale $\underline{\epsilon}^{to}$. Cette évolution est donnée par la résolution de l'équilibre mécanique *global* du système, que nous décrirons au paragraphe suivant. Cette résolution fournit un incrément de déformation $\Delta \underline{\epsilon}^{to}$ au cours d'un incrément de temps Δt considéré. La donnée de l'incrément de déformation $\Delta \underline{\epsilon}^{to}$ suffit à fermer le système (2.46) : celui-ci peut être intégré numériquement. Cette étape est l'**intégration locale** de la loi de comportement.

Une conséquence importante de ce qui précède est que l'intégration locale de la loi de comportement nous permet de définir implicitement la contrainte à l'instant $t + \Delta t$ comme une fonction de l'incrément de déformation, ce que nous noterons :

$$(2.47) \quad \underline{\sigma}_{t+\Delta t} = \underline{\sigma}_t + \Delta \underline{\sigma} (\Delta \underline{\epsilon}^{to})$$

Méthodes numériques d'intégration d'un système différentiel L'intégration numérique du système (2.46) nécessite d'utiliser une méthode d'intégration. Les plus courantes sont :

- des **méthodes explicites** du type RUNGE-KUTTA ([Geyer 98, Randé 04]) ;
- des **méthodes semi-implicites**. Les inconnues sont les incréments des variables internes Δz_i entre t , l'instant initial, et $t + \Delta t$ l'instant final. Les variables d'état z_i sont évaluées à l'instant $t + \theta \Delta t$ où θ est un paramètre numérique compris entre 0 et 1, par la formule :

$$z_i (t + \theta \Delta t) = z_i (t) + \theta \Delta z_i$$

Le système différentiel (2.46) est alors écrit sous la forme suivante :

$$(2.48) \quad \Delta z_i - \Delta t \mathcal{G} \left(\frac{\Delta \underline{\epsilon}^{to}}{\Delta t}, \underline{\epsilon}^{to} (t), z_i (t) + \theta \Delta z_i \right) = 0$$

où les variables d'état ont été remplacée par leurs valeurs en $t + \theta \Delta t$. Pour cette raison, les méthodes semi-implicites sont appelées θ -méthodes. L'équation (2.48) est généralement résolue par des méthodes de type NEWTON-RAPHSON qui nécessitent le calcul de la matrice jacobienne $\frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \Delta z_i}$. Cette méthode est décrite en annexe B.3.

Les méthodes de type RUNGE-KUTTA sont relativement faciles à implanter mais *lentes* ([Besson 04b]). Les méthodes semi-implicites sont plus délicates à implanter mais sont généralement plus efficaces en temps de calcul. Nous avons pour notre part comparé à plusieurs reprises les implantations par la méthode de RUNGE-KUTTA et par une méthode semi-implicite. Dans tous les cas, les méthodes implicites conduisent à des temps de calculs significativement moindres (voir par exemple la référence [Helfer 05c]).

Le choix du paramètre θ influe sur la convergence des calculs. Pour les comportements viscoplastiques, le choix $\theta = \frac{1}{2}$ conduit à une convergence quadratique de l'algorithme et semble le plus adapté.

Matériaux présentant une surface de charge Dans le cas de la plasticité, l'évolution de la déformation plastique cumulée χ^p est donnée par l'équation (2.44) :

$$(2.49) \quad \dot{\chi}^p = \frac{\underline{\mathbf{n}} : \underline{\mathbf{D}} : \dot{\underline{\epsilon}}^{to}}{\underline{\mathbf{n}} : \underline{\mathbf{D}} : \underline{\mathbf{n}} + \frac{dR}{d\chi^p}}$$

Cette formulation ne permet cependant pas de vérifier que la fonction de charge est négative en fin de pas de temps, c'est à dire que le matériau est bien dans le domaine d'élasticité. Pour cette raison, une formulation totalement implicite ($\theta = 1$) est utilisée et l'équation (2.49) est remplacée par l'équation suivante :

$$(2.50) \quad \begin{cases} f(\sigma_{eq}, R(\chi^p + \Delta\chi^p)) = 0 & \text{en cas de charge plastique} \\ \Delta\chi^p = 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

où la contrainte équivalente est évaluée en fin de pas de temps. Dans le cas des matériaux indépendants du temps (présentant une surface de charge), l'utilisation d'une méthode implicite avec $\theta = 1$ est toujours préférable ([Besson 01, Besson 04b]). L'équation (2.50) ou son équivalent en fonction du modèle est utilisé pour les intégrations des modèles présentés au paragraphe C.4 et au paragraphe C.3.

Choix des variables d'intégration, cas de la déformation élastique Les variables z_i constituent un choix naturel de variables d'intégration. Par définition, elles déterminent complètement l'évolution du matériau. D'autres choix sont naturellement possibles. Par ailleurs les déformations élastiques sont souvent ajoutées à la liste des inconnues. L'équation des partitions de déformations (2.1) est alors ajoutée au système (2.46). Ce choix est essentiellement fait pour deux raisons :

- les contraintes $\underline{\sigma}$, qui interviennent dans les évolutions des autres variables internes, sont une fonction explicite des déformations élastiques par la loi de HOOKE (équation (2.17)) ;
- dans le cas d'une intégration semi-implicite, la matrice tangente cohérente, présenté au paragraphe suivant, peut être déduite du jacobien du système. Cette méthode est décrite dans les références [Besson 01] et [Besson 04b].

Ainsi, l'intégration par une méthode semi-implicite d'un comportement viscoplastique tel que ceux présentés au paragraphe 2.1.3.1 peut conduire à choisir les incréments tensoriels $\Delta\underline{\epsilon}^{el}$ de déformations élastiques et scalaire $\Delta\epsilon^{vis}$ de l'intensité d'écoulement viscoplastique. Les équations (2.1) et (2.29) conduisent au système suivant :

$$(2.51) \quad \begin{cases} \Delta\underline{\epsilon}^{el} - \Delta\underline{\epsilon}^{to} + \Delta\epsilon^{vis} \underline{\mathbf{n}} \left(\underline{\epsilon}^{el} + \theta \Delta\underline{\epsilon}^{el} \right) = 0 \\ \Delta\epsilon^{vis} - \frac{\partial \Phi}{\partial \sigma_{eq}} \left(\sigma_{eq} \left(\underline{\epsilon}^{el} + \theta \Delta\underline{\epsilon}^{el} \right) \right) = 0 \end{cases}$$

Une méthode plus efficace d'intégration de ces lois dans le cas où le matériau est élastique isotrope est décrite en annexe C (équation (C.4)). Le système (2.51) est cependant intéressant dans le cas de matériau endommageable.

Il servira de base à l'implantation de différents modèles proposés dans cette thèse. Nous décrivons en annexe C.2 quelques unes des ces implantations.

2.1.4.2 Liens entre intégration locale et résolution globale

La non-linéarité de la relation (2.47) conduit à résoudre l'équilibre global d'une structure à l'instant $t + \Delta t$ de manière itérative. Cette méthode est décrite dans le paragraphe suivant. Elle s'appuie sur la notion de **matrice de raideur** de la structure. Cette matrice décrit la réaction de la structure à une modification de l'incrément du champ de déplacement autour de son estimation actuelle. Nous verrons que cette matrice se construit à partir d'une *estimation* de la dérivée $\underline{\underline{D}}^{tang}$ de la contrainte $\underline{\sigma}_{t+\Delta t}$ par rapport à $\Delta \underline{\epsilon}^{to}$:

$$(2.52) \quad \underline{\underline{D}}^{tang} = \frac{\partial \underline{\sigma}_{t+\Delta t}}{\partial \Delta \underline{\epsilon}^{to}} = \frac{\partial \Delta \underline{\sigma}}{\partial \Delta \underline{\epsilon}^{to}}$$

Matrice tangente cohérente La matrice $\underline{\underline{D}}^{tang}$ est appelée la **matrice tangente cohérente**, l'adjectif cohérent indiquant que cette matrice prend en compte la discrétisation temporelle et le schéma d'intégration. *La notion de matrice tangente cohérente est souvent liée aux méthodes semi-implicites pour lesquelles son calcul analytique à partir de l'équation (2.47) est parfois possible*, voir [Simo 85, Besson 04b]. Pour des méthodes de type RUNGE-KUTTA, il est possible d'utiliser des méthodes de perturbation pour évaluer la matrice $\underline{\underline{D}}^{tang}$, mais ces méthodes peuvent avoir un coût important (voir [Besson 04b]).

Matrice sécante Pour certaines lois de comportements, il est possible de calculer analytiquement une **matrice sécante** $\underline{\underline{D}}^{sec}$ à la loi de comportement par dérivation de la loi de comportement autour du point courant. Par définition, la matrice sécante s'écrit :

$$(2.53) \quad \dot{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{D}}^{sec} : \dot{\underline{\epsilon}}^{to}$$

En général, la matrice sécante $\underline{\underline{D}}^{sec}$ est la limite de la matrice tangente cohérente $\underline{\underline{D}}^{tang}$ quand l'intervalle de temps Δt tend vers 0. Cette matrice ne tient alors aucun compte du schéma d'intégration utilisé : la matrice sécante a donc un intérêt moindre qu'une matrice tangente cohérente. Enfin, dans le cas de lois de comportements viscoplastiques, la matrice sécante se réduit à la matrice d'élasticité : elle n'apporte aucune information sur le comportement non-linéaire du matériau.

2.1.4.3 Intégration des lois de comportement dans CAST3M et ZEBULON

Au cours de la thèse, nous avons eu l'occasion d'implanter un ensemble de lois de comportement sous les logiciels éléments finis CAST3M (<http://www-cast3m.cea.fr/>) et ZEBULON (<http://nwnumerics.com/>). Nous décrivons ici comment se fait l'implantation de nouvelles lois de comportement dans les deux cas.

Intégration des lois de comportement dans ZEBULON Les concepteurs de ZEBULON ont développé un outil, le **Zebfront**, permettant de simplifier l'intégration de nouvelles lois de comportements. Cet outil propose deux méthodes d'intégration : une méthode explicite (RUNGE-KUTTA d'ordre 2) et une méthode semi-implicite. Il repose sur une bibliothèque dédiée à la manipulation de tenseurs qui facilitent l'écriture des lois de comportements.

Nous avons décrit en [Helfer 05c] l'implantation *via* le **Zebfront** de différentes lois de comportement de la gaine et du combustible.

Intégration des lois de comportements dans CAST3M CAST3M a été récemment doté d'une interface pour les lois externes reprise du code Abaqus (<http://www.hks.com/>). Cette interface consiste en une fonction `umat` qui permet d'écrire de nouvelles lois de comportement. Pour les besoins de la thèse, nous avons développé une

petite bibliothèque en langage C permettant de simplifier l'intégration de nouvelles lois de comportement par des méthodes implicites et la manipulation de tenseurs.

Nous avons décrit en [Helfer 05b] l'implantation de différentes lois de comportements du combustible UO_2 *via* `umat`. L'ensemble des lois implantées a nécessité l'écriture de plus de 8 000 lignes de code.

2.2 Du comportement local au calcul de structure

L'objet de ce paragraphe est de faire le lien entre le comportement local d'un matériau et le comportement d'une structure constitué de ce matériau. L'hypothèse essentielle est que la structure est à chaque instant en *équilibre mécanique*. La description de cet équilibre se fait par le principe des travaux virtuels. La présentation mettra l'accent sur le couplage entre la résolution de l'équilibre global et l'intégration locale de la loi de comportement présentée au paragraphe 2.1.4. La méthode de résolution par éléments finis est présentée en annexe B.

Enfin, nous introduirons le lagrangien mécanique incrémental, qui permet de traiter les problèmes d'existence et d'unicité aux problèmes mécaniques quasi-statiques non-linéaires traités en temps discrets.

2.2.1 Équilibre mécanique en quasi-statique, principe des travaux virtuels

Considérons une structure Ω de frontière $\partial\Omega$. La frontière $\partial\Omega$ est décomposée en une partie $\partial\Omega_{\vec{T}}$ sur laquelle des forces surfaciques \vec{T} sont imposées et une partie $\partial\Omega_{\vec{u}}$ sur laquelle les déplacements sont imposés à $\vec{0}$ ($\partial\Omega = \partial\Omega_{\vec{T}} \cup \partial\Omega_{\vec{u}}$). L'intérieur de la structure Ω est soumis à une densité de forces volumiques \vec{f} .

Les déplacements cinématiquement admissibles (C.A.) sont les fonctions vérifiant les conditions cinématiques imposées sur $\partial\Omega_{\vec{u}}$, c'est à dire l'ensemble des fonctions vérifiant $u(\vec{x}) = 0, \forall \vec{x} \in \partial\Omega_{\vec{u}}$. Le *principe des travaux virtuels* s'écrit :

$$(2.54) \quad \forall \vec{v} \text{ C.A.}, \quad \int_{\Omega} \frac{d\vec{p}}{dt} \cdot \vec{v} \, dV + \int_{\Omega} \underline{\sigma} : \underline{\epsilon}^{to}(\vec{v}) \, dV = \int_{\Omega} \vec{f} \cdot \vec{v} \, dV + \int_{\partial\Omega_{\vec{T}}} \vec{T} \cdot \vec{v} \, dS$$

où \vec{p} est l'impulsion volumique du matériau. La description est dite **dynamique** quand ce terme d'impulsion est pris en compte. Quand l'impulsion \vec{p} est négligée, la structure est supposée être en équilibre mécanique à chaque instant : la description est alors dite **quasi-statique**.

Descriptions dynamique et quasi-statique de l'évolution d'une structure mécanique Un exemple simple permet de comprendre la différence entre des descriptions dynamique et quasi-statique. Considérons une lame au comportement élastique. Fixons l'une des extrémités et imposons un déplacement à l'autre extrémité. La lame se tord. Une fois dans un état suffisamment déformé, nous relâchons la lame. L'énergie élastique stockée dans la lame sera instantanément convertie en énergie cinétique. Ceci est visible sur l'équation (2.4) en annulant le terme de puissance extérieur \mathcal{P}_e . La lame oscillera donc jusqu'à ce que l'énergie cinétique soit dissipée. La lame s'immobilisera dans une position finale. Cette position sera la position d'équilibre mécanique correspondant à un chargement nul. Le comportement étant élastique cette position coïncide avec la position initiale de la lame. Décrivons alors cet exemple de manière dynamique ou quasi-statique :

- dans une description dynamique, l'ensemble de ces étapes peuvent être décrites. Une difficulté importante apparaît (voir [Aufaure 95]) : l'intégration des équations du mouvement n'est possible qu'en introduisant une dissipation mécanique artificielle liée au schéma utilisé. Tout l'art du dynamique est de doser cette dissipation pour que, dans la gamme des fréquences qui présentent un intérêt mécanique, elle soit à peu près équivalente à l'amortissement naturel de la structure ;
- dans une description quasi-statique, la lame évoluerait spontanément de l'état déformé à un état final caractérisé par un chargement mécanique nul. Cet état final correspond à l'état initial de la lame. L'énergie élastique stockée dans l'état déformé disparaît du problème : le bilan d'énergie (2.6) n'est pas vérifié.

Les variables d'états de la structure, ici la déformation totale, subissent une discontinuité temporelle entre l'état déformé et l'état final.

Notons que les états finaux des deux calculs ne coïncident que parce que le comportement de la lame est élastique. Dans le cas général, rien ne garantit que les états finaux des deux descriptions soient les mêmes.

Dans la suite, nous choisirons d'utiliser une description quasi-statique des phénomènes. Ce choix est motivé par le fait qu'une description dynamique nécessite :

- des temps des calculs beaucoup plus longs qu'une description quasi-statique à même discrétisation temporelle ;
- les problèmes d'amortissement que nous venons de décrire sont difficiles à traiter ;
- des pas de temps extrêmement petits lors de la description de la fissuration des matériaux fragiles. Ces pas de temps sont incompatibles avec les calculs d'irradiation de crayon combustible qui s'étendent sur plusieurs années.

Principe des travaux virtuels en quasi-statique Dans une description quasi-statique, la structure est supposée être en **équilibre mécanique** à chaque instant. Cet équilibre est caractérisé par le **principe des travaux virtuels**. Ce principe affirme que le champ de déplacement réel \vec{u} de la structure vérifie pour tout déplacement v cinématiquement admissible (C.A.) l'égalité du **travail virtuel des forces intérieures** et du **travail virtuel des forces extérieures** :

$$(2.55) \quad \forall \vec{v} \text{ C.A.}, \quad \underbrace{\int_{\Omega} \underline{\sigma} : \underline{\epsilon}^{to}(\vec{v}) \, dV}_{\text{Travaux virtuels intérieurs}} = \underbrace{\int_{\Omega} \vec{f} \cdot \vec{v} \, dV + \int_{\partial\Omega_{\vec{T}}} \vec{T} \cdot \vec{v} \, dS}_{\text{Travaux virtuels extérieurs}}$$

Résolution incrémentale d'un problème de structure non linéaire D'un point de vue numérique, le problème de l'évolution quasi-statique d'une structure non-linéaire se fait de manière *incrémentale*. Nous supposons connues les variables d'état en tout point du matériau ainsi que le champ de déplacement \vec{u}_t à l'instant t . Nous recherchons leurs valeurs à l'instant $t + \Delta t$, Δt étant l'incrément de temps. Le principe des travaux virtuels en $t + \Delta t$ s'écrit :

$$\forall \vec{v} \text{ C.A.}, \quad \int_{\Omega} \underline{\sigma}_{t+\Delta t} : \underline{\epsilon}^{to}(\vec{v}) \, dV = \int_{\Omega} \vec{f}_{t+\Delta t} \cdot \vec{v} \, dV + \int_{\partial\Omega_{\vec{T}}} \vec{T}_{t+\Delta t} \cdot \vec{v} \, dS$$

Compte tenu de la définition implicite (2.47) des contraintes $\underline{\sigma}_{t+\Delta t}$ en $t + \Delta t$ comme une fonction de l'incrément de déformation $\Delta \underline{\epsilon}^{to} = \underline{\epsilon}^{to}(\Delta \vec{u})$, l'incrément de déplacement recherché vérifie :

$$(2.56) \quad \forall \vec{v} \text{ C.A.}, \quad \int_{\Omega} \underline{\sigma}_{t+\Delta t}(\Delta \underline{\epsilon}^{to}) : \underline{\epsilon}^{to}(\vec{v}) \, dV = \int_{\Omega} \vec{f}_{t+\Delta t} \cdot \vec{v} \, dV + \int_{\partial\Omega_{\vec{T}}} \vec{T}_{t+\Delta t} \cdot \vec{v} \, dS$$

Résolution itérative de l'équation (2.56) Compte tenu du caractère non linéaire de la réponse de la structure (équation (2.47)), la recherche de l'incrément de déplacement $\Delta \vec{u}$ se fait de manière *itérative* à partir de deux étapes élémentaires :

- une estimation à *variables d'état fixées* de l'incrément du champ de déplacement $\Delta \vec{u}$ tel que le champ de déplacement $\vec{u}_{t+\Delta t} = \vec{u}_t + \Delta \vec{u}$ vérifie l'équilibre (2.56). C'est l'étape de **résolution globale** ;
- une estimation de l'évolution des variables d'état et des contraintes à partir de l'incrément du champ de déformation $\Delta \underline{\epsilon}^{to}$ déduit de l'incrément du champ de déplacement $\Delta \vec{u}$: c'est l'*intégration locale* de la loi de comportement décrit au paragraphe 2.1.4.

À l'issue de la seconde étape, la nouvelle estimation des travaux intérieurs perturbe l'équilibre. Une nouvelle résolution de celui-ci conduit à une nouvelle estimation du champ de déplacement. Les étapes de résolutions globale et locale sont alors répétées jusqu'à convergence de l'équilibre mécanique.

La méthode des éléments finis La résolution globale de l'équilibre ne peut être réalisée que de manière approchée. La méthode des éléments finis propose d'approcher la solution par une solution approchée construite sur un ensemble de fonctions d'interpolation. Nous la décrivons en annexe B.

2.2.2 Lagrangien mécanique incrémental

Nous introduisons ici un outil d'étude de l'évolution quasi-statique d'une structure. Cet outil repose sur la minimisation d'une fonction énergétique, le *lagrangien mécanique incrémental*. Il permet de dégager des idées physiques extrêmement importantes pour la compréhension des phénomènes de fissuration et d'endommagement. D'un point de vue mathématique, ses propriétés sous-tendent la validité de la méthode des éléments finis, détaillée en annexe B. Ainsi, nous nous posons deux questions :

- existe-t-il des solutions **régulières** au problème posé ?
- cette solution, quand elle existe, est-elle unique ?

2.2.2.1 Équilibre global, principe de minimum associé

L'analyse mathématique d'un problème d'élasticité (voir [Raviart 98, Henrot 00]) conduit classiquement à introduire le lagrangien mécanique *global* (à l'échelle de la structure) $\mathcal{P}(\vec{u}, z_i)$ défini par :

$$(2.57) \quad \mathcal{P}(\vec{u}, z_i) = \int_{\Omega} \rho \Psi(\underline{\epsilon}^{to}(\vec{u}), z_i) dV - \int_{\Omega} \vec{f} \cdot \vec{u} dV - \int_{\partial\Omega_{\vec{T}}} \vec{T} \cdot \vec{u} dS$$

Ce lagrangien est la différence de l'énergie stockée par la *structure* et de la puissance des forces extérieures. Le principe des travaux virtuels (2.55) est alors équivalent au problème de minimum suivant :

$$(2.58) \quad \boxed{\text{Trouver } \vec{u} \text{ C.A., } \mathcal{P}(\vec{u}, z_i) = \min_{\vec{v} \text{ C.A.}} \mathcal{P}(\vec{v}, z_i)}$$

où *C.A.* désigne l'espace des fonctions cinématiquement admissibles (voir le paragraphe 2.2.1). Le principe de minimisation (2.58) est équivalent au principe des travaux virtuels (voir [Raviart 98, Henrot 00] pour une démonstration en élasticité). Le problème (2.58) est donc équivalent à la *résolution globale* de l'équilibre.

2.2.2.2 Intégration locale, principe de minimum associé

Un principe de minimum caractérisant l'évolution des variables d'état z_i Si nous supposons connus l'incrément de déformations totales $\Delta \underline{\epsilon}^{to}$ et les valeurs des variables d'état $\underline{\epsilon}^{to}(t)$ et $z_i(t)$ en début de pas de temps, il est possible de montrer (voir [Lorentz 03b, Forest 04]) que l'*intégration locale*, décrite au paragraphe 2.1.4.1, est équivalente à rechercher la solution du problème de minimisation suivant :

$$(2.59) \quad \boxed{z_i(t + \Delta t) \text{ est solution de } \min_{z_i^*} \left[\rho \Psi(\underline{\epsilon}^{to}(t + \Delta t), z_i^*) + \Delta t \Phi^* \left(\frac{z_i^* - z_i(t)}{\Delta t} \right) \right]}$$

Dans le cas d'un matériau indépendant du temps, le caractère positivement homogène de degré 1 du potentiel de dissipation dual conduit à faire disparaître l'incrément de temps de l'équation (2.59), conformément à l'idée intuitive d'un comportement indépendant du temps.

Restrictions sur les variables internes Il est souvent nécessaire d'imposer des bornes aux valeurs de certaines variables internes et de ne permettre que certaines évolutions. Pour cela, il est classique d'introduire des fonctions indicatrices :

- dans l'énergie libre $\rho \Psi$ afin de limiter les plages de valeurs admissibles des variables internes ;
- dans le potentiel de dissipation afin de ne permettre que certaines évolutions.

Un tel procédé est parfaitement justifié au vu du procédé de minimisation (2.59). Un exemple classique est donné par les modèles d'endommagement isotrope, qui seront décrits au paragraphe 2.4.1.1. Ces modèles introduisent une variable scalaire d comme variable interne dont l'évolution est nécessairement croissante et bornée : la variable d'endommagement est nulle dans un état sain et atteint une valeur maximale d_c quand le point matériel a perdu toute sa rigidité. Pour décrire ces deux contraintes, la fonction indicatrice $I_{[0;d_c]}(d)$ est introduite dans l'énergie libre Ψ et la fonction indicatrice $I_{\mathbb{R}^+}(\dot{d})$ est introduite dans le potentiel de dissipation dual Φ^* (\mathbb{R}^+ est l'ensemble des nombres réels positifs).

2.2.2.3 Introduction du lagrangien mécanique incrémental

Afin d'étudier les propriétés du problème de l'évolution quasi-statique d'une structure, [Lorentz 99a, Andrieux 04a] proposent d'introduire le lagrangien incrémental mécanique total défini par :

$$(2.60) \quad \begin{aligned} \mathcal{L}(\vec{u}^*, z_i^*) &= \int_{\Omega} \left[\rho \Psi(\underline{\epsilon}^{to}(\vec{u}^*), z_i^*) + \Delta t \Phi^* \left(\frac{z_i^* - z_i(t)}{\Delta t} \right) \right] dV - \int_{\Omega} \vec{f} \cdot \vec{u}^* dV - \int_{\partial\Omega_{\vec{T}}} \vec{T} \cdot \vec{u}^* dS \\ &= \mathcal{P}(\vec{u}^*, z_i^*) + \Delta t \int_{\Omega} \Phi^* \left(\frac{z_i^* - z_i(t)}{\Delta t} \right) dV \end{aligned}$$

Les relations (2.59) et (2.58) sont alors équivalentes, sous certaines hypothèses de régularité (voir [Ekeland 74]), aux problèmes de minimisation *couplés* suivants :

$$(2.61) \quad \boxed{\begin{cases} \vec{u}(t + \Delta t) & \text{est solution de } \min_{\vec{u}^* \in C.A.} \mathcal{L}(\vec{u}^*, z_i(t + \Delta t)) \\ z_i(t + \Delta t) & \text{est solution de } \min_{z_i^*} \mathcal{L}(\vec{u}_{t+\Delta t}, z_i^*) \end{cases}}$$

Stabilité des solutions Dans le cas de comportements endommageables, décrits au paragraphe 2.4, la résolution du problème (2.61) conduit en général à *trop de solutions* (voir les paragraphes 2.4.3.1 et 2.4.3.2). Afin d'en éliminer, [Francfort 93, Marigo 00] proposent d'introduire la condition de stabilité suivante :

$$(2.62) \quad \boxed{\text{Trouver } \vec{u} \text{ et } z_i \text{ réalisant } \min_{\vec{u}^* \in C.A., z_i^*} \mathcal{L}(\vec{u}^*, z_i^*)}$$

Dans le cas où le lagrangien \mathcal{L} est *convexe par rapport à l'ensemble de ses variables*, les deux problèmes (2.61) et (2.62) sont équivalents.

Cas des potentiels de dissipation duaux positivement homogènes de degré 1, interprétation du lagrangien incrémental Nous nous intéresserons essentiellement à des lois indépendantes du temps caractérisées par des potentiels de dissipation duaux positivement homogènes de degré 1 pour lesquels l'équation (2.60) s'écrit :

$$(2.63) \quad \mathcal{L}(\vec{u}^*, \vec{z}^*) = \mathcal{P}(\vec{u}^*, \vec{z}^*) + \int_{\Omega} \Phi^*(\vec{z}^*(\vec{x}) - \vec{z}_t(\vec{x})) dV$$

expression dans laquelle n'intervient plus l'incrément de temps Δt .

Le potentiel de dissipation dual Φ^* étant égal à la vitesse de dissipation d'après l'équation (2.34), le terme $\Phi^*(\vec{z}_{t+\Delta t}(\vec{x}) - \vec{z}_t(\vec{x}))$ mesure approximativement l'incrément de dissipation au cours du temps au point \vec{x} . Nous pouvons alors écrire :

$$(2.64) \quad \boxed{\mathcal{L}(\vec{u}^*, \vec{z}^*) \approx \underbrace{\int_{\Omega} \rho \Psi(\underline{\epsilon}^{to}(\vec{u}^*), z_i^*) dV}_{\text{Énergie stockée}} + \underbrace{\Delta E^{\phi}(\vec{z}^*)}_{\text{Incrément d'énergie dissipé}} - \underbrace{\left(\int_{\Omega} \vec{f} \cdot \vec{u}^* dV + \int_{\partial\Omega_{\vec{T}}} \vec{T} \cdot \vec{u}^* dS \right)}_{\text{Travail des forces extérieures}}}$$

Grâce à l'expression (2.64), l'équilibre mécanique en fin de pas de temps apparaît comme un équilibre entre l'énergie stockée, l'énergie dissipée et le travail des forces extérieures.

2.2.2.4 Propriétés mathématiques du lagrangien mécanique incrémental

Nous introduisons ici quelques notions mathématiques nécessaires pour l'étude du problème (2.62). Ces propriétés sont étudiées pour chacun des comportements matériaux que nous avons décrits afin de leur donner une signification plus intuitive.

Propriétés mathématiques de \mathcal{L} classiquement examinées Lors de l'examen du problème (2.62), il est classique de demander que la fonction \mathcal{L} vérifie quelques propriétés :

- la stricte convexité ;
- la coercivité ;
- la semi-continuité inférieure pour la convergence faible.

Toutes ces notions dépendent de l'espace fonctionnel considéré. Les éléments finis standard ont été construits pour décrire des fonctions **régulières**, sans discontinuité ni singularité. Nous examinons donc les trois propriétés précédentes pour un espace décrivant des fonctions régulières qui peuvent être décrites par les éléments finis standard. Ce sont les espaces de SOBOLEV.

Stricte convexité Il est possible de montrer que si l'énergie libre Ψ et le potentiel de dissipation Φ^* sont convexes, alors le lagrangien incrémental \mathcal{L} est convexe. Par définition, le potentiel de dissipation Φ^* est convexe (voir le paragraphe 2.1.3). La convexité de \mathcal{L} est donc liée à celle de l'énergie libre Ψ . Dans le cas de l'élasticité, l'énergie libre est strictement convexe à la condition que le tenseur d'élasticité $\underline{\underline{D}}$ soit strictement positif (équation (2.15)) :

$$\forall \underline{\underline{\epsilon}} \neq 0, \quad \underline{\underline{\epsilon}} : \underline{\underline{D}} : \underline{\underline{\epsilon}} > 0$$

En viscoplasticité, la positivité du tenseur d'élasticité et la stricte convexité Φ^* permettent d'avoir la stricte convexité de \mathcal{L} . Dans le cas de la plasticité, décrite au paragraphe 2.1.3.3, il faut supposer l'écroutissage positif pour que l'énergie libre soit elle aussi une fonction convexe. La stricte convexité n'est affirmée que si l'écroutissage est strictement positif, ce qui signifie que le domaine d'élasticité peut encore croître. Dans le cas de l'endommagement, cette propriété ne sera pas vérifiée (voir le paragraphe 2.4.1). Cette notion de convexité est au centre de l'étude de l'unicité de la réponse d'une structure. En particulier, elle a été étudiée en mécanique dans la référence [Halphen 73].

Coercivité Une fonction $\mathcal{L}(x)$ est dite coercive si elle vérifie :

$$\lim_{\|x\| \rightarrow +\infty} \mathcal{L}(x) = +\infty$$

En élasticité, cette propriété est vérifiée dès que le tenseur d'élasticité $\underline{\underline{D}}$ est strictement positif ([Raviart 98, Henrot 00]). En viscoplasticité, il faut que Φ^* soit coercif, ce qui semble toujours le cas. Dans le cas de la plasticité, le domaine d'élasticité est généralement borné quelque soit la valeur des variables d'écroutissage. Dans ce cas, le problème peut ne pas avoir de solutions : il suffit d'imposer à la structure une force supérieure à la borne du domaine d'élasticité. Cette absence de solution est classique en plasticité : elle est interprétée comme la **ruine plastique** du matériau (voir [Salençon 02]). En endommagement, la plupart des modèles introduisent une contrainte maximale admissible : la propriété de coercivité n'est alors pas vérifiée. Quelque fois, une raideur résiduelle non nulle est introduite pour contourner cette difficulté, on parle alors d'**endommagement partiel**.

Semi-continuité inférieure pour la convergence faible La semi-continuité inférieure pour la convergence faible est la propriété la plus délicate et mathématiquement la plus technique des trois propriétés demandées. Cette notion est particulièrement importante pour la convergence de la méthode des éléments finis.

Elle est difficile à garantir dans le cas général. Cependant, si l'énergie libre Ψ et le potentiel de dissipation dual Φ^* sont suffisamment réguliers (ce qui est toujours le cas en pratique) et si \mathcal{L} est convexe par rapport à l'ensemble de ses variables, alors \mathcal{L} est semi-continu inférieure pour la convergence faible. D'après ce qui précède, cette propriété sera donc vérifiée pour l'élasticité, la viscoplasticité et la plasticité à écroutissage positif. Elle n'est pas garantie en endommagement.

2.2.2.5 Existence et unicité au problème de minimisation (2.62)

Nous pouvons alors énoncer le théorème classique suivant (voir [Céa 71] pour une démonstration) : si \mathcal{L} vérifie les trois propriétés de stricte convexité, de coercivité et de semi-continuité inférieure pour la convergence faible, alors il existe une solution unique au problème de minimisation (2.62).

La démonstration de ce théorème permet de séparer les rôles des trois propriétés demandées à \mathcal{L} :

- la stricte convexité assure l'unicité de la solution ;
- la coercivité et la semi-continuité inférieure pour la convergence faible assurent l'existence de la solution.

Dans les cas usuels, la stricte convexité de \mathcal{L} joue en fait un rôle essentiel à la fois pour l'unicité de la solution mais aussi pour son existence (elle assure la semi-continuité inférieure pour la convergence faible de \mathcal{L}).

Propriété \ Comportement	Élasticité	Viscoplasticité	Plasticité à écrouissage strictement positif	Endommagement
Stricte convexité	oui	oui	oui*	non
Coercivité	oui	oui	non*	non*
Semi-continuité inférieure pour la convergence faible	oui	oui	oui	non
Unicité	oui	oui	oui*	non
Existence	oui	oui	conditionnelle	non

TAB. 2.1 – Propriétés mathématiques du lagrangien incrémental \mathcal{L} pour des lois de comportement standard (les * indiquent qu'il peut exister quelques cas indiqués dans le texte qui font exception).

Application aux lois de comportements standard Le tableau 2.1 résume les différents cas traités. Il montre que les comportements élastiques et viscoplastiques conduisent à des problèmes pour lesquels il existe une solution unique. Pour la plasticité, les solutions existent tant que les contraintes imposées restent admissibles par le matériau. La solution est unique si l'écrouissage est strictement positif.

Dans le cas de l'endommagement (et de la plasticité à écrouissage négatif ou nul), la plupart des propriétés énoncées ne sont pas vérifiées. Nous verrons que cela conduit à des difficultés importantes. Le cas des matériaux endommageables est détaillé au paragraphe 2.4.

2.3 Approche globale de la rupture

Nous faisons ici des rappels sur ce qu'il est commun de désigner par l'*approche globale* de la rupture. Nous nous limiterons à la mécanique linéaire de la rupture où le comportement du matériau est linéaire élastique.

Nous renvoyons le lecteur aux ouvrages [Anderson 91] et [François 95] pour une description complète de cette théorie, ainsi qu'à l'article [Rice 68] qui constitue une des meilleures références.

2.3.1 Description d'une fissure

Une fissure est une surface de discontinuité du milieu mécanique. Cette discontinuité dégrade la tenue mécanique de la structure et menace son intégrité. Cette discontinuité est en fait constituée de deux surfaces initialement confondues, les **lèvres** de la fissure. Le comportement d'une fissure est différent sous une sollicitation en traction ou en compression :

- lorsque la fissure est sollicitée en traction, les lèvres de la fissure ont la possibilité d'avoir des mouvements relatifs. En particulier, si les lèvres de la fissure s'écartent, la fissure est dite ouverte. Dans ce cas, la dégradation des propriétés mécaniques vient du fait qu'aucune traction ne s'exerce sur les lèvres de la fissure : une fissure ouverte ne peut transférer de contraintes.

- lorsque la fissure est sollicitée en compression, les lèvres de la fissure rentrent en contact. La force de contact entre les lèvres de la fissure permet de transmettre les contraintes.

Nous appellerons **caractère unilatéral** du comportement de la fissure cette différence de réaction mécanique entre une sollicitation de traction et de compression. En deux dimensions, les lèvres de la fissure sont représentées par des lignes. Le point de rencontre des lèvres de fissures est alors appelé la **pointe de la fissure**.

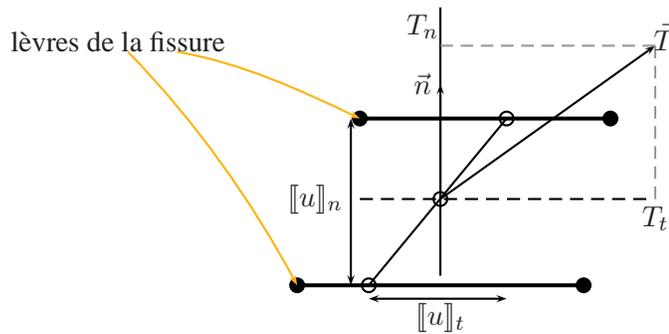


FIG. 2.3 – Définition des tractions agissant sur les lèvres de la fissure et des sauts de déplacement entre les lèvres de la fissure.

Caractérisation du mouvement relatif des lèvres de la fissure Les lèvres de la fissure étant initialement confondues, il est possible d’associer à tout point A d’une des lèvres un point B de l’autre lèvre (les points A et B sont initialement confondus). Le mouvement relatif des points A et B est alors complètement décrit par la différence entre les déplacements \vec{u}_A et \vec{u}_B des points A et B . Cette différence est appelée le **saut de déplacement** $[[\vec{u}]]$ au point A :

$$[[\vec{u}]] = \vec{u}_B - \vec{u}_A$$

Grâce à cette notion de saut de déplacement, nous pouvons définir une fissure d’un point de vue mathématique comme une *surface de discontinuité du champ de déplacement*.

Caractérisation de l’ouverture de la fissure Notons \vec{n}_A et \vec{n}_B les normales extérieures aux deux lèvres aux points A et B respectivement. Pour des raisons de simplicité, nous supposons toujours être en petites déformations : les normales \vec{n}_A et \vec{n}_B sont alors opposées ($\vec{n}_B = -\vec{n}_A$). La condition de non-interpénétration des lèvres de la fissure dit alors que la composante $[[u]]_n$ du saut de déplacement $[[\vec{u}]]$ sur la normale \vec{n}_A est positive :

$$[[u]]_n = [[\vec{u}]] \cdot \vec{n}_A \geq 0$$

Caractérisation du cisaillement entre les lèvres de la fissure Le déplacement transverse $[[\vec{u}]]_t = [[\vec{u}]] - [[u]]_n \vec{n}$ traduit un mouvement de cisaillement entre les lèvres de la fissure.

Caractérisation du caractère unilatéral du comportement de la fissure Les tractions s’exerçant sur les lèvres de la fissure aux points A et B sont :

- nulles quand la fissure est ouverte ;
- égales en norme et opposées en direction quand la fissure est fermée (c’est le principe de l’action et de la réaction) ;

Dans les deux cas, ces tractions sont donc égales en norme et opposées en directions. Nous les caractérisons donc par le seul vecteur de traction \vec{T} au point A . Ce vecteur est lié aux champs de contraintes $\underline{\sigma}_A$ au point A par la relation classique :

$$\vec{T} = \underline{\sigma}_A \cdot \vec{n}_A$$

Le caractère unilatéral du comportement de la fissure s’écrit alors :

- la composante normale T_n des tractions est nulle si $[[u]]_n$ est positif ;
- la composante normale T_n des tractions est négative si $[[u]]_n$ est nul ;

Ceci peut s'écrire sous la forme compacte suivante :

$$[[u]]_n \geq 0, T_n \leq 0, T_n \cdot [[u]]_n = 0$$

La partie transverse des tractions $\vec{T}_t = \vec{T} - T_n \vec{n}_A$ sert à traduire différents comportements tribologiques (par exemple du frottement) entre les lèvres de la fissure. Naturellement, ces effets n'ont lieu que si les lèvres de la fissure sont en contact et que si un mouvement de cisaillement a lieu ($[[\vec{u}]]_t \neq 0$).

2.3.2 Mécanique linéaire de la rupture, taux de restitution de l'énergie

L'**approche globale** de la rupture décrit la propagation d'une fissure, préexistante à tout chargement, dans une structure Ω . Nous décrivons ici la **mécanique linéaire de la rupture** qui suppose le comportement du matériau *élastique linéaire*.

Nous considérons donc un corps (tridimensionnel) élastique Ω contenant une fissure d'aire A . Dans la suite, nous supposons le trajet de la fissure connu. Son aire A permet alors de caractériser complètement l'état de la structure.

Taux de restitution de l'énergie critique L'approche globale de la rupture introduit une énergie *surfactive*, appelée **taux de restitution de l'énergie critique**, notée G_f , telle que l'énergie nécessaire pour une extension $\Delta A = A_{t+\Delta t} - A_t$ de l'aire de la fissure, soit égale à $G_f \Delta A$. Dans la suite, nous parlerons indifféremment d'*énergie de rupture* ou d'*énergie de fissuration* pour désigner le taux de restitution de l'énergie critique.

Dans le cas de matériaux fragiles, il est classique d'identifier G_f à deux fois la **tension de surface** γ du corps considéré, soit $G_f = 2\gamma$. Cette quantité est essentielle pour la caractérisation de la rupture des matériaux. De nombreuses expériences permettent de remonter à sa valeur.

Propagation de la fissure Une fois les hypothèses précédentes faites, il nous faut préciser comment se propage la fissure. Connaissant l'énergie dissipée, la relation (2.64) conduit à introduire un lagrangien mécanique incrémental suivant :

$$(2.65) \quad \mathcal{L}(\vec{u}^*, A^*) = \mathcal{P}(\vec{u}^*, A^*) + \underbrace{G_f (A^* - A_t)}_{\text{dissipation}} + \underbrace{I_{\mathbb{R}^+}(A^* - A_t)}_{\text{irréversibilité}}$$

\vec{u}^* est un déplacement cinématiquement admissible et A^* une extension virtuelle de la fissure. La présence de la fonction indicatrice $I_{\mathbb{R}^+}(A^* - A_t)$ indique ici que la fissure ne peut que croître. Le lagrangien mécanique $\mathcal{P}(\vec{u}^*, A^*)$ s'écrit, d'après l'équation (2.57) :

$$\mathcal{P}(\vec{u}^*, A^*) = \int_{\Omega(A^*)} \underline{\epsilon}^{to}(\vec{u}^*) : \underline{\underline{\mathbf{D}}} : \underline{\epsilon}^{to}(\vec{u}^*) \, dV - \int_{\Omega(A^*)} \vec{f} \cdot \vec{u}^* \, dV - \int_{\partial\Omega_{\vec{T}}(A^*)} \vec{T} \cdot \vec{u}^* \, dS$$

où nous avons indiqué que la structure $\Omega(A^*)$ dépend de l'extension de fissure A^* . Suivant l'équation (2.62), l'évolution de la structure est donnée par le critère de propagation suivant :

$$(2.66) \quad \boxed{\text{Trouver } \vec{u} \text{ et } A_{t+\Delta t} \text{ réalisant } \min_{\vec{u}^* \in C.A., A^*} \mathcal{L}(\vec{u}^*, A^*)}$$

Taux de restitution de l'énergie Le lagrangien mécanique \mathcal{P} contient l'énergie de déformation de toute la structure. Celle-ci est impliquée toute entière dans la propagation de la fissure. Par extension avec ce qui est fait dans le cas de comportements locaux, décrits au paragraphe 2.1, il est possible de définir la force thermodynamique associée à l'extension d'aire de la fissure par (voir [Germain 83]) $\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial A}$.

L'opposé de cette force thermodynamique, $-\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial A}$, est traditionnellement appelé le **taux de restitution de l'énergie**. Sa définition montre que la force motrice de la propagation de la fissure est l'énergie de la structure toute entière.

Dans une modélisation en 2 dimensions, dans laquelle la fissure apparaît comme une ligne de discontinuité de longueur l , la force thermodynamique est alors notée $\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial l}$. Les résultats obtenus dépendent alors de l'hypothèse de modélisation adoptée, contraintes planes ou déformations planes.

2.3.2.1 Formulation continue en temps

Le lagrangien (2.65) est en fait similaire au lagrangien obtenu en plasticité dans le cas où la surface de charge est de rayon G_f . Cette analogie permet de passer d'une formulation incrémentale où l'inconnue est l'incrément d'aire de fissure $\Delta A = A_{t+\Delta t} - A_t$ à une formulation continue dont l'inconnue est la vitesse d'extension d'aire de fissure \dot{A} . Nous verrons plus loin l'intérêt d'une formulation incrémentale par rapport à une formulation continue.

Critère de propagation de GRIFFITH La structure est sur la surface de charge si :

$$(2.67) \quad -\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial A} = G_f$$

C'est à dire que le taux de restitution de l'énergie est égal au taux de restitution de l'énergie critique. L'adaptation de l'équation (2.36) au cas de la propagation d'une fissure s'écrit simplement :

$$\exists \lambda \geq 0 \text{ tel que } \dot{A} = \lambda \quad \text{avec} \quad \begin{cases} \dot{\lambda} = 0, & \text{si } -\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial A} < G_f \\ \dot{\lambda} \geq 0, & \text{si } -\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial A} = G_f \end{cases}$$

Cette relation s'écrit de manière compacte sous la forme du critère de propagation suivant :

$$(2.68) \quad \boxed{\left(G_f + \frac{\partial \mathcal{P}}{\partial A} \right) \dot{A} = 0, \quad \dot{A} \geq 0, \quad -\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial A} \leq G_f}$$

Ce critère a été introduit par GRIFFITH. Cette équation est à la base de la plupart des modélisations numériques de la propagation des fissures : l'équation (2.68) permet de calculer de proche en proche la longueur de fissure en fonction du chargement. Ceci suppose que cette évolution soit continue en fonction du chargement, question intimement liée à la notion de stabilité de la propagation.

2.3.2.2 Stabilité de la propagation

Expérimentalement, il est observé deux types de propagation :

- soit l'expérimentateur peut contrôler la propagation de la fissure de manière continue en augmentant progressivement le chargement de la structure. La propagation est alors dite **stable** ;
- soit la longueur de fissure augmente brusquement pour une infime variation du chargement imposé. L'expérimentateur ne peut suivre continuellement la propagation. Celle-ci est alors dite **instable**.

Si nous cherchons à formaliser ce type de comportement, nous devons étudier le comportement de la structure sur la surface de charge (équation (2.67)). Deux cas se présentent :

- soit un accroissement d'aire de la fissure conduira à faire diminuer le taux de restitution de l'énergie. D'après l'équation (2.68), la structure rentre alors dans le domaine d'élasticité. Ceci signifie qu'il faudra accroître le chargement pour entretenir la propagation. C'est le cas de la propagation stable. Mathématiquement, cela revient à dire que le lagrangien mécanique \mathcal{P} est convexe par rapport à l'aire de fissure. Ceci s'écrit :

$$\frac{\partial^2 \mathcal{P}}{\partial^2 A} \geq 0$$

- soit l'accroissement d'aire augmente le taux de restitution de l'énergie. Dans ce cas, la propagation s'auto-entretient et l'expérimentateur ne peut la contrôler. Mathématiquement, cela traduit la *concavité* du lagrangien mécanique \mathcal{P} par rapport à l'aire de fissure :

$$\frac{\partial^2 \mathcal{P}}{\partial^2 A} \leq 0$$

Propagation instable et description quasi-statique En cas de propagation instable, ces équations signifient physiquement que la diminution de l'énergie élastique stockée ne peut être dissipée par la formation d'une nouvelle aire de fissure. L'énergie excédentaire est alors convertie en énergie cinétique. Pour des matériaux fragiles, ces évolutions se font sur des échelles de temps très petites, donnant l'impression à l'expérimentateur d'une évolution instantanée. En pratique, nous avons vu au paragraphe 2.2.1 qu'il était possible de conserver malgré tout une description quasi-statique de cette propagation. Le prix à payer est que l'aire de fissure subira une discontinuité entre deux états d'équilibre successifs (cette question sera rediscutée en annexe D). Les approches basées sur le calcul de l'aire de fissure de proche en proche à partir de l'équation (2.68) ne sont alors plus utilisables. Dans le cadre de la *mécanique de la rupture revisitée*, que nous décrirons plus loin au paragraphe 2.4.5.3, [Marigo 00] propose de baser la description de la propagation instable sur un principe de minimum analogue à (2.65).

2.3.3 Singularité des contraintes en pointe de fissure

La seconde manière d'introduire l'approche globale de la rupture repose sur les développements asymptotiques des solutions élastiques en petites déformations en pointe de fissure des champs de contraintes et de déformations. Ces solutions ont été obtenues en 2 dimensions et dépendent de l'hypothèse de modélisation (contraintes planes ou déformations planes) (voir [François 95]).

Ces solutions sont une combinaison de trois modes de sollicitation élémentaires, appelés respectivement mode *I*, mode *II* et mode *III*. Quelque soit le mode considéré, les contraintes divergent en $1/\sqrt{r}$ ([François 95]) :

$$(2.69) \quad \sigma_{ij} = \frac{K_\alpha}{\sqrt{r}} f_{ij}^\alpha(\theta) + o\left(\frac{1}{\sqrt{r}}\right) \quad ((i, j) \in (x, y, z)^2)$$

r étant la distance à la pointe de fissure, θ l'angle des coordonnées cylindriques et α est le mode de fissuration considéré. Le coefficient K_α est le facteur d'intensité des contraintes : sa valeur est déterminée par la géométrie du corps dans son ensemble et par le chargement imposé à toute la structure. Cette singularité est due à l'hypothèse des petites déformations : des champs de contraintes finies peuvent être obtenus en grandes déformations par émoussement de la fissure ([François 95]).

Les déplacements sont finis et proportionnels à la racine carré de la distance à la pointe de fissure :

$$\forall i \in [1, 2, 3], \quad [\vec{u}]_i \propto \sqrt{r}$$

Formule d'IRWIN Il est possible de relier les approches en contrainte et en énergie par la formule d'IRWIN (voir par exemple [Rice 68]) :

$$(2.70) \quad -\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial l} = \frac{k+1}{2\mu} (K_I^2 + K_{II}^2) + \frac{1}{2\mu} K_{III}^2$$

où μ est le module de cisaillement et où k dépend de l'hypothèse de modélisation adoptée (contraintes ou déformations planes).

Conclusions sur l'approche globale

La mécanique de la rupture est un cadre théorique qui permet d'appréhender les bases physiques essentielles de la fissuration des structures :

- toute la structure est impliquée dans la description de la propagation d'une fissure ;
- cette description introduit une énergie de surface, le *taux de restitution de l'énergie critique* qui contient toute l'information sur la physique du problème.
- la fissure est mathématiquement décrite comme une *discontinuité* du champ de déplacement. Ce type de discontinuité ne rentre pas dans le cadre des solutions décrites par les éléments finis standards (voir le paragraphe 2.2). Des techniques particulières doivent nécessairement être mise en œuvre pour décrire une fissure ;

Son application à la description de phénomènes complexes, et en particulier ceux intervenant dans les pastilles combustibles, semble cependant délicate ([Marigo 00]) :

- elle ne peut décrire l'initiation de fissures sans faire appel à des critères extérieurs ;
- elle s'applique difficilement à un réseau de fissures ;
- elle s'applique difficilement à des situations où le trajet de la fissure n'est pas connu à l'avance ou en cas de chargement mixte : elle nécessite là aussi l'emploi de critères extérieurs.

De fait, une autre approche de la fissuration, basée sur la description de l'endommagement du matériau, est présentée au paragraphe suivant.

2.4 Mécanique de l'endommagement local

Nous avons présenté au paragraphe 2.3 l'approche globale de la rupture. Une autre approche, basée sur l'endommagement progressif des matériaux, a été introduite ([Chaboche 96]). Cette approche est appelée **approche locale de la rupture**. La notion de fissure est remplacée par la notion de zone endommagée caractérisée par une perte de capacité à transférer les contraintes. La mécanique de l'endommagement, bénéficiant des apports de la thermodynamique des processus irréversibles décrite au paragraphe 2.1, a connu un engouement important dans les années 80 et a marqué le début de l'approche locale.

2.4.1 Application du formalisme standard généralisé à l'endommagement des matériaux

L'endommagement caractérise une dégradation des propriétés des matériaux à transférer des contraintes. Quelque soit l'origine micromécanique de cette dégradation (porosité, micro-fissuration, croissance de vides), la construction d'un modèle d'endommagement conduit à faire les choix suivants ([Marigo 00]) :

- une variable d'endommagement, dont la nature dépend de la complexité du modèle envisagé, du scalaire pour les modèles isotropes au tenseur d'ordre 8 pour les théories les plus complexes ;
- la manière d'introduire cette variable dans la relation contrainte-déformation ;
- la loi d'évolution de cette variable. Le choix d'une telle évolution est généralement simplifié par l'utilisation du cadre thermodynamique formel développé au paragraphe 2.1 ;

Une revue générale de ces modèles peut être trouvée dans [Chaboche 78].

Nous nous intéresserons essentiellement aux matériaux élastiques endommageables, pour lesquels le comportement est :

- élastique à endommagement constant ;
- indépendant du temps ;

Les propriétés mécaniques de ces matériaux, représentées par le tenseur d'élasticité, dépendent de la variable d'endommagement (paragraphe 2.1.2 équation (2.15)).

2.4.1.1 Matériaux élastiques endommageables isotropes

Nous commençons par présenter la classe de matériau endommageable la plus simple, les matériaux élastiques endommageables isotropes.

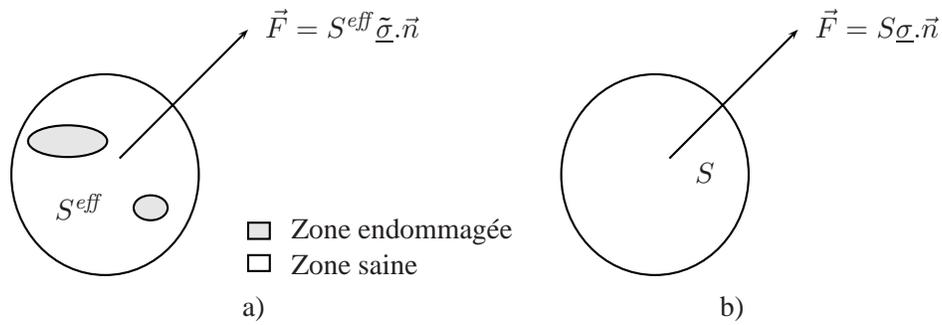


FIG. 2.4 – a) Milieu endommagé. b) Milieu sain équivalent.

Introduction d'une variable d'endommagement isotrope La figure 2.4 présente une coupe de surface S dans un matériau endommagé. L'endommagement se traduit par la présence de vides, de défauts ou de fissures. \tilde{S} est la partie de la surface encore saine, c'est à dire pouvant encore soutenir des efforts. Si nous imposons une force totale \vec{F} à la surface S , la contrainte effective $\tilde{\underline{\sigma}}$ subie par le milieu sain sera telle que :

$$\vec{F} = \tilde{S} \tilde{\underline{\sigma}} \cdot \vec{n}$$

où \vec{n} est la normale extérieure à la surface S . Il est alors possible de définir sur S un milieu sain équivalent, c'est à dire ne présentant pas de défaut, tel que :

$$\vec{F} = S \underline{\sigma} \cdot \vec{n}$$

En comparant ces deux expressions, et en supposant le milieu endommagé *isotrope*, nous avons la relation suivante entre la contrainte effective $\tilde{\underline{\sigma}}$ et la contrainte $\underline{\sigma}$ du milieu équivalent :

$$\underline{\sigma} = \frac{\tilde{S}}{S} \tilde{\underline{\sigma}} = (1 - d) \tilde{\underline{\sigma}}$$

Le paramètre d mesure le rapport entre la surface $S - \tilde{S}$ des zones endommagées et la surface totale. C'est une mesure effective de l'endommagement du matériau. La loi de comportement du matériau sain équivalent est obtenue en supposant d'une part qu'il a les mêmes propriétés élastiques que le matériau sain, et d'autre part en supposant que les milieux endommagé et équivalent ont la même déformation macroscopique $\underline{\epsilon}^{to}$ (principe d'équivalence en déformation, voir le paragraphe 2.4.1.3). Nous obtenons alors la relation :

$$(2.71) \quad \underline{\sigma} = (1 - d) \underline{\underline{\mathbf{D}}}: \underline{\epsilon}^{to}$$

où $\underline{\underline{\mathbf{D}}}$ est le tenseur d'élasticité du matériau sain. Les expressions (2.19) et (2.71) ainsi que l'équation (2.22) montrent que seul le module d'YOUNG du matériau est affecté par l'endommagement :

$$\begin{cases} E(d) = (1 - d) E \\ \nu(d) = \nu \end{cases}$$

où E et ν sont respectivement le module d'YOUNG et le coefficient de POISSON du matériau sain.

Écriture standard généralisée du comportement élastique endommageable isotrope En partant de l'équation (2.71), l'énergie libre volumique d'un matériau élastique endommageable isotrope s'écrit :

$$(2.72) \quad \rho\Psi = \frac{1}{2} (1 - d) \underline{\underline{\epsilon}}^{to} : \underline{\underline{\mathbf{D}}} : \underline{\underline{\epsilon}}^{to}$$

où $\underline{\underline{\mathbf{D}}}$ est le tenseur d'élasticité initial. Suivant [Marigo 81], le formalisme thermodynamique décrit au paragraphe 2.1 introduit la force thermodynamique $-Y$ associée à l'endommagement :

$$(2.73) \quad -Y = \rho \frac{\partial \Psi}{\partial d} = -\frac{1}{2} \underline{\underline{\epsilon}}^{to} : \underline{\underline{\mathbf{D}}} : \underline{\underline{\epsilon}}^{to}$$

Il reste alors à préciser une loi complémentaire.

Nous nous intéressons à des comportements indépendants du temps, décrit au paragraphe 2.1.3.2. Le potentiel de dissipation dual $\Phi^*(\dot{d})$ est choisi positivement homogène de degré 1 :

$$(2.74) \quad \Phi^*(\dot{d}) = f(d) \dot{d} + I_{\mathbb{R}^+}(\dot{d})$$

où apparaissent une fonction $f(d)$ dépendant de la valeur actuelle de l'endommagement et une fonction indicatrice $I_{\mathbb{R}^+}(\dot{d})$ indiquant que seules les évolutions croissantes de l'endommagement sont possibles (l'endommagement est un processus *irréversible*). Il est possible de vérifier que Φ^* possède les propriétés requises pour assurer une dissipation positive (paragraphe 2.1.3) si $f(d)$ est strictement positif : Φ^* est alors convexe et minimal en 0. En utilisant la définition (2.33) de la transformation de LEGENDRE-FRENCHÉL, le potentiel de dissipation $\Phi(Y)$ associé à $\Phi^*(\dot{d})$ est la fonction indicatrice du domaine élastique :

$$(2.75) \quad \Phi(Y) = \sup_{\dot{d} \in \mathbb{R}} \left(Y \dot{d} - \Phi^*(\dot{d}) \right) = \sup_{\dot{d} \in \mathbb{R}^+} (Y - f(d)) \dot{d} = \begin{cases} 0 & \text{si } Y \leq f(d) \\ +\infty & \text{si } Y > f(d) \end{cases}$$

ce qui permet d'interpréter $f(d)$ comme le rayon du domaine d'élasticité.

2.4.1.2 Le modèle de LORENTZ

[Lorentz 03a] propose un exemple de modèle de modèle d'endommagement isotrope illustrant le cadre théorique précédent. Différentes versions de ce modèle peuvent être trouvée dans [Lorentz 99a, Lorentz 05]. Ce modèle est repris au paragraphe 4.2.2 dans le but de décrire le réseau de fissuration secondaire apparaissant dans un fragment de pastille combustible.

La fonction $f(d)$ apparaissant dans la définition (2.74) du potentiel de dissipation dual Φ^* , est choisie égale à :

$$(2.76) \quad f(d) = \frac{k\gamma(1+\gamma)}{(1-d+\gamma)^2}$$

où apparaissent deux coefficients k et γ .

Énergie volumique dissipée Il est possible de caractériser l'énergie volumique dissipée w pour un endommagement total en utilisant le fait que Φ^* soit positivement homogène de degré 1. Φ^* est égal alors au taux de dissipation $\dot{\phi}$ d'après l'équation (2.34) :

$$(2.77) \quad w = \int_0^{rupture} \dot{\phi} dt = \int_0^{rupture} f(d) \dot{d} dt = k$$

L'énergie dissipée w pour un endommagement total est égal au paramètre k du modèle. Elle est *indépendante du trajet de chargement*.

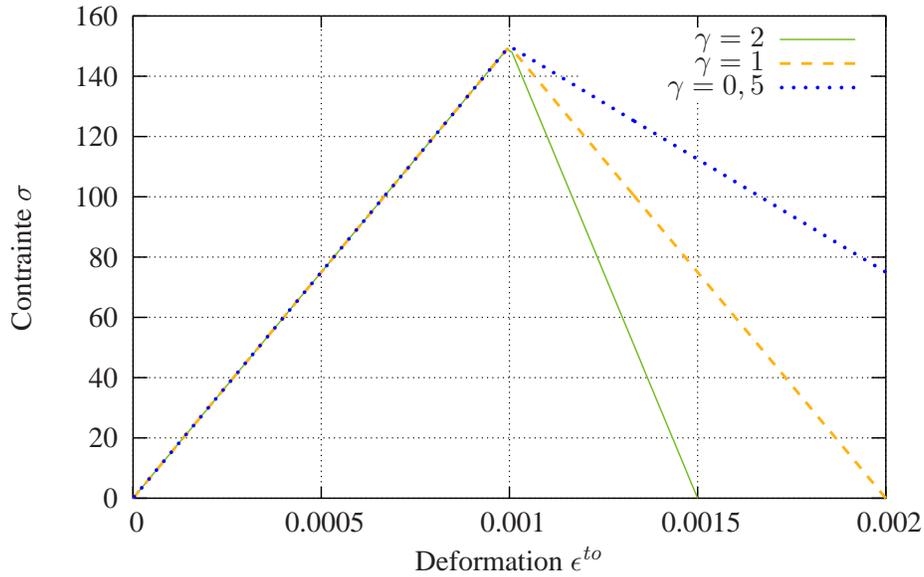


FIG. 2.5 – Réponse du modèle de LORENTZ à un chargement uniaxial monotone croissant, effet du paramètre γ . Le module d'YOUNG a été choisi égal à 150 GPa . Pour chacune des courbes, le paramètre matériau k a été choisi de sorte que la contrainte maximale σ_{max} admissible dans le matériau soit égale à 150 MPa .

Comportement du modèle en traction uniaxiale La réponse du modèle en traction uniaxiale croissante, décrite au paragraphe 2.1.2.1 figure 2.1, est illustrée à la figure 2.5.

Cette figure montre que le comportement est élastique jusqu'à une contrainte maximale σ_{max} . La force thermodynamique Y en traction uniaxiale est égale à $\frac{1}{2} \frac{\sigma^2}{E}$ pour un matériau sain (E est le module d'YOUNG du matériau). La valeur de la contrainte maximale σ_{max} est donnée par les équations (2.75) et (2.76) :

$$(2.78) \quad \sigma_{max} = \sqrt{\frac{2Ek\gamma}{(1+\gamma)}}$$

Une fois le matériau partiellement endommagé, les lois d'état s'écrivent :

$$\begin{cases} \sigma = (1-d) E \epsilon^{to} \\ Y = \frac{1}{2} E (\epsilon^{to})^2 \end{cases}$$

Dans la pente adoucissante, le système est sur la surface de charge $Y = f(d)$. L'équation (2.76) permet de donner l'évolution de la contrainte dans la pente adoucissante :

$$(2.79) \quad \sigma = -E\gamma \left(\epsilon^{to} - \frac{(1+\gamma) \sigma_{max}}{E\gamma} \right)$$

La réponse du modèle dans la phase adoucissante est donc *linéaire*.

2.4.1.3 Anisotropie induite par l'endommagement, principes d'équivalence

D'un point de vue microscopique, les fissures et les vides se développent dans des directions dépendant du chargement imposé. Généralement, une direction privilégiée est celle perpendiculaire à la direction de plus forte contrainte. Ces directions privilégiées conduisent à une anisotropie macroscopique du matériau. Cette anisotropie est fonction de l'histoire du matériau, elle est dite **induite par l'endommagement**. Une description isotrope de l'endommagement est alors inappropriée. L'endommagement est alors décrit par une variable tensorielle, généralement choisie d'ordre 4. Nous la noterons \underline{d} .

D'innombrables dépendances du tenseur d'élasticité à la variable d'endommagement $\underline{\underline{d}}$ ont été proposées dans la littérature. Il est cependant classique d'introduire la notion de milieu sain équivalent. Ce milieu a le même tenseur d'élasticité $\underline{\underline{D}}$ que le matériau sain. Sa déformation et sa contrainte sont notées respectivement $\tilde{\underline{\underline{\epsilon}}}$ et $\tilde{\underline{\underline{\sigma}}}$. La déformation, la contrainte et le tenseur d'élasticité du milieu endommagé sont notés respectivement $\underline{\underline{\epsilon}}^{to}$, $\underline{\underline{\sigma}}$ et $\underline{\underline{D}}(\underline{\underline{d}})$. Les relations entre les variables $(\tilde{\underline{\underline{\epsilon}}}, \tilde{\underline{\underline{\sigma}}}, \underline{\underline{D}})$ et $(\underline{\underline{\epsilon}}^{to}, \underline{\underline{\sigma}}, \underline{\underline{D}}(\underline{\underline{d}}))$ sont alors données en adoptant certains principes d'équivalence. Ces principes sont au nombre de trois :

- **principe d'équivalence en déformation.** Ce principe stipule que les milieux sain équivalent et endommagé ont la même déformation ($\underline{\underline{\epsilon}}^{to} = \tilde{\underline{\underline{\epsilon}}}$). Les contraintes $\tilde{\underline{\underline{\sigma}}}$ et $\underline{\underline{\sigma}}$ des milieux sain équivalent et endommagé sont supposées reliées par une relation linéaire de la forme :

$$\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{M}}(\underline{\underline{d}}) : \tilde{\underline{\underline{\sigma}}}$$

où $\underline{\underline{M}}(\underline{\underline{d}})$ est un tenseur d'ordre 4 fonction du tenseur d'endommagement $\underline{\underline{d}}$. Les tenseurs d'élasticité $\underline{\underline{D}}$ et $\underline{\underline{D}}(\underline{\underline{d}})$ des milieux sain équivalent et endommagé vérifient alors :

$$(2.80) \quad \underline{\underline{D}}(\underline{\underline{d}}) = \underline{\underline{M}}(\underline{\underline{d}}) : \underline{\underline{D}}$$

- **principe d'équivalence en contrainte.** Ce principe stipule que les milieux sain équivalent et endommagé ont la même contrainte ($\underline{\underline{\sigma}} = \tilde{\underline{\underline{\sigma}}}$). Il est alors possible de reprendre les arguments présentés pour le principe d'équivalence en déformation en écrivant maintenant que :

$$(2.81) \quad \tilde{\underline{\underline{\epsilon}}}^{to} = \underline{\underline{M}}(\underline{\underline{d}}) : \underline{\underline{\epsilon}}^{to}$$

pour obtenir finalement une relation analogue à (2.80) entre les tenseurs d'élasticité $\underline{\underline{D}}$ et $\underline{\underline{D}}(\underline{\underline{d}})$ des milieux sain équivalent et endommagé.

- **principe d'équivalence en énergie.** Ce principe stipule que les énergies élastiques des milieux sain équivalent et endommagé sont les mêmes. En introduisant la relation (2.81), les tenseurs d'élasticité $\underline{\underline{D}}$ et $\underline{\underline{D}}(\underline{\underline{d}})$ des milieux sain équivalent et endommagé vérifient ;

$$\underline{\underline{D}}(\underline{\underline{d}}) = {}^t \underline{\underline{M}}(\underline{\underline{d}}) : \underline{\underline{D}} : \underline{\underline{M}}(\underline{\underline{d}})$$

Ces différents principes conduisent à des relations différentes entre les propriétés élastiques des milieux sain équivalent et endommagé. Il n'est cependant pas possible de préférer physiquement l'un ou l'autre de ces principes. Notons qu'ils ne déterminent pas la fonction $\underline{\underline{M}}(\underline{\underline{d}})$. Celle-ci est souvent choisie de la forme :

$$(2.82) \quad \underline{\underline{M}}(\underline{\underline{d}}) = \underline{\underline{I}} - \underline{\underline{d}}$$

où $\underline{\underline{I}}$ est le tenseur identité d'ordre 4. Notons qu'en combinant les expressions (2.80) et (2.82) pour un endommagement isotrope de la forme $\underline{\underline{d}} = d \underline{\underline{I}}$, nous obtenons le comportement élastique endommageable isotrope présenté au paragraphe 2.4.1.1.

Difficultés associées à la description de l'anisotropie induite La description de l'anisotropie induite par l'endommagement conduit généralement à des modèles complexes. Ceci peut être gênant pour :

- la compréhension des phénomènes décrits ;
- l'écriture d'une implantation numérique efficace du modèle.

2.4.2 Prise en compte du caractère unilatéral de l'endommagement

Quelque soit l'origine de l'endommagement, les défauts introduits ne se comportent pas de la même manière en traction ou en compression. Le cas des fissures a déjà été décrit au paragraphe 2.3.1 où le caractère unilatéral de leur comportement a été souligné. Le *caractère unilatéral* de l'endommagement impose un certain nombre de contraintes sur l'écriture des lois de comportements :

- traiter la différence entre un chargement en traction et un chargement en compression dans l'évolution des variables d'endommagement.
- traiter la refermeture des défauts. Cette refermeture conduit à une restauration au moins partielle des propriétés mécaniques du matériau.

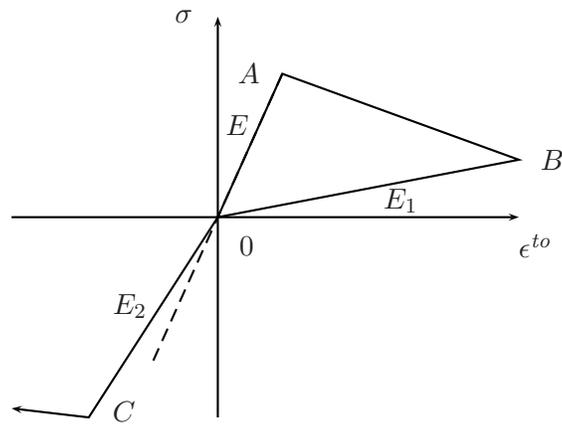


FIG. 2.6 – Courbe de traction d’un matériau endommageable présentant une restauration de ses propriétés élastiques en compression (effet unilatéral). La ligne en pointillés représente le comportement en compression du matériau sain.

Description de l’effet unilatéral sur une courbe de traction Nous avons décrit au paragraphe 2.1.2.1 le principe d’un essai de traction. La courbe de traction d’un matériau endommageable prend l’allure présentée sur la figure 2.6. Partant d’un état de contrainte σ et de déformation totale ϵ^{to} nulles ($\sigma = 0, \epsilon^{to} = 0$), nous imaginons le trajet de chargement suivant :

- du point O au point A, le matériau est chargé en traction ($\epsilon^{to} > 0$). Son comportement est élastique. La raideur du matériau est donnée par son module d’YOUNG E
- du point A au point B, la raideur et la contrainte diminuent progressivement à mesure que le chargement augmente ;
- du point B au point 0, le chargement diminue. Cette décharge se fait de manière élastique avec un module d’YOUNG E_1 ;
- du point O au point C, un chargement en compression est imposé ($\epsilon^{to} < 0$). La raideur du matériau est donnée par un module d’YOUNG E_2 caractérisé par :

$$E_1 < E_2 < E$$

Si $E_2 = E_1$, le modèle ne présente pas de différence de comportement entre traction et compression (pas d’effet unilatéral). Si $E_2 = E$, le matériau recouvre l’intégralité de ses propriétés élastiques initiales (restauration totale). A partir du point C, un endommagement en compression du matériau se développe. L’évolution de cet endommagement en compression est généralement moins rapide qu’en traction.

Difficultés associées à l’effet unilatéral dans le cas général S’il est facile de caractériser l’effet unilatéral sur un essai de traction, la situation est beaucoup plus complexe pour des chargements quelconques. Trois difficultés majeures se présentent :

- le choix d’un critère d’endommagement permettant de différencier un chargement en traction d’un chargement en compression. Un exemple classique (voir [Mazars 90]) est de décrire la surface de charge par une fonction f ne faisant intervenir que les valeurs propres positives des déformations :

$$f \left(\sum_{i=1}^3 \langle \epsilon_i^{to} \rangle^+, d \right) \leq 0$$

où $\langle x \rangle^+$ représente la partie positive d’un nombre réel et ϵ_i^{to} la $i^{\text{ème}}$ valeur propre du tenseur des déformations ;

- le choix d’un critère de refermeture. Ce critère de refermeture des défauts peut être indifféremment formulé en déformations ou en contraintes. Ces deux critères ne sont pas équivalents. Pour toute direction \vec{n} , le critère de refermeture des défauts dans cette direction pourra s’écrire $\vec{n} \cdot \underline{\epsilon}^{to} \vec{n} < 0$ en déformation, et $\vec{n} \cdot \underline{\sigma} \vec{n} < 0$ en contrainte ;

- la refermeture des fissures ne conduit pas à une dissipation brutale d'énergie. Il est en effet possible d'imaginer que la refermeture des défauts conduise à des comportements dissipatifs (frottement des lèvres des fissures par exemple), mais ces comportements et la dissipation qu'ils engendrent sont continus. De plus, quand ces comportements dissipatifs ne sont pas décrits, la refermeture des fissures est un phénomène réversible. Dans tous les cas, il est nécessaire d'imposer la *continuité temporelle* des contraintes $\underline{\sigma}(t)$ et des déformations $\underline{\epsilon}^{to}(t)$ au moment de la refermeture. Cette continuité doit se retrouver au niveau de la loi de comportement $\underline{\sigma}(\underline{\epsilon}^{to})$.

Cas des matériaux endommageables isotropes Dans ce cas, un critère classique, basé sur les travaux de LADEVÈZE, repris ensuite dans [Mazars 90, Frémond 93, Frémond 95], est souvent utilisé. Ce critère repose sur la décomposition du tenseur des déformations totales en une partie négative $\langle \underline{\epsilon}^{to} \rangle^-$ et positive $\langle \underline{\epsilon}^{to} \rangle^+$ définies dans le repère propre des déformations totales $\underline{\epsilon}^{to}$: les valeurs propres négatives et positives de $\underline{\epsilon}^{to}$ permettent d'en construire respectivement la partie négative $\langle \underline{\epsilon}^{to} \rangle^-$ et la partie positive $\langle \underline{\epsilon}^{to} \rangle^+$. Cette décomposition présente les propriétés suivantes :

$$(2.83) \quad \left\{ \begin{array}{l} \underline{\epsilon}^{to} = \langle \underline{\epsilon}^{to} \rangle^+ - \langle \underline{\epsilon}^{to} \rangle^- \\ \langle \underline{\epsilon}^{to} \rangle^+ : \langle \underline{\epsilon}^{to} \rangle^- = \langle \underline{\epsilon}^{to} \rangle^- : \langle \underline{\epsilon}^{to} \rangle^+ = 0 \\ \underline{\epsilon}^{to} : \underline{\epsilon}^{to} = \langle \underline{\epsilon}^{to} \rangle^+ : \langle \underline{\epsilon}^{to} \rangle^+ + \langle \underline{\epsilon}^{to} \rangle^- : \langle \underline{\epsilon}^{to} \rangle^- \\ \text{tr } \underline{\epsilon}^{to} = \langle \text{tr } \underline{\epsilon}^{to} \rangle^+ - \langle \text{tr } \underline{\epsilon}^{to} \rangle^- \\ (\text{tr } \underline{\epsilon}^{to})^2 = \left(\langle \text{tr } \underline{\epsilon}^{to} \rangle^+ \right)^2 + \left(\langle \text{tr } \underline{\epsilon}^{to} \rangle^- \right)^2 \end{array} \right.$$

Ces décompositions ont les propriétés de différentiabilité suivantes :

$$(2.84) \quad \begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \underline{\epsilon}^{to}} \left(\langle \underline{\epsilon}^{to} \rangle^+ : \langle \underline{\epsilon}^{to} \rangle^+ \right) &= \langle \underline{\epsilon}^{to} \rangle^+ & \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \underline{\epsilon}^{to}} \left(\langle \underline{\epsilon}^{to} \rangle^- : \langle \underline{\epsilon}^{to} \rangle^- \right) &= -\langle \underline{\epsilon}^{to} \rangle^- \\ \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \underline{\epsilon}^{to}} \left(\left(\langle \text{tr } \underline{\epsilon}^{to} \rangle^+ \right)^2 \right) &= \langle \text{tr } \underline{\epsilon}^{to} \rangle^+ \mathbf{I} & \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \underline{\epsilon}^{to}} \left(\left(\langle \text{tr } \underline{\epsilon}^{to} \rangle^- \right)^2 \right) &= -\langle \text{tr } \underline{\epsilon}^{to} \rangle^- \mathbf{I} \end{aligned}$$

A partir de l'équation (2.23), qui décrit l'énergie libre d'un matériau élastique isotrope, et des propriétés (2.83), l'énergie libre $\rho\Psi$ est décomposée en la somme d'une partie liée à la traction et d'une partie liée à la compression :

$$(2.85) \quad \begin{aligned} \rho\Psi(\underline{\epsilon}^{to}, d) &= \frac{1}{2} (1-d) \underbrace{\left(2\mu \langle \underline{\epsilon}^{to} \rangle^+ : \langle \underline{\epsilon}^{to} \rangle^+ + \lambda \left(\langle \text{tr } \underline{\epsilon}^{to} \rangle^+ \right)^2 \right)}_{\text{traction}} \\ &+ \frac{1}{2} \underbrace{\left(2\mu \langle \underline{\epsilon}^{to} \rangle^- : \langle \underline{\epsilon}^{to} \rangle^- + \lambda \left(\langle \text{tr } \underline{\epsilon}^{to} \rangle^- \right)^2 \right)}_{\text{compression}} \end{aligned}$$

où nous avons porté la variable d'endommagement d sur la partie de l'énergie libre liée à la traction. En appliquant le formalisme standard généralisé, nous voyons que l'évolution de la variable d'endommagement d est maintenant liée à la traction. En effet, la force thermodynamique associée à d est :

$$-\langle Y \rangle^+ = -\rho \frac{\partial \Psi}{\partial d} = \frac{1}{2} \left(2\mu \langle \underline{\epsilon}^{to} \rangle^+ : \langle \underline{\epsilon}^{to} \rangle^+ + \lambda \left(\langle \text{tr } \underline{\epsilon}^{to} \rangle^+ \right)^2 \right)$$

Nous utiliserons la décomposition (2.85) au paragraphe 4.2.2 pour proposer un extension du modèle de LORENTZ, présenté au paragraphe 2.4.1.2, qui prenne en compte le caractère unilatéral de l'endommagement.

Endommagement en traction et en compression La plupart des matériaux, et notamment le béton, présente un endommagement en compression. Celui-ci évolue cependant moins vite qu'en traction. Il est alors classique d'introduire deux variables d'endommagement d_t et d_c associées respectivement à la traction et à la compression. L'énergie libre $\rho\Psi$ se présente alors sous la forme suivante :

$$(2.86) \quad \rho\Psi(\underline{\epsilon}^{to}, d) = \frac{1}{2}(1-d_t) \left(2\mu \langle \underline{\epsilon}^{to} \rangle^+ : \langle \underline{\epsilon}^{to} \rangle^+ + \lambda \left(\langle \text{tr } \underline{\epsilon}^{to} \rangle^+ \right)^2 \right) + \frac{1}{2}(1-d_c) \left(2\mu \langle \underline{\epsilon}^{to} \rangle^- : \langle \underline{\epsilon}^{to} \rangle^- + \lambda \left(\langle \text{tr } \underline{\epsilon}^{to} \rangle^- \right)^2 \right)$$

Une telle séparation entre un endommagement en traction et en compression est cependant peu physique : *a minima*, l'endommagement en compression entraîne une dégradation des propriétés mécaniques en traction. [Frémond 93] propose d'imposer que l'endommagement en traction d_t ne puisse être inférieur à l'endommagement en compression d_c : la fonction indicatrice du domaine $d_c \geq d_t$ est alors introduite dans l'énergie libre³.

Effet unilatéral pour des modèles d'endommagement plus complexes Les modèles précédents (équations (2.85) et (2.86)) sont essentiellement basés sur la structure de l'énergie élastique d'un matériau isotrope (équation (2.23)) et préserve dans une certaine mesure cette structure. Nous avons vu plus haut des modèles plus complexes présentant des descriptions de l'anisotropie induite par l'endommagement. Décrire l'effet unilatéral dans de tels modèles en respectant la continuité de la relation entre les contraintes et la déformation est une tâche complexe. Nous renvoyons à [Godard 05] pour :

- une bibliographie plus détaillée.
- la description d'un modèle d'endommagement anisotrope intéressant, respectant la continuité de la relation entre les contraintes et la déformation et ne demandant qu'un faible nombre de paramètres.

2.4.3 Difficultés mathématiques associées aux structures endommageables

Nous avons examiné aux paragraphes 2.2.2.4 et 2.2.2.5 différentes propriétés mathématiques du lagrangien incrémental \mathcal{L} , défini au paragraphe 2.2.2 équation (2.60), permettant de répondre à la question de l'existence et de l'unicité de solutions au problème de l'évolution quasi-statique d'une structure. Nous reprenons maintenant ces questions dans le cadre des matériaux endommageables.

Absence de convexité Nous avons souligné au paragraphe 2.2.2.4 l'importance de la convexité du lagrangien \mathcal{L} . Il est facile de voir que cette propriété n'est pas vérifiée pour les matériaux endommageables. Il suffit pour cela de considérer l'énergie libre $\Psi(\underline{\epsilon}^{to}, d)$ obtenue pour les matériaux endommageables isotropes (équation (2.72)). $\Psi(\underline{\epsilon}^{to}, d)$ est convexe par rapport à chacune des variables $\underline{\epsilon}^{to}$ et d prise indépendamment, mais n'est pas une fonction convexe du couple de variable $(\underline{\epsilon}^{to}, d)$. En effet, si nous considérons un chargement unidimensionnel, nous pouvons écrire $\Psi(\underline{\epsilon}^{to}, d)$ sous la forme $\Psi(\epsilon^{to}, d)$ où ϵ^{to} est la déformation dans la direction de chargement. $\Psi(\epsilon^{to}, d)$ est alors égal à :

$$\rho\Psi(\epsilon^{to}, d) = \frac{1}{2}(1-d) E (\epsilon^{to})^2$$

où E est le module d'YOUNG du matériau. Cette fonction n'est convexe que si son hessien H , formé à partir de ses dérivées secondes, n'a que des valeurs propres positives. Dans le cas de la fonction Ψ , ce hessien H a une valeur propre est strictement négative dès que ϵ^{to} est non nul. La fonction $\Psi(\epsilon^{to}, d)$ n'est donc pas convexe.

Ainsi, nous pouvons appliquer le théorème d'existence et d'unicité décrit au paragraphe 2.2.2.5 : nous ne pouvons affirmer *a priori* ni l'existence ni l'unicité d'une solution au problème (2.62) dans le cas de matériaux endommageables.

³L'emploi de fonctions indicatrices afin de limiter les valeurs admissibles des variables d'états est décrit au paragraphe 2.2.2.2

2.4.3.1 Multiplicité des solutions

Pour montrer la non unicité de la réponse en endommagement, [Forest 04] propose d'examiner un essai de traction décrit au paragraphe 2.1.2.1 à la figure 2.1. La longueur du barreau est notée L , le déplacement uniaxial imposé U .

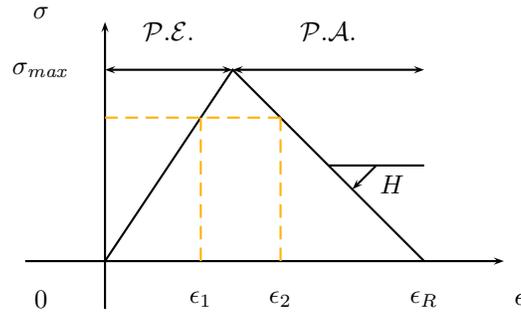


FIG. 2.7 – Un exemple de réponse à un chargement monotone d'un modèle d'endommagement.

Le comportement du matériau considéré est décrit sur la figure 2.7. Une fois le seuil d'endommagement atteint, [Forest 04] montre que plusieurs réponses du barreau sont possibles. Ces réponses sont paramétrées par la longueur l^{end} de la zone endommagée dans le barreau. Cet exemple montre qu'il n'y a pas *unicité* de la solution en endommagement.

D'un point de vue physique, la non-unicité de la solution est classiquement interprétée par la présence d'hétérogénéités microscopiques. Ces hétérogénéités conduisent à la sélection aléatoire d'un lieu d'initiation plutôt qu'un autre. Une fois l'endommagement initié à un endroit, il se poursuit à cet endroit tandis que le reste de la structure se décharge élastiquement.

D'un point de vue numérique, il est classique de faire jouer aux erreurs numériques le rôle de ces hétérogénéités avec pour conséquence immédiate une sensibilité parfois importante aux petites variations du maillage dans le cas de structure et de chargement initialement homogènes. Nous verrons au paragraphe 5.2.2.1 un exemple concret d'une telle instabilité au maillage.

2.4.3.2 Inexistence de solutions régulières

Coercivité Il est de même facile de trouver un exemple où aucune solution n'existe : si un matériau peut être caractérisé par une contrainte maximale σ_{max} , par définition, il est impossible de lui imposer une traction supérieure à cette valeur. Ceci est à relier à l'absence de coercivité du lagrangien. Cette difficulté mathématique a parfois été « contournée » en envisageant un **endommagement partiel** : pour cela, il suffit d'introduire une matrice d'élasticité $\underline{\mathbf{D}}^{min}$ strictement positive telle que :

$$\forall \vec{d}, \Psi(\underline{\epsilon}^{to}, \vec{d}) \geq \frac{1}{2} \underline{\epsilon}^{to} : \underline{\mathbf{D}}^{min} : \underline{\epsilon}^{to}$$

Cette technique est par exemple utilisée dans [Francfort 93] afin de permettre une étude mathématique complète d'un modèle d'endommagement particulier. D'un point de vue pratique, une raideur résiduelle permet d'éviter l'apparition de pivots nuls dans la matrice de raideur de la structure ([Lorentz 03a]).

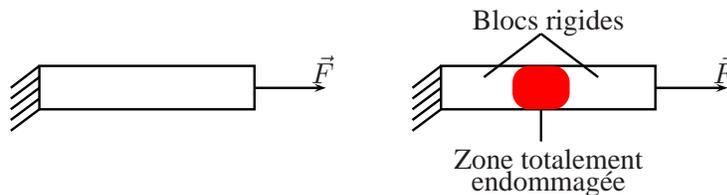


FIG. 2.8 – Barreau endommageable en traction, séparation du barreau en deux blocs rigides.

Minima locaux ou minimum global ? Dans le cas où le lagrangien \mathcal{L} est convexe, tout minimum local est un minimum global ([Céa 71, Demengel 99]). Dans le cas de l'endommagement, l'absence de convexité de \mathcal{L} fait qu'il peut exister des minima locaux. Ceci nous amène à la question suivante : doit-on rechercher un minimum local ou un minimum global au problème (2.62) ?

Pour répondre à cette question, [Lorentz 99a] examine le cas d'un barreau dont l'une des extrémités est fixée et l'autre soumise à une force de traction \vec{F} (figure 2.8). En examinant les différents termes du lagrangien (2.64), il montre l'existence d'un minimum global ($-\infty$) correspondant à la séparation du barreau en deux blocs rigides dont l'un est amené à l'infini. Ainsi, aussi petite que soit la traction imposée, la configuration réalisant le minimum global est une structure brisée. Or, il est observé qu'un tel barreau présente un comportement élastique avant sa rupture. Ce comportement correspond en fait à un minimum local du lagrangien (2.64). C'est pour cela que la recherche de minima locaux au lagrangien \mathcal{L} est préférable à la recherche d'un minimum global.

Existence de solutions régulières Existent-ils des solutions régulières au problème de minimisation (2.62) ? La réponse semble être négative. En effet, il est possible de démontrer (voir [Marigo 00]) que, dans une situation unidimensionnelle analogue à celle traitée au paragraphe 2.4.3.1, *seules les solutions correspondant à des zones endommagées de volume nul sont stables* vis à vis du lagrangien totale du système au sens du critère de stabilité (2.62). Dans le cas présenté au paragraphe 2.4.3.1, ce résultat implique que la longueur l^{end} est nulle⁴. De même, [Francfort 93] montre que, dans le cas d'un modèle d'endommagement isotrope partiel, les candidats naturels à être solutions au problème (2.62) doivent être interprétés comme un mélange fin de parties saines et endommagées (ce qui signifie qu'à toutes échelles de longueur il est possible de trouver des zones saines et des zones endommagées). De telles solutions, si elles existent, sont naturellement fortement *irrégulières*. D'un point de vue mathématique, ce type de comportement peut être associé à l'absence de semi-continuité inférieure pour la convergence faible du lagrangien \mathcal{L} ([Francfort 93]).

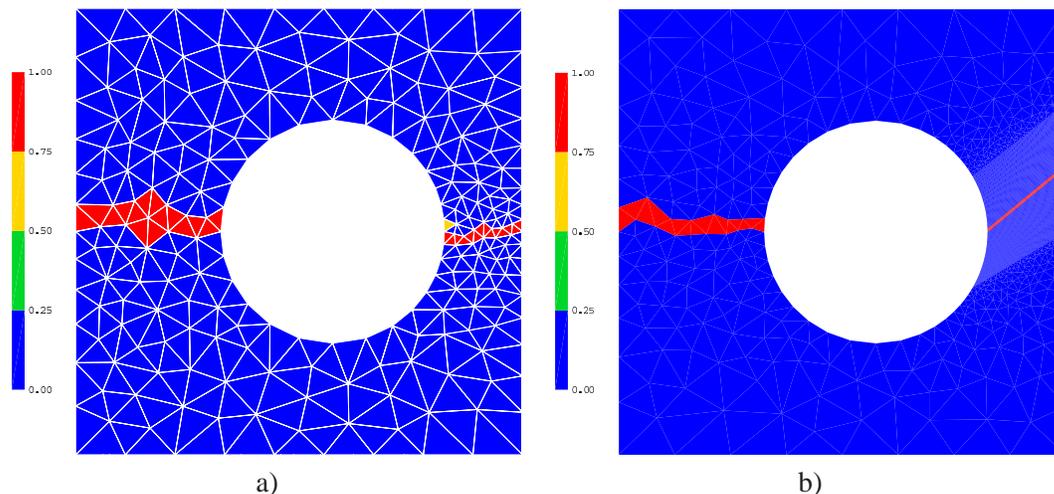


FIG. 2.9 – Dépendance du trajet de fissure à l'orientation du maillage éléments finis : le bleu correspond au matériau sain, le rouge à la zone endommagée (tiré de [Andrieux 04b]).

Conséquences pratiques, dépendance au maillage D'un point de vue pratique, quand nous considérons le problème discrétisé en espace par la méthode des éléments finis (décrite au paragraphe B), les conséquences de cette inexistence de solutions régulières au problème continu (2.62) sont nombreuses : dépendances des résultats à la taille de maille, à l'ordre des éléments finis utilisés, à l'orientation du maillage.

⁴Nous voyons ici l'intérêt d'introduire le critère de stabilité (2.62). En effet, les réponses obtenues par [Forest 04] sur l'exemple traité au paragraphe 2.4.3.1 montrent que toute longueur l^{end} pouvait être solution. En pratique, une longueur l^{end} quelconque n'est jamais observé ni expérimentalement ni numériquement : [Forest 04] a trouvé « trop » de solutions.

La figure 2.9 présente l'exemple d'une plaque trouée soumise à un déplacement imposé sur sa frontière supérieure, sa frontière inférieure étant bloquée verticalement. Le calcul est fait avec deux maillages différents. La constatation la plus immédiate est *la localisation de l'endommagement*. Ensuite, nous pouvons voir que les trajets des deux bandes obtenues pour chacun des maillages sont très différents. En fait, la zone endommagée observée sur la figure 2.9 b) suit le maillage : la solution obtenue dépend de l'orientation donnée au maillage.

Ces observations numériques montrent que *les résultats obtenus dépendent de l'espace d'approximation utilisé* (voir par exemple [Besson 01, Andrieux 04b]). Ainsi, s'il existe des solutions stables au problème (2.62), *les éléments finis standard ne semblent pas être une méthode numérique permettant de les approcher de manière satisfaisante*.

Bande de localisation Nous avons observé sur la figure 2.9 que l'endommagement se localisait. La zone endommagée est appelée **bande de localisation**. La figure 2.9 montre que son épaisseur est d'un élément fini. Cette solution est la plus irrégulière que peut représenter un maillage éléments finis. Les arguments théoriques énoncés conduisent à penser que cette épaisseur est nulle dans le cas du problème continu.

2.4.4 Énergie dissipée par la propagation d'une bande de localisation

La localisation de l'endommagement permet de retrouver la notion de fissure. Il suffit pour cela de penser à une fissure comme une bande de localisation dans laquelle l'endommagement est total. Ceci permet de réaliser un premier pont entre l'approche globale, présentée au paragraphe 2.3, et l'approche locale. L'approche locale est cependant basée sur la définition d'une énergie dissipée par unité d'aire de fissure créée, le taux de restitution de l'énergie critique G_f . Cette quantité est particulièrement importante car elle est mesurable expérimentalement. Il est alors nécessaire de se demander si l'approche locale peut retrouver cette quantité.

Énergie dissipée par la propagation d'une bande de localisation Le potentiel de dissipation dual Φ^* étant égal à la vitesse de dissipation d'après l'équation (2.34), l'énergie dissipée par endommagement est donnée au premier ordre par l'intégrale :

$$\Delta E^\phi(\vec{z}_{t+\Delta t}) = \int_{\Omega} \Phi^*(\vec{z}_{t+\Delta t}(\vec{x}) - \vec{z}_t(\vec{x})) \, dV = \int_{\Omega^{end}} \Phi^*(\vec{z}_{t+\Delta t}(\vec{x}) - \vec{z}_t(\vec{x})) \, dV \leq V^{end} \max_{\Omega^{end}} \left[\int_t^{t+\Delta t} \dot{\phi} \, dt \right]$$

où Ω^{end} désigne la bande localisation et V^{end} son volume. Ce volume V^{end} est nul d'après ce qui a été dit au paragraphe 2.4.3.2. L'énergie volumique $\max_{\Omega^{end}} \left[\int_t^{t+\Delta t} \dot{\phi} \, dt \right]$ étant bornée, *l'énergie dissipée ΔE^ϕ est nulle*. Autrement dit, l'utilisation d'un modèle d'endommagement conduit à prédire la ruine d'un matériau *sans dissipation de l'énergie* (voir [Andrieux 04b, Besson 04a]). Ceci est contraire à l'expérience. En particulier, la notion de taux de restitution de l'énergie critique G_f , décrite au paragraphe 2.3.2, ne peut être retrouvée.

Absence de longueur caractéristique L'absence d'énergie dissipée pour la propagation d'une fissure est due à la localisation de l'endommagement dans une bande de volume nul. Cette difficulté n'existerait pas si la localisation se faisait dans une bande d'épaisseur finie. Or, les lois de comportement décrivant les modèles d'endommagement locaux présentées au paragraphe 2.1 n'introduisent aucune grandeur ayant la dimension d'une longueur qui permettrait de donner une taille à la bande de localisation. L'introduction d'une **longueur caractéristique** de la bande de localisation est donc nécessaire.

Nous présentons maintenant deux techniques classiques qui utilisent la discrétisation éléments finis pour fournir une longueur caractéristique. Ces techniques permettent de retrouver le taux de restitution de l'énergie critique G_f . Elles présentent l'avantage de pouvoir être utilisées sans modification du schéma de résolution éléments finis présenté au paragraphe B.

2.4.4.1 Taille de maille et donnée matériau

Une stratégie souvent utilisée consiste à fixer la taille de maille h comme un paramètre matériau. D'après ce qui précède, ceci fixe l'épaisseur de la bande de localisation (ceci est précisé au paragraphe 4.2.2.3). Une énergie *surfactive* dissipée G_f peut alors être directement reliée à l'énergie *volumique* dissipée par la relation :

$$(2.87) \quad G_f = hw = h \int_0^{rupture} \dot{\phi} dt$$

où w est l'énergie volumique dissipée pour un endommagement total (qui peut dépendre du trajet de chargement) et $\dot{\phi}$ le taux de dissipation (voir [Besson 04a]).

Ordre de grandeur de la taille de maille à utiliser En traction uniaxiale, un matériau élastique parfaitement fragile présente une perte de rigidité totale et brutale une fois la contrainte maximale σ_{max} atteinte. L'énergie dissipée est l'énergie élastique maximale stockée au moment de la rupture, $\Psi^{el} = \frac{\sigma_{max}^2}{2E}$ où E est le module d'YOUNG du matériau. Grâce à cette énergie Ψ^{el} et connaissant l'énergie de surface G_f , il est possible de donner par la relation (2.87) un ordre de grandeur λ_c de la taille de maille à utiliser :

$$(2.88) \quad \lambda_c = \frac{2EG_f}{\sigma_{max}^2}$$

Application à l'UO₂ Les valeurs expérimentales de la contraintes à rupture et du taux de restitution de l'énergie critique G_f conduisent à des valeurs de λ_c de l'ordre de 40 μm .

2.4.4.2 Modèles de fissuration diffuse

Afin de pouvoir utiliser des maillages de taille variable, les **modèles de fissuration diffuse**, initiés par [Dahlblom 90], tentent de rendre l'énergie dissipée indépendante de la taille de maille h en l'introduisant dans la loi de comportement. Plus précisément, si nous considérons deux tailles de maille h_1 et h_2 , les modèles de fissuration diffuse sont tels que :

$$(2.89) \quad G_f = h_1 w_1 = h_2 w_2$$

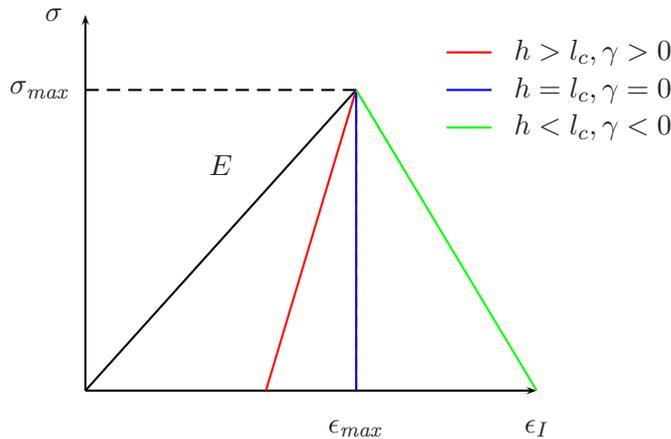


FIG. 2.10 – Snap-back local si la condition $l_c \geq h$ n'est pas respectée.

Application au modèle de LORENTZ Dans le cas du modèle de LORENTZ, présenté au paragraphe 2.4.1.2, l'égalité (2.89) s'écrit :

$$(2.90) \quad G_f = hk$$

Le coefficient γ est relié au paramètre σ_{max} par l'équation (2.78) :

$$\sigma_{max}^2 = 2Ek \frac{\gamma}{1 + \gamma}$$

En introduisant la longueur caractéristique λ_c donné par l'équation (2.88), nous obtenons la relations suivante :

$$\gamma = \frac{h}{\lambda_c - h}$$

γ représentant la pente de la réponse du modèle de LORENTZ en traction uniaxiale (équation (2.79)), sa valeur n'est correctement définie (positive) que si la taille de l'élément h est inférieure à la longueur caractéristique λ_c . Dans le cas contraire, le modèle présenterait un « snap-back » (retour en arrière) local (voir figure 2.10). Ceci peut être interprété ainsi : l'énergie élastique maximale au cours du temps (obtenue au moment de l'initiation de la fissure) contenue dans un élément fini doit *a minima* pouvoir être dissipée par la loi de comportement ([Helfer 05d]). Ceci impose que la taille de maille à utiliser pour retrouver une énergie de surface G_f doit être inférieure à λ_c . Nous discuterons la question des « snap-back » au paragraphe 2.4.6 à l'échelle de la structure.

Type d'éléments à utiliser L'identification (2.90) suppose en fait que l'endommagement se localise de manière homogène dans l'ensemble d'un élément, ce qui est vrai pour des éléments linéaires. Pour des éléments quadratiques, seule une rangée de points de GAUSS s'endommage. Dans ce cas, le volume endommagé est directement relié aux poids w_i des points de GAUSS qui s'endommagent (voir le paragraphe B.2 de l'annexe B). Dans le cas des éléments quadratiques, ces poids dépendent du point de GAUSS considéré : afin d'obtenir des énergies dissipées indépendantes du maillage, il faut non seulement faire intervenir dans la loi de comportement la taille des éléments, mais aussi le poids du points de GAUSS. *Il est donc vivement conseillé de ne l'utiliser qu'avec des éléments linéaires.*

2.4.5 Développements récents de l'approche locale de la rupture

Pour résoudre les difficultés liées à l'inexistence de solutions régulières en endommagement local, les développements récents de l'approche locale de la rupture ont essentiellement suivi deux voies :

- introduire dans la formulation du problème une longueur caractéristique contrôlant la largeur de la bande de localisation ;
- considérer des approches surfaciques de la rupture.

Ces différentes méthodes nécessitent de modifier soit les éléments finis utilisés soit l'algorithme de résolution globale.

2.4.5.1 Approches volumiques

Nous considérons maintenant différentes solutions proposées dans la littérature qui conduisent à introduire une *longueur caractéristique* fixant la taille de la bande de localisation de manière indépendante de la discrétisation éléments finis ([Babin 04]).

Régularisation non locale Les difficultés de la mécanique de l'endommagement local sont liées au comportement singulier des champs de déformations et d'endommagement. Afin de contourner cette difficulté, un de ces champs, noté a , est régularisé. Le champ régularisé est noté $\langle a \rangle$. Deux opérateurs de régularisation sont classiquement utilisés :

- $\langle a \rangle$ est obtenu par convolution spatiale du champ a (voir [Peelings 02, Haidar 04]) ;

– $\langle a \rangle$ est solution d'une équation aux dérivées partielles de la forme :

$$L_c^2 \nabla^2 \langle a \rangle + \langle a \rangle = a$$

où ∇^2 est l'opérateur laplacien.

Ces opérateurs introduisent une longueur caractéristique.

La variable régularisée $\langle a \rangle$ est alors obtenue à la place du champ initial soit dans l'énergie libre, soit dans le potentiel de dissipation dual, soit dans les deux. Une revue critique de telles régularisations peut être trouvée dans [Lorentz 03b] : les auteurs comparent les différentes méthodes de régularisation de la littérature suivant trois critères :

- un problème bien posé doit rester bien posé ;
- la régularisation doit transformer un problème mal posé en un problème mieux posé ;
- la régularisation doit être compatible avec l'inégalité de CLAUSIUS-DUHEM ;

[Lorentz 03b] montrent que peu des différentes régularisations envisageables respectent les deux premières conditions. La troisième condition est souvent problématique car il est impossible d'assurer localement la positivité de la dissipation (elle peut cependant être assurée au niveau de la structure).

Pénalisation des grands gradients Les difficultés de la mécanique de l'endommagement sont mathématiquement liées au caractère mal posé du problème de minimisation (2.62) dans un espace de fonctions régulières. Il est possible de régulariser ce type de problèmes en ajoutant au lagrangien \mathcal{L} à minimiser un terme \mathcal{L}_2 dont le rôle est de *pénaliser* les fonctions trop irrégulières ([Tikhonov 76, Castelier 95] :

$$\text{Trouver } \vec{u} \text{ et } z_i \text{ réalisant } \min_{\vec{u}^* \in C.A., z_i^*} \mathcal{L}(\vec{u}^*, z_i^*) + \mathcal{L}_2(\vec{u}^*, z_i^*)$$

où \mathcal{L}_2 doit être bien choisi. L'existence de solutions localisées au problème de minimisation (2.60) rend naturelle l'introduction d'une pénalisation des solutions variant trop rapidement. La fonction \mathcal{L}_2 est généralement choisie égale à :

$$\mathcal{L}_2(d^*) = \frac{A_c}{2} \int_{\Omega} \vec{\nabla} d^* \cdot \vec{\nabla} d^* dV$$

où d est la variable d'endommagement (supposée scalaire). Il est possible de montrer que cette formulation régularise effectivement le problème de minimisation (2.60) et que les solutions obtenues sont suffisamment régulières (voir par exemple [Marigo 00, Andrieux 04a]).

Notons que les idées développées dans [Frémond 93, Frémond 96] permettent d'étendre cette approche. Pour cela, les auteurs considèrent la variable d'endommagement comme une nouvelle variable cinématique et introduisent dans le principe des travaux virtuels de nouveaux termes associés à cette variable. Il est alors possible de réintroduire tout le cadre thermodynamique formel décrit jusqu'ici. Ces idées se retrouvent aussi dans la formulation non locale du modèle de LORENTZ présenté au paragraphe 2.4.1.2 (voir [Lorentz 99b, Lorentz 99a, Lorentz 03a, Lorentz 05]).

Introduction de nouvelles variables cinématiques La formulation des lois de comportement classique ne fait pas intervenir de longueur caractéristique : en petite déformations, la cinématique se réduit à $\epsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$ dans laquelle il n'y a pas de longueurs internes. Une solution proposée dans la littérature est l'introduction de **milieux à microstructure** décrits à l'aide de variables cinématiques supplémentaires. Deux exemples classiques de milieux à microstructures sont :

1. les milieux de COSSERAT : une variables supplémentaire, interprétée comme un champ de rotations de la microstructure est introduit (voir [Besson 01, Forest 04]) ;
2. les milieux de second gradient : la cinématique est enrichie en introduisant les dérivées secondes du champ de déplacement ;

Dans chacun de ces cas, une longueur caractéristique entre dans la formulation et une largeur de bande finie, indépendante du maillage est observée. Le lecteur intéressé pourra trouver une revue bibliographique de tels modèles dans [Maugin 04]. L'introduction de nouvelles variables cinématiques se fait généralement en leur associant des termes supplémentaires dans le principe des travaux virtuels. Il est là encore possible de retrouver le cadre thermodynamique formel décrit jusqu'ici. Notons que, même en élasticité, le nombre de coefficients à identifier est notablement plus élevé que pour un matériau standard.

2.4.5.2 Approches surfaciques

Une autre voie de l'approche locale de la rupture est portée par les **modèles de zones cohésives**. Ces modèles s'appuient sur la description faite au paragraphe (2.3.1) d'une fissure. Sa loi de comportement est une relation évolutive entre les tractions \vec{T} et le saut du champ de déplacement $\llbracket u \rrbracket$ à cette interface (voir figure 2.3). Fondamentalement, une zone cohésive est une *interface endommageable*.

Ce type d'approche voit son origine dans les travaux précurseurs de BARENBLATT ([Barenblatt 62]), DUGDALE) sur la caractérisation des champs de contraintes en pointe de fissures et HILLERBORG ([Hillerborg 76] sur les bétons. Ces modèles ont ensuite connu un succès grandissant dans la modélisation de la décohéation, en particulier grâce aux travaux de FRÉMOND sur l'adhésion ([Frémond 82, Frémond 87]) ou la caractérisation de la décohéation des interfaces fibres/matrices dans les composites [Cangémi 96, Monerie 00]. Ces modèles ont alors permis d'intégrer de manière naturelle des phénomènes surfaciques complexes (contact unilatéral, adhésion ou endommagement de l'interface suivant le point de vue, et frottement en cisaillement). La littérature consacre un intérêt particulier au modèle de TVERGAARD, décrit dans [Tvergaard 90]. Nous utiliserons ce modèle en annexe D pour décrire les phénomènes de sauts de solutions liés aux propagations instables de fissures.

Modèles de zones cohésives et énergie dissipée Il est possible de montrer (voir [Monerie 00]) que les modèles de zones cohésives permettent de conserver sous certaines hypothèses (propagation rectiligne stable de la fissure en mode I), la notion de taux de restitution de l'énergie, offrant un pont intéressant entre modèles de zones cohésives et mécanique de la rupture. Plus précisément, il est possible de montrer que l'énergie élastique restituée par unité de surface est égal à l'aire sous la courbe $T_n(\llbracket u \rrbracket_n)$ (T_n et $\llbracket u \rrbracket_n$ sont respectivement les projections des tractions \vec{T} et du saut de déplacement sur la normale à la zone cohésive) :

$$(2.91) \quad G_f = \int_0^{\delta_n} T_n(\llbracket u \rrbracket_n) d\llbracket u \rrbracket_n$$

où δ_n est le saut de déplacement critique au delà duquel la zone cohésive ne transmet plus de contraintes.

Implantations possibles Différentes implantations ont été proposées. Elles se rangent principalement en deux catégories :

- utilisation d'éléments surfaciques spécifiques, généralement appelés **éléments cohésifs**. L'implantation de tels éléments est décrite dans [Feyel 04]. Ces éléments sont insérés entre les éléments volumiques. Afin de décrire des situations où le trajet des fissures est *a priori* inconnu, ces éléments cohésifs peuvent être mis entre tous les éléments finis (voir par exemple [Xu 95]). [Tijssens 00] montre néanmoins qu'il est impossible d'insérer ces éléments sans engendrer de biais : les trajets de fissure dépendent donc des maillages choisis ;
- utilisation d'éléments finis possédant des fonctions d'interpolation enrichies. En effet, la possibilité de décrire explicitement des solutions présentant des irrégularités fortes doit se retrouver dans ces fonctions. De nombreuses formulations ont été proposées dans la littérature ([Möes 02, Jirásek 01, de Borst 03]).

Rigidité parasite L'introduction d'éléments cohésifs entre chaque élément fini modifie la rigidité de la structure, avant même que celle-ci ne s'endommage. Cette rigidité parasite est d'autant plus importante que le

maillage est fin. Une solution à ce problème est d'introduire des raideurs surfaciques très importantes par rapport aux raideurs volumiques au niveau de zones cohésives. Cette solution peut conduire à une matrice de raideur mal conditionnée. Cette question a motivé la recherche de formulations permettant une raideur infinie de la zone cohésive avant son endommagement ([de Borst 03]).

2.4.5.3 La mécanique de la rupture revisitée

G. FRANCFORT et J.-J. MARIGO ont proposé une théorie de la rupture particulièrement séduisante (voir [Marigo 00, Francfort 02]) basée sur un principe de minimum du lagrangien du système :

$$(\mathcal{P}_m) \quad \min_{\vec{u} \text{ C.A.}} \left(\int_{\Omega - S_{[[\vec{u}]}} \frac{1}{2} \underline{\underline{\epsilon}}^{to}(\vec{u}) : \underline{\underline{\mathbf{D}}} : \underline{\underline{\epsilon}}^{to}(\vec{u}) \, dV + \int_{S_{[[\vec{u}]}} G_f \, dS \right)$$

où $[[\vec{u}]]$ est une discontinuité du champ de déplacements et $S_{[[\vec{u}]}$ les surfaces de discontinuités. Le nombre, la taille et l'orientation de telles surfaces sont laissés libres (contrairement au lagrangien défini par l'équation (2.65) qui supposait l'existence d'une fissure bien définie). Cette expression peut-être généralisée pour des structures hétérogènes et anisotropes en considérant un champ d'énergie surfacique $G_f(\vec{x}, \vec{n})$ où \vec{n} est un vecteur normal à la discontinuité du champ de déplacement considéré ([Marigo 00]).

Les seuls chargements considérés ici sont des déplacements imposés. La difficulté de cette méthode est liée au caractère fortement irrégulier des champs de déplacements introduits. Le problème de minimum (\mathcal{P}_m) a cependant trouvé un certain écho chez les mathématiciens qui ont sù trouver un « bon » espace fonctionnel dans lequel existe des solutions, donnant un sens précis au problème (\mathcal{P}_m) (voir par exemple [Chambolle 04]).

Les possibilités de cette méthode sont particulièrement intéressantes. Ces auteurs montrent qu'elle permet, entre autres, la description d'un réseau de fissures, l'initiation même brutale d'une fissure (apparition spontanée d'une fissure de longueur finie) et leur bifurcation (voir [Marigo 00, Bourdin 00, Francfort 02, Bilteryst 03]).

Régularisation Naturellement, l'application numérique nécessite de régulariser le problème (\mathcal{P}_m) par un problème dont les solutions sont suffisamment régulières pour pouvoir être approchées par une discrétisation éléments finis. [Bourdin 00] propose de considérer le problème régularisé suivant :

$$(2.92) \quad \min_{\substack{\vec{u} \text{ C.A.} \\ d \in [0; 1]}} \left(\int_{\Omega} \frac{1}{2} (1-d)^2 \underline{\underline{\epsilon}}^{to}(\vec{u}) : \underline{\underline{\mathbf{D}}} : \underline{\underline{\epsilon}}^{to}(\vec{u}) \, dV + \int_{\Omega} G_f \left(\frac{d^2}{4L_c} + L_c \vec{\nabla} d \cdot \vec{\nabla} d \right) \, dV \right)$$

dont il montre la convergence vers le problème (\mathcal{P}_m) quand le paramètre de régularisation L_c tend vers 0. Le problème régularisé a une forme extrêmement proche de celle obtenue par une approche par endommagement non local. Le terme où apparaît le gradient $\vec{\nabla} d$ de l'endommagement pénalise les champs dont le gradient est trop fort, pénalisation analogue à celle introduite au paragraphe 2.4.5.1.

Une extension prenant en compte l'énergie de décohésion Cette théorie a cependant ses limites, en particulier le problème (\mathcal{P}_m) n'introduit pas de contrainte d'initiation, conduisant à une contrainte à rupture dépendant de la taille de la structure. Une évolution de la théorie précédente conduit à introduire une énergie de BARENBLATT $\mathcal{B}([[\vec{u}]])$ dépendant de la discontinuité des champs de déplacements $[[\vec{u}]]$. Le problème d'évolution des fissures prend alors la forme suivante ([Laverne 04]) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \min_{\vec{u} \text{ C.A.}} \left(\int_{\Omega_i - S_{[[\vec{u}]}} \frac{1}{2} \underline{\underline{\epsilon}}^{to}(\vec{u}) : \underline{\underline{\mathbf{D}}} : \underline{\underline{\epsilon}}^{to}(\vec{u}) \, dV + \int_{S_{[[\vec{u}]}} \mathcal{B}([[\vec{u}]]) \, dS - \int_{\Omega} \vec{f} \cdot \vec{u} \, dV - \int_{\partial\Omega_{\vec{T}}} \vec{T} \cdot \vec{u} \, dS \right) \\ [[\vec{u}]] \cdot \vec{n} \geq 0 \end{array} \right.$$

La pente à l'origine de la relation $\mathcal{B}([[\vec{u}]])$ peut être reliée à une contrainte à rupture ([Laverne 04]). D'un point de vue numérique, la résolution de ce problème de minimisation a été mise en œuvre à l'aide d'éléments

cohésifs représentant les surfaces de discontinuité du champ de déplacement. Notons que cette formulation par un problème de minimisation permet de contourner la difficulté associée au problème de rigidité parasite évoqué au paragraphe 2.4.5.2.

2.4.6 Propagation instable

Nous avons introduit au paragraphe 2.3.2.2, les notions de propagations stable et instable d'une fissure. La description de propagations instables en quasi-statique conduit à des discontinuités importantes dans la réponse de la structure. Nous présentons en annexe D le cas d'un barreau en traction uniaxiale contenant une zone cohésive. Cet exemple a déjà été traité dans [Monerie 00, Monerie 01]. Cette étude montre que :

- la propagation stable d'une fissure correspond à une évolution continue de l'état d'équilibre avec le chargement (supposé continu) ;
- la propagation instable d'une fissure correspond à une bifurcation liée à la perte de stabilité de l'état d'équilibre actuel. Pour une infime variation du déplacement imposé, la structure passe spontanément et de manière discontinue de cet état d'équilibre à un autre. Ce passage conduit à une discontinuité du champ de déplacement et des variables internes. Cette discontinuité entraîne la disparition d'une partie de l'énergie élastique emmagasinée. Cette énergie devrait être convertie en énergie cinétique qui n'est pas prise en compte dans une description quasi-statique. Dans le contexte des zones cohésives, ce changement brutal d'état d'équilibre a été appelé **saut de solutions** ([Monerie 00, Monerie 01]).

Difficultés de convergence en temps L'algorithme utilisé dans les codes éléments finis est généralement un dérivé de l'algorithme de NEWTON-RAPHSON, décrit au paragraphe B.3. Cet algorithme n'est réellement efficace que si la solution à l'incrément suivant est proche de la solution au temps actuel. Lors d'un saut de solutions, les états d'équilibre avant et après le saut sont passablement éloignés, conduisant à des difficultés de convergence très importantes. Ces difficultés peuvent conduire à la divergence de l'algorithme. Une modélisation dynamique de l'évolution de la structure fait disparaître les difficultés de convergence (voir [Feyel 04]). Une autre solution est d'introduire une dissipation d'origine visqueuse, régularisation efficace mais qui ne permet pas de contrôler l'énergie dissipée ([Monerie 01]).

Nous décrirons aux paragraphes 5.1, 5.2.2.3 et 5.2.3.3 différents exemples de convergence difficile associée à une évolution rapide de l'endommagement.

Méthodes de suivi de chargement Afin de conserver une approche quasi-statique et une réponse *continue* de la structure, des méthodes particulières de pilotage du chargement ont été développées. Ces méthodes introduisent une inconnue et une équation supplémentaires. Ces méthodes permettent en particulier de calculer la réponse d'une structure qui présenterait des instabilités, d'origines aussi bien géométrique (flambement) que matériau telle que celle décrite plus haut (voir [Lorentz 01, Besson 01]).

Snap-back Dans le cas d'une propagation instable, ces méthodes de pilotage conduisent à des réponses force-déplacement présentant des rebroussements appelés **snap-back**. Un exemple est traité en annexe D paragraphe D.2

Conclusions sur l'approche locale

L'approche locale de la rupture a débuté grâce à la mécanique de l'endommagement local. Nous en avons décrit les différentes difficultés physiques, mathématiques et numériques. Les solutions qui y ont été apportées sont multiples. Toutes introduisent une longueur caractéristique donnant une épaisseur à la bande de localisation. La manière la plus simple est d'utiliser la discrétisation éléments finis pour introduire cette longueur. Toutes les dépendances à l'orientation du maillage subsistent cependant. Une grande prudence est donc nécessaire pour analyser les résultats obtenus. Par ailleurs, la description de la propagation instable de fissures en

quasi-statique conduit à des évolutions discontinues des états d'équilibre. De telles évolutions conduisent à des difficultés de convergence importante.

Bilan du chapitre

Cet chapitre a décrit différents aspects physiques, mathématiques et numériques associés à la description quasi-statique de la fissuration de matériaux fragiles.

Deux approches ont été décrites :

- l'approche globale, basée sur la notion de taux de restitution de l'énergie critique ;
- l'approche locale, basée sur la dégradation locale des propriétés de la matière.

L'utilisation de l'approche globale a été décrite de manière synthétique. Elle fait apparaître que la fissuration des matériaux fragiles fait intervenir l'ensemble de la structure. La propagation d'une fissure est un compromis entre l'énergie dissipée et l'énergie restituée par la structure du fait de cette propagation. Son utilisation dans un contexte combustible semble délicat.

L'approche locale semble plus adaptée. Cette approche regroupe un ensemble de théories. La mécanique de l'endommagement local est la plus ancienne et la plus utilisée. Elle est souvent la seule disponible dans les codes éléments finis. Nous l'utiliserons dans la suite de la thèse. Son utilisation conduit à des difficultés connues :

- l'absence de solutions régulières, ce qui conduit à l'apparition de bandes de localisation et à l'absence de dissipation d'énergie pour les modèles standard ;
- des difficultés de convergence importante lors d'une propagation instable. Ces difficultés sont liées au passage brutal d'un état d'équilibre de la structure à un autre.

Nous nous proposons dans le chapitre suivant de décrire les différentes modélisations du crayon combustible que nous avons utilisés au cours de la thèse.

DEUXIÈME PARTIE

OUTILS DE MODÉLISATION, MISE EN ŒUVRE

CHAPITRE 3

MODÉLISATIONS DU CRAYON COMBUSTIBLE

Objet du chapitre :

Ce chapitre est dédié à la description des différentes modélisations du crayon combustible considérées dans ce mémoire. Le premier paragraphe décrit les apports respectifs de chacune des modélisations. Après une brève description des hypothèses relatives au calcul thermique, les paragraphes suivants décrivent les hypothèses mécaniques sur lesquelles reposent respectivement les modélisations $1D$, $2D$ et $3D$.

Sommaire du chapitre 3

3.1	Intérêt comparé des différentes modélisations du crayon combustible	78
3.2	Modélisation $1D$ du crayon combustible	78
3.2.1	Modélisation mécanique d'une unique tranche axiale	78
3.3	Modélisation $2D$ du crayon combustible	80
3.4	Modélisation $3D$ du crayon combustible	81

3.1 Intérêt comparé des différentes modélisations du crayon combustible

La complexité du comportement des crayons combustible a conduit aux développements de nombreux codes de calcul spécifiques. Ces différents codes se différencient entre autres par les hypothèses de modélisation géométrique du crayon. Ces hypothèses peuvent être reliées à la dimension de l'espace utilisée pour réaliser le calcul. Nous nous intéresserons ici aux apports des modélisations $1D$, $2D$ et $3D$ du crayon combustible.

Description de la modélisation $1D$ Le crayon combustible est un empilement de pastilles entourées d'une gaine cylindrique. La modélisation $1D$ simplifie le crayon en le divisant en tranches perpendiculairement à l'axe du crayon, chaque tranche pouvant contenir une ou plusieurs pastilles. Dans chaque tranche, l'empilement des pastilles est traité comme un cylindre plein et la gaine comme un tube de diamètre uniforme le long de la tranche considérée.

Cette modélisation permet de décrire le comportement *moyen* d'une tranche axiale. Elle permet notamment d'avoir accès à une déformation radiale moyenne de la gaine. Les temps de calcul que requiert la modélisation $1D$ sont faibles, ce qui permet de traiter l'ensemble du cœur d'un réacteur.

Description de la modélisation $2D$ La modélisation $2D$ décrit le comportement du crayon sur la hauteur d'une pastille. Par rapport à la modélisation $1D$, elle donne accès aux déformations géométriques du crayon le long de l'axe de symétrie, en particulier au niveau du plan médian-pastille, où se forme le pli secondaire sur la gaine, et des plans inter-pastilles, où se forment les plis primaires sur la gaine. Cette modélisation permet également de décrire les évolutions géométriques de l'évidement (paragraphe 1.1.2.2).

Description de la modélisation $3D$ L'hypothèse d'invariance par rotation faite dans les modélisations $1D$ et $2D$ est en réalité incompatible avec la fragmentation de la pastille. Ces modélisations ne permettent pas de reproduire les variations orthoradiales des sollicitations mécaniques que la modélisation $3D$, qui représente un fragment de pastille, peut décrire. Elle permet, en particulier, de prédire l'intensification des contraintes due à l'ouverture des fissures radiales, phénomène que nous avons décrit au paragraphe 1.2.3 (figure 1.8). Les temps de calcul nécessaires font de cette modélisation essentiellement un outil de recherche.

3.2 Modélisation $1D$ du crayon combustible

Nous rappelons ici les principales hypothèses mécaniques liées à la modélisation $1D$ du crayon combustible. Cette modélisation est relativement classique. Nous renvoyons à [Garcia 01, Garcia 02] pour une description plus précise de cette modélisation.

Le crayon combustible est découpé en **tranches axiales**. Ce découpage est illustré sur la figure 3.1. D'un point de vue mécanique, ces tranches axiales sont couplées par :

- le calcul de la pression interne dans le crayon ;
- le bilan axial des forces.

Ce couplage entre les différentes tranches axiales permet de représenter toute la hauteur du crayon. Il est d'usage de parler de modélisation $1, 5D$ du crayon pour marquer cette possibilité de décrire les phénomènes intervenant à différentes cotes axiales.

Nous allons maintenant considérer comment sont traitées chacune des tranches axiales.

3.2.1 Modélisation mécanique d'une unique tranche axiale

La modélisation mono-dimensionnelle du crayon combustible se base sur les hypothèses mécaniques suivantes ([Garcia 01, Garcia 02]) :

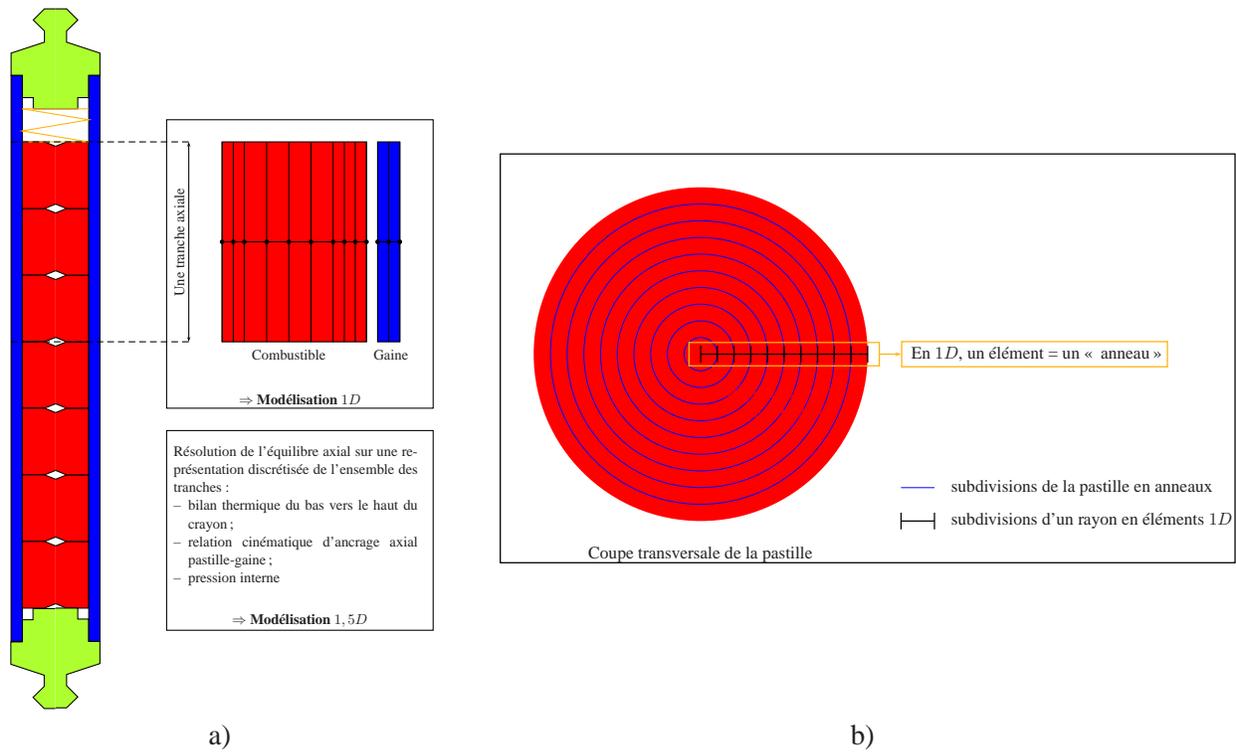


FIG. 3.1 – Modélisation 1D du crayon combustible. a) Découpage du crayon en tranches axiales. b) Équivalence entre un élément fini 1D et une structure.

- le crayon possède une *symétrie de révolution*. Ceci conduit à utiliser des coordonnées cylindriques dont l'axe se confond avec l'axe de révolution du crayon ;
- le crayon est modélisé dans la direction axiale en *déformations planes généralisées* sans rotation : si nous appelons plan horizontal un plan perpendiculaire à l'axe de révolution, cette hypothèse signifie que les points initialement dans un même plan horizontal restent au cours du temps dans un plan horizontal.

Champs de déplacements admissibles Ces hypothèses cinématiques imposent des restrictions fortes sur les champs de déplacement admissibles. La symétrie de révolution impose que le champ de déplacement u_θ et les déformations de cisaillement $\epsilon_{r\theta}^{tot}$ et $\epsilon_{\theta z}^{tot}$ soient nuls. Les déformations planes généralisées imposent que les déplacements axiaux sont uniformes dans un plan horizontal. L'absence de rotation du plan entraîne que le terme ϵ_{rz}^{tot} est nul.

Contact entre la pastille et la gaine Le contact entre la pastille et la gaine est traité par une condition de non interpénétration qui implique que le rayon externe de la pastille est toujours inférieur au rayon interne de la gaine.

Solidarisation Avant contact, les déformations axiales ϵ_z^{to} de la gaine et du combustible sont *indépendantes*. Lors du contact entre la gaine et le combustible, une forte interaction de contact est supposée avoir lieu. Pour le modéliser la condition supplémentaire, dite de *solidarisation*, est imposée :

$$(3.1) \quad \Delta \epsilon_z^{to} |_{pastille} = \Delta \epsilon_z^{to} |_{gaine}$$

où $\Delta \epsilon_z^{to} |_{pastille}$ désigne la différence entre la valeur actuelle de la déformation axiale ϵ_z^{to} dans le combustible et sa valeur à l'instant du contact. Nous retrouverons une hypothèse similaire dans les modélisations 2D et 3D où nous ferons l'hypothèse de la *solidarisation des plans médian*.

Représentation éléments finis L'ensemble de ces hypothèses conduisent à représenter un crayon combustible par deux segments de droites représentant respectivement le combustible et la gaine.

3.3 Modélisation 2D du crayon combustible

La modélisation 2D du crayon combustible vise à décrire le comportement d'une pastille combustible prise dans l'empilement des pastilles et de la partie de gaine en vis à vis. Ces éléments sont supposés posséder une symétrie de révolution autour de l'axe du crayon combustible qui conduit à utiliser un système de coordonnées cylindriques (r, θ, z) où la direction z s'identifie avec l'axe de révolution.

Les conditions utilisées permettent de ne simuler qu'une *moitié de pastille*. Ces conditions aux limites sont décrites en annexe A.

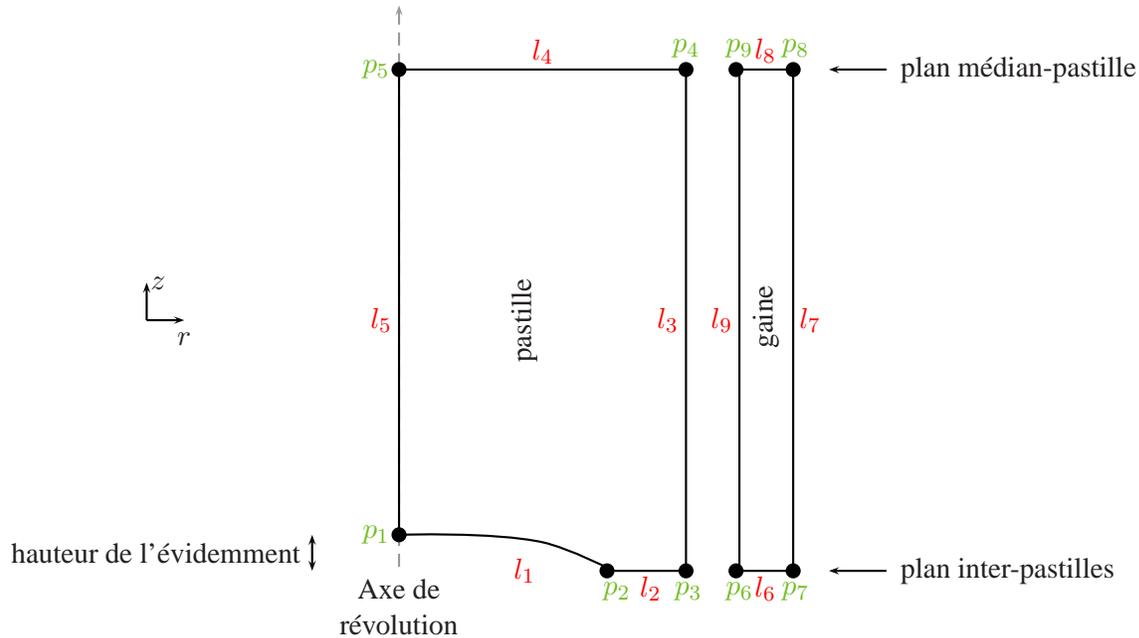


FIG. 3.2 – Domaine représentant le crayon combustible dans une modélisation 2D. Les points sont indiqués en noir, les lignes en rouge.

Représentation du crayon en 2D La modélisation 2D conduit à décrire la partie du crayon combustible considérée par le domaine représenté sur la figure 3.2. Cette figure indique certains points et droites remarquables qui serviront à définir les conditions aux limites ainsi qu'à l'examen des résultats.

La pastille combustible étant prise dans son empilement et étant divisée en deux par symétrie, deux plans particuliers apparaissent, le plan médian-pastille et le plan inter-pastilles (figure 3.2).

Par hypothèse, le plan inter-pastilles est supposé rester fixe au cours du temps. Ce plan est le lieu de contact entre la pastille considérée et sa voisine. Ces deux pastilles ne peuvent s'interpénétrer. La gaine étant continue au niveau de ce plan, son déplacement axial y est nul.

Le plan médian-pastille décrit la frontière entre la moitié de pastille décrite et son symétrique. Afin de décrire la dilatation de la pastille, ce plan se déplace axialement de manière uniforme. Ce déplacement uniforme est appelé *mouvement d'ensemble*. Un mouvement d'ensemble similaire est possible pour l'ensemble des points de la gaine situés dans le plan médian-pastille. Ces mouvements d'ensemble sont les pendants en 2D de la condition de déformations planes généralisées sans rotation adoptée dans une modélisation 1D décrite au paragraphe 3.2.

Ces deux mouvements d'ensemble sont indépendants avant que le contact pastille-gaine n'ait lieu. Après contact, ces mouvements sont liés par une condition de *solidarisation des plans médian* qui impose que la différence des déplacements axiaux de la gaine et de la pastille reste constante et égale à sa valeur au moment du contact. Par analogie avec l'équation (3.1) utilisée en $1D$, cette condition s'écrit :

$$(3.2) \quad \Delta U_z|_{pastille} = \Delta U_z|_{gaine}$$

où $\Delta U_z|_{pastille}$ désigne la différence entre la valeur actuelle du déplacement axial U_z des points du combustible au plan médian-pastille et sa valeur à l'instant du contact.

Le contact entre la pastille et la gaine est pris en compte par une condition de non-interpénétration. La modélisation actuelle ne prend en compte ni frottement ni ancrage qui seront pris en compte dans les évolutions ultérieures.

L'annexe A décrit les conditions aux limites qui traduisent ces hypothèses lors de la définition du problème éléments finis.

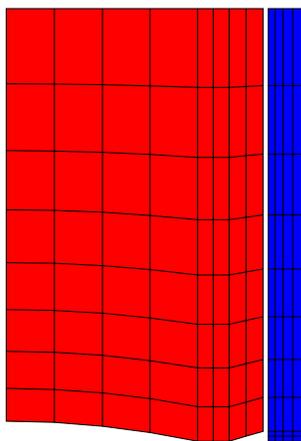


FIG. 3.3 – Maillage utilisé pour la modélisation $2D$ du crayon combustible.

Le maillage utilisé pour décrire le crayon combustible est représenté sur la figure 3.3.

3.4 Modélisation $3D$ du crayon combustible

Nous décrivons ici les hypothèses de modélisation mécanique utilisées dans une modélisation $3D$ du crayon combustible. Ces hypothèses sont équivalentes à celles employées en $2D$ (paragraphe 3.3). Ainsi, nous ne décrivons que les différences existant entre ces deux modélisations.

Géométrie utilisée Une modélisation $3D$ du fragment combustible décrit un fragment de pastille combustible. Par raison de symétrie, seule une moitié de fragment est considérée. Cette géométrie est décrite sur la figure 3.4.

Par rapport à une modélisation $2D$, une modélisation $3D$ doit décrire le comportement orthoradial du fragment et gérer son éventuel mouvement de corps rigide radial.

Comportement orthoradial de la pastille Pour cela, deux plans particuliers sont identifiés (figure 3.4 a)) : le plan de symétrie au centre du fragment et le plan de symétrie entre le fragment considéré et le fragment adjacent. La symétrie au centre du fragment impose que la pastille ne peut avoir de mouvement orthoradial. Au niveau du plan séparant le fragment considéré et le fragment adjacent, une condition de non-interpénétration de ces fragments est imposée.

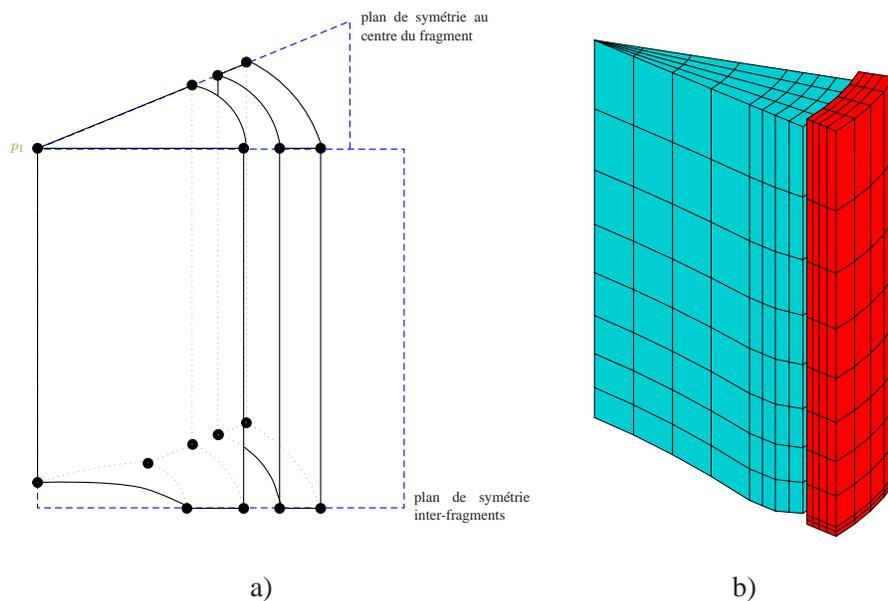


FIG. 3.4 – a) Domaine représentant le crayon combustible dans une modélisation 3D. Les points sont nommés en noir, les lignes sont nommées en rouge. b) Maillage utilisé

Mouvement de corps rigide axial de la pastille Le fragment de pastille *a priori* la liberté de se déplacer en bloc radialement. Ce mouvement de corps rigide ne peut être décrit dans une approche quasi-statique. Pour contourner cette difficulté, le point p_1 de la figure 3.4 est lié à l'axe de symétrie par une raideur radiale.

Traitement du frottement Le frottement entre le fragment et la gaine est modélisé par un modèle de COULOMB. Le coefficient de frottement est choisi égal à 0,47 ([Brochard 01]). L'influence de ce coefficient sur le comportement du crayon combustible a été étudiée par B. Michel et coll. ([Michel 05]).

Maillage utilisé Le maillage utilisé pour décrire le fragment est donné sur la figure 3.4 b).

Bilan du chapitre

Ce chapitre a décrit les différentes modélisations du crayon combustible utilisées dans ce mémoire. Pour chacune de ces modélisations, le chapitre suivant présente les différents modèles qui ont été implantés au cours de la thèse pour décrire le comportement du combustible.

CHAPITRE 4

MODÈLES DE COMPORTEMENT MÉCANIQUE DU COMBUSTIBLE

Objet du chapitre :

Ce chapitre décrit les différents modèles de comportement du combustible utilisés dans ce mémoire.

Un intérêt particulier est apporté au modèle MEFISTO que nous utiliserons dans le cas des modélisations $1D$ et $2D$ du crayon combustible.

Nous décrivons également le modèle de plasticité utilisé en $3D$ pour décrire les effets de la fissuration du combustible. Un modèle d'endommagement destiné à remplacer ce modèle de plasticité est ensuite présenté.

Le chapitre se termine par la description des lois de comportements viscoplastiques du combustible et du modèle de délocalisation/relocalisation utilisé en $1D$.

Sommaire du chapitre 4

4.1	Le modèle d'endommagement MEFISTO	84
4.1.1	Présentation du modèle d'endommagement MEFISTO en $1D$	84
4.1.2	Extension du modèle d'endommagement MEFISTO en $2D$	93
4.2	Modèles de comportement pour la modélisation $3D$	94
4.2.1	Le modèle de seuillage des contraintes par écoulement plastique	94
4.2.2	Extension du modèle de LORENTZ	95
4.3	Lois viscoplastiques d'OTTER et LPCC	98
4.3.1	Loi viscoplastique d'OTTER	98
4.3.2	Loi viscoplastique du LPCC	99
4.4	Représentation de la mise en diabolos des fragments en $1D$	99

4.1 Le modèle d'endommagement MEFISTO

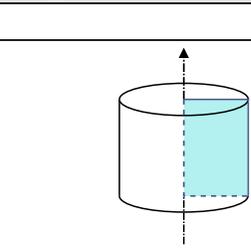
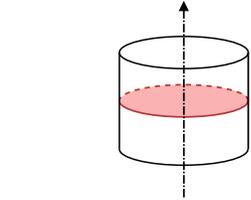
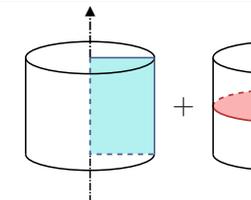
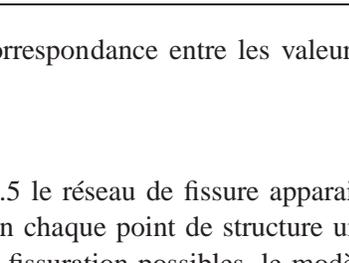
Le modèle d'endommagement MEFISTO est issu de la partie thermomécanique du code mono-dimensionnel METEOR que nous avons présenté au paragraphe 1.3.3.1. Ce code, et par voie de conséquence ce modèle, ont été validés par la simulation de nombreux crayons expérimentaux ([Garcia 02]). Nous avons repris ce modèle dans ce mémoire et notre travail a porté sur trois points :

- offrir une compréhension de ce modèle, initialement formulé de manière *ad hoc*, en particulier pour son modèle de guérison, en l'inscrivant dans le cadre théorique des modèles endommageables formulé au chapitre 2 ;
- l'adapter à une modélisation 2D du crayon combustible ;
- en proposer une implantation efficace pour son intégration dans les codes combustibles ALCYONE1D et ALCYONE2D.

Ce dernier point n'est pas développé dans la suite de ce mémoire. L'algorithme numérique utilisé pour intégrer le modèle est cependant décrit en annexe C au paragraphe C.2.

4.1.1 Présentation du modèle d'endommagement MEFISTO en 1D

Nous présentons ici le modèle d'endommagement MEFISTO. La guérison ou la refermeture des fissures sera abordée plus loin au paragraphe 4.1.1.4.

Variables d'endommagement	Etat de fissuration	Représentation schématique
$d_\theta = 0$ et $d_z = 0$	Non fissuré	
$d_\theta = 1$ et $d_z = 0$	Fissuré en θ , fissure radiale	
$d_\theta = 0$ et $d_z = 1$	Fissuré en z , fissure axiale	
$d_\theta = 1$ et $d_z = 1$	Fissuré en θ et z , fissure radiale et axiale	

TAB. 4.1 – États de fissuration considérés par le modèle MEFISTO. Correspondance entre les valeurs des variables d'endommagement et l'état de fissuration du matériau.

États de fissuration pris en compte Nous avons décrit sur la figure 1.5 le réseau de fissure apparaissant dans la pastille au cours de l'irradiation. Le modèle MEFISTO assigne en chaque point de structure un état de fissuration pour chaque type de fissure. Parmi l'ensemble des états de fissuration possibles, le modèle en considère quatre, décrits dans le tableau 4.1 :

- l'état non fissuré,
- l'état fissuré en θ (présence d'une fissure *radiale*) ;
- l'état fissuré en z (présence d'une fissure *axiale*) ;

– l'état fissuré en θ et en z ;

L'état de fissuration circonférentielle n'est pas pris en compte par le modèle. Il est en effet généralement admis que ces fissures apparaissent lors du retour à puissance nulle (retour à froid), ce que confirme les modélisations 1D et 2D, et qu'elles n'ont pas d'impact sur le comportement du crayon combustible.

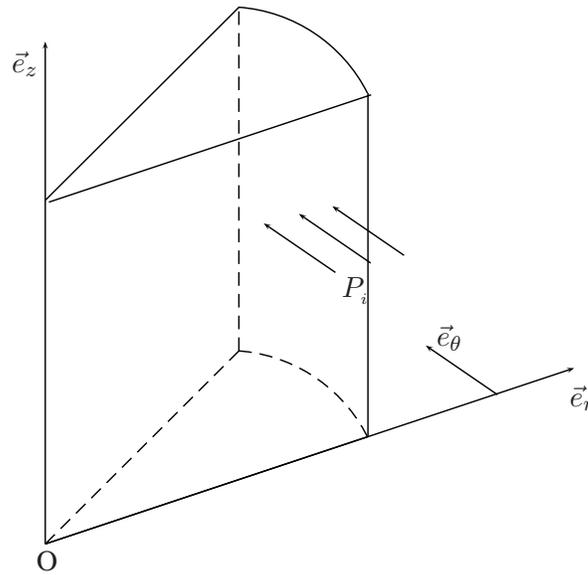


FIG. 4.1 – Vue idéalisée d'une pastille combustible fragmentée radialement.

Hypothèses sur les effets de la fissuration Considérons la figure 4.1 représentant une vue idéalisée d'un fragment de la pastille combustible formé par deux fissures radiales. Nous savons que sur les bords du fragment la contrainte orthoradiale σ_θ est égale à l'opposée de la pression interne P_i . L'hypothèse faite par le modèle de fissuration MEFISTO est que la dépendance vis à vis de θ (dans le fragment) de la contrainte orthoradiale est faible. Nous posons ainsi :

$$(4.1) \quad \sigma_\theta(\theta, r) \approx \sigma_\theta(r) = -P_i \quad \text{si le point d'abscisse } r \text{ est « fissuré » radialement}$$

De la même manière le modèle suppose que si une fissure axiale apparaît, l'invariance par translation le long de l'axe Oz n'est pas perdue. La contrainte axiale est alors telle que :

$$(4.2) \quad \sigma_z(z, r) \approx \sigma_z(r) = -P_i \quad \text{si le point d'abscisse } r \text{ est « fissuré » axialement}$$

Ces hypothèses étant faites, il reste à préciser de quelle manière le tenseur élastique est affecté par la présence de fissures.

4.1.1.1 Effets des fissures sur le tenseur d'élasticité

Une hypothèse forte du modèle MEFISTO est que les hypothèses de déplacements plans généralisés sans rotation et d'axisymétrie restent valides en présence de fissures. Cette hypothèse permet de trouver un tenseur d'élasticité effectif dans chacun des états de fissuration considérés.

Représentation des tenseurs en 1D Les hypothèses mécaniques utilisées en 1D imposent que les déformations totales $\underline{\epsilon}^{to}$ soient diagonales dans le repère associé aux coordonnées cylindriques. Il en va de même pour les contraintes $\underline{\sigma}$. Avec ces hypothèses, les tenseurs considérés dans la suite peuvent être représentés sous la forme de vecteurs à trois dimensions. Ainsi les déformations totales $\underline{\epsilon}^{to}$ et les contraintes $\underline{\sigma}$, peuvent s'écrire

sous la forme suivante :

$$\underline{\epsilon}^{to} = \begin{pmatrix} \epsilon_r^{to} \\ \epsilon_\theta^{to} \\ \epsilon_z^{to} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{du_r}{dr} \\ u_r \\ r \\ C \end{pmatrix} \quad \underline{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_r \\ \sigma_\theta \\ \sigma_z \end{pmatrix}$$

où C désigne une quantité uniforme dans un plan horizontal, issue de l'hypothèse de déformations planes généralisées. Cette constante est déterminée par l'équilibre axial des forces. Dans cette représentation vectorielle, le tenseur d'élasticité est représenté par une matrice carrée à 9 composantes.

Tenseur d'élasticité dans un état non fissuré La loi de HOOKE relie le tenseur des contraintes $\underline{\sigma}$ au tenseur des déformations élastiques $\underline{\epsilon}^{el}$, défini d'après l'équation de partition des déformations (2.1) par :

$$\underline{\epsilon}^{el} = \underline{\epsilon}^{to} - \underline{\epsilon}^{vis} - \underline{\epsilon}^{th}$$

où $\underline{\epsilon}^{th}$ est la dilatation thermique du combustible.

Elle s'écrit pour un matériau isotrope (paragraphe 2.1.2.1, équations (2.19) et (2.22)) :

$$(4.3) \quad \begin{pmatrix} \sigma_r \\ \sigma_\theta \\ \sigma_z \end{pmatrix} = \frac{E}{(1+\nu)(1-2\nu)} \begin{pmatrix} 1-\nu & \nu & \nu \\ \nu & 1-\nu & \nu \\ \nu & \nu & 1-\nu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon_r^{el} \\ \epsilon_\theta^{el} \\ \epsilon_z^{el} \end{pmatrix}$$

Tenseur d'élasticité dans un état fissuré en θ Considérons l'état fissuré en θ . La contrainte σ_θ étant égale à l'opposée de la pression interne, $-P_i$, l'inversion de l'équation (4.3) permet d'écrire σ_r et σ_z comme une fonction des déformations élastiques ϵ_r^{el} et ϵ_z^{el} :

$$\begin{cases} \sigma_r = \frac{E}{(1+\nu)(1-\nu)} (\epsilon_r^{el} + \nu\epsilon_z^{el}) - \frac{\nu}{1-\nu} P_i \\ \sigma_z = \frac{E}{(1+\nu)(1-\nu)} (\epsilon_z^{el} + \nu\epsilon_r^{el}) - \frac{\nu}{1-\nu} P_i \end{cases}$$

Ces deux équations permettent d'écrire la loi d'état (4.3) à l'aide d'un tenseur d'élasticité effectif et un terme supplémentaire traduisant l'effet de la pression interne :

$$(4.4) \quad \begin{pmatrix} \sigma_r \\ \sigma_\theta \\ \sigma_z \end{pmatrix} = \underbrace{\frac{E}{(1+\nu)(1-\nu)} \begin{pmatrix} 1 & 0 & \nu \\ 0 & 0 & 0 \\ \nu & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon_r^{el} \\ \epsilon_\theta^{el} \\ \epsilon_z^{el} \end{pmatrix}}_{\text{HOOKE modifiée}} - \underbrace{\frac{\nu}{1-\nu} P_i \begin{pmatrix} 1 \\ 1-\nu \\ \nu \\ 1 \end{pmatrix}}_{\text{terme supplémentaire}}$$

Tenseur d'élasticité dans un état fissuré en z La présence d'une fissure en z se déduit du cas précédent en intervertissant les directions θ et z :

$$(4.5) \quad \begin{pmatrix} \sigma_r \\ \sigma_\theta \\ \sigma_z \end{pmatrix} = \frac{E}{(1+\nu)(1-\nu)} \begin{pmatrix} 1 & \nu & 0 \\ \nu & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon_r^{el} \\ \epsilon_\theta^{el} \\ \epsilon_z^{el} \end{pmatrix} - \frac{\nu}{1-\nu} P_i \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1-\nu \\ \nu \end{pmatrix}$$

Tenseur d'élasticité dans un état fissuré en θ et en z Enfin, dans un état où il y a présence d'une fissure en θ et en z , nous imposons les valeurs de σ_θ et σ_z , ce qui conduit toujours à une loi de HOOKE modifiée, donnée par :

$$(4.6) \quad \begin{pmatrix} \sigma_r \\ \sigma_\theta \\ \sigma_z \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon_r^{el} \\ \epsilon_\theta^{el} \\ \epsilon_z^{el} \end{pmatrix} - P_i \begin{pmatrix} 2\nu \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Expression de la loi de HOOKE dans les différents états de fissuration Quel que soit l'état de fissuration, les équations (4.3), (4.4), (4.5) et (4.6) montrent que le modèle MEFISTO conduit à écrire la loi de HOOKE sous la forme générale suivante :

$$(4.7) \quad \underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{\mathbf{D}}}_{\alpha} : \underline{\underline{\epsilon}}^{el} + \underline{\underline{\sigma}}_{\alpha}^{P.I.}$$

où α est un indice indiquant l'état de fissuration. Le vecteur supplémentaire $\underline{\underline{\sigma}}_{\alpha}^{P.I.}$ est présent pour prendre en compte l'effet de la pression du gaz présent dans le crayon. Il est analogue à la pression exercée par un fluide contenu dans milieu poreux ([Coussy 91]).

4.1.1.2 Écriture du modèle dans un cadre thermodynamique

Nous nous proposons maintenant d'écrire le modèle MEFISTO sous une forme compatible avec les principes thermodynamiques énoncés au paragraphe 2.1.

Introduction de variables d'endommagement Nous introduisons *deux variables d'endommagement* suivant les directions θ et z : ces variables sont notée d_{θ} et d_z . Le tableau 4.1 résume la correspondance existant entre les valeurs des variables d'endommagement et l'état de fissuration du matériau.

La dépendance de la matrice d'élasticité aux variables d'endommagement est choisie de la manière la plus simple possible : une forme bilinéaire des variables d'endommagement d_{θ} et d_z . La matrice d'élasticité est alors donnée par :

$$(4.8) \quad \underline{\underline{\mathbf{D}}}(d_{\theta}, d_z) = \underline{\underline{\mathbf{D}}}(1 - d_{\theta})(1 - d_z) + \underline{\underline{\mathbf{D}}}_{\theta} d_{\theta}(1 - d_z) + \underline{\underline{\mathbf{D}}}_z (1 - d_{\theta})d_z + \underline{\underline{\mathbf{D}}}_{\theta z} d_{\theta}d_z$$

où les expressions des tenseurs d'élasticité $\underline{\underline{\mathbf{D}}}$, $\underline{\underline{\mathbf{D}}}_{\theta}$, $\underline{\underline{\mathbf{D}}}_z$ et $\underline{\underline{\mathbf{D}}}_{\theta z}$ sont données respectivement par les équations (4.3), (4.4), (4.5) et (4.6).

Le vecteur des contraintes supplémentaires est donc donné par :

$$(4.9) \quad \underline{\underline{\sigma}}^{P.I.}(d_{\theta}, d_z) = \underline{\underline{\sigma}}_{\theta}^{P.I.} d_{\theta}(1 - d_z) + \underline{\underline{\sigma}}_z^{P.I.} d_z(1 - d_{\theta}) + \underline{\underline{\sigma}}_{\theta z}^{P.I.} d_{\theta}d_z$$

où les expressions des tenseurs $\underline{\underline{\sigma}}_{\theta}^{P.I.}$, $\underline{\underline{\sigma}}_z^{P.I.}$ et $\underline{\underline{\sigma}}_{\theta z}^{P.I.}$ sont données respectivement par les équations (4.3), (4.4), (4.5) et (4.6).

Nous montrerons au paragraphe suivant qu'une définition légèrement différente du vecteur des contraintes supplémentaires est nécessaire pour assurer la continuité des contraintes en guérison.

Compatibilité du modèle avec les principes de la thermodynamique En l'absence de *pression interne* P_i , la loi de comportement dérive de l'énergie libre suivante (voir équation (2.15)) :

$$(4.10) \quad \rho \Psi = \frac{1}{2} (\underline{\underline{\epsilon}}^{to} - \underline{\underline{\epsilon}}^{vis}) : \underline{\underline{\mathbf{D}}}(d_{\theta}, d_z) : (\underline{\underline{\epsilon}}^{to} - \underline{\underline{\epsilon}}^{vis})$$

D'après l'équation (2.7), l'inégalité de CLAUSIUS-DUHEM s'écrit :

$$(4.11) \quad \sigma : \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^{vis} + Y_{d_{\theta}} \dot{d}_{\theta} + Y_{d_z} \dot{d}_z \geq 0$$

où $Y_{d_{\theta}}$ et Y_{d_z} sont l'opposée des forces thermodynamiques associées aux variables d'endommagement d_{θ} et d_z . $Y_{d_{\theta}}$ et Y_{d_z} sont égaux à :

$$(4.12) \quad \begin{cases} Y_{d_{\theta}} = -\rho \frac{\partial \Psi}{\partial d_{\theta}} = -\frac{1}{2} (\underline{\underline{\epsilon}}^{to} - \underline{\underline{\epsilon}}^{vis}) : \frac{\partial \underline{\underline{\mathbf{D}}}}{\partial d_{\theta}} : (\underline{\underline{\epsilon}}^{to} - \underline{\underline{\epsilon}}^{vis}) \\ Y_{d_z} = -\rho \frac{\partial \Psi}{\partial d_z} = -\frac{1}{2} (\underline{\underline{\epsilon}}^{to} - \underline{\underline{\epsilon}}^{vis}) : \frac{\partial \underline{\underline{\mathbf{D}}}}{\partial d_z} : (\underline{\underline{\epsilon}}^{to} - \underline{\underline{\epsilon}}^{vis}) \end{cases}$$

Nous supposons que l'endommagement et la viscoplasticité sont non *couplés*. En n'envisageant pas de guérison des fissures, \dot{d}_θ et \dot{d}_z sont positifs. Afin de satisfaire l'inégalité de CLAUSIUS-DUHEM (équation (2.7)), il suffit d'imposer indépendamment les inégalités suivantes :

$$(4.13) \quad \sigma : \underline{\dot{\epsilon}}^{vis} \geq 0 \quad Y_{d_\theta} \geq 0 \quad Y_{d_z} \geq 0$$

Les deux dernières inégalités reviennent à imposer que les tenseurs $\frac{\partial \underline{\underline{D}}}{\partial d_\theta}$ et $\frac{\partial \underline{\underline{D}}}{\partial d_z}$ soient négatifs, ou, de manière équivalente, que leurs valeurs propres soient négatives.

La figure 4.2 montre l'évolution de deux des trois valeurs propres de $\frac{1}{E} \frac{\partial \underline{\underline{D}}}{\partial d_z}$ (qui ne dépendent que de d_θ d'après l'équation (4.8)) pour d_θ variant dans l'intervalle $[0, 1]$, la troisième valeur propre étant toujours nulle. Ces deux valeurs propres sont effectivement négatives. Le même résultat est naturellement valable pour $\frac{1}{E} \frac{\partial \underline{\underline{D}}}{\partial d_\theta}$ par symétrie entre d_θ et d_z .

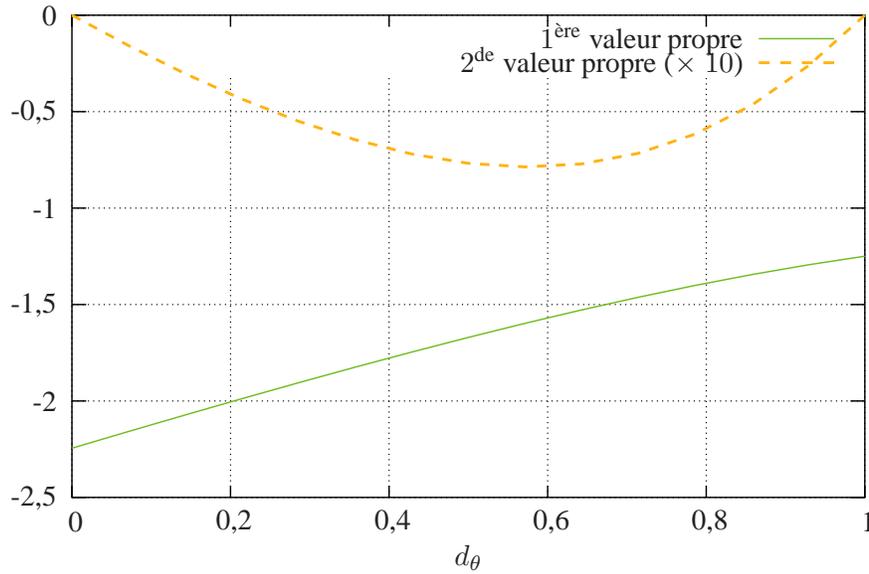


FIG. 4.2 – Evolution des valeurs propres de $\frac{1}{E} \frac{\partial \underline{\underline{D}}}{\partial d_z}$ en fonction de d_θ . L'une des trois valeurs propres est nulle pour toute valeur de d_θ .

Le modèle d'endommagement MEFISTO est donc compatible avec le second principe de la thermodynamique pour toute évolution *croissante* des variables d'endommagement.

4.1.1.3 Évolution de l'endommagement

Nous devons maintenant préciser comment évolue l'endommagement dans les différentes directions. Pour des raisons techniques décrites plus loin, cette évolution est différente suivant les implantations du modèle dans le code **CAST3M** ou **ZEBULON**.

Évolution de l'endommagement sous CAST3M Le modèle MEFISTO utilisé dans METEOR propose une évolution *discontinue* de l'endommagement dès que la contrainte principale dépasse la valeur de la contrainte à rupture σ_{max} . Cette évolution a été conservée dans **CAST3M**. Cette évolution s'écrit :

$$(4.14) \quad \begin{cases} \text{si } \sigma_\theta > \sigma_{max}, d_\theta \text{ passe à } 1 \text{ et } \sigma_\theta \text{ passe à } -P_i \\ \text{si } \sigma_z > \sigma_{max}, d_z \text{ passe à } 1 \text{ et } \sigma_z \text{ passe à } -P_i \end{cases}$$

L'implantation du modèle MEFISTO couplé aux lois viscoplastiques du combustible est décrite en annexe C au paragraphe (C.2). Cette implantation est utilisée au sein respectivement des applications ALCYONE1D et ALCYONE2D du projet PLEIADES.

Évolution de l'endommagement sous ZEBULON L'implantation du modèle MEFISTO dans le code ZEBULON nous a obligé à modifier la loi d'évolution de l'endommagement. En effet, l'outil proposé par ZEBULON, le Zebfront, décrit au paragraphe 2.1.4.3 ne permet pas d'évolutions discontinues de la loi de comportement, telle que l'évolution proposé par le critère 4.14. Alors que ce critère était formulé en contrainte, nous avons dû utiliser un critère en *déformation* pour paramétrer l'évolution de l'endommagement. Dans la direction θ , en chargement monotone croissant, l'évolution de l'endommagement prend la forme :

$$(4.15) \quad d_{\theta} = \frac{1}{2} \left(1 + \text{th} \left(\frac{\epsilon_{\theta}^{el} - \epsilon_R}{\Delta\epsilon} \right) \right)$$

Le paramètre ϵ_R doit être relié à la contrainte à rupture σ_{max} . Nous avons fait le choix d'identifier ce paramètre sur une courbe de traction uniaxiale. Ceci nous a conduit à poser :

$$(4.16) \quad \sigma_{max} = E\epsilon_R$$

où E est le module d'YOUNG du dioxyde d'uranium. Le paramètre $\Delta\epsilon$ est un paramètre numérique rendant la pente adoucissante plus ou moins forte. Afin de rendre l'évolution irréversible et pouvoir considérer des chargements non nécessairement croissants, ϵ_{θ}^{el} est remplacé par sa valeur maximale au cours du temps dans l'expression (4.15). L'évolution de l'endommagement axial suit une loi similaire. L'évolution des contraintes est donc *continue*. Cette implantation a servi aux calculs de ce chapitre et a été utilisée pour étudier les réponses des modèles sur des cas d'études simples présentés aux paragraphes 5.1 et 5.2. Notons deux choses sur cette implantation :

- bien que très différents, les critères (4.14) et (4.15) conduisent à des résultats proches ([Helfer 05c]) ;
- le critère (4.15) pose une difficulté importante. Il est incompatible avec le critère de refermeture des fissures proposé dans le modèle MEFISTO, décrit au paragraphe 4.1.1.4 ([Helfer 05a]). De fait, cette implantation n'a été utilisée que pour des cas où la guérison n'intervenait pas.

4.1.1.4 Refermeture et guérison des fissures

Le modèle MEFISTO décrit l'apparition de fissures radiales et axiales. Ces fissures peuvent se refermer au cours de l'irradiation. En particulier les fissures radiales, qui sont associées à la fragmentation de la pastille, jouent un rôle important sur le comportement de la pastille ([Retel 02]).

Décrire la refermeture des fissures radiales revient à décrire le contact entre les fragments de la pastille et nécessite *a priori* d'avoir une information sur le déplacement orthoradial des bords de fragments. Or, par nature, un calcul 1D ne peut fournir ce type d'information sans hypothèses supplémentaires. Une démarche intéressante a été proposée dans [Masson 05]. Elle consiste à enrichir la modélisation 1D par un critère de refermeture déduit de calcul 2D.

Dans le modèle MEFISTO, la solution retenue a été de formuler un critère local *ad hoc* de refermeture au niveau de la loi de comportement ([Garcia 02]). La présentation de ce critère se fait en trois étapes :

- la présentation du critère de guérison dans sa forme originale ;
- une modification du critère pour assurer la continuité des contraintes au moment de la refermeture des fissures ;
- une interprétation du critère qui éclaire sa signification.

Ces étapes permettent de faire le lien entre la formulation originale du modèle MEFISTO et la version que nous en proposons ici.

Introduction d'une déformation de fissuration Afin de formuler son critère de guérison, le modèle de MEFISTO introduit une *déformation de fissuration fictive* $\underline{\epsilon}^{fis}$ définie par :

$$(4.17) \quad \underline{\sigma} = \underline{\underline{D}} : (\underline{\epsilon}^{el} - \underline{\epsilon}^{fis}) = \underline{\underline{D}}(d_\theta, d_z) : \underline{\epsilon}^{el} + \underline{\sigma}^{P.I.}(d_\theta, d_z)$$

où $\underline{\underline{D}}$ est le tenseur d'élasticité initial, $\underline{\underline{D}}(d_\theta, d_z)$ le tenseur d'élasticité endommagé et $\underline{\sigma}^{P.I.}(d_\theta, d_z)$ un terme *ad hoc* permettant de décrire l'effet de la pression interne P_i sur les lèvres de la fissure (équations (4.4), (4.5), (4.6), (4.7), (4.8) et (4.9)). Le tenseur des déformations élastiques $\underline{\epsilon}^{el}$ se déduit des déformations totales et élastiques par l'équation de partition des déformations (2.1).

Afin de préciser le sens physique de la déformation de fissuration, nous pouvons définir une déformation élastique « équivalente » $\underline{\epsilon}_{eq}^{el}$ définie par :

$$(4.18) \quad \underline{\epsilon}_{eq}^{el} = \underline{\epsilon}^{el} - \underline{\epsilon}^{fis} = \underline{\epsilon}^{to} - \underline{\epsilon}^{vis} - \underline{\epsilon}^{fis}$$

Cette dernière équation est formellement identique à la définition du tenseur d'élasticité en présence d'un nouveau mécanisme de déformation, d'autant que par construction, la déformation élastique « équivalente » est telle que la loi de HOOKE non endommagée est vérifiée :

$$(4.19) \quad \underline{\sigma} = \underline{\underline{D}} : \underline{\epsilon}_{eq}^{el}$$

La déformation élastique équivalente est donc celle qu'aurait le matériau sain dans un même état de contrainte. La déformation de fissuration s'interprète alors comme la différence entre la déformation élastique et la déformation élastique « équivalente ». Cette déformation est nulle si le matériau n'est pas fissuré. L'équation (4.17) permet de donner une expression explicite de la déformation de fissuration :

$$(4.20) \quad \underline{\epsilon}^{fis} = (\underline{\underline{I}} - \underline{\underline{D}}^{-1} \underline{\underline{D}}(d_\theta, d_z)) : \underline{\epsilon}^{el} - \underline{\underline{D}}^{-1} : \underline{\sigma}^{P.I.}(d_\theta, d_z)$$

Critère de refermeture des fissures La déformation de fissuration $\underline{\epsilon}^{fis}$ permet de formuler un critère de refermeture des fissures. Supposons que le combustible soit fissuré radialement (resp. axialement), le critère de refermeture de fissure suppose que si la composante ϵ_θ^{fis} (resp. ϵ_z^{fis}) du tenseur des déformations de fissuration devient négative, alors les propriétés élastiques dans cette direction sont restaurées. Le critère de refermeture s'exprime alors ainsi :

$$(4.21) \quad \epsilon_\theta^{fis} \leq 0 \quad \Rightarrow \quad \text{refermeture de la fissure}$$

Dans le cas d'une fissure radiale, nous pouvons avoir les évolutions suivantes :

- si le combustible est, au moment de la refermeture, fissuré radialement et axialement, le combustible passe à l'état fissuré axialement ;
- si le combustible est, au moment de la refermeture, fissuré uniquement radialement, le combustible retrouve ses propriétés élastiques non endommagées ;

Continuité de la relation contrainte-déformation Sous cette forme, le critère de guérison conduit à des *discontinuités* de la relation entre les contraintes et les déformations. Une telle discontinuité n'est pas acceptable au vu de ce que nous avons présenté au paragraphe 2.4.2. Nous avons montré ([Helfer 05a]) que ces discontinuités sont liées à la prise en compte du terme $\underline{\sigma}^{P.I.}(d_\theta, d_z)$ dans l'équation (4.17). Nous allons maintenant modifier le critère de refermeture précédent afin de garantir cette continuité.

Une nouvelle définition de la déformation de fissuration Changeons la définition (4.17) de la déformation de fissuration par celle-ci :

$$(4.22) \quad \underline{\sigma} - \underline{\sigma}^{P.I.}(d_\theta, d_z) = \underline{\underline{D}} : (\underline{\epsilon}^{el} - \underline{\epsilon}^{fis}) = \underline{\underline{D}}(d_\theta, d_z) : \underline{\epsilon}^{el}$$

de sorte qu'une définition explicite de la déformation de fissuration est :

$$(4.23) \quad \underline{\epsilon}^{fis} = (\underline{\mathbf{I}} - \underline{\mathbf{D}}^{-1} \underline{\mathbf{D}})(d_\theta, d_z) : \underline{\epsilon}^{el}$$

Nous avons montré ([Helfer 05a]) que les transitions entre les différents états de fissuration sont continues au sens suivant :

$$(\underline{\sigma} - \underline{\sigma}^{P.I.}(d_\theta, d_z))|_{\text{avant}} = (\underline{\sigma} - \underline{\sigma}^{P.I.}(d_\theta, d_z))|_{\text{après}} \Rightarrow \Delta \underline{\sigma} = \Delta \underline{\sigma}^{P.I.}(d_\theta, d_z)$$

où Δx exprime la discontinuité de x au cours d'une transition.

Cette expression montre que le critère de refermeture introduit par MEFISTO peut être modifié de manière à rendre *continue* l'évolution des contraintes. Pour ce faire, nous devons utiliser la définition (4.22) des déformations de fissuration et définir le terme $\underline{\sigma}^{P.I.}$ associé à l'action de la pression interne ainsi :

$$(4.24) \quad \underline{\sigma}^{P.I.} = -P_i \max_{\tau \leq t} (\underline{\sigma}_\theta^{P.I.} d_\theta(\tau) (1 - d_z(\tau)) + \underline{\sigma}_z^{P.I.} d_z(\tau) (1 - d_\theta(\tau)) + \underline{\sigma}_{\theta z}^{P.I.} d_\theta(\tau) d_z(\tau))$$

Nous pouvons interpréter la définition (4.24) ainsi : la contrainte $\underline{\sigma}^{P.I.}$ devient la contrainte de *référence* du matériau qui a été fissuré une fois au cours de son histoire.

		État d'arrivée		
		Non fissuré	Fissuré en θ	Fissuré en z
État de départ	Fissuré en θ	$\epsilon_\theta^{fis} = (1 - \nu) \epsilon_\theta^{el} + \nu (\epsilon_r^{el} + \epsilon_z^{el})$		
	Fissuré en z	$\epsilon_z^{fis} = (1 - \nu) \epsilon_z^{el} + \nu (\epsilon_r^{el} + \epsilon_\theta^{el})$		
	Fissuré en θ et z		$\epsilon_z^{fis} = \epsilon_z^{el} + \nu \epsilon_r^{el}$	$\epsilon_\theta^{fis} = \epsilon_\theta^{el} + \nu \epsilon_r^{el}$

TAB. 4.2 – Critères de refermeture entre les différents états de fissuration.

Interprétation du critère de refermeture proposé Le critère de refermeture du modèle (équation (4.21)) repose sur la déformation de fissuration $\underline{\epsilon}^{fis}$ dont nous allons donner une interprétation. En comparant les expressions des matrices d'élasticité données dans les équations (4.3), (4.4), (4.5) et (4.6) dans les différents états de fissuration, et les expressions des composantes du tenseur de fissuration $\underline{\epsilon}^{fis}$ données dans le tableau 4.2, nous pouvons écrire :

$$\begin{aligned} \sigma_\theta|_{\text{non fissuré}} - \sigma_\theta^{P.I.} &= \frac{E}{(1 - 2\nu)(1 + \nu)} \left((1 - \nu) \epsilon_\theta^{el} + \nu \epsilon_r^{el} + \epsilon_z^{el} \right) = \frac{E}{(1 - 2\nu)(1 + \nu)} \epsilon_\theta^{fis} \Big|_{\text{fissuré en } \theta} \\ \sigma_z|_{\text{non fissuré}} - \sigma_z^{P.I.} &= \frac{E}{(1 - 2\nu)(1 + \nu)} \left((1 - \nu) \epsilon_z^{el} + \nu \epsilon_r^{el} + \epsilon_\theta^{el} \right) = \frac{E}{(1 - 2\nu)(1 + \nu)} \epsilon_z^{fis} \Big|_{\text{fissuré en } z} \\ \sigma_\theta|_{\text{fissuré en } z} - \sigma_\theta^{P.I.} &= \frac{E}{(1 + \nu)(1 - \nu)} \left(\epsilon_r^{el} + \nu \epsilon_\theta^{el} \right) = \frac{E}{(1 + \nu)(1 - \nu)} \epsilon_\theta^{fis} \Big|_{\text{fissuré en } \theta \text{ et } z} \\ \sigma_z|_{\text{fissuré en } \theta} - \sigma_z^{P.I.} &= \frac{E}{(1 + \nu)(1 - \nu)} \left(\epsilon_r^{el} + \nu \epsilon_z^{el} \right) = \frac{E}{(1 + \nu)(1 - \nu)} \epsilon_z^{fis} \Big|_{\text{fissuré en } \theta \text{ et } z} \end{aligned}$$

Nous voyons que la déformation de fissuration est en fait égale, à un coefficient multiplicatif près, à une contrainte calculée à l'aide du tenseur élastique dans « l'état d'arrivée ». Nous pouvons exprimer le critère de guérison (4.21) ainsi :

$$\begin{aligned} \epsilon_\theta^{fis} \leq 0 &\Leftrightarrow (\sigma_\theta - \sigma_\theta^{P.I.})_{\text{arrivée}} \leq 0 \\ \epsilon_z^{fis} \leq 0 &\Leftrightarrow (\sigma_z - \sigma_z^{P.I.})_{\text{arrivée}} \leq 0 \end{aligned}$$

Fondamentalement, le critère de guérison introduit dans MEFISTO est un critère en *contraintes*. Cette identification est essentielle pour comprendre la cohérence du modèle MEFISTO : le modèle est explicitement formulé en contraintes pour l'ouverture des fissures et implicitement, via la déformation de fissuration, pour leur refermeture.

L'intérêt pratique des expressions données dans le tableau 4.2 est de ne plus avoir à calculer de déformation de fissuration explicitement. Celle-ci étant une fonction simple des déformations élastiques, plus simple que ce que l'expression (4.22) laissait entrevoir, il n'est plus nécessaire de les conserver en tant que variables internes du modèle.

Guérison des fissures En réacteur, il est observé une guérison des fissures. Pour en rendre compte, le modèle MEFISTO considère que toute fissure refermée est instantanément guérie : si le critère de refermeture des fissures est vérifié, la variable d'endommagement associé à cette fissure est remise à 0. Dans la suite, le modèle MEFISTO décrira toujours cette guérison.

4.1.1.5 Essai de traction uniaxiale

Nous proposons de caractériser la réponse du modèle MEFISTO sur un essai de traction uniaxiale suivie d'une compression uniaxiale. Cet essai a été décrit en paragraphe 2.1.2.1, figure 2.1 et permet à la fois de se familiariser avec le comportement de ce modèle mais aussi de valider son implantation.

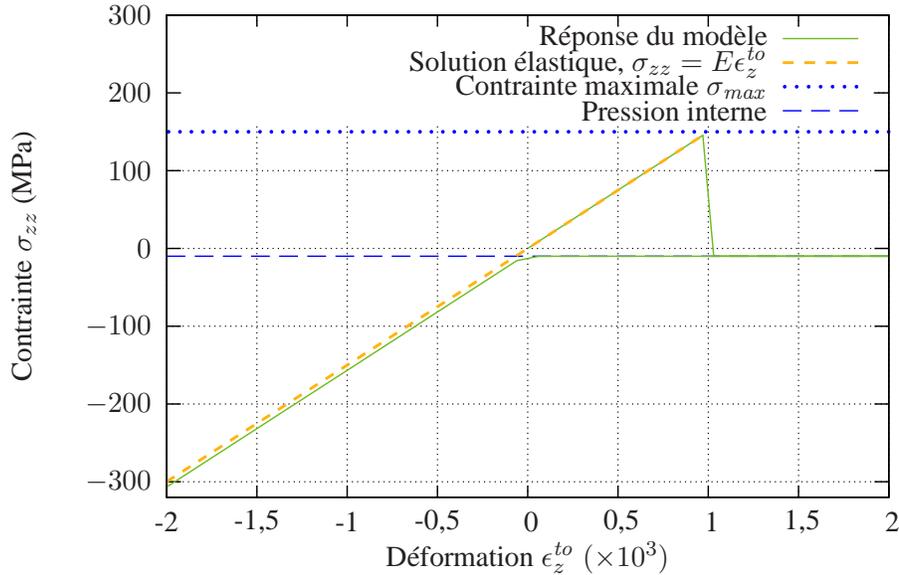


FIG. 4.3 – Réponse du modèle MEFISTO à une traction uniaxiale dans la direction axiale suivie d'une compression.

L'axe de traction est ici identifié à l'axe O_z . L'essai est donc piloté en imposant un déplacement axial u_z . Le modèle d'endommagement MEFISTO étant indépendant du temps, la vitesse de chargement n'influe pas sur sa réponse. Nous ne précisons donc pas l'historique du chargement.

La contrainte à rupture σ_{max} , utilisée dans le critère d'endommagement (4.14), a été choisie égal à 150 MPa . Le module d'YOUNG du matériau est choisi égal à 150 GPa de sorte que la rupture intervient pour une déformation imposée égale à 10^{-3} . Une pression interne P_i fictive de 20 MPa est fournie en entrée du modèle. La déformation axiale est d'abord imposée positive jusqu'à une valeur de 2.10^{-3} puis est imposée compressive jusqu'à une valeur de -2.10^{-3} .

La figure 4.3 montre la réponse du matériau, caractérisée par la valeur de la contrainte σ_z en fonction de la déformation axiale ϵ_z^{to} , obtenue avec le code CAST3M. Cette figure montre de plus la réponse obtenue par un calcul élastique. Cette réponse est une droite de pente le module d'YOUNG d'après l'équation (2.20). Les valeurs de la contrainte maximale σ_{max} et de l'opposée de la pression interne P_i sont aussi indiquées.

La réponse du matériau est dans un premier temps élastique. Une fois la contrainte égale à la contrainte à rupture σ_{max} , la contrainte passe alors à la valeur de la pression interne conformément à l'évolution donnée par l'équation 4.14. La contrainte reste constante jusqu'à ce que la déformation totale imposée ϵ_z^{to} soit à nouveau nulle. L'expression du critère de guérison (4.21) montre qu'à ce moment les propriétés élastiques du matériau sont restaurées. Les contraintes diminuent suivant une droite parallèle à la réponse élastique. Ceci est dû à la présence du terme $\underline{\sigma}^{P.I.}$ qui n'évolue plus d'après l'équation (4.24).

Nous n'avons pas représenté la réponse du barreau à une nouvelle déformation en traction afin de ne pas surcharger la figure 4.3. Cette réponse serait tout d'abord une droite dans la continuité de la réponse en com-

pression puis une nouvelle rupture une fois la contrainte σ_{max} atteinte.

4.1.2 Extension du modèle d'endommagement MEFISTO en 2D

Nous discutons ici de l'extension du modèle d'endommagement MEFISTO en 2D. Cette extension se fait de manière similaire à ce qui a été présenté au paragraphe précédent lors de la formulation du modèle initial.

4.1.2.1 Effet de l'endommagement, anisotropie élastique induite

Le modèle MEFISTO, rend compte de la relaxation des contraintes induites par l'apparition de fissures axiales et radiales (voir figure 1.5). Cette relaxation est décrite par une anisotropie élastique induite par la présence de fissures. Nous décrivons ici comment est construite l'extension de ce modèle à une modélisation 2D.

Représentation des tenseurs en 2D La symétrie de révolution impose que la direction θ soit une direction principale des différents tenseurs considérés. Les termes de cisaillement $\epsilon_{r\theta}^{el}$ et $\epsilon_{\theta z}^{el}$ du tenseur élastique $\underline{\epsilon}^{el}$ sont donc nuls. De même, les termes de cisaillement $\sigma_{r\theta}$ et $\sigma_{\theta z}$ du tenseur des contraintes $\underline{\sigma}$ sont nuls.

Les tenseurs sont représentés sous forme vectorielle. La nullité des termes de cisaillement permet de représenter un tenseur par un vecteur à 4 composantes. Les déformations élastiques $\underline{\epsilon}^{el}$ et les contraintes $\underline{\sigma}$ seront donc représentées par les vecteurs suivants :

$$\underline{\epsilon}^{el} = \begin{pmatrix} \epsilon_r^{el} \\ \epsilon_\theta^{el} \\ \epsilon_z^{el} \\ \sqrt{2} \epsilon_{rz}^{el} \end{pmatrix} \quad \underline{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_r \\ \sigma_\theta \\ \sigma_z \\ \sqrt{2} \sigma_{rz} \end{pmatrix}$$

Le facteur $\sqrt{2}$ est un choix pratique qui simplifie l'implantation du modèle. La même convention permet d'écrire le tenseur des contraintes $\underline{\sigma}$. Dans cette représentation, la relation de HOOKE peut être décrite par une matrice carrée à 16 composantes.

Hypothèse sur l'endommagement axial Nous prenons l'hypothèse qu'une fissure dans le plan (r, z) ne peut se faire que parallèlement à la direction radiale. Cette hypothèse simplifie l'implantation du modèle et semble légitime au vue des observations expérimentales, au moins en première approximation. Une modélisation plus rigoureuse conduirait à utiliser les repères de contraintes principales pour déterminer les directions de rupture.

Effet d'une fissure axiale Nous supposons qu'une fissure axiale ne peut pas transmettre de contrainte de cisaillement. Ainsi, la contrainte de cisaillement σ_{rz} est nulle en présence d'une fissure axiale :

$$\sigma_{rz} = 0$$

Tenseurs d'élasticité En reprenant la méthode décrite au paragraphe 4.1.1.1, cette condition permet d'obtenir les tenseurs élastiques représentant chacun des états de fissuration. Ces tenseurs d'élasticité sont donnés au tableau 4.3.

Guérison des fissures L'évolution de l'endommagement proposé demanderait de changer le critère (4.21) utilisé pour refermer les fissures. Nous montrerons au chapitre 5, où l'extension en 2D du modèle MEFISTO sera discutée en détails, qu'il est préférable de ne pas tenir compte de l'endommagement axial. Dans le cas où seul l'endommagement orthoradial est décrit, le critère de guérison est parfaitement valide. Cette solution a été

$\frac{E}{(1+\nu)(1-2\nu)} \begin{pmatrix} 1-\nu & \nu & \nu & 0 \\ \nu & 1-\nu & \nu & 0 \\ \nu & \nu & 1-\nu & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1-2\nu \end{pmatrix}$	$\frac{E}{(1+\nu)(1-\nu)} \begin{pmatrix} 1 & 0 & \nu & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \nu & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1-\nu \end{pmatrix}$
Matériau sain	Fissuré en θ ($d_\theta = 1$)
$\frac{E}{(1+\nu)(1-\nu)} \begin{pmatrix} 1 & \nu & 0 & 0 \\ \nu & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$E \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$
Fissuré en z ($d_z = 1$)	Fissuré en θ et z ($d_\theta = 1$ et $d_z = 1$)

TAB. 4.3 – Tenseurs d'élasticité dans les différents états fissurés utilisés pour décrire la fissuration du combustible en 2D.

retenue pour l'utilisation du modèle dans le code ALCYONE dont nous nous servons pour simuler le cas d'un crayon expérimental au chapitre 6.

4.2 Modèles de comportement pour la modélisation 3D

La modélisation 3D, décrite au paragraphe 3.4, considère un fragment de combustible. Cette fragmentation *a priori* permet de prendre en compte l'apparition d'un réseau de fissures traversantes dans la pastille au cours de la première montée en puissance. Les contraintes dans la pastille sont alors nettement inférieures à celles obtenues sur une pastille intègre et les déformations géométriques de la pastille, telles que sa mise en diabolo, sont importantes.

Il est cependant nécessaire de prendre en compte le réseau de fissuration secondaire pour pouvoir décrire de manière réaliste le comportement du crayon. Le principal effet de ce réseau de fissuration est de limiter les valeurs des contraintes. Pour ce faire, il est d'usage d'utiliser un modèle de plasticité instantanée que nous présenterons au paragraphe suivant. L'emploi de ce modèle est justifié par des résultats satisfaisants qui permettent de rendre compte de nombreux résultats expérimentaux. Nous verrons cependant lors de l'analyse du crayon I04-4 au chapitre 6 que ce modèle possède des aspects physiquement insatisfaisants. L'objet du paragraphe 4.2.2 est de proposer un modèle d'endommagement permettant de prendre en compte de manière plus réaliste le comportement fragile du combustible.

4.2.1 Le modèle de seuillage des contraintes par écoulement plastique

Afin de retrouver des résultats de simulation convenables, il est apparu nécessaire de prendre en compte en première approximation le caractère fragile du combustible. De manière plus précise, les contraintes dans la pastille doivent être seuillées. Une solution *ad hoc* consiste à utiliser un modèle de plasticité instantanée isotrope pour décrire le combustible.

Les modèles de plasticité instantanée isotrope ont été décrits au paragraphe 2.1.3.3. En reprenant le formalisme que nous y avons développé, la formulation du modèle se limite à donner l'évolution du rayon de la surface de charge en fonction de l'écroutissage. Cette évolution est ici donnée par l'expression suivante :

$$(4.25) \quad R(p) = \sigma_{max} + H\chi^p$$

Le module d'écroutissage H est choisi positif afin de régulariser le problème. En effet, au vu du chapitre 2, l'utilisation d'un modèle de plasticité à écroutissage positif conduit à un problème bien posé : sa solution est unique et régulière. En particulier, il n'y a pas de phénomènes de localisation tels que ceux observés en endommagement (voir le paragraphe 2.4.3).

La valeur de H est choisie suffisamment faible pour seuiller la contrainte équivalente à une valeur proche de la contrainte à rupture σ_{max} de l'UO₂.

Effets du modèle de plasticité Le modèle de plasticité permet de seuiller les contraintes équivalentes à la valeur σ_{max} . Il introduit pour cela une déformation inélastique supplémentaire artificielle. Enfin, par rapport à un modèle d'endommagement, ce modèle ne distingue pas la compression de la traction.

Prise en compte des fissures axiales En réacteur, la zone centrale de la pastille est globalement en compression. L'effet des fissures axiales se fait peu sentir et ne semble pas prépondérant quant au comportement de la pastille combustible en irradiation de base ou en rampe de puissance.

L'effet de ces fissures axiales est cependant sensible lors des retours à froid (à puissance nulle). Au cours du retour à froid, la pastille prend une forme de diabolo inversée : la pastille se met en tonneau. Cette mise en tonneau de pastille imprime une déformation importante à la gaine et exacerbe le pli secondaire par rapport aux observations expérimentales. En réalité, la fragmentation axiale permet un repositionnement naturel des morceaux de fragments lorsqu'ils sont en contact avec la gaine. Ceux-ci ne renvoient *a priori* aucun effort à la gaine ([Plancq 01]).

Le modèle de plasticité utilisé en 3D ne permet pas de décrire ces fissures axiales, ni ce repositionnement des fragments axiaux. Cette difficulté est contournée en pratique en faisant évoluer le combustible et la gaine de manière indépendante lors du retour à froid : la condition de contact unilatéral entre la pastille et la gaine est supprimée.

4.2.2 Extension du modèle de LORENTZ

Le caractère fragile du combustible conduit d'une part à la fragmentation de la pastille, que la modélisation 3D prend explicitement en compte, mais aussi à la formation d'un réseau de fissures non traversantes à l'intérieur du fragment de pastille. Le paragraphe précédent a décrit le modèle de plasticité isotrope utilisé pour décrire le seuillage des contraintes dû à ce réseau de fissuration secondaire. Nous verrons au paragraphe 6.4.2.6 les faiblesses de ce modèle. Nous proposons dans ce chapitre un modèle d'endommagement dont l'objet est de décrire de manière plus réaliste le comportement fragile du combustible.

Nous avons recherché un modèle d'endommagement qui réponde aux critères suivants :

- prise en compte de la contrainte à rupture σ_{max} en traction ;
- description du caractère unilatéral de l'endommagement ;

Nous avons étudié au paragraphe 2.4.1.2 le modèle de LORENTZ. Il s'agit d'un modèle d'endommagement isotrope. Ce modèle répond à la plupart des critères énoncés, la prise en compte du caractère unilatéral mis à part. Le caractère unilatéral de l'endommagement peut être pris en compte par une méthode classique exposée au paragraphe 2.4.2 et que nous proposons d'appliquer ici au modèle de LORENTZ.

4.2.2.1 Prise en compte du caractère unilatéral de l'endommagement

Nous reprenons ici les outils présentés au paragraphe 2.4.2. Pour plus de clarté, nous présentons le modèle en supposant le matériau isotherme et élastique endommageable. Pour les applications, en présence de dilatation thermique ou d'un écoulement viscoplastique, il suffit de remplacer dans les expressions qui suivent la déformation totale par la déformation élastique définie par l'équation de partition des déformations (2.1) :

$$\underline{\epsilon}^{el} = \underline{\epsilon}^{to} - \underline{\epsilon}^{vis} - \underline{\epsilon}^{th}$$

où $\underline{\epsilon}^{th}$ est la dilatation thermique.

Énergie libre Partant des outils exposés au paragraphe 2.4.2, en particulier des équations (2.83) et (2.85), nous proposons d'écrire l'énergie libre Ψ du modèle (équation (2.72)) sous la forme suivante :

$$\rho\Psi = \underbrace{\frac{1}{2}(1-d) \left(2\mu \langle \underline{\epsilon}^{to} \rangle^+ : \langle \underline{\epsilon}^{to} \rangle^+ + \lambda \left(\langle \text{tr } \underline{\epsilon}^{to} \rangle^+ \right)^2 \right)}_{\text{traction}} + \underbrace{\frac{1}{2} \left(2\mu \langle \underline{\epsilon}^{to} \rangle^- : \langle \underline{\epsilon}^{to} \rangle^- + \lambda \left(\langle \text{tr } \underline{\epsilon}^{to} \rangle^- \right)^2 \right)}_{\text{compression}}$$

où apparaissent $\langle \cdot \rangle^-$ et $\langle \cdot \rangle^+$ qui représentent respectivement les parties positive et négative de la quantité tensorielle ou réelle, d l'endommagement du matériau et les coefficients de LAMÉ λ et μ .

Par rapport à l'expression initiale de l'énergie libre (équation (2.72)), la partie élastique est décomposée en une partie liée à la partie positive du tenseur des déformations et associée à la traction et une partie associée à la compression. *La variable d'endommagement est supposée n'agir que sur la partie associée au comportement en traction.* Ceci signifie qu'en compression, les propriétés élastiques ne seront pas affectées par un éventuel endommagement.

Lois d'états Les lois d'états sont alors, d'après les propriétés de dérivabilité des parties positive et négative des tenseurs (équation (2.84)) :

$$(4.26) \quad \begin{cases} \underline{\sigma} = \rho \frac{\partial \Psi}{\partial \underline{\epsilon}^{to}} = (1-d) \left(\lambda \langle \text{tr } \underline{\epsilon}^{to} \rangle^+ + 2\mu \langle \underline{\epsilon}^{to} \rangle^+ \right) + \lambda \langle \text{tr } \underline{\epsilon}^{to} \rangle^- + 2\mu \langle \underline{\epsilon}^{to} \rangle^- \\ \langle Y \rangle^+ = -\rho \frac{\partial \Psi}{\partial d} = \frac{1}{2} \left(2\mu \langle \underline{\epsilon}^{to} \rangle^+ : \langle \underline{\epsilon}^{to} \rangle^+ + \lambda \left(\langle \text{tr } \underline{\epsilon}^{to} \rangle^+ \right)^2 \right) \end{cases}$$

L'équation (2.84) montre que les lois d'états sont *continues*.

4.2.2.2 Évolution de l'endommagement

Le potentiel de dissipation Φ^* reste inchangé par rapport au modèle initial. Ce potentiel est donné par (équation (2.74) et (2.76)) :

$$\Phi^* (\dot{d}) = \frac{k\gamma(1+\gamma)}{(1-d+\gamma)^2} \dot{d} + I_{\mathbb{R}^+} (\dot{d})$$

où k et γ sont deux coefficients qui seront identifiés plus tard et $I_{\mathbb{R}^+} (\dot{d})$ la fonction indicatrice de l'ensemble des réels positifs.

L'équation (2.76) donnant la fonction de charge f du modèle reste valable en utilisant la définition (4.26) de la force thermodynamique $\langle Y \rangle^+$:

$$(4.27) \quad f(\langle Y \rangle^+) = \langle Y \rangle^+ - \frac{k\gamma(1+\gamma)}{(1-d+\gamma)^2}$$

Notons $\langle Y \rangle_{max}^+$ la valeur maximale de $\langle Y \rangle^+$ au cours du temps. L'équation (4.27) peut s'écrire ainsi :

$$(4.28) \quad d(\langle Y \rangle_{max}^+) = \begin{cases} 0 & \text{si } \langle Y \rangle_{max}^+ \leq \frac{k\gamma}{1+\gamma} \\ 1 + \gamma - \sqrt{\frac{k\gamma(1+\gamma)}{\langle Y \rangle_{max}^+}} & \text{si } \frac{k\gamma}{1+\gamma} \leq \langle Y \rangle_{max}^+ \leq \frac{k(1+\gamma)}{\gamma} \\ 1 & \text{si } \langle Y \rangle_{max}^+ \geq \frac{k(1+\gamma)}{\gamma} \end{cases}$$

Cette relation est utilisée pour le calcul des contraintes.

4.2.2.3 Identification des paramètres

Nous avons choisi de prendre en compte la contrainte à rupture σ_{max} afin de seuiliser les contraintes dans la pastille. L'étude bibliographique présentée au chapitre 2 nous a montré l'importance de prendre en compte une énergie de fissuration G_f . Les tailles de maille nécessaires pour rendre compte de l'énergie de fissuration de l'UO₂ sont cependant très faibles, de l'ordre de 40 μm d'après le paragraphe 2.4.4.2. Ces tailles de maille ne sont pas compatibles avec des temps de calcul réalistes. Ainsi, l'énergie de fissuration introduite dans ce

modèle doit être considérée comme un paramètre de régularisation permettant de rendre les calculs les plus indépendants possibles aux effets du maillage.

Avec les moyens dont nous disposons, nous devons introduire l'énergie de fissuration G_f par la technique proposée par les modèles de fissuration diffuse présentés au paragraphe 2.4.4.2. Nous y avons illustré l'identification des paramètres k et γ du modèle de LORENTZ. Nous reprenons ici cette identification dans le cas du modèle proposé.

Coefficient k Le potentiel de dissipation dual étant inchangé, l'énergie volumique dissipée est toujours égale à k (équation (2.77)). La relation entre l'énergie volumique dissipée et le taux de restitution de l'énergie fait intervenir la taille de maille h par la relation :

$$k = \frac{G_f}{h}$$

Coefficient γ L'équation (4.26) modifie la définition de la force thermodynamique associée à la variable d'endommagement. En traction uniaxiale, avant endommagement, la variable $\langle Y \rangle^+$ vaut :

$$\langle Y \rangle^+ = \frac{1}{2} \left(\lambda(1 - 2\nu)^2 + 2\mu \right) \frac{\sigma_I^2}{E^2}$$

À partir des équations (4.26) et (4.27), l'initiation de l'endommagement aura lieu pour des contraintes égales à :

$$\sigma_{max} = E \sqrt{\frac{2}{\lambda(1 - 2\nu)^2 + 2\mu} \left(\frac{k\gamma}{1 + \gamma} \right)}$$

Le coefficient γ est alors donné par :

$$(4.29) \quad \gamma = \frac{Ah}{G_f - Ah} \text{ avec } A = \frac{1}{2} \left(\lambda(1 - 2\nu)^2 + 2\mu \right) \frac{\sigma_{max}^2}{E^2}$$

La constante A permet de fixer une taille de maille minimale pour que le modèle soit localement cohérent (absence de snap-back dans la courbe de traction).

4.2.2.4 Comportement en traction-compression uniaxiale

Nous reprenons ici le cas traité au paragraphe 2.4.2. Il s'agit d'un essai de traction-compression imposé à une barre de traction. La direction de traction est identifiée à l'axe Oz . Le déplacement imposé est successivement positif (traction), négatif (compression) et à nouveau positif.

La figure 4.4 montre la réponse du modèle à ce chargement. Nous voyons que :

- du point O au point A, la réponse est élastique. La pente de la droite est le module d'YOUNG du matériau ;
- du point A au point B, le matériau s'endommage ;
- du point B au point O, le matériau décrit une décharge élastique. La pente de la droite de décharge est plus faible que le module d'YOUNG ;
- du point O au point C, le matériau est en compression. La pente de la droite est plus élevée que lors de la décharge élastique, ce qui traduit une restauration des propriétés élastiques. Cette pente étant inférieure au module d'YOUNG, cette restauration est partielle ;
- du point C au point O, le matériau se décharge ;
- du point O au point B, le matériau a un comportement élastique endommagé ;
- du point B au point D, le matériau s'endommage jusqu'à perdre totalement sa rigidité.

Continuité de la réponse mécanique Nous pouvons remarquer que comme annoncé, la réponse de la structure est continue au moment de la refermeture de la fissure et que le matériau récupère une partie de ses propriétés élastiques en compression (la totalité des propriétés n'est pas recouverte car par effet POISSON, les déformations transverses deviennent positives et sont donc affectées par l'endommagement).

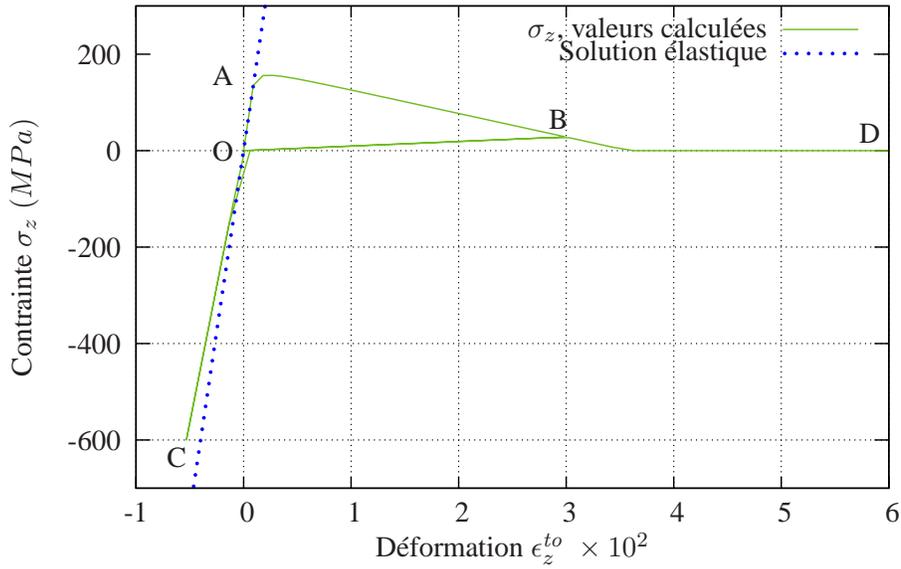


FIG. 4.4 – Réponse du modèle proposé à une série de chargements successivement de traction, de compression et de traction jusqu’à rupture.

Réponse en traction Nous pouvons remarquer que le caractère linéaire de la réponse dans la pente adoucissante est globalement préservé : l’introduction du caractère unilatéral conduit à une petite courbure de la réponse au moment de l’initiation (figure 4.4).

4.3 Lois viscoplastiques d’OTTER et LPCC

En réacteur, en raison des températures atteintes et des effets de l’irradiation, le comportement mécanique de la pastille n’est pas seulement fragile. Son écoulement viscoplastique doit aussi être pris en compte. Suivant l’historique de développement et de validation des codes, différentes lois sont utilisées pour modéliser le comportement viscoplastique du combustible UO_2 :

- la loi d’OTTER ([Bahoboy 69, Otter 75]) est utilisée en 1D dans le code METEOR et ALCYONE1D ;
- la loi LPCC, plus récente, est utilisée en 3D dans les codes TOUTATIS et ALCYONE3D.

Ces lois sont extrêmement proches dans leur formulation. Elles s’écrivent toutes deux dans le formalisme décrit au paragraphe 2.1.3.1, équation (2.29) :

$$(4.30) \quad \dot{\underline{\epsilon}}^{vis} = \frac{\partial \Phi}{\partial \sigma_{eq}} (\sigma_{eq}) \underline{\mathbf{n}}$$

L’intensité de l’écoulement est donnée par la fonction $\frac{\partial \Phi}{\partial \sigma_{eq}} (\sigma_{eq})$. Seule cette fonction différencie les deux lois présentées. Il n’est cependant pas évident d’en déduire une comparaison de ces deux lois. En effet, en fonction des conditions locales de température et d’irradiation, l’une ou l’autre des deux lois peut donner une vitesse d’écoulement plus importante que l’autre.

4.3.1 Loi viscoplastique d’OTTER

La loi viscoplastique d’OTTER est décrite dans les références [Bahoboy 69, Otter 75]. L’écoulement viscoplastique est régi par la loi complémentaire suivante :

$$(4.31) \quad \frac{\partial \Phi}{\partial \sigma_{eq}} = A \sigma_{eq} + B \sigma_{eq}^n + C \sigma_{eq}$$

dont les coefficients dépendent de la température, de la taille moyenne des grains d_G , de la porosité p et du taux de fissions ϕ :

$$\begin{aligned} A &= \frac{1}{d^2} (C_1 + C_2\phi) \exp(C_3p) \exp\left(-\frac{C_4}{RT}\right) \\ B &= (C_5 + C_6\phi) \exp(C_7p) \exp\left(-\frac{C_8}{RT}\right) \\ C &= C_9 \exp\left(-\frac{C_{10}}{RT}\right) \phi \end{aligned}$$

où les coefficients de la loi sont notés C_i .

L'expression (4.31) montre que l'intensité de l'écoulement est la somme de trois lois de NORTON qui représentent respectivement les deux mécanismes thermiques associés à la diffusion sous contrainte et au mouvement des dislocations ainsi qu'un mécanisme induit par l'irradiation proportionnel au taux de fissions (paragraphe 1.2.1.1).

4.3.2 Loi viscoplastique du LPCC

La loi viscoplastique LPCC a été proposée dans la référence [Sladkoff 99]. L'intensité de l'écoulement est donnée par :

$$(4.32) \quad \frac{\partial \Phi}{\partial \sigma_{eq}} = (C_1 (1 + C_2\phi) [\min(\max(\epsilon_1^{vis}, \epsilon_2^{vis}), \epsilon_{st\ lim}^{vis})] + \epsilon_\phi^{vis})$$

dont les différents termes dépendent de la contrainte équivalente σ_{eq} , de la température, de la taille moyenne des grains d_G , de la porosité p et du taux de fissions ϕ :

$$\begin{aligned} \epsilon_1^{vis} &= C_3 \exp(C_4p) d^{C_5} \sigma_{eq}^{C_6} \exp\left(-\frac{C_7}{RT}\right) & \epsilon_2^{vis} &= C_8 \exp(C_9p) d^{C_{10}} \sigma_{eq}^{C_{11}} \exp\left(-\frac{C_{12}}{RT}\right) \\ \epsilon_{st\ lim}^{vis} &= C_{13} \exp(C_{14}pM) \sigma_{eq}^{C_{15}} \exp\left(-\frac{C_{16}}{RT}\right) & \epsilon_\phi^{vis} &= C_{17} \sigma_{eq} \phi \exp\left(-\frac{C_{18}}{RT}\right) \end{aligned}$$

Le terme ϵ_ϕ^{vis} représente le mécanisme induit par l'irradiation, proportionnel au taux de fission comme dans le cas de la loi d'OTTER.

Par rapport à cette loi, la loi viscoplastique du LPCC présente des particularités concernant les mécanismes associés à la diffusion sous contrainte et au mouvement des dislocations, représentés ici par les termes ϵ_1^{vis} et ϵ_2^{vis} :

- la transition entre les deux mécanismes est brutale, la vitesse d'écoulement étant le maximum des vitesses ϵ_1^{vis} et ϵ_2^{vis} alors que la loi d'OTTER proposait une contribution additive des deux vitesses ;
- les deux vitesses ϵ_1^{vis} et ϵ_2^{vis} sont limitées par un troisième terme $\epsilon_{st\ lim}^{vis}$.

4.4 Représentation de la mise en diablo des fragments en 1D

En réacteur, la pastille se fragmente (paragraphe 1.2.1). Cette fragmentation conduit à :

- la relaxation des contraintes dans la pastille et la perte d'une partie de sa rigidité ;
- la mise en diablo de la pastille.

Dans une description 1D, le premier point sera décrit par le modèle d'endommagement MEFISTO décrit plus haut.

La modélisation 1D n'est *a priori* pas à même de représenter la mise en diablo de la pastille. [Garcia 98b] propose de modéliser ces phénomènes en 1D par un déplacement supplémentaire ajusté sur un calcul 3D.

Cet ajustement a été effectué à différentes cotes axiales dans la pastille ([Garcia 99]). Il est donc possible par ce biais d'avoir en 1D des calculs représentatifs du comportement du crayon combustible non seulement au

médian-pastille, là où la modélisation $1D$ semble la plus justifiée, mais aussi au plan inter-pastilles. *L'option retenue par défaut est de décrire un comportement moyen entre le plan médian-pastille et le plan inter-pastilles.*

Bilan du chapitre

Ce chapitre a présenté l'ensemble des lois de comportement du combustible utilisées dans ce mémoire.

Un intérêt particulier a été apporté au modèle MEFISTO. Le chapitre suivant propose d'analyser les résultats auxquels conduit ce modèle dans le cas d'une montée en puissance nominale décrite par des modélisations $1D$ et $2D$.

CHAPITRE 5

ÉTUDES PRÉLIMINAIRES DU MODÈLE MEFISTO

Objet du chapitre :

L'objet de ce chapitre est de décrire les réponses du modèle MEFISTO appliqué à une description simplifiée de la montée en puissance d'une pastille combustible dans des modélisations $1D$ et $2D$.

Sommaire du chapitre 5

5.1 Réponse du modèle MEFISTO dans une modélisation $1D$	102
5.1.1 Cas traité	102
5.1.2 Résultats obtenus	102
5.1.3 Observations numériques	103
5.2 Réponse du modèle MEFISTO en $2D$	105
5.2.1 Le cas étudié : une montée en puissance nominale	105
5.2.2 Prise en compte de l'endommagement axial et orthoradial	106
5.2.3 Prise en compte du seul endommagement orthoradial	112
5.3 Méthodes numériques	114

5.1 Réponse du modèle MEFISTO dans une modélisation 1D

Nous décrivons maintenant le comportement d'une pastille dont le comportement est donné par le modèle MEFISTO soumise à un chargement représentant de manière simplifiée une montée en puissance nominale à 200 W.cm^{-1} .

5.1.1 Cas traité

Le chargement mécanique est essentiellement dû au gradient thermique dans la pastille. Ce gradient est généré par une source de chaleur volumique q supposée uniforme et caractérisée par une puissance linéique \mathcal{P}_{lin} égale à :

$$\mathcal{P}_{lin} = \pi R^2 q$$

où R est le rayon de la pastille.

La puissance linéique, initialement nulle, évolue jusqu'à une valeur de 200 W.cm^{-1} . La pression interne évolue avec la puissance linéique d'une valeur initiale de 1 MPa à une valeur finale fictive de 20 MPa qui permet de représenter de manière plus visuelle l'effet de la pression interne sur la réponse du modèle MEFISTO.

Le comportement de la pastille est supposé dicté par le modèle d'endommagement MEFISTO. Le calcul a été effectué avec le code ZEBULON. Les spécificités de son implantation ont été décrites au paragraphe 4.1.1.3. La déformation à rupture ϵ_R apparaissant dans l'évolution de l'endommagement (4.15) a été prise égale à 10^{-3} . Le paramètre numérique $\Delta\epsilon$ est choisi égal à $10^{-2}\epsilon_R$. Les valeurs des coefficients thermoélastiques de la pastille sont données sur la figure 1.4.

Les résultats présentés dans la suite ont été obtenus en représentant la pastille par un maillage 1D composé d'un ensemble de 50 nœuds équidistants.

5.1.2 Résultats obtenus

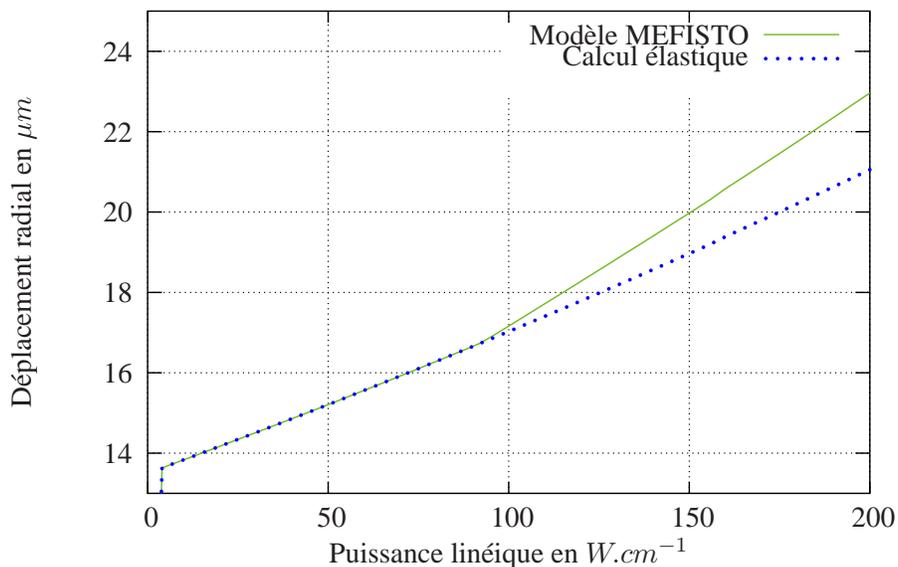


FIG. 5.1 – Évolution du déplacement radial au cours de la montée en puissance nominale. Comparaison des résultats obtenus avec le modèle d'endommagement MEFISTO par rapport à un calcul élastique.

Évolution du rayon de la pastille combustible La figure 5.1 représente l'évolution du déplacement radial au cours de la montée en puissance nominale. Cette évolution est comparée à celle obtenue par un calcul élastique.

Les deux courbes coïncident pour des puissances linéiques inférieures à $85 W.cm^{-1}$. Elles montrent toutes deux une réponse linéaire en fonction de la puissance linéique. Autour de $85 W.cm^{-1}$, la courbe de réponse du modèle MEFISTO montre un changement important et rapide dans la pente de la courbe. La fin de la montée en puissance est caractérisée par une pente plus importante que la pente initiale. Ceci traduit une *perte de rigidité* de la pastille.

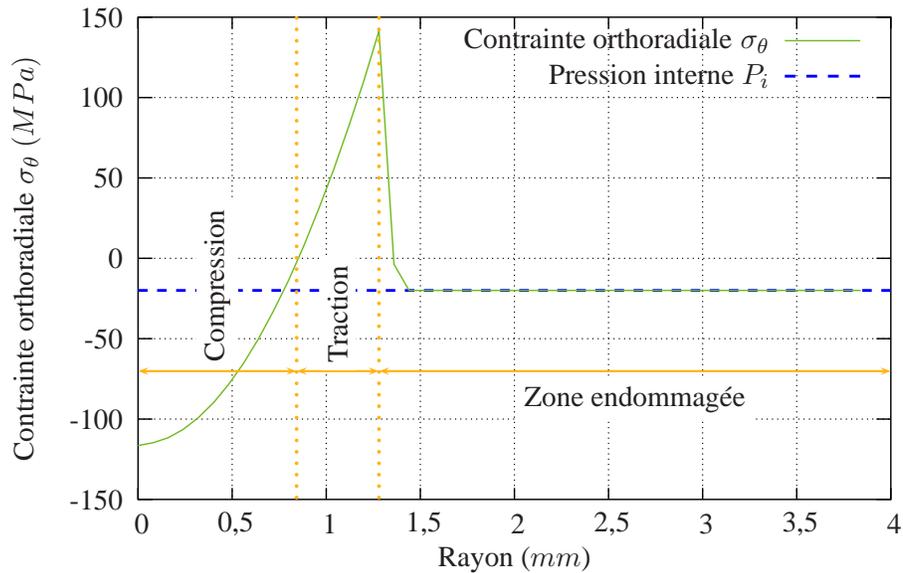


FIG. 5.2 – Profil radial de contraintes dans la pastille à $200 W.cm^{-1}$.

Profil de contrainte dans la pastille à la puissance nominale La figure 5.2 nous montre la répartition de la contrainte orthoradiale dans la pastille une fois la puissance nominale atteinte. Cette figure montre clairement que la pastille est séparée en deux parties. La première, périphérique, est totalement endommagée. Ceci se traduit par une contrainte égale à l’opposé de la pression interne P_i ($-20 MPa$ ici). La seconde, au centre, est non endommagée. Cette partie montre un équilibre des contraintes entre une partie centrale en compression et une partie en traction. Cet équilibre est similaire à celui observé sur la figure 1.4 dans le cas d’un calcul thermoélastique. La comparaison de ces deux figures montre de plus que les niveaux de contraintes dans la pastille sont significativement inférieurs à ceux obtenus par un calcul thermoélastique : le modèle MEFISTO conduit effectivement à *une relaxation des contraintes dans la pastille*.

5.1.3 Observations numériques

Nous décrivons dans ce paragraphe différentes observations numériques associées à l’utilisation du modèle MEFISTO.

Indépendance des résultats au maillage, régularité de la solution Nous avons effectué une étude paramétrique pour vérifier l’influence du maillage éléments finis sur les résultats. Nous avons observé que la méthode des éléments finis converge vers une solution unique et régulière. Les difficultés classiques associées aux comportements endommageables et décrites en paragraphe 2.4.3 ne se retrouvent donc pas en 1D.

Absence de localisation Dans le cas de l’endommagement orthoradial, cette absence de difficulté est due à l’hypothèse d’axisymétrie qui ne permet pas la localisation orthoradiale de l’endommagement. En effet, ainsi que l’illustre la figure 5.3 sur une coupe transversale de la pastille, l’hypothèse d’axisymétrie conduit à l’endommagement d’un anneau de combustible. Dans une représentation non axisymétrique, l’endommagement orthoradial se serait localisé dans un élément fini. L’énergie volumique dissipée est beaucoup moins importante

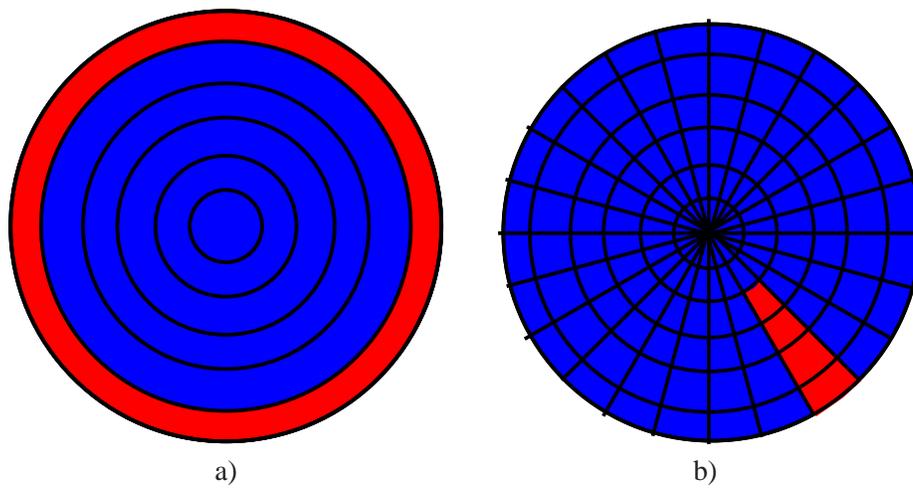


FIG. 5.3 – Absence de localisation de l'endommagement orthoradial en $2D$.

dans le second cas et dépend de la taille de l'élément utilisé. Ainsi, l'hypothèse d'axisymétrie conduit à une forte dissipation d'énergie par endommagement qui limite l'extension de celui-ci. Ceci explique pourquoi il n'est pas observé d'endommagement orthoradial de l'ensemble de la pastille en $1D$ alors qu'expérimentalement les premières fissures sont traversantes.

Absence de singularité des contraintes Une autre conséquence de la localisation est la singularité en $1/\sqrt{r}$ du champ de contrainte en pointe de fissure (équation 2.69). L'hypothèse d'axisymétrie ne permettant pas une telle localisation, le champ de contrainte obtenu ne présente pas de singularité.

Ce bon comportement n'est pas propre au modèle MEFISTO. Nous avons en effet proposé dans la note [Helfer 05a] un autre modèle d'endommagement spécifique au $1D$. Nous avons là aussi pu vérifier que les simulations ne conduisaient là non plus à aucune difficulté particulière.

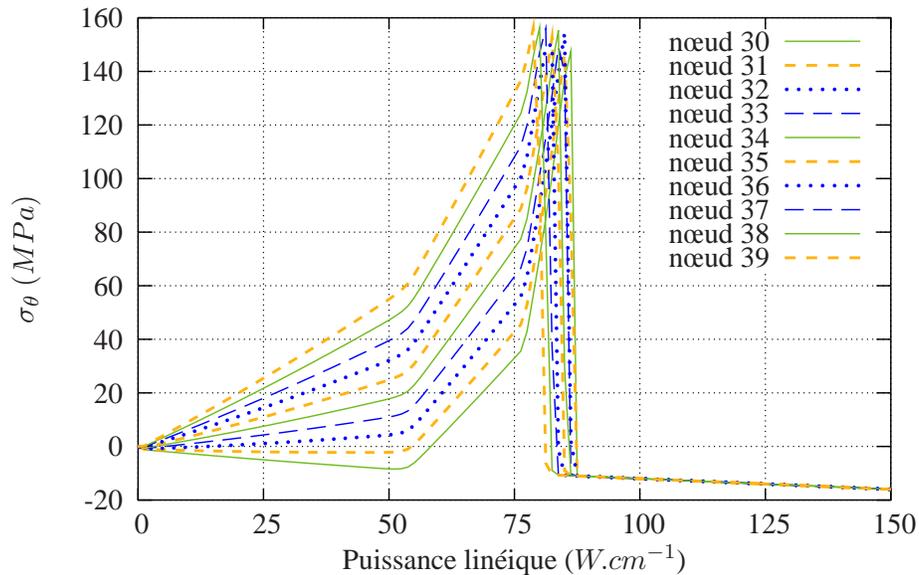


FIG. 5.4 – Evolution temporelle de la contrainte tangentielle pour un ensemble de point de GAUSS se situant au centre de la pastille (plus le numéro du point de GAUSS est élevé plus il est éloigné du centre de la pastille). Ces points de GAUSS fissurent pratiquement au même instant.

Évolution des contraintes dans la pastille, difficultés de convergence Le changement dans la réponse de la pastille observée sur la figure 5.1 peut être corrélé à une évolution rapide de l'endommagement dans la pastille mise en évidence sur la figure 5.4.

Cette figure montre l'évolution des contraintes orthoradiales en fonction de la puissance linéique pour un ensemble de nœuds situés dans la pastille représentant environ un cinquième de la pastille. Cette figure met en évidence quatre étapes :

- une évolution pratiquement linéaire jusqu'à une puissance linéique de l'ordre de $50 W.cm^{-1}$;
- une évolution notable entre 50 et $85 W.cm^{-1}$ à cause de l'endommagement des nœuds situés à la périphérie de la pastille, endommagement qui conduit à une réorganisation des contraintes dans la pastille ;
- une évolution très rapide aux alentours d'une puissance linéique de $85 W.cm^{-1}$, l'ensemble des nœuds présentés sur cette figure s'endommagent ;
- une évolution lente après $85 W.cm^{-1}$ où la contrainte suit les évolutions de la pression interne P_i .

Le nombre d'itérations nécessaire pour obtenir la convergence de l'algorithme de résolution global est *maximal* à $85 W.cm^{-1}$. Ces difficultés correspondent à une évolution rapide d'un état d'équilibre à un autre, semblable à celles intervenant dans la description de propagation instable de fissures et que nous avons décrites au paragraphe 2.4.6. Par ailleurs, nous avons pu vérifier que la convergence est d'autant plus difficile que la discrétisation de la pastille est finement maillée.

5.2 Réponse du modèle MEFISTO en 2D

Nous proposons dans cette section d'étudier la réponse du modèle MEFISTO utilisé dans une modélisation 2D du crayon combustible dans un cas similaire à celui décrit au paragraphe précédent. Cette étude vise à analyser l'ensemble des propriétés de ce modèle et de juger à la fois de sa pertinence à décrire le comportement de la pastille et sa facilité de mise en œuvre. En particulier, deux hypothèses, qui se distinguent par la prise en compte ou non de l'endommagement axial, sont évaluées.

L'étude a été faite à l'aide du code ZEBULON.

5.2.1 Le cas étudié : une montée en puissance nominale

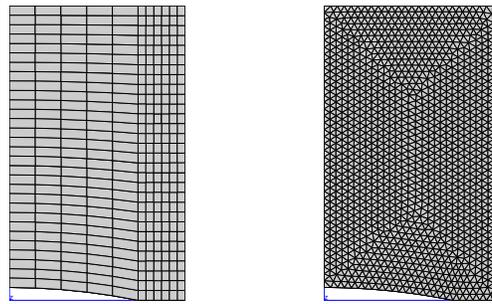
Nous avons choisi de tester la modélisation 2D dans le cas d'une montée en puissance. Le combustible est décrit à l'aide du modèle MEFISTO présenté au paragraphe 4.1.2. Cette loi étant indépendante du temps, nous avons utilisé un *historique fictif* pour effectuer notre étude. La puissance maximale atteinte est égale à $200 W.cm^{-1}$. Elle est de l'ordre de grandeur des puissances atteintes en fonctionnement normal d'un réacteur de puissance.

Nous nous intéresserons dans la suite aux endommagements axial et orthoradial en *fin de montée en puissance* ainsi qu'à leurs conséquences sur la mise en diabolos de la pastille.

Maillages utilisés Les premiers résultats obtenus avec le modèle MEFISTO ont montré une dépendance des résultats au maillage. Celle-ci est prévisible au vu de ce que nous avons décrit au paragraphe 2.4.3.2 du chapitre 2. Pour étudier l'impact de cette dépendance, différents maillages - plus d'une vingtaine - de taille de maille, d'orientation et de type d'éléments divers, ont été étudiés.

Nous présentons maintenant les conclusions obtenues en les illustrant pour deux maillages particuliers. Ces deux maillages, représentés sur la figure 5.5, sont respectivement :

- un maillage utilisant des éléments quadrangulaires à 4 nœuds. Par abus de langage, ce maillage sera appelé maillage rectangulaire dans la suite du chapitre (voir figure 5.5 a) ;
- un maillage utilisant des éléments triangulaires à 3 nœuds qui sera appelé maillage triangulaire dans la suite du chapitre (voir figure 5.5 b) ;



a) Maillage rectangulaire b) Maillage triangulaire

FIG. 5.5 – Maillages utilisés.

5.2.2 Prise en compte de l'endommagement axial et orthoradial

Nous décrivons dans ce paragraphe les principaux résultats obtenus avec le modèle MEFISTO en prenant en compte les endommagements axial et orthoradial du combustible.

5.2.2.1 Cartes d'endommagements axial d_z et orthoradial d_θ

Nous décrivons maintenant les cartes d'endommagements axial d_z et orthoradial d_θ obtenues à la fin de la montée en puissance. Nous avons observé que l'endommagement axial d_z apparaissait avant l'endommagement orthoradial d_θ , celui-ci est donc décrit en premier.

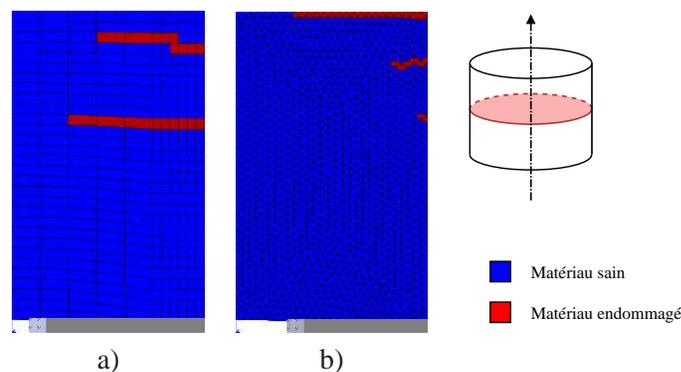


FIG. 5.6 – Carte de l'endommagement axial à la fin de la montée en puissance ($P_{lim} = 200 \text{ W.cm}^{-1}$) : a) pour le maillage rectangulaire, b) pour le maillage triangulaire.

Description de l'endommagement axial, dépendance des résultats au maillage La figure 5.6 décrit la carte de l'endommagement axial à la fin de la montée en puissance pour chacun des maillages de la figure 5.5. Cette figure fait apparaître des zones endommagées (en rouge) et des zones saines (en bleu)

Localisation de l'endommagement La figure 5.6 permet d'observer la *localisation* de l'endommagement axial, ce qui reproduit la formation d'une fissure axiale. Cette localisation se fait dans une bande ayant une épaisseur égale à la hauteur d'un élément fini. Ce phénomène est classique, nous l'avons décrit au paragraphe 2.4.3.2 du chapitre 2. Nous avons de plus pu observer une forte concentration des contraintes à l'extrémité de la bande de localisation, conformément à l'équation (2.69).

Dépendance des résultats au maillage L'endommagement axial d_z , représenté sur la figure 5.6, montre que les résultats du modèle de fissuration dépendent du maillage utilisé :

- pour le maillage rectangulaire, deux fissures axiales sont apparues. La plus importante est située au $3/8^e$ de la pastille ;
- pour le maillage triangulaire, une seule fissure axiale est apparue. Elle est localisée dans le plan médian pastille ;

D'après l'équation (4.15), le critère d'endommagement axial est fondé sur le champ de déformation élastique axial ϵ_z^{el} . Nous avons vérifié que celui-ci est pratiquement identique pour les deux maillages avant l'initiation de la fissure. Une petite hétérogénéité numérique suffit alors à localiser l'endommagement à un endroit plutôt qu'un autre.

L'étude numérique réalisée semble cependant montrer que la localisation de la fissure axiale se fait préférentiellement au plan médian-pastille pour des maillages fins. Pour des raisons de temps de calcul, il n'est pas souhaitable de recourir à des maillages trop fins. Les maillages utilisés ici ont été choisis proches des maillages que l'on souhaite utiliser en pratique pour décrire la pastille.

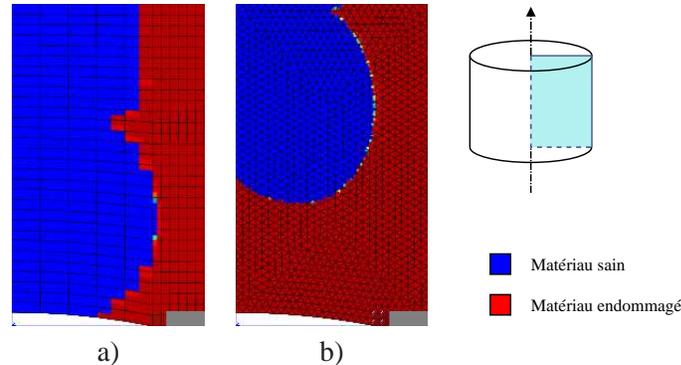


FIG. 5.7 – Endommagement orthoradial à la fin de la montée en puissance ($\mathcal{P}_{lin} = 200 \text{ W.cm}^{-1}$) : a) pour le maillage rectangulaire, b) pour le maillage triangulaire.

Description de l'endommagement orthoradial L'endommagement orthoradial d_θ observé en fin de montée en puissance avec les deux maillages est représenté sur la figure 5.7. Cette figure montre que :

- pour le maillage rectangulaire (figure 5.7 a)), nous voyons que l'endommagement orthoradial d_θ s'est développé en périphérie de la pastille. En comparant les figures 5.6 et 5.7, il est possible de voir sur la carte d'endommagement orthoradial la trace de la fissuration axiale au niveau du $3/8^e$ de pastille ;
- pour le maillage triangulaire (figure 5.7 b)), nous observons que l'endommagement orthoradial d_θ s'est développé sur une surface plus importante de la pastille que dans le cas du maillage rectangulaire. Notons que l'endommagement orthoradial atteint l'axe de symétrie.

Absence de singularité du champ de contrainte Contrairement à ce que nous avons observé avec l'endommagement axial, le champ de contrainte ne présente pas de singularité aux limites de la zone endommagée de manière orthoradiale. Nous retrouvons ainsi un comportement comparable à celui que nous avons observé en $1D$ au paragraphe 5.1.

Extension de l'endommagement orthoradial L'endommagement orthoradial représente les fissures radiales dans la pastille. Ces fissures apparaissent au cours de la première montée en puissance et sont traversantes, ce qui conduit à la fragmentation de la pastille. Le modèle MEFISTO ne reproduit pas une fragmentation totale de la pastille. Il décrit une extension de l'endommagement orthoradial relativement peu importante.

Pour expliquer ce fait, remarquons que, dans la modélisation $2D$, l'endommagement orthoradial peut en fait être associé à une énergie dissipée importante à cause de l'hypothèse d'axisymétrie. De manière plus précise, nous pouvons nous inspirer de la figure 5.3 pour comparer les énergies dissipées par la rupture d'un élément fini en $2D$ et $3D$. Soit S la surface de l'élément s'endommageant dans le plan (r, z) , l'énergie dissipée en $2D$

s'écrit $2\pi RS\Delta\Psi^{el}$ où R est le rayon de l'élément et $\Delta\Psi^{el}$ l'énergie élastique restituée. Dans une modélisation $3D$, l'énergie dissipée aurait été approximativement $2\pi hS\Delta\Psi^{el}$, où h est la troisième dimension de l'élément. Ainsi, l'énergie dissipée en $2D$ est toujours supérieure à l'énergie dissipée en $3D$ et, au vu de la taille d'élément à utiliser pour pouvoir reproduire l'énergie de fissuration de l' UO_2 , beaucoup plus importante que l'énergie qu'une fissure réelle dissiperait.

Nous retrouvons une conclusion semblable à celle faite en $1D$ au paragraphe 5.1.

Effet de l'endommagement axial Les différents maillages utilisés montrent que la localisation des fissures axiales joue un rôle important sur l'endommagement orthoradial. Sur l'ensemble des cas traités, nous avons pu observer que deux calculs conduisant à des localisations de l'endommagement axial proches conduisaient à des cartes d'endommagement orthoradial proches.

La carte d'endommagement orthoradial permet également de mesurer la capacité d'une fissure axiale à relaxer les contraintes. En effet, plus la relaxation des contraintes par la fissuration axiale est importante, moins l'endommagement orthoradial sera étendu. Au vu de la figure 5.7, une fissure axiale située au $3/8^e$ de pastille (cas du maillage rectangulaire) semble avoir un impact plus important qu'une fissure axiale située au médian-pastille (cas du maillage triangulaire).

5.2.2.2 Influence de l'endommagement sur la mise en diablo de la pastille

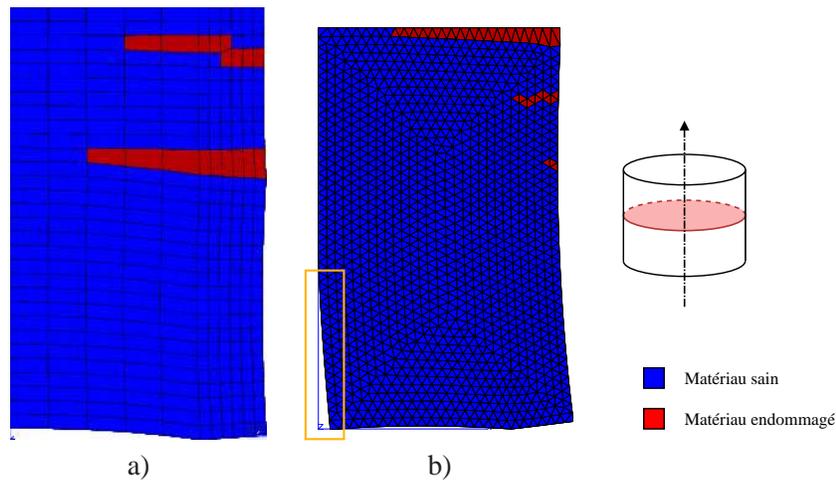


FIG. 5.8 – Déformées de la pastille en fin de montée en puissance.

La figure 5.8 montre que les déformées, visualisées avec une même amplification d'un facteur 30 du champ de déplacement, obtenues pour les deux maillages sont sensiblement différentes. Le cas du maillage rectangulaire présente une mise en diablo peu importante. Dans le cas du maillage triangulaire, cette mise en diablo est bien visible. Les comportements obtenus pour les 2 maillages sont également très différents le long de l'axe de symétrie. La figure 5.8 b) montre en particulier (boîte orange) un décollage des nœuds de l'axe de symétrie dans le cas du maillage triangulaire qui n'apparaît pas dans le cas du maillage rectangulaire (figure 5.8 a))

Influence de l'endommagement axial sur la mise en diablo La figure 5.9 représente le déplacement radial des nœuds situés sur la surface extérieure de la pastille de la figure 3.2. L'effet de la fissuration axiale est clairement visible. Chaque fissure axiale divise la pastille en différents morceaux. Chaque morceau ainsi obtenu prend une forme de diablo. Conformément à ce que laissait penser la figure 5.8, la figure 5.9 montre que la mise en diablo est beaucoup plus importante dans le cas du maillage triangulaire que dans le cas du maillage rectangulaire.

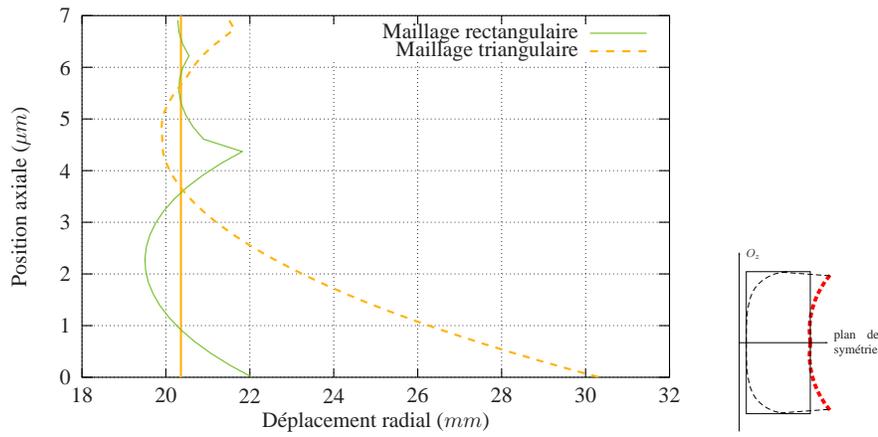


FIG. 5.9 – Mise en diabolisme obtenue pour le maillage rectangulaire et le maillage triangulaire.

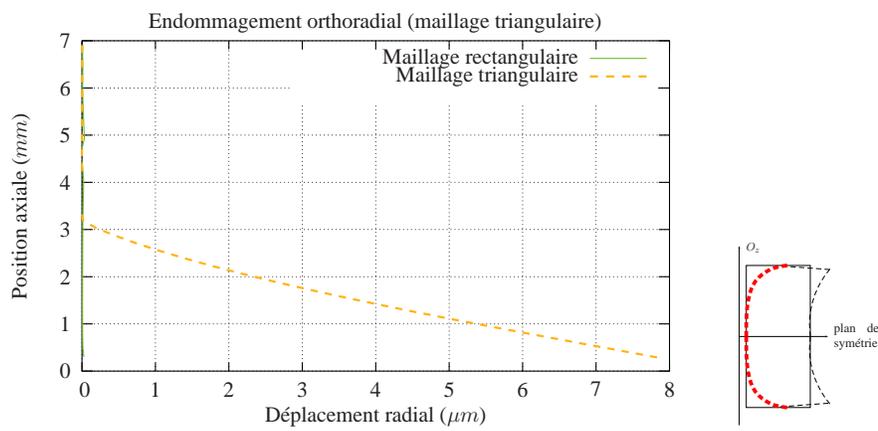


FIG. 5.10 – Déplacement radial des points de l'axe de symétrie pour les maillages rectangulaire et triangulaire.

Décollement des nœuds de l'axe de symétrie, influence sur l'effet diablo La figure 5.10 représente le déplacement radial des nœuds situés le long de l'axe de symétrie. Cette figure montre que :

- pour le maillage rectangulaire, le déplacement radial des points de l'axe est nul ;
- pour le maillage triangulaire, une partie des nœuds, situés dans la partie inférieure de la pastille, a pu se *décoller* de l'axe.

Ces résultats sont conformes aux observations faites à partir de la figure 5.8.

Les différentes observations que nous avons faites montrent que le décollement des nœuds de l'axe de symétrie contribue significativement au déplacement des nœuds situés en surface externe de pastille. En conséquence, l'effet diablo est magnifié par le décollement des nœuds de l'axe de symétrie.

Influence de l'endommagement orthoradial sur la mise en diablo Les décollements de l'axe de symétrie peuvent être reliés à l'endommagement orthoradial : les nœuds quittent l'axe de symétrie lorsqu'ils sont endommagés orthoradialement ($d_\theta = 1$).

L'endommagement orthoradial influence au premier ordre la mise en diablo de la pastille. Ces deux principaux effets sont :

- la perte de rigidité de la pastille (figure 5.1), également observée en 1D au paragraphe 5.1 ;
- le décollement des nœuds de l'axe de symétrie.

L'endommagement orthoradial apparaît être essentiel pour reproduire les déformations géométriques de la pastille.

5.2.2.3 Difficultés numériques

Nous décrivons ici des difficultés numériques qui sont apparues au cours du calcul.

Dépendance de la longueur de fissure axiale au maillage Bien que cela ne soit pas évident sur la figure 5.6, nous avons observé que la longueur de fissure est d'autant plus grande que le maillage est fin. Une étude spécifique à cette question, que nous ne détaillerons pas ici, nous a permis de conclure que la longueur de fissure dépendait à la fois de la taille de maille dans la direction de fissure et dans la direction perpendiculaire à celle-ci :

- la dépendance à la taille de maille perpendiculaire à sa direction de propagation est classique. Elle est liée au fait que l'énergie dissipée par endommagement est proportionnelle à cette taille de maille (voir le paragraphe 2.4.4 du chapitre 2). Plus cette énergie est petite, plus l'extension de la fissure est importante ;
- la dépendance à la finesse du maillage dans la direction de propagation semble liée à la singularité des contraintes et des déformations en pointe de fissure. Celles-ci y divergent en $1/\sqrt{r}$ d'après l'équation (2.69), r désignant ici la distance à la pointe de la fissure. La déformation élastique axiale étant utilisée dans le critère d'endommagement, la longueur de la fissure est d'autant plus grande que cette singularité est mieux décrite, c'est à dire que le maillage est fin.

Divergence des calculs L'étude menée a montré que les calculs divergeaient dès que la fissure axiale atteignait l'axe de symétrie. Cette divergence est liée à la séparation de la pastille en deux parties mécaniquement indépendantes. La partie supérieure n'étant soumise à aucun blocage mécanique, elle peut avoir un mouvement de corps rigide qui ne peut être décrit dans une approche quasi-statique.

Afin d'empêcher ce mouvement de corps rigide, nous avons tout d'abord tenté de maintenir la cohésion de la pastille en imposant une pression fictive au médian-pastille et en prenant en compte le caractère unilatéral de l'endommagement. Cette solution n'a pas suffi à stabiliser le calcul.

Une seconde tentative a consisté à empêcher une petite zone centrale de la pastille de fissurer. Cette solution n'est pas apparue satisfaisante pour deux raisons :

- des concentrations de contraintes importantes apparaissent à la limite de cette zone centrale. Ces contraintes dépassant largement la limite à rupture du combustible ;

- des fissurations axiales *parasites* apparaissent le long de la limite de cette zone centrale.

Conséquences pratiques La longueur de fissure axiale dépend à la fois du chargement, c'est à dire de la puissance linéique, et de la finesse du maillage. La divergence des calculs lorsque la fissure atteint l'axe de symétrie a deux conséquences pratiques importantes :

- il est impossible d'utiliser des maillages trop fins ;
- aucun calcul n'a pu être mené au bout pour des puissances linéiques de l'ordre de celles atteintes en rampe de puissance.

Ce deuxième point est essentiel pour nos applications : il signifie qu'aucun calcul de crayon en situation de rampe de puissance ne pourra être effectué si l'on tient compte de la fissuration axiale.

Description de la convergence des calculs Les différents tests effectués ont montré des difficultés de convergence à certains instants précis. Ces difficultés avaient déjà été notées en 1D au paragraphe 5.1.3. Elles correspondent à une évolution brutale de l'endommagement. Nous avons décrit de telles évolutions au paragraphe 2.4.6 quand nous avons étudié la propagation instable de fissure en quasi-statique (voir aussi l'annexe D).

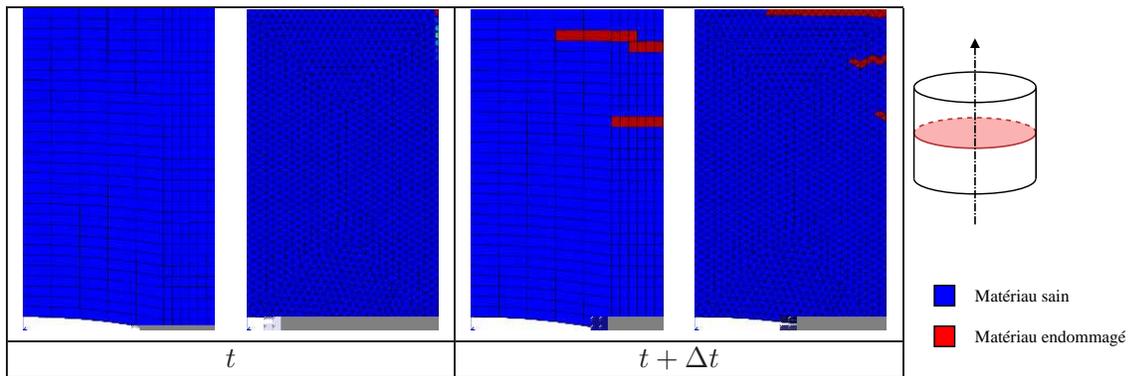


FIG. 5.11 – Brutalité de la fissuration axiale : les figures représentent les champs d'endommagement obtenus avant et après initiation de la fissuration axiale. La propagation de la fissure se fait en un pas de temps.

Brutalité de la fissuration axiale La figure 5.11, qui compare des profils d'endommagement axial entre deux instants séparés d'un incrément de temps, montre que la fissuration axiale est *brutale* : il suffit d'un incrément de temps pour qu'une fissure s'initie et se propage. Réduire le pas de temps ne permet pas de suivre cette propagation.

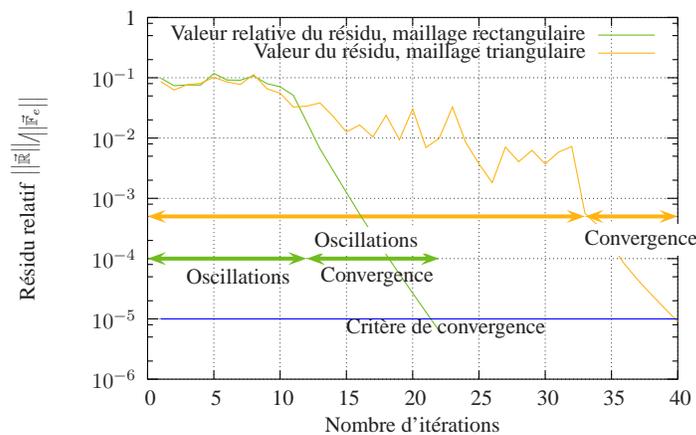


FIG. 5.12 – Convergence de l'algorithme de NEWTON-RAPHSON à l'incrément d'apparition des fissures axiales entre les instants t et $t + \Delta t$.

Convergence du schéma de calcul Une conséquence de la brutalité de l'endommagement axial est une convergence numérique difficile de l'algorithme de résolution global au cours de l'incrément de temps correspondant à l'apparition de la fissuration axiale. Le résidu \vec{R} , défini par l'équation (B.3), mesure l'écart entre la réaction de la structure et les sollicitations mécaniques qui lui sont imposées. L'équilibre correspond donc à un résidu nul (voir l'annexe B). La figure 5.12 illustre cette convergence par la valeur relative de la norme du résidu en fonction du nombre d'itérations de l'algorithme de résolution global. Cette convergence se fait en deux phases distinctes. La première phase montre des oscillations dans le résidu. Chaque oscillation semble correspondre à la rupture d'un élément. Au cours de cette étape, le résidu ne diminue pas sensiblement. Une fois l'ensemble des éléments rompus, c'est à dire que l'état de fissuration est stabilisé, la convergence est rapide.

Cette description laisse penser que la convergence est d'autant plus difficile que le nombre d'éléments est important, ce que nous avons pu observer au cours de notre étude. Ceci est illustré par les deux maillages présentés. Le maillage rectangulaire est plus grossier que le maillage triangulaire. La figure 5.12 nous montre que la convergence se fait en 21 itérations pour le maillage rectangulaire et en 40 itérations pour le maillage triangulaire.

Conclusions sur la modélisation d'un endommagement axial dans la pastille

La prise en compte de la fissuration axiale conduit à une relaxation des contraintes dans la pastille.

Nous avons de plus montré que la prise en compte de la fissuration axiale conduisait à de nombreuses difficultés. La première est une dépendance des résultats au maillage. La seconde est une divergence des calculs pour des puissances linéiques élevées ou des maillages trop fins.

5.2.3 Prise en compte du seul endommagement orthoradial

Nous proposons maintenant d'étudier la réponse du modèle quand la fissuration axiale n'est pas prise en compte. Le cas d'étude est toujours celui présenté au paragraphe 5.2.1.

5.2.3.1 Cartes d'endommagement orthoradial obtenu

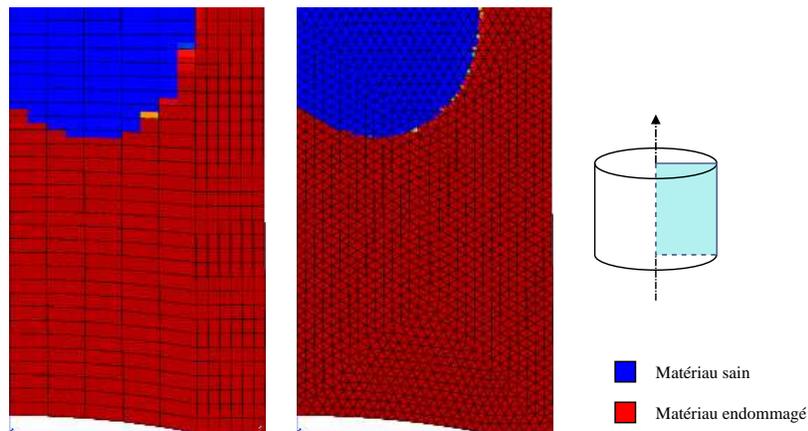


FIG. 5.13 – Comparaisons des profils d'endommagement obtenus en supprimant la fissuration axiale à 200 W.cm^{-1} .

Indépendance des résultats au maillage La prise en compte de l'endommagement orthoradial seul permet de retrouver un problème bien posé : les cartes d'endommagement orthoradial d_θ sont indépendantes du maillage (voir figure 5.13) : il semble y avoir *unicité de la solution*. Une dizaine de maillages différents (en taille de maille, en orientation ou en type d'éléments) ont été testés et tous ont conduit aux mêmes résultats.

Comparaison aux résultats obtenus au paragraphe 5.2.2.1 La comparaison des figures 5.7 et 5.13 montrent que l'endommagement orthoradial est beaucoup plus important en l'absence de prise en compte de la fissuration axiale. Ceci est facilement compréhensible. En effet, nous avons observé que la fissuration axiale avait un rôle important de relaxation des contraintes. En l'absence de cette fissuration, il est nécessaire de relaxer les contraintes par endommagement orthoradial plus important.

5.2.3.2 Influence de l'endommagement orthoradial sur la mise en diabolo de la pastille

La figure 5.14 montre la mise en diabolo de la pastille observée au moment du maximum de puissance.

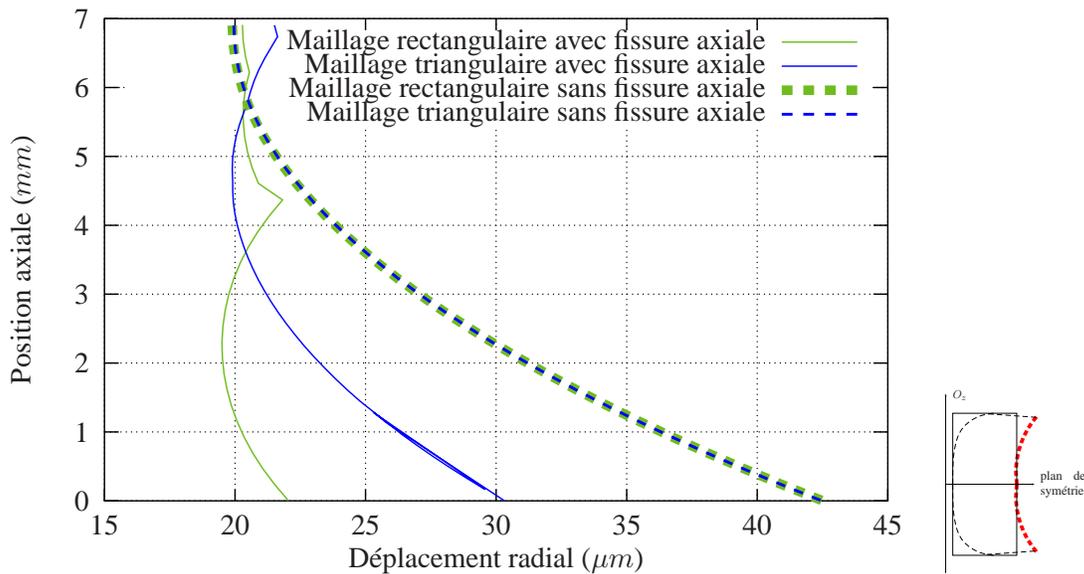


FIG. 5.14 – Comparaison des effets diabolo avec et sans fissuration axiale.

Cette figure confirme le rôle important de l'endommagement orthoradial pour la mise en diabolo de la pastille. D'un point de vue quantitatif, nous avons pu constater, sur un autre cas d'étude, que cette mise en diabolo est du même ordre de grandeur que celui obtenu par une modélisation 3D préfragmentée. Ceci nous a conforté dans le choix de ne pas prendre en compte la fissuration axiale.

5.2.3.3 Description de la convergence des calculs

La figure 5.15 montre l'évolution de l'endommagement orthoradial sur un pas de temps. Nous voyons que celui-ci évolue énormément.

En pratique, au vu de l'important changement dans l'état de fissuration de la structure au cours d'un pas de temps (figure 5.15), la convergence au cours de ce pas de temps est difficile et environ 50 itérations sont nécessaires à l'algorithme de résolution global pour trouver l'état d'équilibre. Ce nombre d'itérations est donné de manière indicative pour des maillages tels que celui de la figure 5.5 a). Ce nombre peut augmenter si l'on raffine le maillage. Nous retrouvons ainsi les conclusions données au paragraphe 5.2.2.3.

Notons que la diminution des pas de temps ne permet pas de trouver d'état d'équilibre intermédiaire entre ceux présentés à la figure 5.15. Nous avons au contraire pu remarquer que la convergence était d'autant plus difficile que le pas de temps est petit, ces difficultés pouvant aller jusqu'à la divergence du calcul.

Puissances importantes Par ailleurs, nous avons souligné une autre cause de divergence des calculs en 2D quand la fissuration axiale était prise en compte : le calcul divergeait dès qu'une fissure axiale arrivait sur l'axe de symétrie. Ceci nous avait empêché d'atteindre des chargements élevés caractéristiques des transitoires de

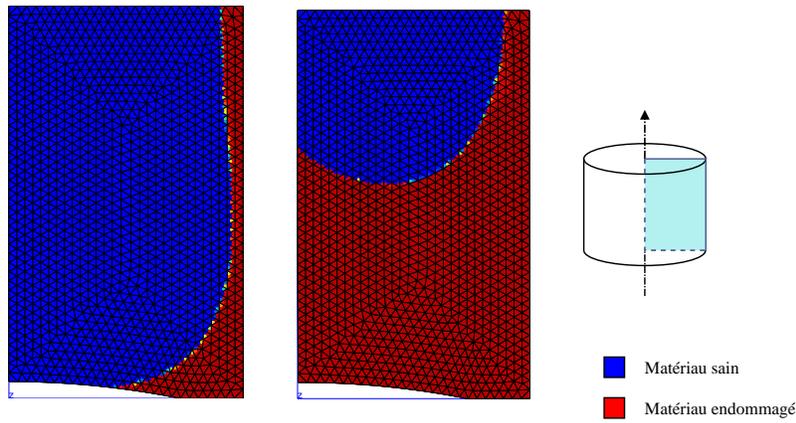


FIG. 5.15 – Évolution de l’endommagement orthoradial d_θ dans la pastille sur un incrément de temps entre les instants t et $t + \Delta t$.

puissance (c’est à dire des puissances de l’ordre de 400 W.cm^{-1}). Nous n’avons observé aucune difficulté à atteindre ce niveau de puissance en l’absence de fissure axiale.

5.3 Méthodes numériques

Les deux exemples traités dans ce chapitre ont permis de mettre en lumière certains aspects numériques qui avaient déjà été évoqués au cours la bibliographie. Trois points sont particulièrement intéressants :

- le choix de la méthode d’intégration ;
- la localisation de l’endommagement et la dépendance des résultats au maillage ;
- les sauts de solutions.

Choix d’une méthode d’intégration L’exemple traité en $1D$ a permis de tester deux méthodes d’intégration locale de la loi de comportement, une méthode implicite ($\theta = 1$) et une méthode de RUNGE-KUTTA d’ordre 2. Les résultats de ce test ont été présenté ailleurs ([Helfer 05c]). Cette comparaison a mis en évidence une très nette différence de temps de calcul en faveur de la méthode implicite. Celle-ci permet de traiter l’exemple présenté 5 fois plus rapidement que la méthode de RUNGE-KUTTA. Cette conclusion a motivé le choix des méthodes implicites pour l’implantation des différentes lois de comportements proposées dans ce mémoire dans le code ALCYONE (voir annexe C).

Localisation Les fissures sont représentées par les modèles d’endommagement local par des bandes dont la taille est donnée par la taille de maille utilisée. Cette localisation de l’endommagement conduit à de sérieuses difficultés de dépendances au maillage que nous avons rencontrées avec la prise en compte de la fissuration axiale de la pastille. La longueur de fissure axiale, par exemple, diminue avec la taille de maille pour 2 raisons : d’une part l’énergie dissipée diminue avec la taille de maille et d’autre part la singularité des contraintes est d’autant mieux décrite que le maillage est fin.

Une telle dépendance au maillage n’est pas observée sur l’endommagement orthoradial, ce qui s’explique par les hypothèses de symétrie utilisées (ici l’invariance par rotation, figure 5.3). L’énergie dissipée par l’endommagement orthoradial ne dépend plus de la discrétisation utilisée. Elle est relativement importante, ce qui limite l’endommagement orthoradial, en particulier quand la fissuration axiale est décrite.

L’extension de l’endommagement orthoradial est reliée à la mise en diabololo. Pour que celle-ci soit importante, nous avons fait le choix de ne pas décrire la fissuration axiale. Ce choix permet également à la modélisation $2D$ de contourner les difficultés associées à la localisation. Ce résultat est extrêmement important : il permet de fournir une application $2D$ suffisamment robuste pour les études combustibles.

Sauts de solutions L'utilisation de l'implantation du modèle MEFISTO dans CAST3M a conduit à des difficultés de convergence beaucoup plus importante qu'avec l'implantation de ce modèle sous ZEBULON lorsque l'endommagement évoluait rapidement.

Une étude plus approfondie nous a permis de montrer que le meilleur comportement numérique du modèle sous ZEBULON devait être relié à l'utilisation de la matrice tangente cohérente dans ce code. Cette conclusion est en accord avec le profond changement de rigidité de la structure qui rend l'utilisation de la matrice de raideur initiale particulièrement insatisfaisante.

Outre des problèmes de performances, l'utilisation du modèle MEFISTO sous CAST3M ne permet à l'heure actuelle que l'utilisation de maillages relativement grossiers (voir la figure 3.3). Même si une étude rapide de sensibilité tend à montrer que les résultats obtenus n'en semblent pas affectés, ce point mérite cependant d'être approfondi. L'utilisation de cette matrice dans CAST3M pour les lois de comportements externes est en cours de développement.

Bilan du chapitre

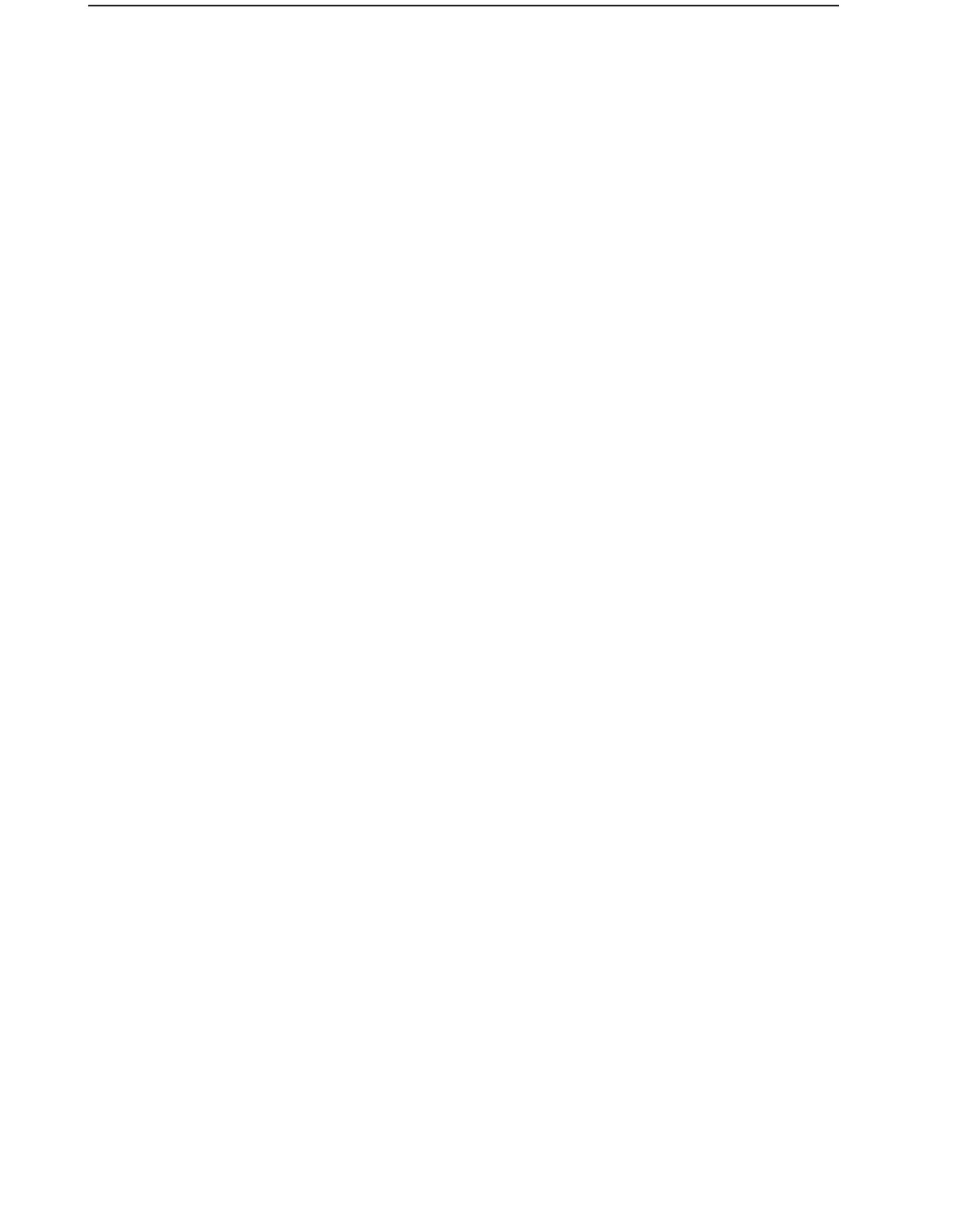
Ce chapitre a analysé les réponses du modèle MEFISTO dans le cas d'une description simplifiée d'une montée en puissance nominale d'une pastille combustible quand celle-ci est modélisée ou en $1D$ ou en $2D$.

L'étude s'est plus particulièrement portée sur la modélisation $2D$. Nous avons montré l'importance de l'endommagement orthoradial sur les déformations géométriques de la pastille combustible. Il reproduit la mise en diabolo de la pastille en décrivant une perte de rigidité de la pastille et un décollement des nœuds de l'axe de symétrie.

Cet endommagement est fortement dépendant de la prise en compte ou non de la fissuration axiale. Cette fissuration axiale conduit à un faible endommagement orthoradial de la pastille et par voie de conséquence une mise en diabolo peu importante de la pastille. Pour cette raison, nous avons choisi de ne pas décrire la fissuration axiale de la pastille dans la suite.

Quelque soit la modélisation considérée, $1D$ et $2D$, des difficultés de convergence apparaissent au cours de quelques pas de temps. Ces difficultés sont liées à des évolutions brutales de l'endommagement au cours du pas de temps considéré. Ces difficultés sont d'autant plus importantes que le maillage est fin et peuvent s'avérer bloquantes lors de l'utilisation du modèle sous CAST3M. L'analyse effectuée montre que l'utilisation de la matrice tangente cohérente permet de contourner cette difficulté.

La partie suivante applique les modèles décrits au cours de ce mémoire au cas du crayon I04-4, avec une mise en lumière particulière des résultats obtenus par la modélisation $2D$ du crayon combustible.



TROISIÈME PARTIE

APPLICATION À LA SIMULATION DU CRAYON COMBUSTIBLE

CHAPITRE 6

MODÉLISATION DU CRAYON I04-4

Objet du chapitre :

Nous décrivons dans ce chapitre le comportement sous irradiation d'un crayon combustible ayant subi deux cycles d'irradiation en réacteur de puissance suivis d'un transitoire de puissance.

Les résultats obtenus par une modélisation $2D$ du crayon combustible sont tout d'abord décrits. La comparaison des profilométries calculées aux profilométries expérimentales permet ensuite de juger la pertinence de cette modélisation.

Les résultats obtenus par une modélisation $2D$ sont ensuite comparés aux résultats obtenus respectivement par des modélisations $1D$ et $3D$ du crayon combustible pour lesquelles le retour d'expérience est plus important.

Sommaire du chapitre 6

6.1	Description du crayon I04-4, historique de puissance	120
6.2	Modélisation $2D$ du crayon I04-4 en irradiation de base	120
6.2.1	Phénoménologie en irradiation de base	121
6.2.2	Évolution des contraintes dans la gaine en irradiation de base	122
6.2.3	Profilométrie de la gaine après l'irradiation en base	123
6.3	Modélisation $2D$ du crayon I04-4 en transitoire de puissance	123
6.3.1	Phénoménologie détaillée	124
6.3.2	Évolution des contraintes dans la gaine en transitoire de puissance	125
6.3.3	Profilométrie de la gaine après le transitoire de puissance	126
6.3.4	Capacités de la modélisation $2D$	127
6.4	Comparaisons des résultats obtenus par différentes modélisations	127
6.4.1	Comparaison des résultats $3D$ aux résultats $2D$ au cours de l'irradiation de base	127
6.4.2	Comparaison des résultats $3D$ aux résultats $2D$ au cours du transitoire de puissance	129
6.4.3	Comparaison des modélisations $1D$ et $2D$ en irradiation de base	132

6.1 Description du crayon I04-4, historique de puissance

Afin de comprendre le comportement des crayons combustible, la démarche expérimentale consiste à irradier des crayons pendant plusieurs cycles en réacteur industriel. Ces crayons sont ensuite introduits en réacteur expérimental où ils subissent un transitoire de puissance. Expérimentalement, nous avons accès aux mesures de diamètres de gaine après l'irradiation de base et le transitoire de puissance.

Les codes de calculs sont validés en comparant les prévisions des calculs à ces données expérimentales. Ces données sont le résultat de l'ensemble des nombreux phénomènes intervenant dans le crayon. Il est donc nécessaire de comparer les prévisions des calculs sur de nombreux crayons expérimentaux aux conditions d'irradiation les plus larges possibles.

Les modèles que nous avons développés sont appliqués ici à la simulation du crayon I04-4. Ce crayon est représentatif d'une gamme assez large de résultats expérimentaux. D'autres études ([Castelier 05]), utilisant nos modèles, ont permis de simuler d'autres crayons. Les résultats obtenus corroborent les résultats présentés ici.

6.1.0.4 Historique de puissance

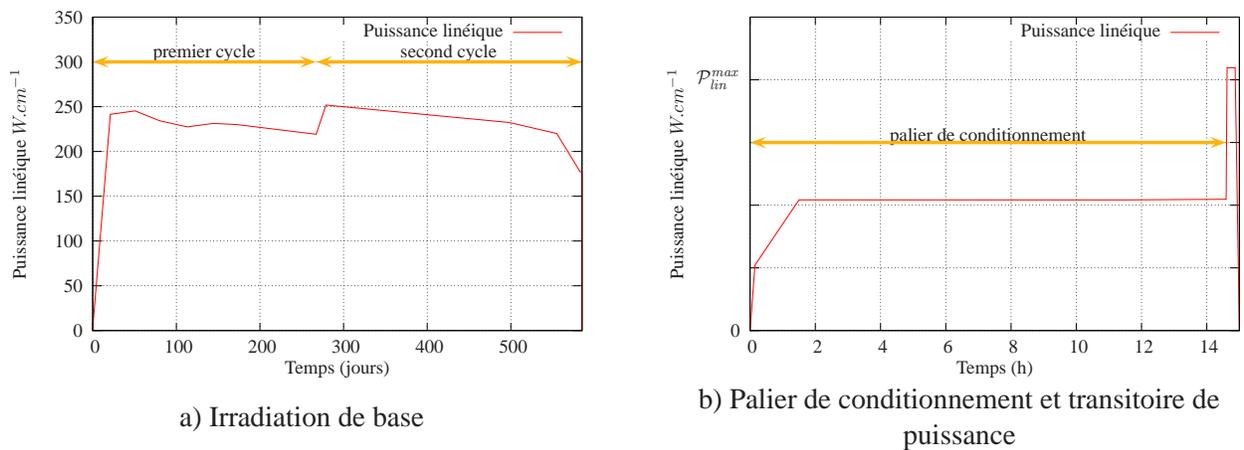


FIG. 6.1 – a) Historique de puissance linéique en irradiation de base pour le crayon I04-4. b) Historique de puissance linéique en palier de conditionnement et en rampe de puissance pour le crayon I04-4.

Le crayon I04-4 a été refabriqué à partir d'un crayon irradié pendant deux cycles dans le réacteur de puissance Gravelines V. L'historique de cette irradiation est retracé sur la figure 6.1 a). La durée de cette irradiation est d'environ 2 ans.

Le crayon I04-4 a subi une rampe de puissance dans le réacteur expérimental Osiris. L'historique de puissance de cette rampe est donné en figure 6.1 b). Cet historique présente un palier de conditionnement d'environ 15 heures. Ce palier est suivi d'une rampe de puissance caractérisée par une puissance maximale, notée \mathcal{P}_{lin}^{max} sur les figures, dont la valeur est supérieure à $400 W.cm^{-1}$ et une vitesse de montée en puissance fixée à $100 W.cm^{-1}.min^{-1}$. La durée du palier à puissance maximale est d'environ 15 minutes.

6.2 Modélisation 2D du crayon I04-4 en irradiation de base

Nous présentons maintenant les résultats obtenus par une modélisation 2D de l'irradiation de base du crayon I04-4. La loi de comportement utilisée pour le combustible est le modèle MEFISTO décrit au paragraphe 4.1 couplé à la loi viscoplastique LPCC décrite au paragraphe 4.3. Aucun paramètre de calage spécifique à la modélisation 2D n'a été introduit pour obtenir les résultats présentés.

6.2.1 Phénoménologie en irradiation de base

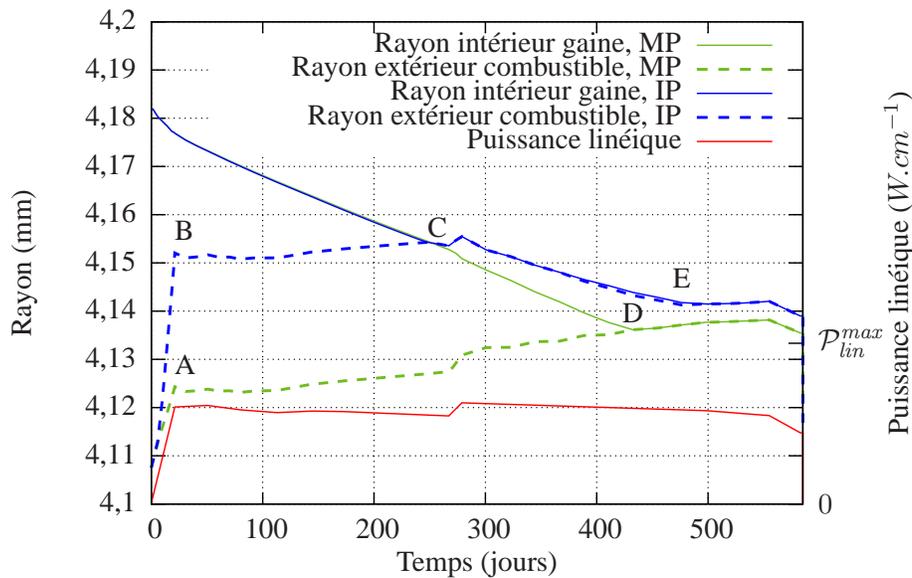


FIG. 6.2 – Évolution des rayons intérieurs de la gaine et extérieurs de la pastille au plan médian-pastille et au plan inter-pastilles au cours de l'irradiation de base pour le crayon I04-4.

L'évolution du crayon sous irradiation est complexe du fait des différents phénomènes mécaniques et physico-chimiques qui interviennent dans la pastille et la gaine. Elle peut être appréhendée au travers des changements géométriques du crayon au cours de l'irradiation de base.

Elle est illustrée dans ce paragraphe par les résultats de la modélisation 2D. Ces résultats sont en accord avec le retour d'expérience apporté par l'ensemble des simulations des crayons combustible effectuées par le passé. Ainsi l'intérêt de ce paragraphe est double. Il permet d'une part de montrer que la modélisation 2D est compatible avec ce retour d'expérience. Il permet également de décrire les phénomènes qui interviennent sous irradiation.

Les changements géométriques du crayon peuvent être compris en analysant l'évolution des rayons internes de la gaine et externes du combustible aux plans inter-pastilles et médian-pastille (points p_3 , p_4 , p_6 et p_7 de la figure 3.2 située page 80). Cette évolution, représentée sur la figure 6.2, peut se décomposer en trois phases successives :

- une première phase pastille-gaine à jeu ouvert ;
- une seconde phase au cours de laquelle le jeu pastille-gaine est partiellement fermé ;
- une troisième phase où le jeu pastille-gaine est fermé sur toute la hauteur de la pastille.

Jeu ouvert Lors de la première phase, les évolutions mécaniques de la pastille et de la gaine sont indépendantes. En début d'irradiation, la pastille adopte une forme de diabolo décrite sur la figure 1.6. Cette forme de diabolo se retrouve sur la figure 6.2 par un rayon de pastille au plan inter-pastilles supérieur d'une trentaine de microns au rayon au plan médian-pastille (points A et B). En début d'irradiation, le combustible densifie. Ce phénomène, difficilement visible sur la figure 6.2, conduit à une faible diminution des rayons partiellement compensée par un gonflement du combustible dû à la production de produits de fissions solides. Ce gonflement explique l'augmentation des rayons de la pastille aux plans médian-pastille et inter-pastilles, en particulier au cours du second cycle d'irradiation.

Durant cette première phase, la gaine évolue de la même manière dans les plans médian pastille et inter-pastilles. Elle est uniformément sollicitée sur sa face externe par le caloporteur et sur sa face interne par le gaz de remplissage. La pression du caloporteur étant plus importante que la pression interne, la gaine est sollicitée en compression. Par écoulement viscoplastique sous irradiation, son rayon diminue. La vitesse d'écoulement évolue d'abord rapidement en début d'irradiation (écoulement primaire) et se stabilise (écoulement secondaire) :

l'évolution du rayon de la gaine devient linéaire en fonction du temps.

Au cours de cette première phase, la pastille gonfle alors que le rayon de la gaine diminue. Ils rentrent en contact au niveau du plan inter-pastilles (point C) en fin de premier cycle d'irradiation, ce qui marque le début de la seconde phase.

Refermeture du jeu Au moment du contact pastille-gaine au plan inter-pastilles (point C), la dilatation thermique de la pastille, sa mise en diabolo et l'écoulement viscoplastique de la gaine contribuent à part quasiment égales ([Garcia 98b]) au comblement du jeu initial. L'évolution de la gaine cesse alors d'être uniforme. Au plan inter-pastilles, la gaine prend appui sur la pastille, ce qui se traduit, sur la figure 6.2, par ralentissement de la réduction de son rayon. La gaine s'oppose à la mise en diabolo de la pastille, qui se réduit progressivement. Il est d'usage de parler de remise en place du fragment, phénomène induit par l'écoulement viscoplastique sous irradiation du combustible. Au plan médian-pastille, le rayon de la gaine évolue avec une cinétique similaire à celle qu'elle avait au cours de la première phase. Cette phase se termine par le contact entre la pastille et la gaine au niveau du plan médian-pastille (point D) qui se produit au milieu du second cycle. Le jeu est alors comblé sur toute la hauteur de la pastille : la pastille et la gaine sont solidaires.

Jeu fermé Au plan médian-pastille, la gaine suit le gonflement de la pastille et voit son rayon augmenter à nouveau. Au plan inter-pastilles, la remise en place du fragment se termine. Le fragment prend appui sur les fragments adjacents pour résister à la poussée de la gaine. La figure montre que la modélisation 2D, grâce au modèle de guérison des fissures proposé par le modèle MEFISTO, semble pouvoir rendre compte de ce phénomène. Il se traduit par une augmentation du rayon au plan inter-pastilles à partir du point E. Les rayons de la pastille et de la gaine aux plans inter-pastilles et médian-pastille évoluent de manière similaire sous l'effet du gonflement de la pastille. Nous pouvons observer qu'en fin de second cycle, les rayons aux plans inter-pastilles sont plus importants qu'au médian-pastille, ce qui se traduit, après retour à froid par la formation de plis primaires sur la gaine.

6.2.2 Évolution des contraintes dans la gaine en irradiation de base

Le paragraphe précédent a montré sur les changements géométriques de la pastille et de la gaine que la modélisation 2D pouvait rendre compte qualitativement de tous les comportements apparaissant sous irradiation. Le but des codes de calcul étant de pouvoir quantifier le chargement mécanique de la gaine, il est intéressant de voir comment celui-ci évoluait au cours de l'irradiation de base.

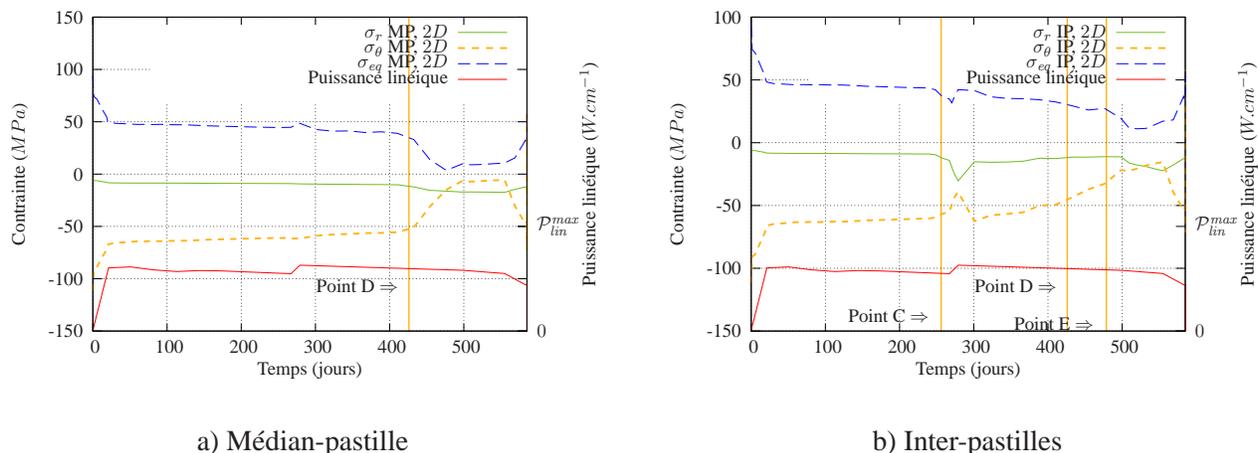


FIG. 6.3 – Évolution des contraintes en peau interne de gaine en irradiation de base. a) Au plan médian-pastille (point p_9 de la figure 3.2). b) Au plan inter-pastilles (point p_6 de la figure 3.2).

Nous présentons sur la figure 6.3 l'évolution des contraintes dans la gaine en peau interne de gaine au niveau des plans médian-pastille (point p_9 de la figure 3.2) et inter-pastilles (point p_6 de la figure 3.2). Nous

avons adopté la convention classique qui représente les tractions par des valeurs positives de la contrainte. La contrainte radiale σ_r permet de mesurer les efforts exercés en peau interne de gaine. Elle est égale à l'opposée de la somme de la pression interne P_i et de la pression de contact $P_{contact}$:

$$\sigma_r = - (P_i + P_{contact})$$

La contrainte circonférentielle σ_θ permet de mesurer le chargement global de la gaine. La contrainte équivalente σ_{eq} est reproduite car elle gouverne l'écoulement viscoplastique de la gaine.

Jeu ouvert À jeu ouvert, les contraintes dans la gaine sont uniformes et sont dues à la différence entre la pression interne du crayon et la pression exercée sur la gaine par le fluide caloporteur. La pression du caloporteur étant constante, elles évoluent à cause de l'augmentation progressive de la pression interne dans le crayon.

Refermeture du jeu En fin de premier cycle, la pastille et la gaine rentrent en contact au niveau du plan inter-pastilles (point C). La pression de contact $P_{contact}$ fait diminuer la contrainte radiale σ_r en peau interne de gaine et la contrainte équivalente σ_{eq} (figure 6.3 b)). Cette diminution de la contrainte équivalente explique la diminution de la vitesse de déformation viscoplastique de la gaine observée au paragraphe précédent (figure 6.2).

Jeu fermé Une fois le jeu pastille-gaine entièrement refermé (point D), la gaine prend appui sur la pastille pour s'opposer à la pression du caloporteur. La pression de contact $P_{contact}$ augmente progressivement au plan médian-pastille avec pour effet une nette augmentation de la contrainte circonférentielle σ_θ observable sur la figure 6.3 a). Cette contrainte σ_θ augmente au cours du second cycle jusqu'à devenir pratiquement nulle.

Au plan inter-pastilles, la fin de la remise en place du fragment se traduit par une augmentation de la pression de contact à partir du point E de la figure 6.3 b).

6.2.3 Profilométrie de la gaine après l'irradiation en base

Les profilométries, c'est-à-dire les mesures de diamètre de gaine, après irradiation sont les principales données expérimentales permettant de juger les résultats d'un code de calculs.

Les diamètres initiaux de la gaine (avant irradiation) sont connus avec une précision de l'ordre du micron. De plus, les profilométries expérimentales mesurent également une couche de zircone non prises en compte dans les calculs. Il est cependant possible d'estimer son épaisseur. Elle est de l'ordre de $7 \mu m$ pour le crayon I04-4.

Les mesures expérimentales sont comparées au calcul sur la figure 6.4. Nous avons appliqué aux profilométries calculées une translation globale de $9 \mu m$, inférieure aux incertitudes sur le diamètre initial et liées à la couche de zircone. De plus, la modélisation $2D$ ne représentant qu'une moitié de pastille, la profilométrie calculée a été complétée par son symétrique par rapport au plan médian-pastille afin de représenter la pastille dans son intégralité.

La comparaison faite sur la figure 6.4 montre que la modélisation $2D$ est capable de reproduire avec une bonne précision l'apparition d'un pli primaire marqué au niveau du plan inter-pastilles. Un faible pli secondaire au plan médian-pastille peut également être observé expérimentalement et est également reproduit par la simulation.

6.3 Modélisation $2D$ du crayon I04-4 en transitoire de puissance

Après l'irradiation en réacteur de puissance, le crayon est refabriqués pour être introduit en réacteur expérimental où il subit un transitoire de puissance après un palier de conditionnement qui ne sera plus considéré dans la suite.

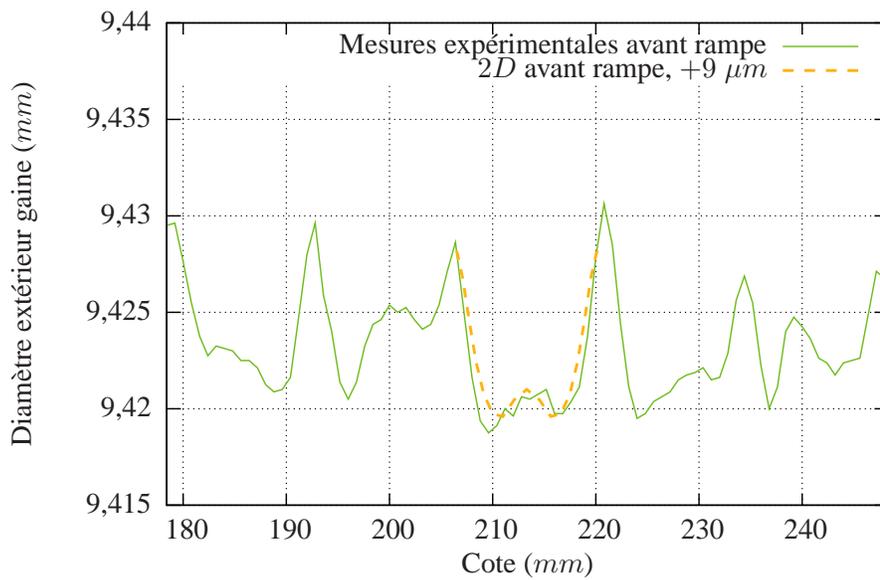


FIG. 6.4 – Comparaison entre les profilométries expérimentales et calculées avec le modèle MEFISTO couplé à la loi de comportement viscoplastique du LPCC pour le crayon I04-4. Les résultats calculés sont présentés après décalage global de la profilométrie calculée.

Nous présentons dans ce paragraphe les résultats obtenus par une modélisation 2D du transitoire de puissance subi par le crayon I04-4.

6.3.1 Phénoménologie détaillée

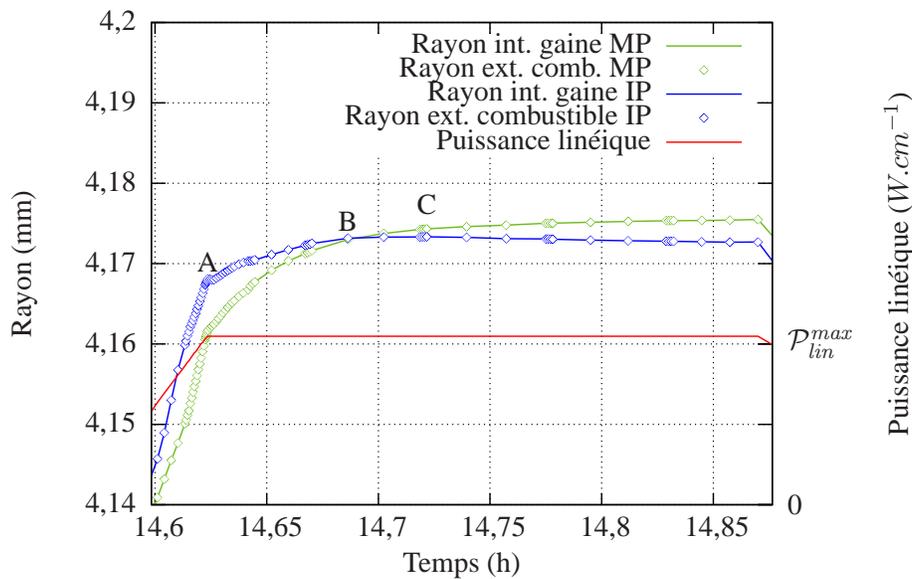


FIG. 6.5 – Évolution des rayons externes pastille et internes gaine aux plans médian-pastille et inter-pastilles au cours du transitoire de puissance.

Au cours du transitoire de puissance le jeu est refermé. Les rayons externes pastille et internes gaine aux plans médian-pastille et inter-pastilles sont confondus (figure 6.5) et la gaine suit les dilatations de la pastille. Ces dilatations ont deux causes : l'élévation de température et le gonflement dû aux produits de fissions gazeux ([Garcia 98b]). Il est possible de distinguer trois points particuliers :

- le point A qui marque la fin de la montée en puissance maximale ;

- le point B à partir duquel le rayon au plan médian-pastille est supérieur au rayon au plan inter-pastilles ;
- le point C où le rayon au plan inter-pastilles commence à diminuer ;

Montée en puissance Au cours de la montée en puissance, la pastille se dilate sous l'effet de l'augmentation de température. Cette dilatation conduit à un accroissement rapide et important du rayon de la gaine qu'il est possible d'observer sur la figure 6.5. Les évolutions des rayons aux plans inter-pastilles et médian-pastille sont similaires.

Gonflement gazeux Une fois le palier à puissance maximale atteint, la pastille continue de gonfler sous l'effet des produits de fissions gazeux. Son effet est plus important au plan médian-pastille et se traduit sur la profilométrie expérimentale par un accroissement du pli secondaire Ce comportement se retrouve sur la figure 6.5. Nous y voyons que le rayon augmente plus vite au plan médian pastille qu'au plan inter-pastilles. Nous pouvons également observer que le rayon au plan inter-pastilles n'augmente pratiquement plus avant de commencer à diminuer à partir du point C.

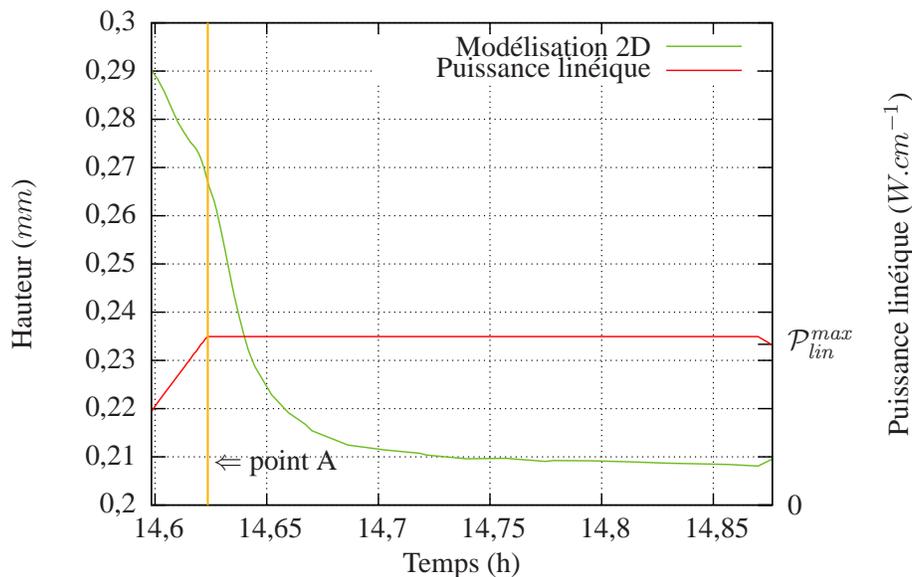


FIG. 6.6 – Comblement de l'évidement au cours du transitoire de puissance.

Comblement de l'évidement L'évidement de la pastille a pour but d'accommoder les déformations à chaud de la pastille. Après une rampe de puissance, les observations expérimentales montrent que cet évidement a tendance à se combler. Le comblement de l'évidement peut être caractérisé par la diminution de hauteur du point p_1 de la figure 3.2. Son évolution au cours du transitoire de puissance est représentée en figure 6.6. Cette figure montre que la modélisation 2D décrit de manière satisfaisante le comblement de l'évidement. Au cours du palier de puissance (point A), ce comblement est dû aux déformations inélastiques du combustible, son gonflement et son écoulement viscoplastique.

6.3.2 Évolution des contraintes dans la gaine en transitoire de puissance

Au cours du transitoire de puissance, la gaine subit le gonflement de la pastille et voit son rayon fortement augmenter. Elle se trouve sollicitée en traction et risque de se rompre.

L'évolution des contraintes dans la gaine au cours du transitoire de puissance, quand celle-ci est la plus fortement sollicitée, est un résultat particulièrement intéressant pour juger la pertinence de la modélisation 2D. Cette évolution est représentée en figure 6.7 en peau interne de gaine au niveau du point médian-pastille (point

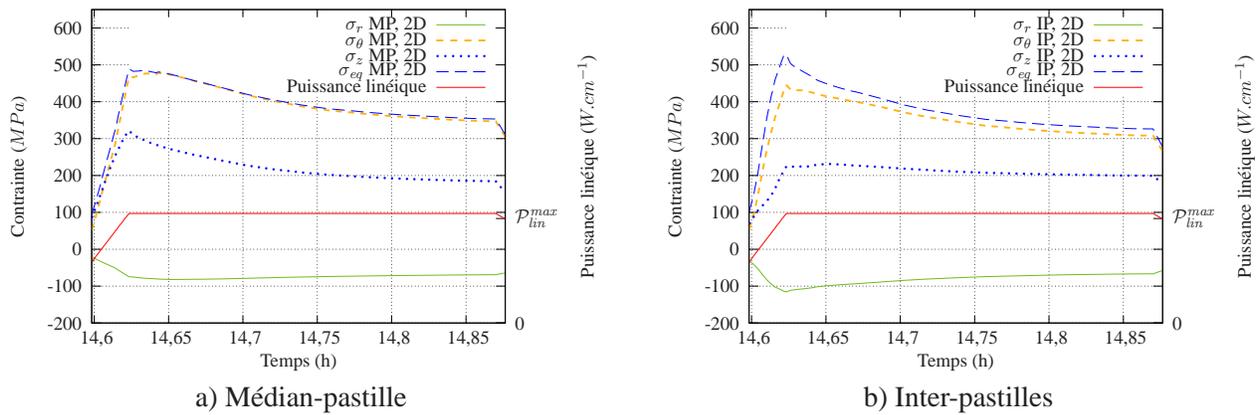


FIG. 6.7 – Évolution des contraintes en peau interne de gaine au cours de la rampe de puissance a) au plan médian-pastille (point p_9 de la figure 3.2) b) au plan inter-pastilles (point p_6 de la figure 3.2)

p_9 de la figure 3.2) au cours de la rampe de puissance et au niveau du point inter-pastilles (point p_6 de la figure 3.2).

La figure 6.7 montre que la contrainte σ_θ est la plus importante en valeur absolue. Cette contrainte est représentative du niveau de chargement de la gaine. Nous pouvons observer que la modélisation 2D prévoit que sa valeur est plus importante au plan médian-pastille qu’au plan inter-pastilles. Ce résultat est contraire à l’expérience : les ruptures de gaine sont observés expérimentalement au plan inter-pastilles. Ce résultat, déjà observé en 3D, est analysé par Plancq et coll. ([Plancq 01]) qui l’expliquent par une modélisation insuffisamment précise des conditions de frottement ou d’ancrage au niveau du plan inter-pastilles. Rappelons qu’aucune condition de frottement n’est utilisée dans les résultats présentés ici en 2D.

Pendant le palier à haute puissance, nous pouvons observer une relaxation progressive des contraintes dans la gaine.

6.3.3 Profilométrie de la gaine après le transitoire de puissance

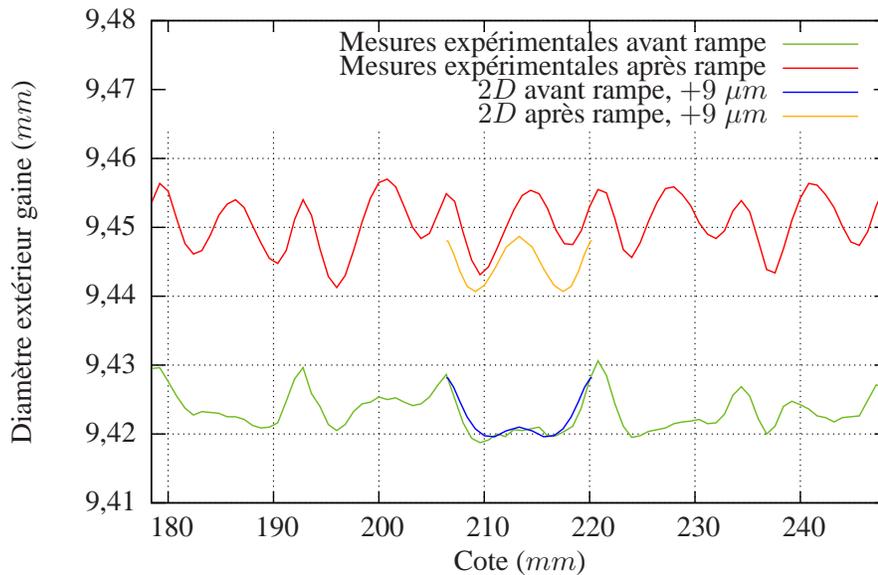


FIG. 6.8 – Comparaison entre les profilométries expérimentales et calculées par une modélisation 2D pour le crayon I04-4. a) Résultats bruts b) Résultats obtenus après décalage global de la profilométrie calculée.

Afin de juger les capacités prédictives de la modélisation 2D, la figure 6.8 compare les profilométries me-

surées et calculées en fin d'irradiation de base et après le transitoire de puissance. Ces profilométries montrent une augmentation moyenne du diamètre de la gaine que la modélisation $2D$ semble pouvoir retrouver.

Après le transitoire de puissance, les profilométries montrent que le pli secondaire s'est accru jusqu'à devenir légèrement plus important que le pli primaire. La modélisation $2D$ semble à même de reproduire cette augmentation.

6.3.4 Capacités de la modélisation $2D$

Les résultats obtenus sur la modélisation $2D$ du crayon I04-4 permettent de donner un premier avis sur la pertinence de celle-ci. D'un point de vue qualitatif, la modélisation $2D$ reproduit correctement toute la phénoménologie du comportement sous irradiation des crayons combustible. D'un point de vue quantitatif, elle est à même de prédire les principaux changements géométriques du crayon.

Ces conclusions doivent être étayées. Pour ce faire, il est d'une part possible d'analyser les résultats obtenus sur d'autres crayons présentant une gamme la plus large possible de conditions d'irradiation. Ce travail a été effectué ailleurs ([Castelier 05]) sur cinq autres crayons. La modélisation $2D$ a pu reproduire leurs changements géométriques. Les conclusions de ce travail confirment les résultats obtenus sur le crayon I04-4. D'autre part, les résultats obtenus par la modélisation $2D$ peuvent être comparés et confirmés par les autres modélisations développées antérieurement au CEA, les modélisations $1D$ et $3D$, pour lesquelles le retour d'expérience est important. Cette comparaison est présentée maintenant.

6.4 Comparaisons des résultats obtenus par différentes modélisations

La comparaison des différentes modélisations du crayon combustible permet de garantir la cohérence des résultats obtenus. Elle permet de plus de conforter certains résultats de calcul qui ne sont pas directement mesurables expérimentalement, l'évolution des contraintes dans la gaine par exemple.

La modélisation $2D$ est comparée aux deux modélisations plus classiques développées au CEA, les modélisations $1D$ et $3D$. La modélisation $1D$, dans l'état actuel de développement de l'application ALCYONE, n'étant pas encore en mesure de prendre en compte le gonflement gazeux, la comparaison des modélisations $1D$ et $2D$ se fera uniquement sur l'irradiation de base.

Cette comparaison est grandement facilitée par le code ALCYONE développé dans le cadre du projet PLEIADES qui permet de se baser sur un ensemble de modèles communs à toutes les modélisations.

6.4.1 Comparaison des résultats $3D$ aux résultats $2D$ au cours de l'irradiation de base

Nous présentons ici la comparaisons de quelques résultats obtenus par les modélisations $2D$ et $3D$ au cours de l'irradiation de base. La modélisation $3D$ décrit un fragment de pastille et remplace le comportement fragile du combustible par un comportement plastique, décrit au paragraphe 4.2.1. Dans la suite, les résultats du calcul $3D$ ont été pris au niveau du plan de symétrie du fragment, là où ces 2 modélisations sont *a priori* les plus comparables.

6.4.1.1 Évolution des rayons au cours de l'irradiation de base

La figure 6.9 compare les évolutions des rayons intérieurs gaine et extérieurs pastille obtenues par des calculs $2D$ et $3D$ au cours de l'irradiation de base pour le crayon I04-4.

Au plan médian-pastille, la figure 6.9 a) montre que les évolutions observées sont comparables. La représentation $2D$ de la pastille semble donc conduire à des rigidités comparables à celles d'un fragment. Le contact entre la pastille et la gaine se produit à des instants proches en $3D$ et $2D$.

Au plan inter-pastilles, le calcul $3D$ prédit une mise en diabolo supérieure d'une vingtaine de microns à celle prédite en $2D$. De fait, le jeu inter-pastilles est refermé plus tôt, au premier quart du premier cycle

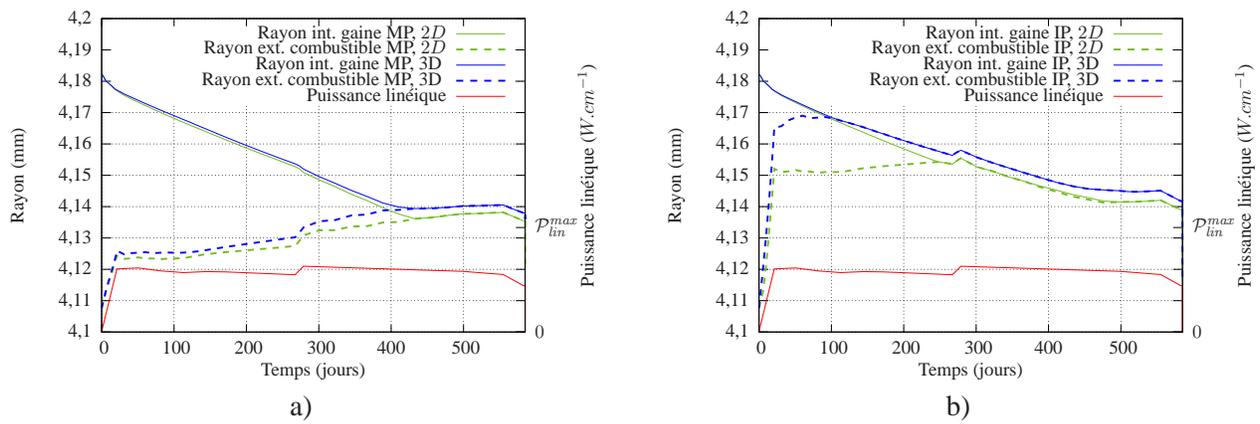


FIG. 6.9 – Comparaison des évolutions des rayons intérieurs gaine et extérieurs pastille obtenues par des calculs 2D et 3D au cours de l’irradiation de base pour le crayon I04-4 a) au plan médian-pastille b) au plan inter-pastilles.

d’irradiation. La figure 6.9 montre cependant que l’évolution du rayon interne gaine reste similaire entre la modélisation 3D et 2D. Ceci signifie que la pastille exerce une force de contact faible sur la gaine. En fait, la déformation viscoplastique sous irradiation de la pastille suffit à redresser la pastille sans que la gaine ne soit fortement sollicitée. Ceci permet de retrouver des déplacements de pastilles similaires en 2D et 3D en fin de premier cycle. Les évolutions des rayons externe pastille et interne gaine observées par la suite sont ensuite très proches. Ce résultat retrouve le fait que la pastille n’exerce d’effort important sur la gaine qu’après la moitié du second cycle, une fois la pastille pratiquement redressée. La pastille prend alors appui sur les fragments voisins pour repousser la gaine.

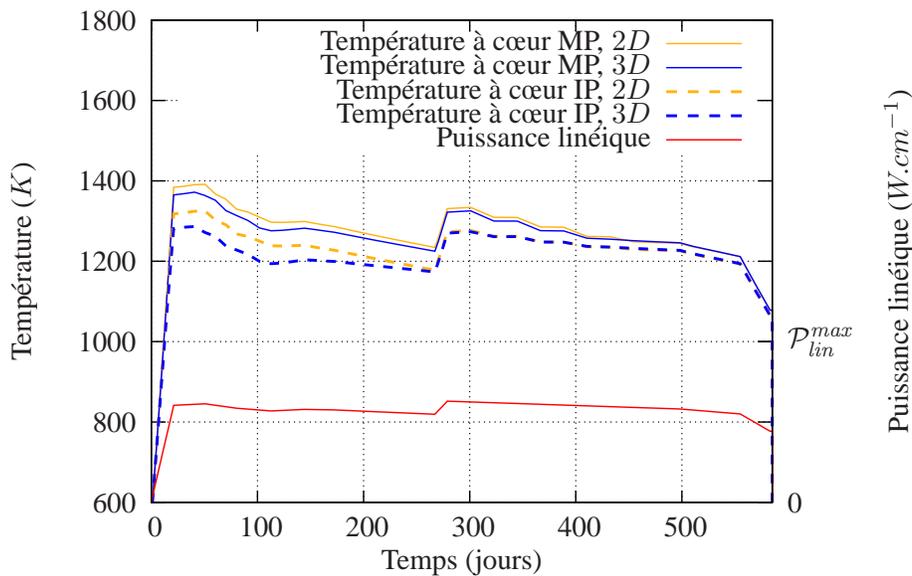


FIG. 6.10 – Évolution des températures à cœur calculées par des modélisations 2D et 3D.

6.4.1.2 Thermique

Les températures atteintes dans le combustible influencent la plupart des phénomènes intervenant dans la pastille sous irradiation. Il est donc important d’en faire un calcul le plus réaliste possible. La figure 6.10 compare les évolutions des températures à cœur calculées par des modélisations 2D et 3D aux plans médian-pastille et inter-pastilles.

Le coefficient d'échange thermique entre la pastille et la gaine dépend de l'ouverture du jeu et conduit à des températures à cœur d'autant plus élevées que le jeu pastille gaine est important. En conséquence, la plus faible mise en diablo prédite par la modélisation $2D$ conduit à des températures à cœur globalement plus élevées que celles prédites par la modélisation $3D$. Cette différence est essentiellement visible au cours du premier cycle d'irradiation.

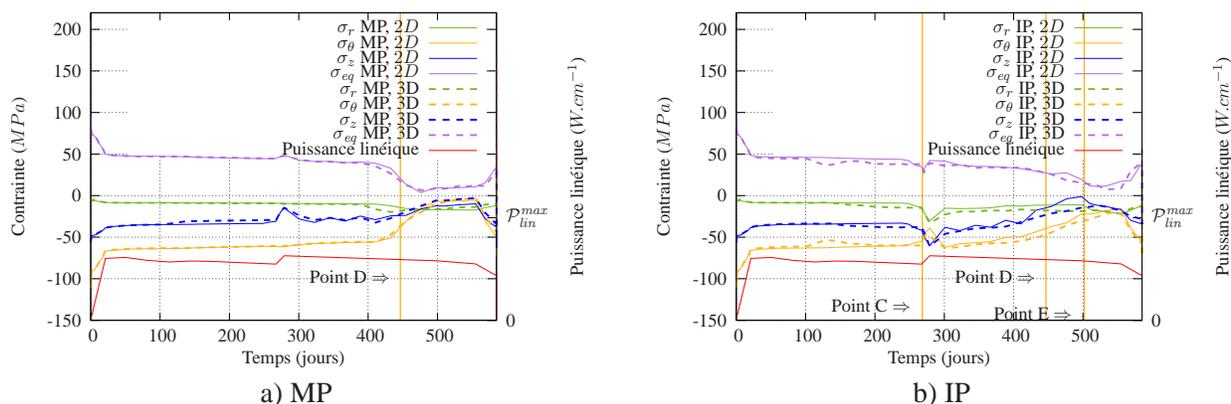


FIG. 6.11 – Évolution des contraintes en peau interne de gaine au cours de l'irradiation de base.

6.4.1.3 Évolution des contraintes en peau interne de gaine au cours de l'irradiation de base

Il est intéressant de comparer les évolutions de contraintes dans la gaine prédites par les modélisations $2D$ et $3D$ au cours de l'irradiation de base (figure 6.11). La première constatation est que les contraintes prédites sont extrêmement proches. De manière plus précise, nous pouvons nous intéresser aux différents instants particuliers que l'analyse faite au paragraphe 6.2.2 avait mis en évidence (figure 6.3).

L'instant de contact au plan médian-pastille (point D) est pratiquement identique dans les deux modélisations. Nous pouvons noter que les évolutions de la contrainte orthoradiale σ_θ sont confondues : les efforts exercés par la pastille sur la gaine en $2D$ et en $3D$ sont identiques. La situation est plus délicate à analyser au plan inter-pastilles. On peut tout de même noter que les contraintes exercées sur la gaine restent très similaires malgré un contact pastille-gaine plus précoce en $3D$.

6.4.2 Comparaison des résultats $3D$ aux résultats $2D$ au cours du transitoire de puissance

Nous présentons ici la comparaison de quelques résultats obtenus par les modélisations $2D$ et $3D$ au cours du transitoire de puissance. Cette comparaison permet de discuter la validité de l'utilisation du modèle de plasticité en $3D$, décrit au paragraphe 4.2.1, afin de rendre compte du caractère fragile du combustible.

6.4.2.1 Températures à cœur

La figure 6.12 compare les températures à cœur prédites par les deux modélisations $2D$ et $3D$ aux plans médian-pastille et inter-pastilles. Il est intéressant de noter que les différences observées sont minimales, de l'ordre de la dizaine de Kelvin.

6.4.2.2 Évolution des rayons

La figure 6.13 compare l'évolution des rayons interne gaine aux plans médian-pastille et inter-pastilles prédits par les modélisations $2D$ et $3D$ au cours du transitoire de puissance. Alors que les évolutions observées au plan inter-pastilles semblent similaires, des différences notables apparaissent au plan médian-pastille. D'une

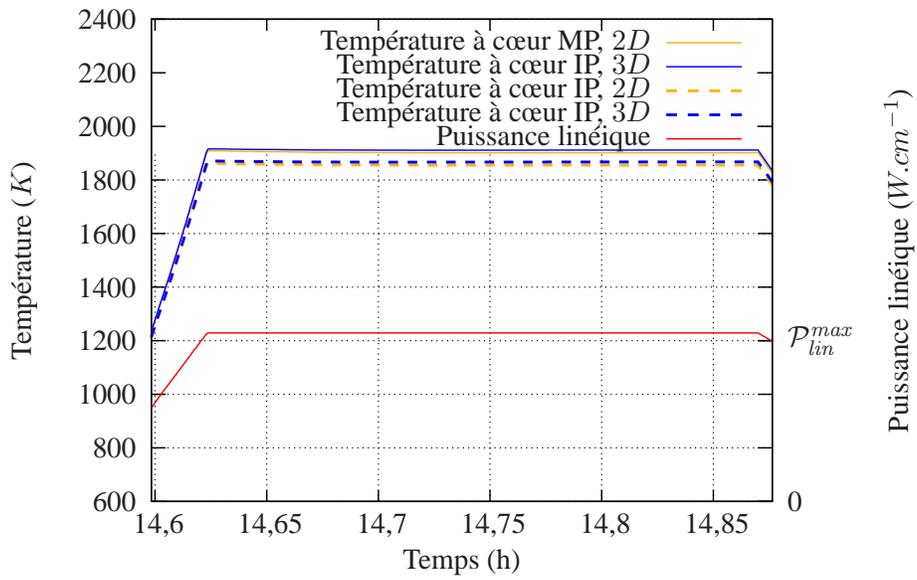


FIG. 6.12 – Températures à cœur prédites par les modélisations 2D et 3D aux plans médian-pastille et inter-pastilles.

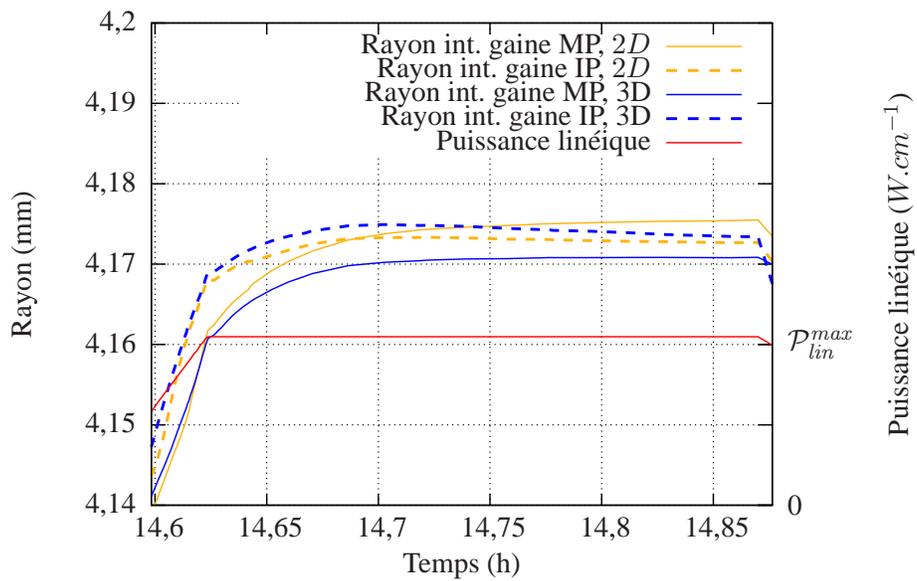


FIG. 6.13 – Évolution des rayons internes gaine aux plans médian-pastille et inter-pastilles au cours du transitoire de puissance.

part la cinétique de gonflement est plus faible en 3D. D'autre part, le rayon diminue au cours du temps de maintien en 3D alors que la modélisation 2D prédit un accroissement de rayon.

6.4.2.3 Comparaisons des profilométries obtenues en 2D et 3D

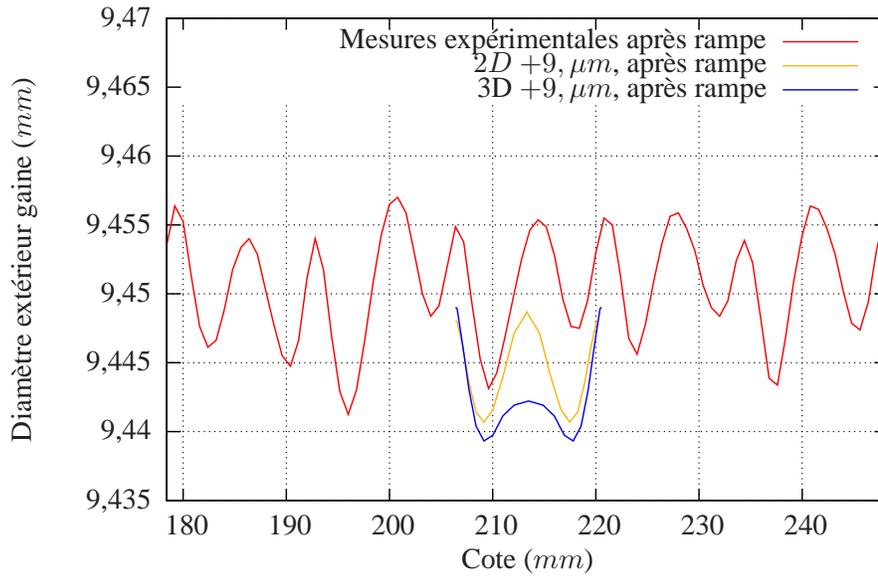


FIG. 6.14 – Comparaison des profilométries calculées en 2D et 3D de puissance pour le crayon I04-4 après le transitoire de puissance.

La figure 6.14 compare les profilométries calculées en 2D et 3D après rampe de puissance. Cette figure montre que les deux modélisations conduisent à des hauteurs de plis primaires pratiquement identiques. Le pli secondaire est visiblement moins marqué en 3D et la modélisation 2D semble ici plus conforme à l'expérience.

6.4.2.4 Évolution de la hauteur de l'évidement au cours du transitoire de puissance

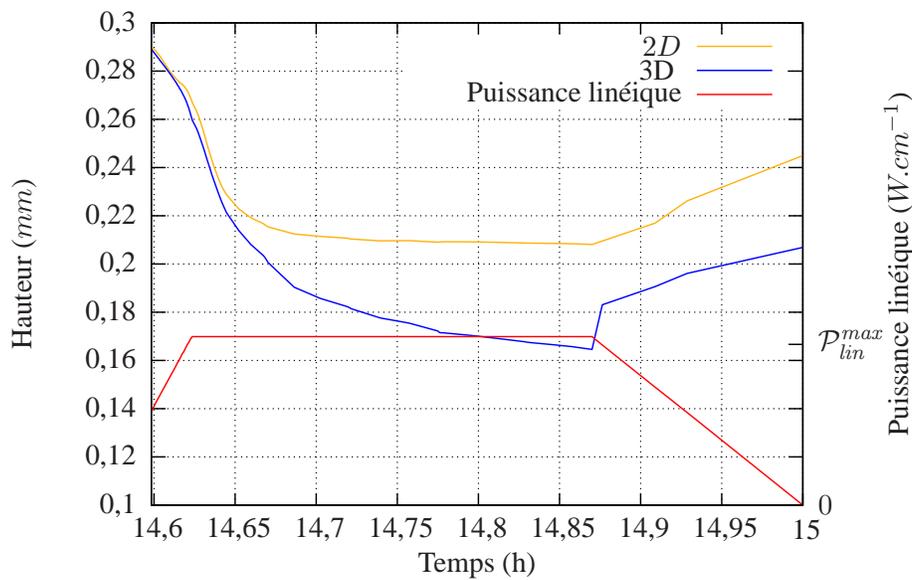


FIG. 6.15 – Comparaison des évolutions de la hauteur de l'évidement calculées en 2D et 3D.

La figure 6.15 montre que le comblement de l'évidement est plus important dans une modélisation 3D.

Lors du retour à froid, la hauteur de l'évidement évolue de manière linéaire avec la puissance linéique avec des pentes proches en $2D$ et $3D$. Cette linéarité semble montrer que le retour à froid se fait de manière élastique. Elle permet de mettre en évidence un déplacement inélastique important qui explique les différences vues entre le $2D$ et le $3D$. Ceci est dû au modèle de plasticité utilisé en $3D$, qui pour relaxer les contraintes, celui-ci introduit une déformation plastique dont l'écoulement tend à occuper les espaces libres dans le crayon et en particulier l'évidement.

6.4.2.5 Évolution des contraintes dans la gaine au cours du transitoire de puissance

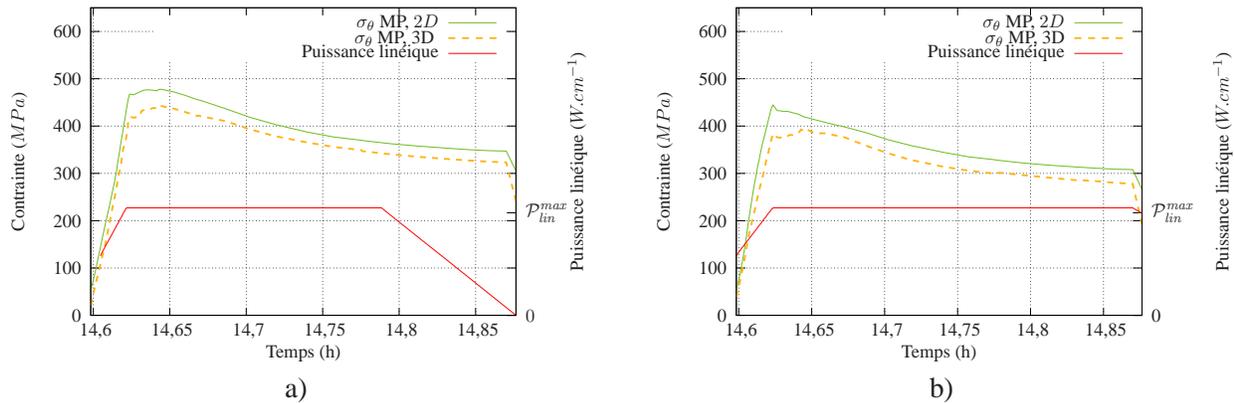


FIG. 6.16 – Comparaison des évolutions des contraintes orthoradiales σ_θ calculées en peau interne de gaine en $2D$ et $3D$ au cours de la rampe de puissance pour le crayon I04-4.

La figure 6.16 montre l'évolution des contraintes orthoradiales σ_θ en peau interne de gaine. Cette contrainte est globalement plus faible en $3D$. Ceci est cohérent avec le plus faible pli secondaire observé en $3D$.

6.4.2.6 Effet du modèle de plasticité

Pour relaxer les contraintes dans la pastille, le modèle de plasticité introduit une déformation irréversible incompressible (paragraphe 2.1.3.3). Cette incompressibilité conduit la matière à occuper les espaces disponibles, ici les évidements. Le modèle de plasticité prédit un flux de matière dans l'axe de la pastille qui se traduit par un comblement de l'évidement plus important qu'en $2D$. La modélisation $3D$ montre que les contraintes exercées sur la gaine sont plus faibles en $3D$, ce qui pour conséquence un pli secondaire moins important que celui observé expérimentalement (figures 6.4.2.6 et 6.16).

6.4.3 Comparaison des modélisations $1D$ et $2D$ en irradiation de base

Nous comparons dans ce paragraphe les résultats obtenus par des modélisations $1D$ et $2D$ en irradiation de base. Dans ce paragraphe, nous avons utilisé la loi d'OTTER pour décrire le comportement viscoplastique du combustible.

Afin de représenter un comportement moyen de la pastille, la modélisation $1D$ utilise un modèle de délocalisation/relocalisation, décrit au paragraphe 4.4. Il s'agit d'un sur-déplacement calé sur des modélisations $3D$. La réponse obtenue ici en $1D$ est représentative d'un plan situé entre le médian-pastille et l'inter-pastilles.

Température à cœur Les températures à cœur calculées par des modélisations $1D$ et $2D$ sont comparées en figure 6.17. Cette comparaison montre que la modélisation $2D$ conduit à des températures plus importantes que la modélisation $1D$ au cours du premier cycle d'irradiation. Ce résultat est lié à la mise en diablo moins importante de la pastille dans une modélisation $2D$ par rapport à la modélisation $3D$ sur laquelle le modèle de

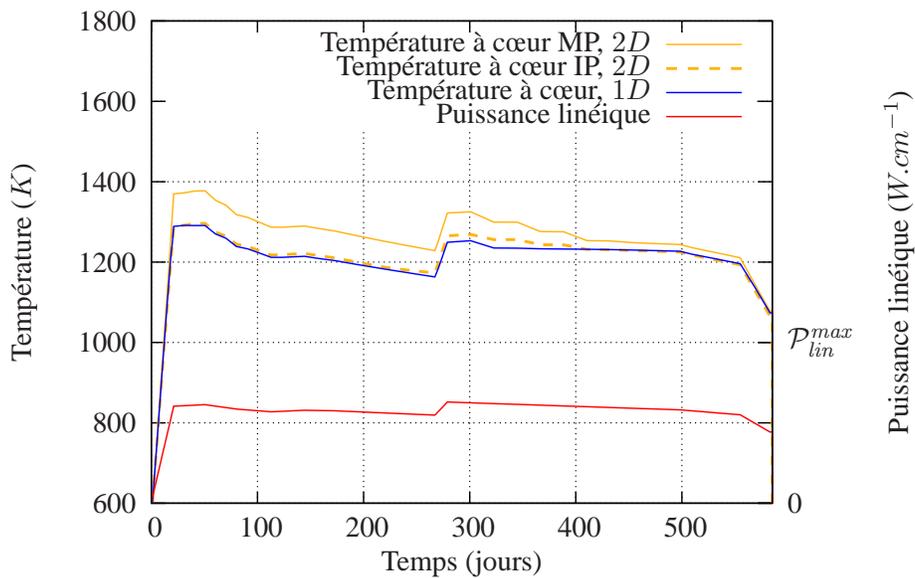


FIG. 6.17 – Comparaison des températures à cœur calculée par des modélisations 1D et 2D.

délocalisation/relocalisation a été calée (paragraphe 6.4.1.1). Nous pouvons voir qu'en fin de second cycle, les différences sont minimales.

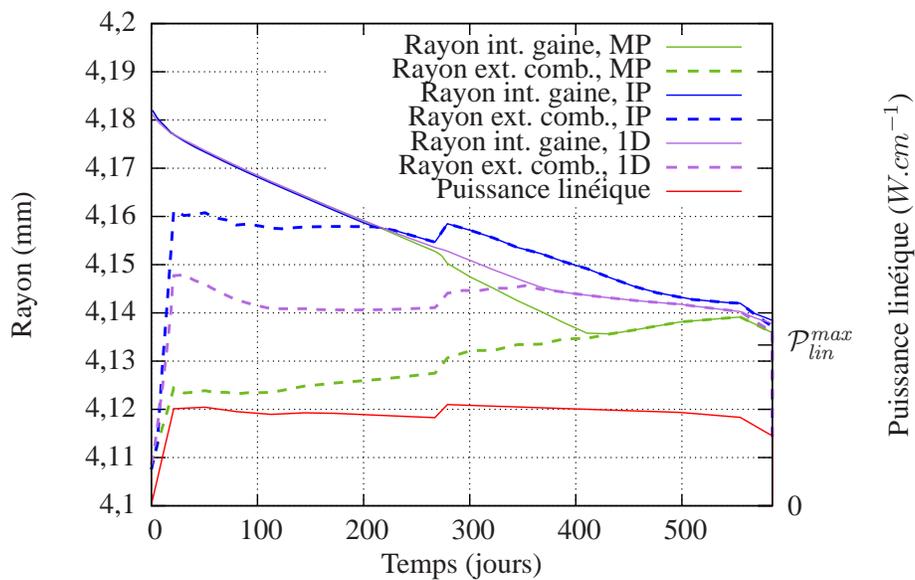


FIG. 6.18 – Comparaisons des évolutions des rayons internes gaine et externe combustible calculés par une modélisation 2D et une modélisation 1D.

Évolution des rayons dans la pastille combustible au cours de l'irradiation de base La figure 6.18 compare les évolutions des rayons internes gaine et externes combustible calculées par une modélisation 2D aux calculs effectués par l'application ALCYONE1D. Dans les deux cas, la modélisation 1D offre une évolution intermédiaire entre le plan médian-pastille et le plan inter-pastilles.

Conclusions du chapitre

L'analyse du crayon I04-4 a montré que la modélisation $2D$ est à même de retrouver le comportement du crayon combustible à la fois qualitativement et quantitativement. Elle a été validée sur la base des profilométries expérimentales.

Cette modélisation est cohérente avec les différentes modélisations $1D$ et $3D$ disponibles. Des différences apparaissent cependant entre la modélisation $3D$ et $2D$, cette dernière fournissant dans le cas étudié des résultats plus proches des données expérimentales. Ces différences sont liées à l'utilisation d'un modèle de plasticité pour décrire le caractère fragile du combustible en $3D$.

Les résultats présentés dans ce chapitre sont très encourageants quant à la capacité de la modélisation $2D$, associée au modèle MEFISTO, à représenter le comportement des combustibles UO_2 standard. Nous proposons dans le chapitre suivant de discuter l'influence des différentes lois utilisées pour décrire soit le comportement viscoplastique du combustible, soit son gonflement gazeux.

CHAPITRE 7

SENSIBILITÉ DE LA MODÉLISATION $2D$ AUX DIFFÉRENTS PHÉNOMÈNES INTERVENANT DANS LA PASTILLE COMBUSTIBLE

Objet du chapitre :

Nous avons appliqué le modèle d'endommagement MEFISTO en le couplant aux lois mécaniques et physico-chimiques à notre disposition. Il est intéressant d'évaluer la sensibilité de la réponse de la modélisation $2D$ à ces lois de comportement. Nous nous intéressons ici à deux phénomènes particuliers, le comportement viscoplastique et le gonflement gazeux. La modélisation $2D$ est ensuite appliquée à un crayon présentant des propriétés sensiblement différentes des propriétés des combustibles standard.

Sommaire du chapitre 7

7.1	Influence de la loi de comportement viscoplastique	136
7.1.1	Influence sur l'évolution des rayons extérieurs de la pastille au cours de l'irradiation de base	136
7.1.2	Influence sur la profilométrie de la gaine	136
7.1.3	Influence sur l'évolution des contraintes dans la gaine en transitoire de puissance	137
7.2	Influence du gonflement gazeux	138
7.3	Autres combustibles	138

7.1 Influence de la loi de comportement viscoplastique

Deux lois sont généralement utilisées pour décrire le comportement viscoplastique du combustible, la loi LPCC ([Sladkoff 99]) et la loi d'OTTER ([Bahoboy 69, Otter 75]). Nous les avons décrites au paragraphe 4.3. Ces deux lois ont la même direction d'écoulement, si bien qu'elle ne diffèrent que par la vitesse de l'écoulement $\frac{\partial \Phi}{\partial \sigma_{eq}}$. Nous n'avons cependant pas pu extraire de conclusions simples de leur comparaison, l'une ou l'autre des lois pouvant conduire à des vitesses d'écoulement plus importantes en fonction de la température, de la contrainte ou du taux de fission. Nous nous bornons ici à une description et une interprétation factuelle des résultats obtenus avec chacune de ces lois.

7.1.1 Influence sur l'évolution des rayons extérieurs de la pastille au cours de l'irradiation de base

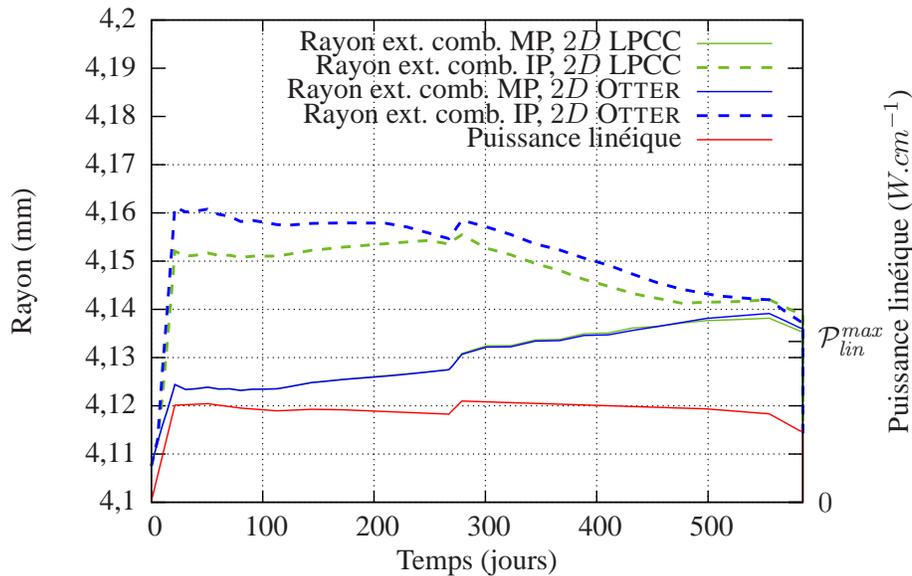


FIG. 7.1 – Comparaison entre les évolutions des rayons extérieurs de la pastille au plan médian-pastille et au plan inter-pastilles calculées avec le modèle MEFISTO couplé soit à la loi viscoplastique LPCC soit à la loi d'OTTER pour le crayon I04-4.

La figure 7.1 présente une comparaison des évolutions des rayons extérieurs de la pastille au plan médian-pastille et au plan inter-pastilles calculées soit avec la loi viscoplastique LPCC soit avec la loi d'OTTER au cours de l'irradiation de base.

Cette figure montre que l'évolution de la pastille au médian-pastille est équivalente dans les deux cas. Au plan inter-pastilles, la loi d'OTTER conduit à une mise en diabolo de la pastille plus importante. En conséquence, la refermeture du jeu pastille-gaine est plus rapide dans ce cas.

Ces écarts sont vraisemblablement liés au fait qu'au cours de la montée en puissance, la loi d'OTTER prédit des déformations viscoplastiques inférieures à la loi LPCC. Ceci affecte l'extension de l'endommagement orthoradial, plus important dans le cas de la loi d'OTTER, qui lui-même affecte directement la mise en diabolo de la pastille.

7.1.2 Influence sur la profilométrie de la gaine

La figure 7.2 compare les profilométries obtenues expérimentalement et calculées avec les lois viscoplastiques LPCC et d'OTTER.

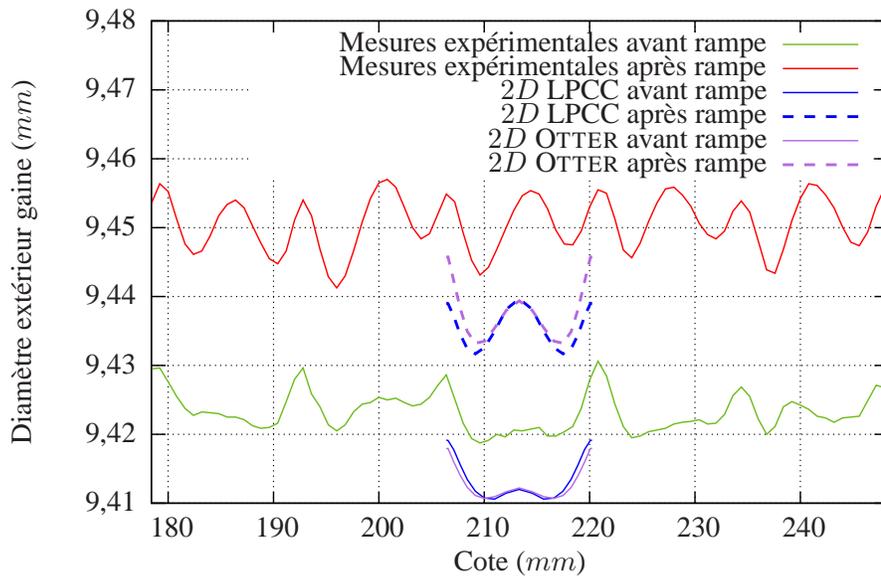


FIG. 7.2 – Comparaison entre les profilométries expérimentales et calculées pour le modèle Mefisto 2D couplé soit à la loi viscoplastique LPCC soit à la loi d’OTTER pour le crayon I04-4.

Cette figure montre que l’utilisation de l’une ou l’autre loi viscoplastique influe peu sur la profilométrie en fin d’irradiation de base. Un pli primaire légèrement plus important peut cependant être observé sur le calcul utilisant la loi d’OTTER.

Après le transitoire de puissance, cette figure montre que l’utilisation de la loi d’OTTER conduit à des prédictions de hauteurs de plis primaires beaucoup plus importants qu’avec la loi LPCC. Les plis secondaires et les décalages moyens entre les profilométries en fin d’irradiation de base et après le transitoire de puissance sont équivalents dans les deux cas.

7.1.3 Influence sur l’évolution des contraintes dans la gaine en transitoire de puissance

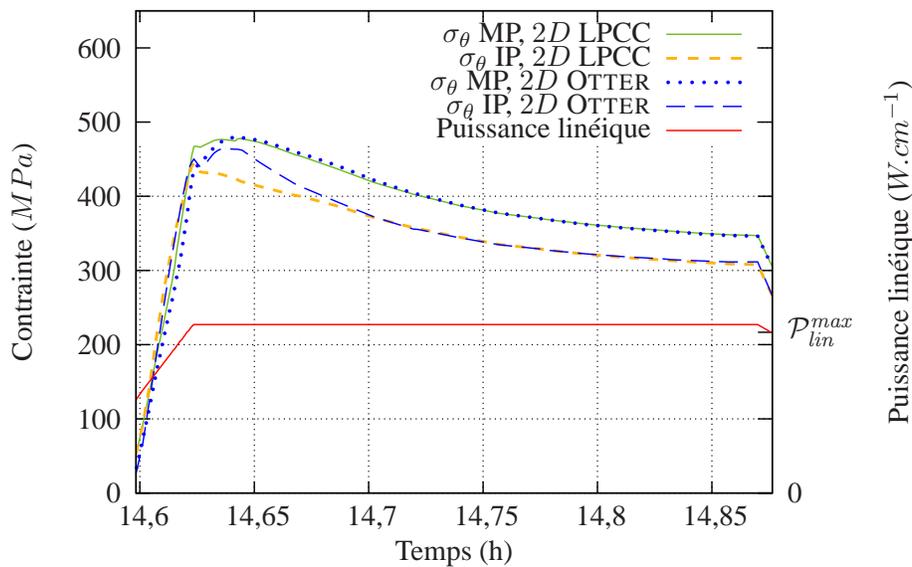


FIG. 7.3 – Comparaisons des évolutions des contraintes circonférentielles σ_θ calculées soit avec la loi viscoplastique LPCC soit avec la loi d’OTTER pour le crayon I04-4.

La figure 7.3 compare les évolutions des contraintes circonférentielles σ_θ calculées soit avec la loi visco-

plastique LPCC soit avec la loi d'OTTER au cours du transitoire de puissance. Cette figure montre que les évolutions observées dans les deux cas sont extrêmement proches. L'utilisation de l'une ou l'autre de ces lois n'impacte le chargement de la gaine qu'au niveau de l'inter-pastilles et pendant un temps relativement court après la fin de la montée en puissance : la contrainte circonférentielle décroît immédiatement avec la loi LPCC alors qu'elle continue d'augmenter avec la loi d'OTTER.

7.2 Influence du gonflement gazeux

Nous regardons dans ce paragraphe l'influence du gonflement dû aux produits de fissions gazeux sur les résultats de la modélisation 2D.

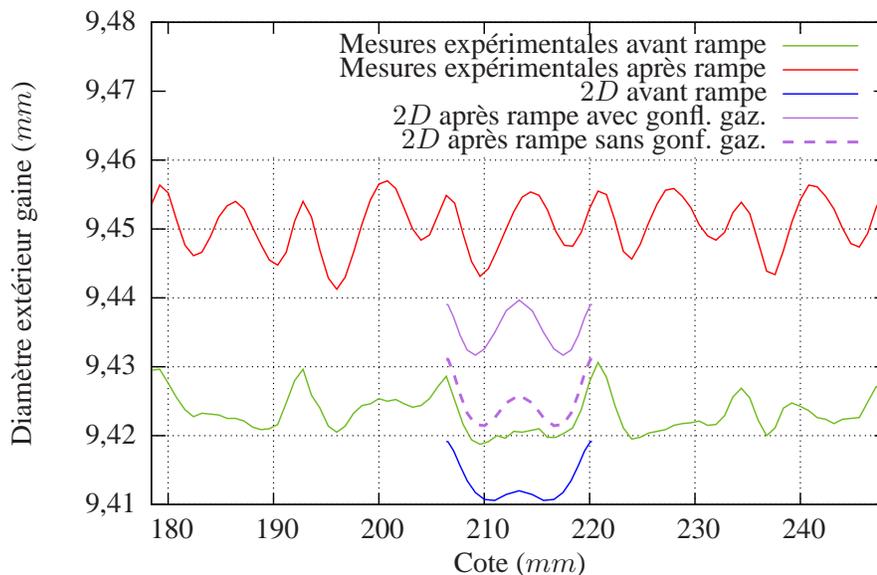


FIG. 7.4 – Influence du gonflement gazeux pour le crayon I04-4 sur la profilométrie de la gaine après rampe.

Influence du gonflement gazeux sur la profilométrie de la gaine La figure 7.4 montre l'influence du gonflement gazeux sur la profilométrie de la gaine après rampe. L'augmentation moyenne du diamètre de la gaine observée entre les profilométries avant et après le transitoire de puissance est deux fois moins importante en l'absence de gonflement gazeux.

Le gonflement gazeux joue également un rôle important sur la formation du pli secondaire. La hauteur de celui-ci est environ deux fois moins importante en l'absence de gonflement gazeux.

Influence du gonflement gazeux sur le comblement de l'évidement Des analyses précédentes ont montré que le gonflement gazeux joue un rôle important vis à vis du comblement de l'évidement. Nous illustrons son rôle dans le cas d'une modélisation 2D du crayon combustible sur la figure 7.5.

7.3 Autres combustibles

Le crayon I04-4 est constitué d'un combustible UO_2 standard. D'autres combustibles sont en cours d'étude qui se différencient nettement du combustible standard par leurs propriétés à rupture, leur comportement visco-plastique et leur gonflement gazeux. Au vu des sensibilités des résultats de la modélisation 2D observées à ces deux phénomènes dans les deux paragraphes précédents, il est intéressant d'observer à quels résultats conduit cette modélisation quand elle est appliquée à ces nouveaux combustibles.

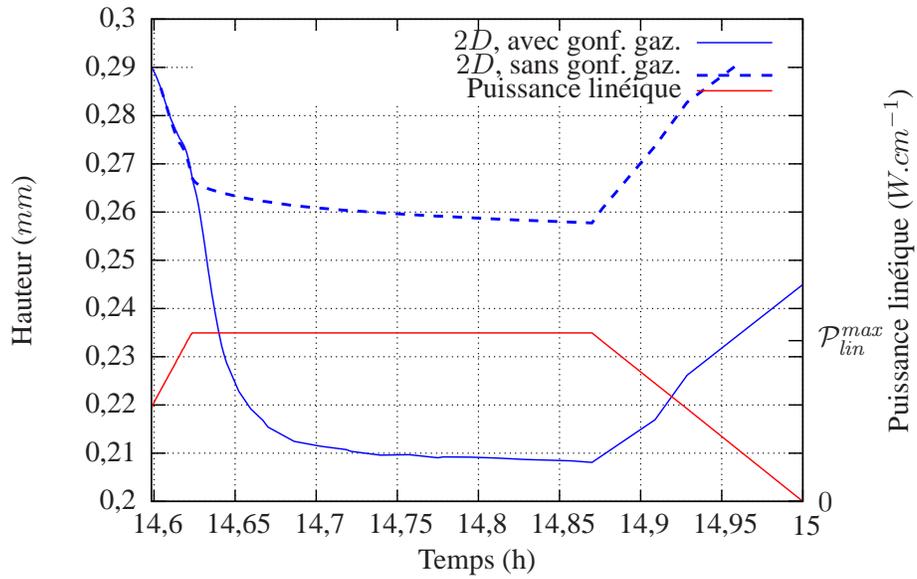


FIG. 7.5 – Influence du gonflement gazeux pour le crayon I04-4 sur le comblement de l'évidement.

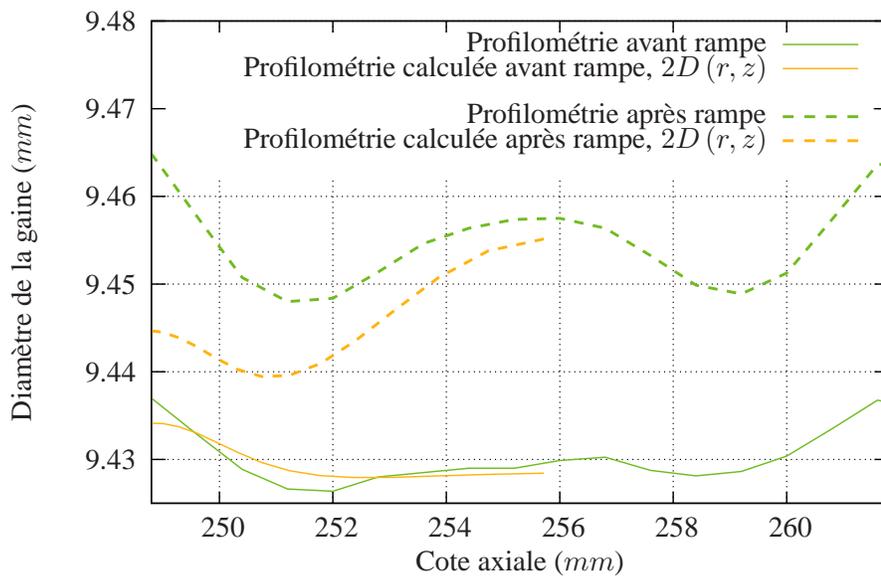


FIG. 7.6 – Comparaisons des résultats obtenus par une modélisation 2D aux résultats expérimentaux dans le cas d'un transitoire de puissance sur des combustibles différents des combustibles UO₂ standard.

La figure 7.6 compare les résultats obtenus par la modélisation $2D$ en fin d'irradiation de base et après le transitoire de puissance dans le cas d'un combustible différent du combustible UO_2 standard caractérisé par un écoulement viscoplastique et un gonflement gazeux plus importants. Les modèles de comportement utilisés sont les mêmes que ceux utilisés pour le combustible standard mais avec un jeu de paramètres matériau adapté à ce combustible.

Les résultats obtenus sont représentatifs des résultats expérimentaux, en particulier après l'irradiation de base. Les résultats après le transitoire de puissance montrent une nette augmentation du pli secondaire due au gonflement gazeux important dans ce type de combustible.

Conclusion du chapitre

Ce chapitre a montré la sensibilité au comportement viscoplastique et au gonflement gazeux du combustible des résultats obtenus par une modélisation $2D$.

Cette modélisation a ensuite été appliquée au calcul d'un crayon composé d'un combustible qui se différencie entre autres du combustible standard par ces deux phénomènes. Bien qu'une analyse plus poussée doive être menée, il semble que la modélisation $2D$ retrouve de manière relativement satisfaisante les résultats expérimentaux pour ce type de combustible. La modélisation $2D$ semble pouvoir discriminer les différents combustibles sur la base de leurs propriétés mécaniques et physico-chimiques.

CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES

Ce mémoire examine la fissuration des combustibles nucléaires oxyde, en vue de modéliser le comportement mécanique des crayons combustibles en réacteur. Des modèles de comportement ont été élaborés pour permettre des modélisations 1D, 2D et 3D du crayon en conditions normales et incidentelles.

La fissuration des matériaux fragiles est par nature instable. D'une part, les fissures se propagent brusquement (propagation instable). D'autre part, les trajets des fissures sont aléatoires, les aléas étant liés aux hétérogénéités microscopiques du matériau. L'étude bibliographique réalisée montre comment ces différentes caractéristiques de la fissuration se traduisent par des difficultés mathématiques et numériques communes aux différentes classes de modèles proposées dans la littérature. Elle met également en avant les difficultés liées à la représentation des fissures, objets surfaciques, par des modèles volumiques. Parmi l'ensemble des approches disponibles, nous avons choisi d'utiliser des modèles d'endommagement local dans une description quasi-statique. Dans ce cas, les principales difficultés numériques rencontrées sont la *localisation de l'endommagement* et les *sauts de solutions*.

- Les calculs par éléments finis montrent que l'endommagement se localise dans des bandes de l'épaisseur d'un élément. Cette localisation permet de reproduire les fissures, mais celles-ci sont cependant mal définies car elles dépendent du maillage utilisé, tant pour leur trajet que pour l'énergie qu'elles dissipent. Ces dépendances au maillage rendent difficiles l'application des modèles d'endommagement local dans les calculs de structure. Dans les modélisations 1D et 2D, les conditions de symétries ont permis de s'affranchir de cette localisation et les résultats obtenus sont indépendants du maillage. Pour la modélisation 3D, pour laquelle un modèle d'endommagement local a également été formulé, il n'est plus possible dans ce cas de s'appuyer sur des symétries. Il est probable que le besoin d'avoir des résultats indépendants du maillage nécessite de se tourner vers d'autres approches, les modèles d'endommagement non local ou la mécanique de la rupture revisitée ([Marigo 00, Bourdin 00]). Il est cependant difficile de juger à l'heure actuelle de la capacité de ces approches à gérer des situations aussi complexes que celle de la pastille combustible où de nombreux phénomènes thermiques, mécaniques et physico-chimiques interviennent simultanément.
- La description quasi-statique des matériaux fragiles décrit les propagations instables de fissures par des évolutions brutales de l'état d'équilibre du système. D'un point de vue numérique, ces évolutions conduisent à des convergences de l'algorithme d'équilibre global de la structure d'autant plus difficiles que les maillages utilisés sont fins. À l'heure actuelle, ces difficultés de convergence limitent les performances des modélisations 1D et 2D. L'étude effectuée dans ce mémoire montre que ces performances peuvent être sensiblement améliorées en réactualisant la matrice de raideur de la structure à chaque itération, en utilisant par exemple la matrice tangente cohérente, pour prendre en compte l'évolution de l'endommagement.

Les modèles développés au cours de ce travail ont été intégrés dans l'application combustible ALCYONE au sein de la plateforme PLEIADES. Parmi ces applications, celle liée à la modélisation 2D du combustible a été particulièrement étudiée dans ce mémoire. Cette modélisation est aujourd'hui capable de retrouver les principaux résultats expérimentaux sur le comportement des crayons combustibles en situation normale et en transitoire de puissance, et en particulier les déformations géométriques des crayons combustibles. Nous avons de plus montré que les prédictions de la modélisation 2D sont en accord avec les autres modélisations 1D et 3D. Enfin, l'important travail effectué au sein de la plateforme PLEIADES a permis de faire de cette modélisation un outil complètement opérationnel.

Ces conclusions sur la modélisation 2D, très encourageantes, ne sont cependant fondées que sur quelques crayons ([Castelier 05]). Une qualification sur une base expérimentale plus étendue reste à mener. D'autre part, nos efforts se sont essentiellement limités au combustible UO_2 standard. Nous avons montré dans ce mémoire quelques éléments qui laissent à penser que la modélisation 2D est capable de traiter tous les types de combustibles. Ce point doit être approfondi, avec en particulier, une étude spécifique aux combustibles

MOX et « dopés chrome ». Cette modélisation doit également être complétée de diverses manières, en prenant en compte le frottement entre la pastille et la gaine, en calculant directement le gonflement gazeux qui est aujourd'hui le résultat d'un calcul $1D$, etc...

Une perspective particulièrement intéressante serait de pouvoir enrichir la modélisation $2D$ d'une description des phénomènes non axisymétriques. En effet, si la modélisation $2D$ est capable de décrire les déformations géométriques de la gaine, elle ne permet pas de rendre compte des variations orthoradiales des contraintes dans la gaine. La modélisation $1D$ partage cette faiblesse qui rend aujourd'hui nécessaire le recours à des modélisations $3D$. Un tel travail d'enrichissement de la modélisation $1D$ a été effectué ailleurs ([Retel 02, Masson 05]). Ces approches peuvent *a priori* être étendues à la modélisation $2D$.

ANNEXES

Annexe A : Conditions aux limites mécaniques

Cette annexe décrit les conditions aux limites mécaniques utilisées dans les modélisations $2D(r, z)$ et $3D$ du crayon combustible.

A.1 Modélisation $2D(r, z)$ du crayon combustible

Nous définissons ici les conditions aux limites mécaniques spécifiques à une modélisation en $2D(r, z)$. Les conditions décrites sont équivalentes à celles décrites pour les modélisations $3D$ dans [Brochard 97] ou [Michel 05]. Nous renvoyons à ces références pour la description des conditions aux limites thermiques.

Conditions aux limites au plan inter-pastilles Le plan inter-pastilles est un plan de symétrie pour la gaine. Les points de la gaine, situés sur la ligne l_6 de la figure 3.2, sont bloqués dans la direction z . La condition suivante est donc imposée :

$$u_z = 0$$

Les points du combustible situés initialement soit dans le plan inter-pastilles soit sur l'évidement, c'est à dire le long des lignes l_1 et l_2 de la figure 3.2, sont soumis à une condition de *contact unilatéral* qui prévient l'interpénétration de la pastille considérée avec sa voisine. Cette condition se traduit par la condition suivante :

$$u_z + H(z) \geq 0$$

où $H(z)$ est la hauteur initiale du point considéré.

Blocage axial Afin de prévenir tout mouvement de corps rigide de la pastille, le point p_2 de la figure 3.2 est bloqué axialement :

$$u_z = 0$$

Conditions aux limites au plan médian-pastille Au plan médian-pastille, les points du combustible et de la gaine, situés respectivement sur les lignes l_4 et l_8 de la figure 3.2, sont supposés rester dans un même plan axial. Il s'agit d'un *mouvement d'ensemble* qui permet à chacun de ses éléments, pastille et gaine, de se dilater. À chaque instant t , ce mouvement d'ensemble se traduit par une condition de la forme :

$$\begin{cases} u_z^{\text{combustible}} = Cste_1(t) \\ u_z^{\text{gaine}} = Cste_2(t) \end{cases}$$

Avant contact entre la gaine et le combustible, les mouvements d'ensemble de la gaine et du combustible sont *indépendants*. Lorsque le contact est établi, une condition dite d'*ancrage* impose que la différence de déplacements axiaux entre la gaine et la pastille reste *constante* et égale à sa valeur avant contact.

Conditions de contact entre la pastille et la gaine La pastille et la gaine peuvent rentrer en contact suivant les lignes l_3 et l_9 de la figure 3.2. Pour l'instant seules des conditions de non interpénétration sont imposées. Le frottement entre la pastille et la gaine n'est pas pris en compte.

Conditions de pression La pression interne du crayon est imposée sur les lignes l_3 et l_9 de la figure 3.2. La pression du caloporteur est imposée sur la ligne l_7 de la figure 3.2.

A.2 Modélisation 3D du crayon combustible

Par rapport à une modélisation 2D (r, z) , une modélisation 3D doit décrire le comportement orthoradial de la pastille. Pour cela, deux plans particuliers sont identifiés (figure 3.4 a)) :

- le plan de symétrie au centre du fragment. Ce plan est soumis à une condition de symétrie classique :

$$u_\theta = 0$$

- le plan de symétrie entre le fragment considéré et le fragment adjacent. Une condition de contact unilatéral est introduite. Celle-ci s'écrit :

$$u_\theta \geq 0$$

La modélisation 3D doit gérer un mouvement de corps rigide du fragment de pastille combustible. Ce mouvement ne peut être décrit en quasi-statique. Pour contourner cette difficulté, une raideur radiale relie le point p_1 de la figure 3.4 a) à l'axe de symétrie. Cette raideur suffit à stabiliser le calcul.

Annexe B : La méthode des éléments finis

La résolution exacte de l'équilibre (2.56) est en pratique impossible : nous ne pouvons connaître en tout point de la structure Ω la valeur de champ de déplacement car cela représente une infinité de variables. La solution recherchée doit donc être approchée. La méthode la plus utilisée est la *méthodes des éléments finis* ([Raviart 98]).

B.1 Discrétisation spatiale

La méthode des éléments finis repose sur une approximation de l'espace des solutions par un espace de fonctions de dimension finie. Implicitement, ceci suppose que l'espace des solutions soit connu, ce qui est le cas pour des matériaux au comportement standard : ce sont les espaces de SOBOLEV qui caractérisent des fonctions suffisamment régulières. Nous présentons ici le vocabulaire associé à cette méthode.

Maillage de la discrétisation Un espace d'approximation adapté à de tels espaces est construit en approchant le volume Ω par un volume Ω^h appelé le **maillage** obtenu par agrégation d'un ensemble de polygones convexes appelés **mailles** ou **éléments**. Ces polygones définissent un ensemble de points particuliers incluant en particulier leur sommet où sont estimées les inconnues, ici l'incrément du champ de déplacement. Ces points particuliers sont les **nœuds** du maillage et peuvent être communs à plusieurs éléments.

Notion de champ nodal La discrétisation éléments finis permet de définir la notion de **champ nodal** : à chaque nœud est associé un vecteur de dimension 3 dans le cas général. Dans la suite, nous représenterons un champ nodal par un vecteur \vec{V}^h contenant l'ensemble des coordonnées de chacun des vecteurs du champ nodal (si N est le nombre de nœuds du maillage, \vec{V}^h est un vecteur de dimension $3N$).

Interpolation des champs nodaux sur un élément, assemblage Nous voulons associer à tout champ nodal \vec{V}^h une fonction \vec{v}^h définie sur le maillage. La méthode des éléments finis définit cette nouvelle fonction par **interpolation** sur chaque élément fini des valeurs du champ nodal \vec{v}^h aux nœuds de l'élément considéré. Pour cela, un ensemble de **fonctions d'interpolation** sont définies sur l'élément. Insistons sur le fait que seules les valeurs nodales correspondant aux nœuds de l'élément considéré jouent un rôle : cette remarque est importante car cette relative indépendance des éléments finis permet de construire la réponse d'une structure à partir de la réponse de chacun des éléments finis pris individuellement : c'est l'étape d'**assemblage**.

Espace d'approximation engendré par la discrétisation éléments finis La notion d'interpolation sur chaque élément fini permet d'associer à tout champ nodal une fonction définie sur le domaine discrétisé Ω^h : ces fonctions définissent l'**espace d'approximation** engendré par la discrétisation éléments finis.

Convergence de la méthode des éléments finis Le nombre de points d'interpolation dépend du nombre d'éléments utilisés. Ce nombre est relié à la taille maximale h des éléments finis utilisés : plus cette taille est

petite, plus le nombre de points d'interpolation sera important. En augmentant le nombre de points d'interpolation, il est légitime de penser que la méthode des éléments finis donnera des approximations d'autant plus proches de la solution exacte. Dans ce cas, la méthode des éléments finis est dite **convergente**. Cette notion est essentielle pour assurer la validité du calcul éléments finis. Cette convergence nécessite qu'au moins deux conditions soient remplies :

- la solution exacte doit exister ;
 - les éléments finis doivent être choisis pour pouvoir représenter cette solution exacte, quand elle existe.
- Les éléments finis tels que nous allons les présenter sont dits *standard*. Ils décrivent des solutions **régulières** au problème mécanique.

Ces deux conditions seront examinées au paragraphe 2.2.2 pour les matériaux élastiques, plastiques à écrouissage strictement positif et viscoplastiques et 2.4.3.2 pour les matériaux endommageables.

B.2 Principe de la méthode des éléments finis

La méthode des éléments finis propose de rechercher un champ nodal $\Delta \vec{U}$ tel que la fonction associée $\Delta \vec{u}^h$ vérifie une approximation du principe des travaux virtuels :

$$\forall \vec{v}^h \in C.A.^h, \quad \underbrace{\int_{\Omega^h} \underline{\sigma}_{t+\Delta t}(\Delta \underline{\epsilon}^{to}) : \underline{\epsilon}^{to}(\vec{v}^h) dV}_{\text{Travaux intérieurs}} = \underbrace{\int_{\Omega^h} \vec{f}_{t+\Delta t} \cdot \vec{v}^h dV + \int_{\partial \Omega_T^h} \vec{T}_{t+\Delta t} \cdot \vec{v}^h dS}_{\text{Travaux extérieurs}}$$

où nous avons noté $\Delta \underline{\epsilon}^{to}$ la déformation totale associée à la fonction $\Delta \vec{u}^h$ ($\Delta \underline{\epsilon}^{to} = \underline{\epsilon}^{to}(\Delta \vec{u}^h)$). L'espace $C.A.^h$ est l'ensemble des fonctions \vec{v}^h correspondant aux champs nodaux vérifiant les conditions aux limites cinématiques. L'espace $C.A.^h$ étant fini, il existe deux champs nodaux $\vec{F}_i(\Delta \vec{U})$ et \vec{F}_e tels que :

$$\begin{aligned} \forall \vec{v}^h \in C.A.^h, \quad \vec{F}_i(\Delta \vec{U}) \cdot \vec{v}^h &= \int_{\Omega^h} \underline{\sigma}_{t+\Delta t} : \underline{\epsilon}^{to}(\vec{v}) dV \\ \vec{F}_e \cdot \vec{v}^h &= \int_{\Omega^h} \vec{f}_{t+\Delta t} \cdot \vec{v}^h dV + \int_{\partial \Omega_T^h} \vec{T}_{t+\Delta t} \cdot \vec{v}^h dS \end{aligned}$$

Les deux champs nodaux $\vec{F}_i(\Delta \vec{U})$ et \vec{F}_e sont appelés respectivement les **forces nodales intérieures et extérieures**. Le principe des travaux virtuels est alors équivalent à l'égalité des forces nodales intérieures et extérieures :

$$(B.1) \quad \boxed{\vec{F}_i(\Delta \vec{U}) = \vec{F}_e}$$

Calcul des forces intérieures Les forces nodales intérieures peuvent être calculées à partir de la contribution de chacun des éléments finis. La reconstruction du vecteur \vec{F}_i à partir des contributions élémentaires \vec{F}_i^e est l'étape d'**assemblage**. Sur chaque élément fini, cette contribution élémentaire est calculée par intégration du champ de contraintes :

$$\vec{F}_i^e = \int_{V^e} \underline{\sigma}_{t+\Delta t} : \underline{B} dV$$

où V^e est le volume de l'élément fini et \underline{B} une matrice propre à l'élément fini permettant de définir la déformation de la fonction interpolée à partir des valeurs du champ nodal aux nœuds de l'élément. La matrice \underline{B} est directement liée aux gradients des fonctions d'interpolation.

Intégration numérique, points de GAUSS Numériquement, l'intégrale $\int_{V^e} \underline{\sigma}_{t+\Delta t} : \underline{B} dV$ est évaluée par quadrature : la fonction $\underline{\sigma}_{t+\Delta t} : \underline{B}$ est évaluée en un certain nombre de points choisis pour minimiser l'erreur

commise. Ces points particuliers sont les **points de GAUSS** de l'élément. La formule de quadrature s'écrit alors :

$$(B.2) \quad \vec{\mathbb{F}}_i^e = \sum_{i=1}^{N^G} (\underline{\sigma}_{t+\Delta t}(\Delta \underline{\epsilon}^{to}(\vec{\eta}_i)) : \underline{\mathbb{B}}(\vec{\eta}_i)) w_i$$

où N^G est le nombre de points de GAUSS de l'élément, $\vec{\eta}_i$ leurs coordonnées et w_i un poids associé au $i^{\text{ème}}$ point de GAUSS. Les conséquences de cette formule sont importantes : les contraintes et, par conséquent, les variables d'états z_i , n'ont besoin d'être connues qu'aux points de GAUSS.

L'étape d'*intégration locale*, c'est à dire la résolution du système différentiel (2.46), est donc effectuée aux points de GAUSS. En pratique, la matrice $\underline{\mathbb{B}}$ définie ci-dessus n'est déterminée qu'aux points de GAUSS au moment de l'implantation de l'élément fini.

Notion de résidu L'équation d'équilibre discrétisée (B.1) est écrite classiquement en introduisant le **résidu** $\vec{\mathbb{R}}(\Delta \vec{\mathbb{U}})$:

$$(B.3) \quad \vec{\mathbb{R}}(\Delta \vec{\mathbb{U}}) = \vec{\mathbb{O}} \quad \text{avec} \quad \vec{\mathbb{R}}(\Delta \vec{\mathbb{U}}) = \vec{\mathbb{F}}_i(\Delta \vec{\mathbb{U}}) - \vec{\mathbb{F}}_e$$

La résolution de l'équilibre de la structure est équivalente à la recherche d'un champ nodal annulant le résidu.

B.3 Principe de la méthode de NEWTON-RAPHSON

La **méthode de NEWTON-RAPHSON** propose de rechercher de manière itérative la solution à l'équation (B.3). Une estimation $\Delta \vec{\mathbb{U}}^{n+1}$ de cette solution est construite à partir de l'estimation $\Delta \vec{\mathbb{U}}^n$ à l'étape précédente. La relation de récurrence entre $\Delta \vec{\mathbb{U}}^{n+1}$ et $\Delta \vec{\mathbb{U}}^n$ s'obtient en écrivant le développement limité à l'ordre 1 du résidu $\vec{\mathbb{R}}(\Delta \vec{\mathbb{U}}^{n+1})$ en supposant que les estimations $\Delta \vec{\mathbb{U}}^{n+1}$ et $\Delta \vec{\mathbb{U}}^n$ proches :

$$\vec{\mathbb{R}}(\Delta \vec{\mathbb{U}}^{n+1}) \approx \vec{\mathbb{R}}(\Delta \vec{\mathbb{U}}^n) + \left. \frac{\partial \vec{\mathbb{R}}}{\partial \Delta \vec{\mathbb{U}}} \right|_{\Delta \vec{\mathbb{U}}^n} \cdot (\Delta \vec{\mathbb{U}}^{n+1} - \Delta \vec{\mathbb{U}}^n)$$

En écrivant que cette approximation est solution de l'équation (B.3) et en supposant $\left. \frac{\partial \vec{\mathbb{R}}}{\partial \Delta \vec{\mathbb{U}}} \right|_{\Delta \vec{\mathbb{U}}^n}$ inversible, nous obtenons la relation de récurrence suivante :

$$(B.4) \quad \Delta \vec{\mathbb{U}}^{n+1} = \Delta \vec{\mathbb{U}}^n - \left(\left. \frac{\partial \vec{\mathbb{R}}}{\partial \Delta \vec{\mathbb{U}}} \right|_{\Delta \vec{\mathbb{U}}^n} \right)^{-1} \cdot \vec{\mathbb{R}}(\Delta \vec{\mathbb{U}}^n)$$

Nous sommes donc amenés à résoudre le problème (B.3) par une *succession de problèmes linéaires*.

Matrice de raideur Le calcul de la dérivée $\left. \frac{\partial \vec{\mathbb{R}}}{\partial \Delta \vec{\mathbb{U}}} \right|_{\Delta \vec{\mathbb{U}}^n}$ se fait en supposant les forces extérieures constantes au cours de la résolution :

$$\left. \frac{\partial \vec{\mathbb{R}}}{\partial \Delta \vec{\mathbb{U}}} \right|_{\Delta \vec{\mathbb{U}}^n} = \underline{\mathbb{K}} \quad \text{avec} \quad \underline{\mathbb{K}} = \left. \frac{\partial \vec{\mathbb{F}}_i}{\partial \Delta \vec{\mathbb{U}}} \right|_{\Delta \vec{\mathbb{U}}^n}$$

La matrice $\underline{\mathbb{K}}$ est appelée **matrice de raideur** de la structure.

Calcul de la matrice de raideur La méthode des éléments finis permet de calculer la matrice de raideur globale par *assemblage* de **matrices de raideur élémentaires** $\underline{\underline{\mathbb{K}}}^e$. Pour chaque élément, l'expression de cette matrice de raideur élémentaire est :

$$(B.5) \quad \underline{\underline{\mathbb{K}}}^e = \sum_{i=1}^{N^G} {}^t \underline{\underline{\mathbf{B}}}(\vec{\eta}_i) : \frac{\partial \Delta \underline{\underline{\sigma}}}{\partial \Delta \underline{\underline{\epsilon}}}(\vec{\eta}_i) : \underline{\underline{\mathbf{B}}}(\vec{\eta}_i) w_i$$

où nous retrouvons la *matrice tangente cohérente* introduite au paragraphe 2.1.4 par l'équation (2.52).

Matrice de raideur tangente cohérente L'utilisation de la matrice tangente cohérente ou de la matrice sécante est la solution la plus performante en théorie car elle conduit à une convergence quadratique de la méthode de NEWTON-RAPHSON. Le coût de la réactualisation de la matrice de raideur du système à chaque itération peut cependant être important. Par ailleurs, certaines méthodes permettent de préconditionner la matrice de raideur afin de résoudre le système linéaire (B.4) de manière extrêmement efficace, mais ce préconditionnement a un coût important. Une stratégie visant à utiliser la même matrice pendant plusieurs itérations (ou pendant tout le calcul pour la dernière possibilité) est souvent considérée comme un bon compromis quand la non-linéarité n'est pas trop forte.

Quelques variations autour de la méthode de NEWTON-RAPHSON Le calcul de la matrice tangente cohérente n'est pas toujours possible, il dépend de l'algorithme de résolution utilisé pour l'intégration de la loi de comportement. Plusieurs solutions peuvent être trouvées dans la littérature, les deux solutions les plus connues sont :

- la méthode BFGS (BROYDEN-FLETCHER-GOLDFARD-SHANNO), décrite dans [Besson 01], permet de donner une approximation de l'inverse de la matrice de raideur actualisée à chaque itération ;
- l'utilisation de la matrice de raideur élastique. Cette méthode, couplée à un préconditionnement de la matrice de raideur, permet une résolution très rapide du système linéaire (B.4), permettant de combler la perte du caractère quadratique de la convergence de l'algorithme de NEWTON-RAPHSON. Pour des non-linéarités faibles, cette méthode peut conduire à une convergence très rapide malgré un nombre d'itérations plus important.

Limitation de l'algorithme de NEWTON-RAPHSON L'un des désavantages les plus importants de la méthode de NEWTON-RAPHSON est de ne converger que si l'estimation initiale de la solution est suffisamment proche de la solution recherchée.

B.4 Algorithme de résolution du code CAST3M

Nous décrivons ici les algorithmes de résolution utilisés dans le code CAST3M. Le code ZEBULON repose sur des principes analogues (voir [Besson 01]).

Prise en compte d'autres conditions aux limites Nous n'avons jusqu'à présent abordé que deux types de conditions aux limites :

- blocages stricts (déplacements nuls) sur une partie $\partial\Omega_{\vec{u}}$ de la frontière ;
- tractions imposées sur une partie $\partial\Omega_{\vec{T}}$ de la frontière.

D'autres types de conditions aux limites doivent pouvoir être prises en compte dans nos applications afin de traiter, entre autres, des problèmes comportant :

- du contact entre différents corps ;
- des relations de liaisons entre les déplacements d'un corps ;
- des déplacements imposés sur une partie de la frontière.

Dans le cas général, ces conditions aux limites sont des contraintes traitées en introduisant des variables supplémentaires appelées **multiplicateurs de LAGRANGE** (voir [Gayffier 94, Pellet 01]). Le système résolu à chaque itération de la résolution globale est alors ([Gayffier 94]) :

$$\begin{pmatrix} \underline{\underline{\mathbb{K}}} & {}^t\underline{\underline{\mathbb{M}}} \\ \underline{\underline{\mathbb{M}}} & \underline{\underline{\mathbb{L}}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta\vec{\mathbb{U}}^{n+1} - \Delta\vec{\mathbb{U}}^n \\ \vec{\lambda}^{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vec{\mathbb{F}}_e - \vec{\mathbb{F}}_i(\Delta\vec{\mathbb{U}}^n) \\ \vec{d}_{t+\Delta t} - \underline{\underline{\mathbb{M}}}.(\vec{\mathbb{U}}_t + \Delta\vec{\mathbb{U}}^n) \end{pmatrix}$$

- avec : – $\vec{\mathbb{U}}_t$, déplacement initial ;
– $\Delta\vec{\mathbb{U}}^n$, n^e estimation de l'incrément de déplacement ;
– $\vec{\lambda}^{n+1}$, n^e estimation des multiplicateurs de LAGRANGE ;
– $\underline{\underline{\mathbb{K}}}$ matrice de rigidité (élastique, sécante ou tangente) ;
– $\underline{\underline{\mathbb{M}}}$, $\underline{\underline{\mathbb{L}}}$ matrices associées aux multiplicateurs de LAGRANGE ;
– $\vec{\mathbb{F}}_e$ forces extérieures en $t + \Delta t$;
– $\vec{\mathbb{F}}_i(\Delta\vec{\mathbb{U}}^j)$ forces internes nodales ;
– $\vec{d}_{t+\Delta t}$ déplacements imposés en $t + \Delta t$;

Le test de convergence se fait alors sur la norme du résidu $\vec{\mathbb{R}}(\Delta\vec{\mathbb{U}})$ défini par :

$$\vec{\mathbb{R}}(\Delta\vec{\mathbb{U}}) = \begin{pmatrix} \vec{\mathbb{F}}_e - \vec{\mathbb{F}}_i(\Delta\vec{\mathbb{U}}^n) \\ \vec{d}_{t+\Delta t} - \underline{\underline{\mathbb{M}}}.(\vec{\mathbb{U}}_t + \Delta\vec{\mathbb{U}}^n) \end{pmatrix}$$

Système résolu pour la résolution globale La matrice de raideur utilisée peut être construite à partir de la matrice d'élasticité initiale $\underline{\underline{\mathbb{D}}}$, de la matrice sécante $\underline{\underline{\mathbb{D}}}^{sec}$ ou de la matrice tangente cohérente $\underline{\underline{\mathbb{D}}}^{tang}$ pour les lois propres au code. Pour les lois de comportement définies via l'interface `umat`, présentée au paragraphe 2.1.4.3, la matrice de raideur $\underline{\underline{\mathbb{K}}}$ est construite à partir de la matrice d'élasticité initiale. La sortie de la fonction `umat` relative à la matrice tangente cohérente ou sécante est à l'heure actuelle ignorée.

Accélération de convergence dans CAST3M CAST3M propose une méthode d'accélération de convergence décrite dans [Gayffier 94]. Cette méthode semble particulièrement adaptée aux cas où ni la matrice tangente cohérente ni la matrice sécante ne sont disponibles. L'idée est d'estimer une solution accélérée à partir des quatre résidus trouvés aux incréments précédents et les quatre estimations associées de la solution. Ces quatre résidus permettent de construire un hyperplan tangent sur lequel est projeté l'origine (c'est à dire la solution du problème). Ce projeté s'exprime comme une combinaison linéaire des quatre résidus de départ. En utilisant la même combinaison linéaire sur les quatre estimations de la solution, une nouvelle estimation est définie. Cette nouvelle estimation ne vérifiant *a priori* pas les conditions aux limites associées, une nouvelle itération de l'algorithme de résolution global est nécessaire. Par défaut, l'accélération n'est utilisée que toutes les deux itérations.



Annexe C : Intégration numérique des différentes lois de comportement

Cette annexe décrit les algorithmes utilisés pour l'intégration des différentes lois de comportement du combustible UO_2 que nous avons utilisées au cours de la thèse.

C.1 Intégration implicite des lois viscoplastiques de l' UO_2

Nous proposons ici la méthode d'intégration retenue pour l'intégration numérique des lois viscoplastiques du LPCC et d'OTTER, utilisée pour décrire l' UO_2 . Cette intégration est utilisée en l'absence d'endommagement du matériau.

Connaissant l'état du matériau à l'instant t , nous voulons connaître son comportement à l'instant $t + \Delta t$. Nous avons proposé en paragraphe 2.1.4.1 le système implicite suivant pour l'intégration d'une loi de comportement viscoplastique (équation 2.51) :

$$(C.1) \quad \begin{cases} \Delta \underline{\epsilon}^{el} - \Delta \underline{\epsilon}^{to} + \Delta \epsilon^{vis} \underline{\mathbf{n}}|_{t+\theta\Delta t} = 0 \\ \Delta \epsilon^{vis} - \frac{\partial \Phi}{\partial \sigma_{eq}} (\sigma_{eq}|_{t+\theta\Delta t}) \Delta t = 0 \end{cases}$$

dont les inconnues sont la déformation élastique $\underline{\epsilon}^{el}$ et l'incrément de déformation viscoplastique équivalente $\Delta \epsilon^{vis}$.

Le caractère non linéaire de l'intégration est lié au fait que la direction d'écoulement $\underline{\mathbf{n}}$ et la contrainte équivalente σ_{eq} sont évaluées à l'instant $t + \theta\Delta t$ ($0 < \theta < 1$). Nous allons maintenant montrer comment, dans le cas d'un matériau isotrope, réduire ce système d'équations à une équation scalaire d'inconnue $\Delta \epsilon^{vis}$.

Expression de la contrainte équivalente et de la direction d'écoulement Les contraintes sont une fonction explicite des déformations élastiques et nous supposons le comportement du matériau isotrope de sorte que son tenseur d'élasticité s'écrit :

$$\underline{\underline{\mathbf{D}}} = \lambda \underline{\underline{\mathbf{I}}} \otimes \underline{\underline{\mathbf{I}}} + 2\mu \underline{\underline{\mathbf{I}}}$$

où λ et μ sont les coefficients de LAMÉ du matériau.

À l'instant $t + \theta\Delta t$, le tenseur normal $\underline{\mathbf{n}}$ est évalué ainsi :

$$\begin{aligned} \underline{\mathbf{n}}|_{t+\theta\Delta t} &= \frac{3}{2 \sigma_{eq}|_{t+\theta\Delta t}} \underline{\mathbf{s}}|_{t+\theta\Delta t} = \frac{3\mu}{\sigma_{eq}|_{t+\theta\Delta t}} \underline{\mathbf{s}}^{el}|_{t+\theta\Delta t} = \frac{3\mu}{\sigma_{eq}|_{t+\theta\Delta t}} \left(\underline{\mathbf{s}}^{el}|_t + \theta \Delta \underline{\mathbf{s}}^{el} \right) \\ &= \frac{3\mu}{\sigma_{eq}|_{t+\theta\Delta t}} \left(\underline{\mathbf{s}}^{el}|_t + \theta \left(\Delta \underline{\epsilon}^{to} - \frac{1}{3} \text{tr} (\Delta \underline{\epsilon}^{to}) \underline{\underline{\mathbf{I}}} - \Delta \epsilon^{vis} \underline{\mathbf{n}}|_{t+\theta\Delta t} \right) \right) \end{aligned}$$

Dans la suite, nous noterons $\underline{\underline{\mathbf{B}}}$ le tenseur suivant :

$$\underline{\underline{\mathbf{B}}} = \underline{\underline{\epsilon}}^{el}|_t + \theta \Delta \underline{\underline{\epsilon}}^{to} - \frac{1}{3} \text{tr} \left(\underline{\underline{\epsilon}}^{el}|_t + \theta \Delta \underline{\underline{\epsilon}}^{to} \right)$$

Ce tenseur est parfaitement connu au début du pas de temps. Nous pouvons alors écrire :

$$(\sigma_{eq}|_{t+\theta\Delta t} + 3\mu\theta\Delta\epsilon^{vis}) \underline{\mathbf{n}}|_{t+\theta\Delta t} = 3\mu\underline{\mathbf{B}}$$

En utilisant le fait que le produit contracté $\underline{\mathbf{n}}|_{t+\theta\Delta t} : \underline{\mathbf{n}}|_{t+\theta\Delta t}$ est égal à $\frac{3}{2}$ (voir [Helfer 05c]), nous obtenons l'expression suivante de la contrainte équivalente :

$$(C.2) \quad \sigma_{eq}|_{t+\theta\Delta t} = \mu\sqrt{6\underline{\mathbf{B}} : \underline{\mathbf{B}}} - 3\mu\theta\Delta\epsilon^{vis}$$

De plus, la normale est donnée par :

$$(C.3) \quad \underline{\mathbf{n}}|_{t+\theta\Delta t} = \frac{3}{\sqrt{6\underline{\mathbf{B}} : \underline{\mathbf{B}}}} \underline{\mathbf{B}}$$

Équation du système A l'aide de l'équation (C.2), le système (2.51) peut se ramener à la seule équation scalaire :

$$(C.4) \quad \mathcal{F}(\Delta\epsilon^{vis}) = \Delta\epsilon^{vis} - \frac{\partial\Phi}{\partial\sigma_{eq}} \left(\mu\sqrt{6\underline{\mathbf{B}} : \underline{\mathbf{B}}} - 3\mu\theta\Delta\epsilon^{vis} \right) \Delta t = 0$$

Cette équation est résolue par la méthode itérative de NEWTON.

Une fois $\Delta\epsilon^{vis}$, connu, les incréments de déformations élastiques sont données par (équation (C.3)) :

$$\Delta\underline{\underline{\epsilon}}^{el} = \Delta\underline{\underline{\epsilon}}^{to} - \frac{3\Delta\epsilon^{vis}}{\sqrt{6\underline{\mathbf{B}} : \underline{\mathbf{B}}}} \underline{\mathbf{B}}$$

Calcul de la matrice tangente cohérente Il est possible, à partir de l'expression précédente d'obtenir l'expression de la matrice tangente cohérente $\underline{\underline{\mathbf{D}}}^{tang}$. Ce calcul est détaillé dans [Helfer 05b]. Son expression est la suivante :

$$\underline{\underline{\mathbf{D}}}^{tang} = \underline{\underline{\mathbf{D}}} - 4\mu^2\theta \left[\frac{\Delta\epsilon^{vis}}{\mu\sqrt{6\underline{\mathbf{B}} : \underline{\mathbf{B}}}} \underline{\underline{\mathbf{M}}} + \left(\frac{\Delta\epsilon^{vis}}{\mu\sqrt{6\underline{\mathbf{B}} : \underline{\mathbf{B}}}} - \frac{\frac{\partial^2\Phi}{\partial\sigma_{eq}^2}(\sigma_{eq}|_{t+\theta\Delta t}) \Delta t}{1 + 3\mu\theta\Delta t \frac{\partial^2\Phi}{\partial\sigma_{eq}^2}(\sigma_{eq}|_{t+\theta\Delta t})} \right) \underline{\mathbf{n}} \otimes \underline{\mathbf{n}} \right]$$

où $\underline{\underline{\mathbf{M}}}$ est le tenseur $\frac{3}{2} \left(\underline{\underline{\mathbf{I}}} - \frac{1}{3} \underline{\underline{\mathbf{I}}} \otimes \underline{\underline{\mathbf{I}}} \right)$.

C.2 Intégration implicite du modèle MEFISTO

Nous présentons ici l'implantation d'une loi couplant le modèle d'endommagement MEFISTO à une loi viscoplastique. Le modèle MEFISTO est décrit en paragraphe 4.1.1.

Les lois viscoplastiques considérées sont la loi d'OTTER et la loi du LPCC. Ces deux lois sont présentées en paragraphe 4.3. Cette implantation se fait *via* l'interface `umat` du code `CAST3M`. Cette interface est décrite en paragraphe 2.1.4.3.

La loi proposée est intégrée par une méthode semi-implicite. Cette méthode est décrite en paragraphe 2.1.4.1. Elle demande d'explicitier le résidu que l'on cherche à annuler et son jacobien.

Choix des variables d'intégration Le modèle MEFISTO relie les contraintes aux déformations élastiques $\underline{\epsilon}^{el}$ par la relation (4.7). Cette relation conduit naturellement à choisir l'incrément de déformations élastiques $\Delta\underline{\epsilon}^{el}$ comme variable d'intégration. Un autre avantage de ce choix est de permettre un calcul automatique de la matrice tangente cohérente (voir le paragraphe 2.1.4.1). La seconde inconnue choisie est l'incrément scalaire de déformation viscoplastique $\Delta\epsilon^{vis}$.

Résidu Les équations suivantes découlent de ce choix d'inconnues :

$$(C.5) \quad \begin{cases} \Delta\underline{\epsilon}^{el} - \Delta\underline{\epsilon}^{to} + \Delta\epsilon^{vis} \underline{\mathbf{n}}|_{t+\theta\Delta t} = 0 \\ \Delta\epsilon^{vis} - \frac{\partial\Phi}{\partial\sigma_{eq}}(\sigma_{eq}|_{t+\theta\Delta t}) \Delta t = 0 \end{cases}$$

Ce système est naturellement similaire au système (2.51). L'expression de l'intensité de l'écoulement $\frac{\partial\Phi}{\partial\sigma_{eq}}(\sigma_{eq})$ dans le cas des lois d'OTTER et du SPUA a été donnée en paragraphe 4.3.1.

Les contraintes sont exprimées à l'instant $t + \theta\Delta t$ à l'aide de les relations (4.7) et (4.24) :

$$\underline{\sigma}|_{t+\theta\Delta t} = \underline{\underline{\mathbf{D}}}(d_\theta|_{t+\theta\Delta t}, d_z|_{t+\theta\Delta t}) : \underline{\epsilon}^{el}|_{t+\theta\Delta t} + \underline{\sigma}^{P.I.}(d_\theta^{max}|_{t+\theta\Delta t}, d_z^{max}|_{t+\theta\Delta t})$$

Cette expression permet de calculer la direction de l'écoulement $\underline{\mathbf{n}}|_{t+\theta\Delta t}$ par la relation (2.29) à l'instant $t + \theta\Delta t$.

Les valeurs des variables d'endommagement d_θ, d_z et de leur valeur maximale au cours du temps d_θ^{max} et d_z^{max} sont évaluées à l'instant $t + \theta\Delta t$ à chaque itération de l'algorithme en fonction des critères d'endommagement proposé en paragraphe 4.1.1 et de guérison proposé en paragraphe 4.1.1.4 et de leurs valeurs en début de pas de temps.

Jacobien du système Le jacobien du système (C.5) est donné par :

$$\begin{pmatrix} \underline{\underline{\mathbf{I}}} + \theta \frac{\partial n}{\partial \underline{\epsilon}^{el}} & \underline{\mathbf{n}} \\ \frac{\partial \sigma_{eq}}{\partial \underline{\epsilon}^{el}} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial^2 \sigma_{eq}} \theta dt & 1 \end{pmatrix}$$

Précisons la valeur de $\frac{\partial n}{\partial \underline{\epsilon}^{el}}$ et $\frac{\partial \sigma_{eq}}{\partial \underline{\epsilon}^{el}}$. Commençons par $\frac{\partial n}{\partial \underline{\epsilon}^{el}}$. Nous avons montré en note [Helfer 05c] que nous avons :

$$\frac{\partial n}{\partial \underline{\epsilon}^{el}} = \frac{\partial n}{\partial \underline{\sigma}} : \frac{\partial \underline{\sigma}}{\partial \underline{\epsilon}^{el}} = \frac{\partial n}{\partial \underline{\sigma}} : \underline{\underline{\mathbf{D}}}(d_\theta, d_z) \quad \text{avec} \quad \frac{\partial n}{\partial \underline{\sigma}} = \frac{1}{\sigma_{eq}} (\underline{\underline{\mathbf{M}}} - \underline{\mathbf{n}} \otimes \underline{\mathbf{n}})$$

où $\underline{\underline{\mathbf{M}}}$ est le tenseur d'ordre quatre $\underline{\underline{\mathbf{M}}} = \frac{3}{2} \left(\underline{\underline{\mathbf{I}}} - \frac{1}{3} \underline{\underline{\mathbf{I}}} \otimes \underline{\underline{\mathbf{I}}} \right)$. Le terme $\frac{\partial \sigma_{eq}}{\partial \underline{\epsilon}^{el}}$ se calcule de manière similaire à l'aide de l'équation (2.29) :

$$\frac{\partial \sigma_{eq}}{\partial \underline{\epsilon}^{el}} = \frac{\partial \sigma_{eq}}{\partial \underline{\sigma}} : \frac{\partial \underline{\sigma}}{\partial \underline{\epsilon}^{el}} = \underline{\mathbf{n}} : \underline{\underline{\mathbf{D}}}(d_\theta, d_z)$$

C.3 Intégration implicite du modèle de plasticité instantanée couplé aux lois viscoplastique de l'UO₂

La modélisation 3D du crayon combustible décrit une pastille fragmentée. Cette fragmentation permet de prendre en compte l'apparition d'un premier réseau de fissures dans la pastille. Au cours de l'irradiation, un second réseau de fissures apparaît. Dans les modélisations utilisées en standard, les effets de ce second réseau

sur le champ de contraintes sont pris en compte par un modèle de plasticité instantanée isotrope à écrouissage positif.

La loi de comportement utilisée est un couplage de la loi viscoplastique du SPUA à ce modèle plastique. Pour cela, il est appelée modèle DDI (double déformation inélastique).

C.3.1 Description du modèle de plasticité instantanée

Le rayon de la surface de charge est donné par :

$$R(\chi^p) = R_0 + H \chi^p$$

R_0 est le rayon initial de la surface de charge. Sa valeur est prise égale à la contrainte à rupture σ_{max} de l'oxyde UO_2 . H décrit l'écrouissage du matériau. Sa valeur est positive mais faible ([Bentejac 97]).

C.3.2 Intégration implicite

Soit $\Delta\chi^p$ l'incrément de la variable d'écrouissage. Par analogie avec l'équation (C.2), la contrainte équivalente σ_{eq} est donnée par :

$$\sigma_{eq}|_{t+\theta\Delta t} = \mu \sqrt{6 \underline{\mathbf{B}} : \underline{\mathbf{B}}} - 3\mu\theta\Delta\epsilon^{vis} - 3\mu\theta\Delta\chi^p$$

Les équations permettant de déterminer les incréments $\Delta\epsilon^{vis}$ et $\Delta\chi^p$ sont alors :

$$\left\{ \begin{array}{l} \Delta\epsilon^{vis} - \frac{\partial\Phi}{\partial\sigma_{eq}} \left(\mu \sqrt{6 \underline{\mathbf{B}} : \underline{\mathbf{B}}} - 3\mu\theta\Delta\epsilon^{vis} - 3\mu\theta\Delta\chi^p \right) \Delta t = 0 \\ \left\{ \begin{array}{l} \mu \sqrt{6 \underline{\mathbf{B}} : \underline{\mathbf{B}}} - 3\mu\theta\Delta\epsilon^{vis} - 3\mu\theta\Delta\chi^p - R(\chi_t^p + \theta\Delta\chi^p) = 0 \quad \text{en cas de charge plastique} \\ \Delta\chi^p = 0 \quad \text{sinon} \end{array} \right. \end{array} \right.$$

Ce système est résolu par une méthode de NEWTON-RAPHSON.

Une fois les incréments $\Delta\epsilon^{vis}$ et $\Delta\chi^p$ connus, les incréments de déformations élastiques sont donnés par (équation (C.3)) :

$$\Delta\epsilon^{el} = \Delta\epsilon^{to} - \frac{3(\Delta\epsilon^{vis} + \Delta\chi^p)}{\sqrt{6 \underline{\mathbf{B}} : \underline{\mathbf{B}}}} \underline{\mathbf{B}}$$

C.4 Intégration implicite du modèle d'endommagement proposé pour la modélisation 3D du crayon combustible

Nous décrivons ici la mise en œuvre numérique du modèle présenté au paragraphe 4.2.2. La prise en compte du caractère unilatéral (différence entre traction et compression) la rend quelque peu délicate : certains tenseurs, dont les contraintes $\underline{\sigma}$, n'ont d'expressions simples que dans le repère principal des déformations élastiques.

C.4.1 Choix des variables d'intégration

Outre les éventuels déformations inélastiques, il nous faut choisir un jeu de variables permettant de caractériser de manière univoque l'état local du matériau et conduisant au système différentiel le plus simple.

Déformations élastiques Les lois d'états (4.26) font apparaître dans l'expression des contraintes $\underline{\sigma}$ et de la force thermodynamique $\langle Y \rangle^+$ les déformations élastiques $\underline{\epsilon}^{el}$. Les déformations élastiques $\underline{\epsilon}^{el}$ permettent de caractériser de manière univoque l'état du matériau. Il est donc intéressant de les inclure dans les variables d'intégration.

Variables $\langle Y \rangle_{max}^+$ La variable d'endommagement d est une fonction explicite de la variable $\langle Y \rangle_{max}^+$ d'après l'équation (4.28). Cette variable stocke la valeur maximale au cours du temps de la variable $\langle Y \rangle^+$ qui est une fonction explicite des déformations élastiques. Le calcul de $\langle Y \rangle^+$ n'est cependant facile que dans le repère principal des déformations élastiques.

Enfin, dans le cas général, il nous faut inclure les déformations inélastiques $\underline{\epsilon}^{inl}$ dans les variables d'intégration. Celles-ci sont des fonctions des contraintes $\underline{\sigma}$ qui sont connues dès que les variables $\underline{\epsilon}^{el}$ et $\langle Y \rangle_{max}^+$ sont connues.

C.4.2 Intégration de la loi de comportement

Nous détaillons maintenant les 2 étapes les plus délicates de l'intégration de la loi :

- le calcul des contraintes ;
- la formation du résidu et le calcul du jacobien ;

C.4.2.1 Calcul des contraintes

Les contraintes $\underline{\sigma}$ sont une fonction explicite dans le repère principal de la déformation élastique $\underline{\epsilon}^{el}$ et de la variable d'endommagement d d'après l'équation (4.26). Un changement de repère est donc nécessaire. Nous notons ϵ_I^{el} , ϵ_{II}^{el} , ϵ_{III}^{el} les valeurs principales du tenseur des déformations élastiques. Les contraintes dans cette base sont diagonales et nous pouvons écrire :

$$(C.6) \quad \forall i \in (I, II, III), \sigma_i = \lambda \left((1-d) \langle \text{tr } \epsilon^{el} \rangle^+ + \langle \text{tr } \epsilon^{el} \rangle^- \right) + 2\mu \left((1-d) \langle \epsilon_i^{el} \rangle^+ + \langle \epsilon_i^{el} \rangle^- \right)$$

Les contraintes sont exprimées dans le repère initial.

C.4.2.2 Système différentiel

Nous devons préciser quelles sont les équations relatives aux inconnues $\underline{\epsilon}^{el}$, $\langle Y \rangle_{max}^+$ et $\underline{\epsilon}^{inl}$:

- pour les déformations élastiques, nous utiliserons leur définition (équation (2.1)) ;
- la variable $\langle Y \rangle_{max}^+$ stocke la valeur maximale de la variable $\langle Y \rangle^+$. Son évolution se fait à l'aide d'un seuil et est formellement identique à celle de la déformation plastique cumulée en plasticité : son intégration a été décrite en note [Helfer 05c] ;
- nous ne précisons pas les équations relatives aux déformations inélastiques $\underline{\epsilon}^{inl}$.

Le système à résoudre est alors le suivant :

$$(C.7) \quad \begin{cases} \Delta \underline{\epsilon}^{el} - \Delta \underline{\epsilon}^{to} - \Delta \underline{\epsilon}^{inl} = 0 \\ \begin{cases} \Delta \langle Y \rangle_{max}^+ - \langle Y \rangle^+ + \langle Y \rangle_{max}^+ = 0 & \text{en cas de charge} \\ \Delta \langle Y \rangle_{max}^+ = 0 & \text{sinon} \end{cases} \\ \Delta \epsilon^{vis} - \frac{\partial \Phi}{\partial \sigma_{eq}} (\sigma_{eq}|_{t+\theta \Delta t}) \Delta t = 0 \end{cases}$$

Ce système est naturellement similaire au système (2.51). L'expression de l'intensité de l'écoulement $\frac{\partial \Phi}{\partial \sigma_{eq}} (\sigma_{eq})$ dans le cas des lois d'OTTER et du LPCC a été donnée en paragraphe 4.3.1.

La résolution du système (C.7) par une méthode de NEWTON-RAPHSON demande qu'on en calcule le jacobien (paragraphe 2.1.4.1). La plupart des termes du jacobien ne posent pas de problèmes particuliers.

Le terme $-\frac{\partial \langle Y \rangle^+}{\partial \underline{\epsilon}^{el}}$ n'a pas d'expression simple. D'après la définition de $\langle Y \rangle^+$, le calcul de ce terme nécessite de calculer la dérivée $\frac{\partial \langle \underline{\epsilon}^{to} \rangle^+}{\partial \underline{\epsilon}^{to}}$. Cette dérivée peut être calculée analytiquement. Son calcul est donné

dans [Godard 05]. Son expression est cependant complexe et nous avons préféré l'évaluer numériquement. Bien qu'insatisfaisante, cette solution a le mérite de pouvoir tester rapidement le modèle.

Le traitement de l'équation relative à la viscoplasticité nous demande de calculer la dérivée $\frac{\partial}{\partial \Delta \underline{\epsilon}^{el}} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \sigma_{eq}} \right)$:

$$\frac{\partial}{\partial \Delta \underline{\epsilon}^{el}} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \sigma_{eq}} \right) = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \sigma_{eq}^2} \frac{\partial \sigma_{eq}}{\partial \underline{\sigma}} : \frac{\partial \underline{\sigma}}{\partial \underline{\epsilon}^{el}} : \underbrace{\frac{\partial \underline{\epsilon}^{el}}{\partial \Delta \underline{\epsilon}^{el}}}_{\theta \underline{\mathbf{I}}} = \theta \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \sigma_{eq}^2} \underline{\mathbf{n}} : \frac{\partial \underline{\sigma}}{\partial \underline{\epsilon}^{el}}$$

La matrice d'élasticité $\frac{\partial \underline{\sigma}}{\partial \underline{\epsilon}^{el}}$ n'a d'expression simple que dans le repère principal des déformations élastiques $\underline{\epsilon}^{el}$ d'après l'équation (C.6), repère qui dépend lui-même de ces déformations. Là encore, un calcul analytique semble possible à partir des expressions données dans [Godard 05]. La complexité des expressions obtenues est telle que nous avons là aussi préféré une évaluation numérique de ce terme, au moins dans un premier temps.

Traitement spécifique d'un matériau non endommagé La mise en œuvre est relativement lourde. Le phénomène de localisation nous montre qu'une grande partie des éléments resteront sains. Nous avons donc traité ces éléments de manière spécifique en testant si le matériau était sain en début de calcul. À la fin de cet algorithme, la variable $\langle Y \rangle_{max}^+$ est comparée à la valeur à laquelle débute l'endommagement. Si elle lui est supérieure, un nouveau calcul est effectué avec l'algorithme d'intégration proposé dans ce paragraphe.

Annexe D : Instabilité temporelle

Le phénomène de localisation nous a montré toute la difficulté d’obtenir des résultats indépendants de la discrétisation d’espace. Du côté « temporel », nous avons introduit la notion de propagation stable ou instable de fissures (voir paragraphe (2.3.2.2)). Nous avons invoqué la conservation de l’énergie pour montrer qu’une description dynamique du problème semblait la plus naturelle en cas de propagation instable. Pour des raisons de temps de calculs ou de logiciels spécifiques, le choix d’une description dynamique est souvent *inadapté* et *une approche quasi-statique doit être conservée* : il s’agit alors de mesurer l’impact de ce choix.

Pour cela, considérons le cas particulier d’un barreau élastique en traction uniaxiale contenant une zone cohésive (paragraphe 2.4.4) afin d’introduire une énergie de fissuration G_f finie. Les conclusions que nous tirerons de cet exemple nous semblent parfaitement générales et restent valables pour des situations de chargements ou des structures plus complexes.

D.1 Cas particulier du barreau en traction

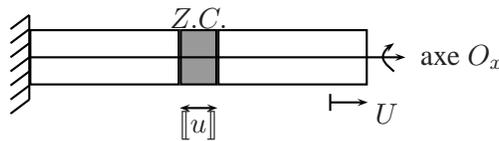


FIG. D.1 – Essai de traction simple. La zone grisée représente le saut de déplacement au niveau de la zone cohésive et non son épaisseur.

D.1.1 Description du cas traité

La figure D.1 présente le problème considéré. Il s’agit d’un essai de traction uniaxiale sur une barre cylindrique de longueur L constituée de :

- deux éléments volumiques de longueur $L/2$. Leur comportement élastique est caractérisé par un module d’YOUNG E . L’énergie contenue dans ces éléments est :

$$L\Psi^{el} = L\frac{\epsilon^2}{2E}$$

où ϵ est la déformation de chacun des éléments.

- une zone cohésive notée Z.C. qui lie les deux éléments volumiques. Son comportement est décrit par une fonction $T(\llbracket u \rrbracket)$ où $\llbracket u \rrbracket$ est le saut de déplacement au niveau de la zone cohésive. Il dérive d’une énergie libre surfacique Ψ^s telle que :

$$T(\llbracket u \rrbracket) = \frac{d\Psi^s}{d\llbracket u \rrbracket}$$

Nous imposons un déplacement U à cette barre. Les déplacements se répartissent de la manière suivante :

$$(D.1) \quad U = 2\epsilon\frac{L}{2} + \llbracket u \rrbracket$$

où ϵ est la déformation axiale, égale dans les deux éléments volumiques et $\llbracket u \rrbracket$ le saut de déplacement au niveau de la zone cohésive. Cette équation montre que la solution sera connue une fois le saut de déplacement $\llbracket u \rrbracket$ connu. Nous sommes donc ramenés à rechercher un scalaire. Ceci permet de caractériser l'ensemble des solutions cinématiquement admissibles par l'ensemble des sauts de déplacement $\llbracket u \rrbracket^*$ compris entre 0 et le déplacement imposé U .

D.1.2 Analyse à l'aide du lagrangien

L'énergie totale emmagasinée E dans le barreau est d'après l'équation (D.1) :

$$E(U, \llbracket u \rrbracket) = \Psi^s(\llbracket u \rrbracket) + L \frac{\epsilon^2}{2E} = \Psi^s(\llbracket u \rrbracket) + \frac{E}{2L} (U - \llbracket u \rrbracket)^2$$

En l'absence de travaux extérieurs, le lagrangien (linéique) du système est égal à cet énergie d'après l'équation (2.60) :

$$(D.2) \quad \mathcal{L}(\llbracket u \rrbracket^*, U) = E(U, \llbracket u \rrbracket) = \Psi^s(\llbracket u \rrbracket^*) + \frac{E}{2L} (U - \llbracket u \rrbracket^*)^2$$

Nous sommes amenés à trouver la solution du problème de minimisation suivant :

$$(D.3) \quad \min_{\llbracket u \rrbracket^* \in [0; U]} \mathcal{L}(\llbracket u \rrbracket^*, U)$$

Critère de stabilité de la propagation Le principe de minimum (D.3) permet de définir implicitement le saut de déplacement comme une fonction du déplacement imposé U , ce que nous noterons $\llbracket u \rrbracket(U)$. $\llbracket u \rrbracket(U)$ rendant le lagrangien minimal, il vérifie :

$$(D.4) \quad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \llbracket u \rrbracket}(\llbracket u \rrbracket(U), U) = 0$$

La propagation est stable si la fonction $\llbracket u \rrbracket(U)$ est *continue*. Cette continuité peut s'exprimer en demandant qu'une variation infinitésimale ΔU du chargement conduise à une variation infinitésimale $\Delta \llbracket u \rrbracket$ de la fonction $\llbracket u \rrbracket(U)$. À partir de l'équation (D.4), ceci s'écrit :

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \llbracket u \rrbracket}(\llbracket u \rrbracket + \Delta \llbracket u \rrbracket, U + \Delta U) \approx \frac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial^2 \llbracket u \rrbracket} \Delta \llbracket u \rrbracket + \frac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial U \partial \llbracket u \rrbracket} \Delta U = 0$$

Cette équation permettra de déterminer l'incrément $\Delta \llbracket u \rrbracket$ uniquement si la dérivée seconde $\frac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial^2 \llbracket u \rrbracket}$ du lagrangien est non nulle. Cette dérivée étant positive ou nulle puisque $\llbracket u \rrbracket$ est un minimum du lagrangien, une condition de stabilité est :

$$\frac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial \llbracket u \rrbracket^2} > 0 \quad \text{soit, d'après l'équation (D.2),} \quad \frac{\partial T}{\partial \llbracket u \rrbracket} > -\frac{E}{L}$$

Nous voyons qu'une propagation est stable si la courbe $T(\llbracket u \rrbracket)$ n'est pas trop forte dans la partie adoucissante.

D.1.3 Illustrations à l'aide du modèle de TVERGAARD

Nous choisissons comme comportement de la zone cohésive le modèle de TVERGAARD ([Tvergaard 90]), dont la réponse en chargement monotone uniaxial est de la forme :

$$(D.5) \quad T(\llbracket u \rrbracket) = \frac{27}{4} \sigma_{max} f\left(\frac{\llbracket u \rrbracket}{\delta}\right) \quad \text{avec} \quad f\left(\frac{\llbracket u \rrbracket}{\delta}\right) = \begin{cases} \left(1 - \frac{\llbracket u \rrbracket}{\delta}\right)^2 \frac{\llbracket u \rrbracket}{\delta} & \text{si } \llbracket u \rrbracket \leq \delta \\ 0 & \text{si } \llbracket u \rrbracket \geq \delta \end{cases}$$

où σ_{max} est la contrainte maximale que puisse supporter une zone cohésive et où δ est une *longueur caractéristique* correspondant au saut de déplacement tel que la perte totale de rigidité de la zone cohésive soit totale. La pente maximale $\mathcal{P.A.}$ dans la phase adoucissante est donnée par :

$$\sup_{\mathcal{P.A.}} \left| \frac{\partial T}{\partial \llbracket u \rrbracket} \right| = \frac{27}{12} \frac{\sigma_{max}}{\delta}$$

Cette quantité devant être comparée à la quantité $\frac{E}{L}$, nous introduisons le paramètre α défini par $\frac{27L\sigma_{max}}{12E\delta}$.

Dans ce cas, le problème (D.3) peut s'écrire ainsi :

$$(D.6) \quad \min_{\llbracket u \rrbracket^* \in [0; U]} \frac{L}{E\delta^2} \mathcal{L} \left(\frac{\llbracket u \rrbracket^*}{\delta} \right) = 3\alpha \int_0^{\llbracket u \rrbracket^*/\delta} f(b) db + \frac{1}{2} \left(\frac{U}{\delta} - \frac{\llbracket u \rrbracket^*}{\delta} \right)^2$$

Une fois les déplacements U et $\llbracket u \rrbracket$ normés par δ , le comportement du barreau est uniquement dépendant du paramètre α .

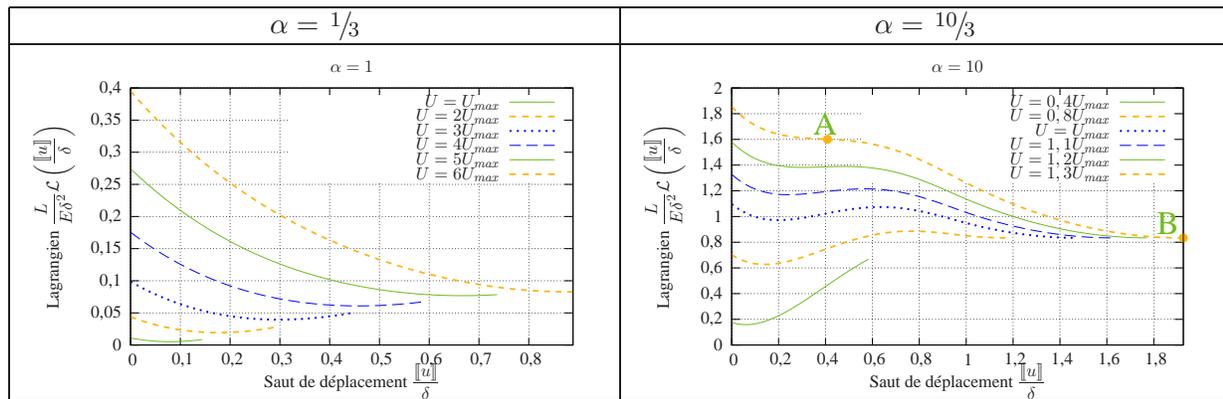


FIG. D.2 – Lagrangien associé au problème du barreau en traction uniaxiale pour différentes valeurs du paramètre α et pour différents déplacements imposés U . Dans le cas $\alpha = 1$, un minimum unique existe tout au long du chargement. Dans le cas $\alpha = 10$, un minimum unique existe pour de faibles chargements, un second minimum apparaît pour des chargements plus élevés : le saut de la solution A à la solution B correspond ici à la disparition du premier minimum et au passage au second.

La fonction $\frac{L}{E\delta^2} \mathcal{L} \left(\frac{\llbracket u \rrbracket^*}{\delta} \right)$ est tracée sur la figure D.2 pour différents déplacements imposés pour les valeurs $\frac{1}{3}$ et $\frac{10}{3}$ du paramètre α . Sur cette figure, les déplacements imposés U ont été comparés à un déplacement U_{max} . Ce déplacement est celui qu'il faut imposer à un barreau élastique de même module d'YOUNG et de même longueur L pour atteindre la contrainte σ_{max} ($U_{max} = \frac{L\sigma_{max}}{E}$). La figure D.2 montre que :

- pour $\alpha = \frac{1}{3}$, un unique minimum existe quelque soit le déplacement imposé. De plus, ce minimum évolue continûment avec le déplacement imposé. Il est donc possible de contrôler continûment l'évolution de l'endommagement de la zone cohésive. Ceci correspond à une *propagation stable* ;
- Pour $\alpha = \frac{10}{3}$, différents cas se présentent :
 - pour des chargements faibles ($U = 0, 4U_{max}$), un unique minimum existe ;
 - pour des chargements plus importants, deux minimums coexistent ($0,8U_{max} < U < 1,2U_{max}$). La réponse du système est continue, elle reste sur le minimum le plus à gauche de la figure, même quand celui-ci cesse d'être le minimum global de la solution ;
 - quand le chargement atteint une valeur critique, (ici $U = 1,3U_{max}$), nous observons une bifurcation liée à la disparition du premier minimum et au passage spontané de la solution au second minimum. Ces points correspondent en fait aux deux solutions A et B indiqués sur la figure D.2 pour la réponse globale du système. Nous avons une *propagation instable* ;

Le passage de la solution de A à la solution B est appelé **saut de solutions** dans le contexte des modèles de zones cohésives (voir par exemple [Chaboche 97, Monerie 00]).

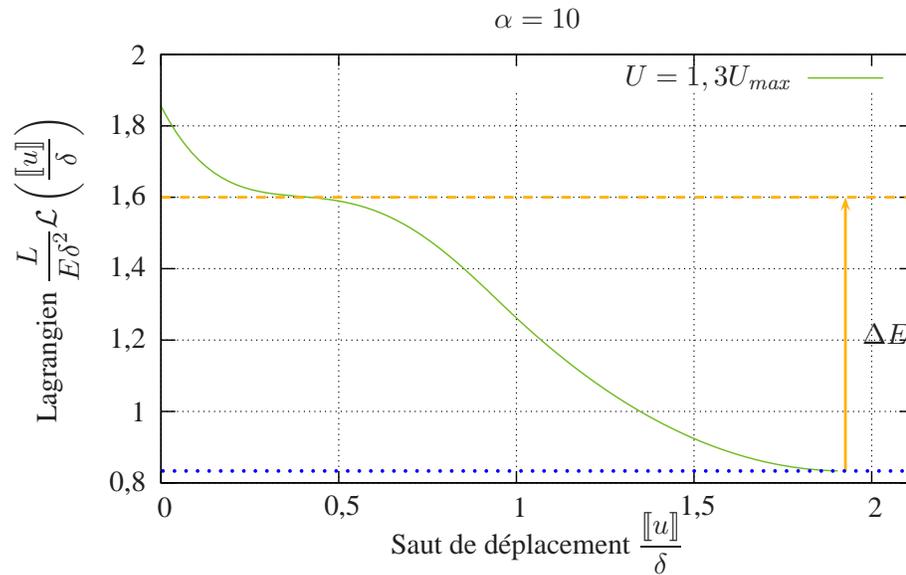


FIG. D.3 – Disparition d’une énergie ΔE au moment du saut de solution.

Conservation de l’énergie La figure D.3 nous permet de proposer une conséquence des sauts de solutions : le passage de la solution A à la solution B met en évidence la disparition d’une énergie ΔE . Cette énergie ΔE correspond à la différence entre l’énergie emmagasinée et l’énergie qu’il est possible de dissiper dans la zone cohésive : cette quantité d’énergie devrait être convertie en énergie cinétique, *énergie qui ne peut être prise en compte par une description quasi-statique*.

D.2 Snap-back

Les difficultés de convergence précédentes peuvent être contournées. Pour cela, des méthodes particulières de pilotage du chargement ont été développées. Nous donnons une idée du type de réponse qu’il est possible d’obtenir avec de telles méthodes dans le cas du barreau en traction traité précédemment.

D.2.1 Retour sur l’exemple du paragraphe D.1

Il est facile à partir des équations (D.1) et (D.5) d’obtenir le chargement U comme une fonction du saut de déplacement $[u]$: nous parlerons de *pilotage de la solution en endommagement croissant*. Cette solution est alors comparée à un calcul élément fini effectué grâce au code ZEBULON :

- pour $\alpha = 1/3$, la figure D.4 montre que la réponse obtenue de manière paramétrique en traçant la courbe $(U([u]), T([u]))$ coïncide avec la réponse obtenue numériquement.
- pour $\alpha = 10/3$, la solution en endommagement croissant coïncide avec la réponse numérique jusqu’au saut de solution. La courbe obtenue en endommagement croissant présente alors un *rebroussement caractéristique* appelé **snap-back**. Une fois la contrainte nulle, le système est alors conduit à contrainte nulle au déplacement U voulu. La réponse du système est alors *continue*.

Disparition d’énergie La réponse obtenue par pilotage en endommagement croissant peut être comprise en remarquant que le trajet suivi amène à ne dissiper que l’énergie que la zone cohésive est capable de dissiper. Plus précisément, la figure D.5 montre que le retour en arrière met en évidence une énergie perdue (aire grisée). Cette énergie perdue est ici précisément l’énergie perdue ΔE mise en évidence sur la figure D.3.

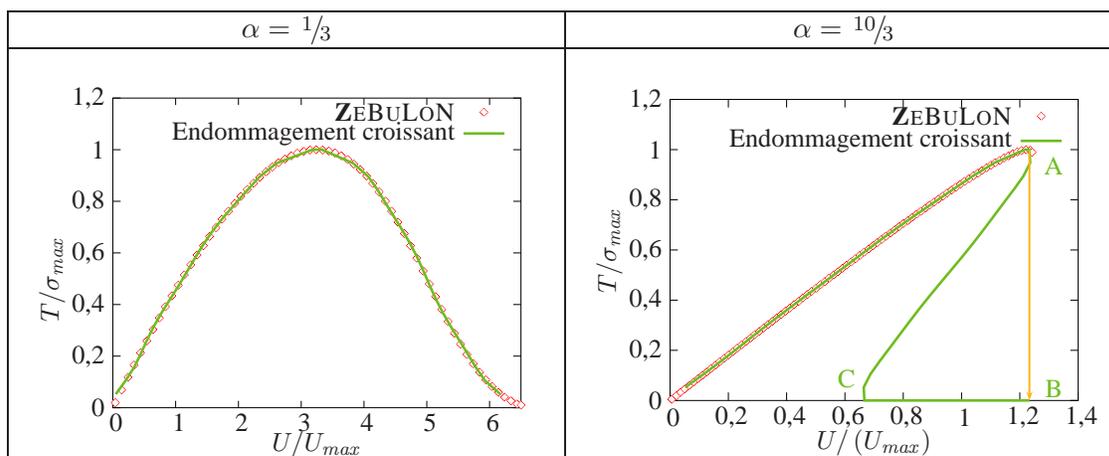


FIG. D.4 – Solutions obtenues numériquement et solutions calculées analytiquement dans chacun des deux cas $\alpha = 1/3$ et $\alpha = 10/3$.

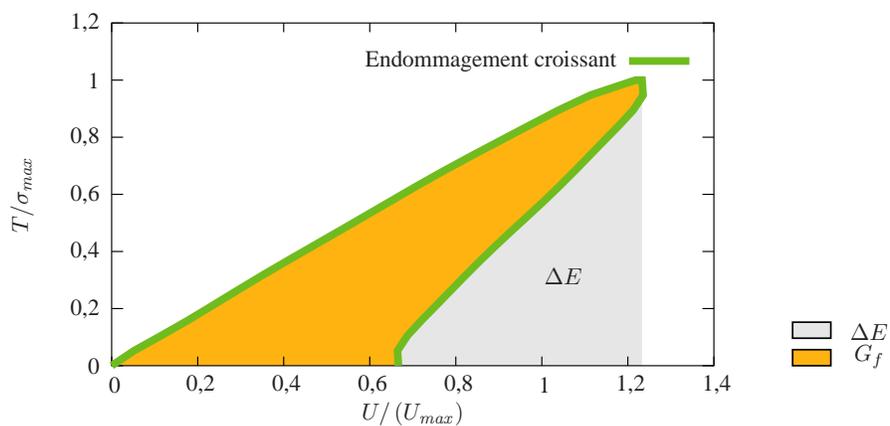


FIG. D.5 – L'énergie disparue ΔE correspond à la différence entre l'énergie emmagasinée et l'énergie qu'il est possible de dissiper dans la zone cohésive.

Table des figures

1.1	Schéma de principe d'un réacteur à eau pressurisée. _____	20
1.2	Dimensions caractéristiques d'un crayon combustible utilisé dans les REP (figure extraite de la référence [Baron 02]) _____	21
1.3	Dimensions caractéristiques des pastilles combustible utilisées dans les REP. _____	22
1.4	a) Contraintes thermoélastiques dans la pastille combustible pour une puissance linéique nominale de $200 W.cm^{-1}$. b) Valeurs typiques des coefficients thermoélastiques du combustible UO_2 . _____	23
1.5	Réseau de fissures dans la pastille combustible après irradiation. a) coupe transversale (perpendiculaire à l'axe de symétrie) b) coupe longitudinale (le long de l'axe de symétrie) c) représentation schématique. _____	24
1.6	Illustration de la mise en diabolo de la pastille combustible _____	25
1.7	Illustration de l'effet bambou sur la gaine. _____	27
1.8	Effets de surcontraintes locales dans la gaine au droit des fissures dans la pastille. _____	28
1.9	Principe schématique utilisé pour les codes de calcul de crayon combustible. _____	29
2.1	Barreau en traction uniaxiale _____	38
2.2	Illustration de la notion de domaine d'élasticité. _____	41
2.3	Définition des tractions agissant sur les lèvres de la fissure et des sauts de déplacement entre les lèvres de la fissure. _____	53
2.4	a) Milieu endommagé. b) Milieu sain équivalent. _____	58
2.5	Réponse du modèle de LORENTZ à un chargement uniaxial monotone croissant _____	60
2.6	Courbe de traction d'un matériau endommageable présentant une restauration de ses propriétés élastiques en compression (effet unilatéral). La ligne en pointillés représente le comportement en compression du matériau sain. _____	62
2.7	Un exemple de réponse à un chargement monotone d'un modèle d'endommagement. _____	65
2.8	Barreau endommageable en traction, séparation du barreau en deux blocs rigides. _____	65
2.9	Dépendance du trajet de fissure à l'orientation du maillage éléments finis : le bleu correspond au matériau sain, le rouge à la zone endommagée (tiré de [Andrieux 04b]). _____	66
2.10	Snap-back local si la condition $l_c \geq h$ n'est pas respectée. _____	68
3.1	Modélisation $1D$ du crayon combustible _____	79
3.2	Domaine d'étude dans une modélisation $2D$ _____	80
3.3	Maillage utilisé pour la modélisation $2D$ du crayon combustible. _____	81
3.4	Domaine d'étude dans une modélisation $3D$ _____	82
4.1	Vue idéalisée d'une pastille combustible fragmentée radialement. _____	85

4.2	Evolution des valeurs propres de $\frac{1}{E} \frac{\partial D}{\partial d_z}$ en fonction de d_θ . L'une des trois valeurs propres est nulle pour toute valeur de d_θ .	88
4.3	Réponse du modèle MEFISTO à une traction uniaxiale dans la direction axiale suivie d'une compression.	92
4.4	Réponse du modèle proposé à une série de chargements successivement de traction, de compression et de traction jusqu'à rupture.	98
5.1	Évolution du déplacement radial au cours de la montée en puissance nominale. Comparaison des résultats obtenus avec le modèle d'endommagement MEFISTO par rapport à un calcul élastique.	102
5.2	Profil radial de contraintes dans la pastille à $200 W.cm^{-1}$.	103
5.3	Absence de localisation de l'endommagement orthoradial en $2D$.	104
5.4	Evolution temporelle de la contrainte tangentielle pour un ensemble de point de GAUSS se situant au centre de la pastille (plus le numéro du point de GAUSS est élevé plus il est éloigné du centre de la pastille). Ces points de GAUSS fissurent pratiquement au même instant.	104
5.5	Maillages utilisés.	106
5.6	Carte de l'endommagement axial à la fin de la montée en puissance ($\mathcal{P}_{lin} = 200 W.cm^{-1}$) : a) pour le maillage rectangulaire, b) pour le maillage triangulaire.	106
5.7	Endommagement orthoradial à la fin de la montée en puissance ($\mathcal{P}_{lin} = 200 W.cm^{-1}$) : a) pour le maillage rectangulaire, b) pour le maillage triangulaire.	107
5.8	Déformées de la pastille visualisée avec une magnification de 30 (les déplacements sont multipliés par 30) en fin de montée en puissance à $200 W.cm^{-1}$.	108
5.9	Mise en diabolo obtenue pour le maillage rectangulaire et le maillage triangulaire.	109
5.10	Déplacement radial des points de l'axe de symétrie pour les maillages rectangulaire et triangulaire.	109
5.11	Brutalité de la fissuration axiale.	111
5.12	Convergence de l'algorithme de NEWTON-RAPHSON à l'incrément d'apparition des fissures axiales entre les instants t et $t + \Delta t$.	111
5.13	Comparaisons des profils d'endommagement obtenus en supprimant la fissuration axiale à $200 W.cm^{-1}$.	112
5.14	Comparaison des effets diabolo avec et sans fissuration axiale.	113
5.15	Évolution de l'endommagement orthoradial d_θ dans la pastille sur un incrément de temps entre les instants t et $t + \Delta t$.	114
6.1	a) Historique de puissance linéique en irradiation de base pour le crayon I04-4. b) Historique de puissance linéique en palier de conditionnement et en rampe de puissance pour le crayon I04-4.	120
6.2	Évolution des rayons intérieurs de la gaine et extérieurs de la pastille au cours de l'irradiation de base pour le crayon I04-4.	121
6.3	Évolution des contraintes en peau interne de gaine en irradiation de base.	122
6.4	Comparaison entre les profilométries expérimentales et calculées pour le crayon I04-4.	124
6.5	Évolution des rayons externes pastille et internes gaine aux plans médian-pastille et inter-pastilles au cours du transitoire de puissance.	124
6.6	Comblement de l'évidement au cours du transitoire de puissance.	125
6.7	Évolution des contraintes en peau interne de gaine au cours de la rampe de puissance.	126
6.8	Comparaison entre les profilométries expérimentales et calculées pour le crayon I04-4.	126
6.9	Comparaison des évolutions des rayons intérieurs gaine et extérieurs pastille obtenues par des calculs $2D$ et $3D$ pour le crayon I04-4.	128

6.10	Évolution des températures à cœur calculées par des modélisations $2D$ et $3D$. _____	128
6.11	Évolution des contraintes en peau interne de gaine au cours de l'irradiation de base. _____	129
6.12	Températures à cœur prédites par les modélisations $2D$ et $3D$ aux plans médian-pastille et inter-pastilles. _____	130
6.13	Évolution des rayons internes gaine aux plans médian-pastille et inter-pastilles au cours du transitoire de puissance. _____	130
6.14	Comparaison des profilométries calculées en $2D$ et $3D$ de puissance pour le crayon I04-4 après le transitoire de puissance. _____	131
6.15	Comparaison des évolutions de la hauteur de l'évidement calculées en $2D$ et $3D$. _____	131
6.16	Comparaison des évolutions des contraintes orthoradiales σ_θ calculées en peau interne de gaine en $2D$ et $3D$ au cours de la rampe de puissance pour le crayon I04-4. _____	132
6.17	Comparaison des températures à cœur calculée par des modélisations $1D$ et $2D$. _____	133
6.18	Comparaisons des évolutions des rayons internes gaine et externe combustible calculés par une modélisation $2D$ et une modélisation $1D$. _____	133
7.1	Comparaison entre les évolutions des rayons extérieurs de la pastille obtenues avec le modèle MEFISTO couplé soit à la loi viscoplastique LPCC soit à la loi d'OTTER pour le crayon I04-4 _____	136
7.2	Comparaison entre les profilométries obtenues avec le modèle MEFISTO couplé soit à la loi viscoplastique LPCC soit à la loi d'OTTER pour le crayon I04-4 _____	137
7.3	Comparaisons des évolutions des contraintes circonférentielles σ_θ calculées soit avec la loi viscoplastique LPCC soit avec la loi d'OTTER pour le crayon I04-4. _____	137
7.4	Influence du gonflement gazeux pour le crayon I04-4 sur la profilométrie de la gaine après rampe. _____	138
7.5	Influence du gonflement gazeux pour le crayon I04-4 sur le comblement de l'évidement. _____	139
7.6	Comparaisons des résultats obtenus par une modélisation $2D$ aux résultats expérimentaux dans le cas d'un transitoire de puissance sur des combustibles différents des combustibles UO_2 standard. _____	139
D.1	Essai de traction simple. La zone grisée représente le saut de déplacement au niveau de la zone cohésive et non son épaisseur. _____	159
D.2	Évolution du lagrangien d'un barreau en traction uniaxiale en fonction du déplacement imposé. _____	161
D.3	Disparition d'une énergie ΔE au moment du saut de solution. _____	162
D.4	Solutions obtenues numériquement et solutions calculées analytiquement dans chacun des deux cas $\alpha = 1/3$ et $\alpha = 10/3$. _____	163
D.5	L'énergie disparue ΔE correspond à la différence entre l'énergie emmagasinée et l'énergie qu'il est possible de dissiper dans la zone cohésive. _____	163

Liste des tableaux

1	Notations utilisées dans le corps du texte. _____	14
2.1	Propriétés mathématiques du lagrangien incrémental \mathcal{L} pour des lois de comportement standard. .	52
4.1	États de fissuration considérés par le modèle MEFISTO. _____	84
4.2	Critères de refermeture entre les différents états de fissuration. _____	91
4.3	Tenseurs d'élasticité dans les différents états fissurés utilisés pour décrire la fissuration du combustible en $2D$. _____	94

Références bibliographiques

- [Anderson 91] ANDERSON T.L. *fracture mechanics : fundamentals and applications*. CRC Press, 1991.
- [Andrieux 04a] ANDRIEUX S., BADEL P., CANO V., GODARD V. et LORENTZ É. *analyse de modèles non locaux d'endommagement*. mécanismes et mécanique des matériaux et structures à longueur interne : comportement et effets d'échelles. Colloque National MECAMAT, janvier 2004, p 25–32.
- [Andrieux 04b] ANDRIEUX S., BADEL P., CANO V., GODARD V., LORENTZ É. et BENALLAL A. *analyse de modèles non locaux d'endommagement*. Mécanismes et mécanique des matériaux : comportement et effets d'échelle. Colloque national Mecamat, janvier 2004, p 199–206.
- [Aufaure 95] AUFAURE M. *algorithme non linéaire dynamique du Code Aster*. référence du code aster, <http://www.code-aster.org/>, EDF/IMA/MMN, décembre 1995.
- [Babin 04] BABIN P., DENDIEVEL R., FOREST S., GANGHOFFER J.F., ZEGHADI A. et ZOBERMAN M. H. *mécanismes et mécanique des matériaux et structures à longueur interne : comportement et effets d'échelles*. Colloque National MECAMAT, janvier 2004.
- [Bahoboy 69] BAHOBOY P.E., ASAMOTO R.R. et CONTI A.E., 1969.
- [Bailly 96] BAILLY H., MÉNESSIER D. et PRUNIER C. *le combustible nucléaire des réacteurs à eau sous pression et des réacteurs à neutrons rapides*. série synthèses. Eyrolles, 1996.
- [Barenblatt 62] BARENBLATT G. I. *the mathematical theory of equilibrium cracks in brittle fracture*. Adv. Appl. Mech., 1962, vol 7, p 55–129.
- [Baron 97] BARON D., RUCK J.-M., COUTY J.-C. et D BONNIÈRES P. *CYRANO3 : un logiciel de nouvelle génération pour simuler le comportement des crayons combustible en réacteur*. Epure, 1997, vol 55, p 29–40.
- [Baron 02] BARON D. et BOUFFIOUX P. *le crayon combustible des réacteurs à eau pressurisée de grande puissance (Tranches 900 et 1300 MWe)*. Cours de l'École Centrale de Nantes, EDF, 2002.
- [Bentejac 97] BENTEJAC F., HOURDEQUIN N., BOURREAU S. et BROCHARD J. *lois physiques utilisées pour la modélisation thermomécanique des crayons combustible dans le code Toutatis version 2.0*. Rapport technique, CEA DMT/SEMI/LEMO, janvier 1997.
- [Bentejac 04] BENTEJAC F. et HOURDEQUIN N. *TOUTATIS : an application of the CAST3M finite element code for PCI three dimensional modelling*. pellet-clad interaction in water reactor fuels. Aix-en-Provence, France. nuclear energy agency, mars 2004.
- [Besson 01] BESSON J., CAILLETAUD G., CHABOCHE J.L. et FOREST S. *mécanique non linéaire des matériaux*. Hermes Science, 2001.
- [Besson 04a] BESSON J. *application de l'approche locale de la rupture à la simulation de la fissuration des structures : problèmes numériques liés à l'existence d'une longueur interne*. Mécanismes et mécanique des matériaux et structures à longueur interne : comportement et effet d'échelle. Colloque national Mecamat, janvier 2004, p 206–214.
- [Besson 04b] BESSON J. et DESMORAT D. *numerical implementation of constitutive models*. Local approach to fracture. BESSON J. École des Mines de Paris - les presses, 2004.

- [Bilteryyst 03] BILTERYST F. et MARIGO J.-J. *an energy based analysis of the pull-out problem*. European Journal of Mechanics, 2003, vol 22, p 55–69.
- [Bourdin 00] BOURDIN B. et MARIGO G.A. FRANCFORT J.J. *numerical experiments in revisited brittle fracture*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 2000, vol 28, p 797–826.
- [Brochard 97] BROCHARD J., BENTEJAC F. et HOURDEQUIN N. *non linear finite element studies of the pellet cladding mechanical interaction in a PWR Fuel*. SMIRT 14. France. août 1997.
- [Brochard 01] BROCHARD J., BENTEJAC F., HOURDEQUIN N., SEROR S., VERDEAU C., FANDEUR O., LANSIART S. et VERPEAUX P. *modelling of Pellet Cladding Interaction in PWR Fuel*. SMIRT 16-C03/1. Washington DC. août 2001.
- [Béguin 04] BÉGUIN S. *PCI-related constraints on EDF PWRs and associated challenges*. pellet-clad interaction in water reactor fuels. Aix-en-Provence, France. nuclear energy agency, mars 2004.
- [Cangémi 96] CANGÉMI L., COCU M. et RAOUS M. *adhesion and friction model for the fiber/matrix interface of a composite*. Engineering Systems Design and Analysis, 1996, vol 4, p 157–163.
- [Castelier 95] CASTELIER É. *estimation d'un champ de perméabilité à partir de mesures de charge hydraulique*. Thèse : École Nationale Supérieure des Mines de Paris, octobre 1995.
- [Castelier 05] CASTELIER É., HELFER T., GARCIA P. et PLANCQ D. *Extension en deux dimensions du modèle MEFISTO : étude numérique et premiers résultats de l'application Alcyone2D*. Rapport technique, CEA DEC/SESC/LLCC, À paraître 2005.
- [Chaboche 78] CHABOCHE J.L. et LEMAÎTRE J. *aspect phénoménologique de la rupture par endommagement*. Journal de Mécanique Appliquée, 1978, vol 2, n° 3, p 317–365.
- [Chaboche 96] CHABOCHE J.L. et LEMAÎTRE J. *mécanique des matériaux solides*. Dunod, 2^{de} édition, 1996.
- [Chaboche 97] CHABOCHE J.L., GIRARD R. et LEVASSEUR P. *on the interface debonding models*. International Journal of Damage Mechanics, juillet 1997, vol 6.
- [Chambolle 04] CHAMBOLLE A. *an approximation result for special functions with bounded deformation*. Journal de mathématiques pures et appliquées, avril 2004.
- [Coirier 01] COIRIER J. *mécanique des milieux continus*. Dunod, 2^{de} édition, 2001.
- [Coussy 91] COUSSY O. *mécanique des milieux poreux*. Éditions Technip, 1991.
- [Céa 71] CÉA J. *optimisation : théorie et algorithme*. Méthodes mathématiques de l'informatique. Dunod, 1971.
- [Dahlblom 90] DAHLBLOM O. et OTTOSEN N. S. *smearred crack analysis using generalized fictitious crack model*. Journal of Engineering Mechanics, janvier 1990, vol 116, n° 1, p 55–76.
- [de Borst 03] DE BORST R. *numerical aspects of cohesive-zone models*. Engineering Fracture Mechanics, 2003.
- [Demengel 99] DEMENGEL F. *introduction aux équations aux dérivées partielles elliptiques : fonctions à dérivées mesures et applications*. Diderot Multimedia-EDL, 1999.
- [Ekeland 74] EKELAND I. et TEMAM R. *analyse convexe et problèmes variationnels*. Dunod Gauthier-Villars Paris, 1974.
- [Feyel 04] FEYEL F. *cohesive Zone Models*. Local approach to fracture. BESSON J. École des Mines de Paris - les presses, 2004, p 265–277.
- [Forest 04] FOREST S. et LORENTZ É. *localization phenomena and regularization methods*. Local Approach to fracture. D. M. D. P. L PRESSES ÉCOLE. 2004, p 311–371.
- [Francfort 93] FRANCFORT G.A. et MARIGO J.-J. *stable damage evolution in a brittle continuous medium*. Eur. J. Mech. A/Solids, 1993, vol 12, n° 2, p 149–189.
- [Francfort 02] FRANCFORT G. et MARIGO J.J. *vers une théorie énergétique de la rupture fragile*. C.R. Mécanique, 2002, vol 330, p 225–233.

- [François 95] FRANÇOIS D., PINEAU A. et ZAOUÏ A. *comportement mécanique des matériaux II - viscoplasticité, endommagement, mécanique de la rupture, mécanique du contact*. Hermès, 1995.
- [Frémond 82] FRÉMOND M. *adhésion et contact unilatéral*. Contact Mechanics and Wear of Rail/Wheel Systems, p 62–77. University of Waterloo Press, 1982.
- [Frémond 87] FRÉMOND M. *adhérence des solides*. Journal de Mécanique Théorique et Appliquée, 1987, vol 6, n° n 3, p 383–407.
- [Frémond 93] FRÉMOND M. et NEDJAR B. *endommagement et principe des puissances virtuelles*. C.R. Acad. Sci., 1993, vol 317, série II, p 857–864.
- [Frémond 95] FRÉMOND M. et NEDJAR B. *damage in concrete : the unilateral phenomenon*. Nuclear Engineering and Design, juin 1995, vol 156, p 323–335.
- [Frémond 96] FRÉMOND M. et NEDJAR B. *damage, gradient of damage and principle of virtual power*. International Journal of Solids and Structures, mars 1996, vol 33, n° 8, p 1083–1103.
- [Garcia 97] GARCIA P. et MOYNE M. *modelling the steady state and transient mechanical behaviour of fuel rods*. Proceedings of the 14th SMIRT Conference, Lyon, France. Division C, 1997, p 263–270.
- [Garcia 98a] GARCIA P., STRUZIŁ C., AGARD M. et MOYNE M. *the effect of fission gas swelling on cladding strain during power ramp tests*. Fuel chemistry and pellet-clad interaction to high burn-up fuel. Nyköping, Sweden. IAEA, septembre 1998.
- [Garcia 98b] GARCIA P., STRUZIŁ C. et VEYRIER N. *temperature calculations and the effect of modelling the fuel mechanical behaviour*. thermal performance of high burn-up LWR Fuel. OCDE/AEN, Mars 1998.
- [Garcia 99] GARCIA P., BOURGOGNON J., BILLEREY A. et STRUZIŁ C. *modélisation du phénomène de délocalisation et de remise en place des fragements de combustible : analyse de calculs tridimensionnels*. Rapport technique 99-2021, CEA DEC/SESC/LLCC, septembre 1999.
- [Garcia 01] GARCIA P. et LOUCHE V. *modélisation mono-dimensionnelle du comportement mécanique du crayon combustible : spécifications physiques du problème*. Rapport technique 99-2001, CEA DEC/SESC/LSC, juin 2001.
- [Garcia 02] GARCIA P., STRUZIŁ C., AGARD M. et LOUCHE V. *mono-dimensional mechanical modelling of fuel rods under normal and off-normal operating conditions*. Nuc. Engng. and Design, 2002, vol 206, p 183–201.
- [Garnier 04] GARNIER C., MAILHE P., VESCO P., BERNARD L.C., DELAFOY C. et GARCIA P. *the COPERNIC mechanical model and its application to doped fuel*. pellet-clad interaction in water reactor fuels. Aix-en-Provence, France. nuclear energy agency, mars 2004.
- [Gayffier 94] GAYFFIER A. DE. *algorithme non linéaire de CASTEM2000 (NONLINE et INCREME)*. Rapport technique, CEA DRN/DMT/SEMT/LAMS, 1994.
- [Germain 83] GERMAIN P., NGUYEN Q. Q. et SUQUET P. *continuum thermodynamics*. Journal of Applied Mechanics, décembre 1983, vol 50, p 1010–1020.
- [Geyer 98] GEYER P., LORENTZ É. et VOGEL C. *intégration explicite des relations de comportement non linéaire*. référence du code aster, <http://www.code-aster.org/>, EDF/RNE/EMA, IMA/MMN, avril 1998.
- [Godard 05] GODARD V. *modélisation de l'endommagement anisotrope du béton avec prise en compte de l'effet unilatéral : application à la simulation des enceintes de confinement nucléaires*. Thèse : Université Paris VI, 2005.
- [Guérin 85] GUÉRIN Y. *le comportement mécanique du combustible nucléaire sous irradiation*. Ann. Chim. Fr., 1985, vol 10, p 405–414.

- [Haidar 04] HAIDAR K. et PIJAUDIER-CABOT G. *propriétés de rupture, microstructure et vieillissement : approche par un modèle d'endommagement non local*. Mécanismes et mécanique des matériaux et structures à longueur interne : comportement et effet d'échelle. Colloque national Mecamat, janvier 2004, p 233–240.
- [Halphen 73] HALPHEN B. et NGUYEN Q.S. *sur les lois de comportement élasto-visco-plastique à potentiel généralisé*. Compte Rendu de l'Académie des Sciences série A, août 1973, vol 277, p 319–322.
- [Halphen 75] HALPHEN B. et NGUYEN Q. S. *sur les matériaux standard généralisés*. Journal de Mécanique, 1975, vol 14, n° 1, p 39–63.
- [Helfer 05a] HELFER T. *description et extension du modèle d'endommagement MEFISTO*. Rapport technique, CEA DEC/SESC/LLCC, janvier 2005.
- [Helfer 05b] HELFER T. *implantation de lois de comportement viscoplastique de l'UO₂ et du modèle de fissuration MEFISTO couplé à la viscoplasticité dans CAST3M via l'interface umat*. Rapport technique, CEA DEC/SESC/LLCC, mars 2005.
- [Helfer 05c] HELFER T. et CASTELIER É. *implémentation du module mécanique MEFISTO sous ZEBULON*. Rapport technique, CEA DEN/DEC/SESC/LLCC, janvier 2005.
- [Helfer 05d] HELFER T. et CASTELIER É. *revue bibliographique sur la fissuration des matériaux fragiles*. Rapport technique, CEA DEC/SESC/LLCC, À paraître 2005.
- [Henrot 00] HENROT A. *équations aux dérivées partielles*. Rapport technique, École des Mines de Nancy, 2000. Mathématiques tronc commun.
- [Hillerborg 76] HILLERBORG A., MODÉER M. et PERTERSON P-E. *analysis of crack formation and crack growth in concrete by means of fracture mechanics and finite elements*. Cement and Concrete Research, 1976, vol 6, p 779–782.
- [Jirásek 01] JIRÁSEK M. et ZIMMERMANN T. *embedded crack model : part I : basic formulation*. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 2001, vol 50, p 1269–1290.
- [Lassmann 87] LASSMANN K. *the structure of fuel element code*. Nuclear Engineering and Design, 1987, vol 57, p 17–39.
- [Laverne 04] LAVERNE J. et MARIGO J.J. *approche globale, minima relatifs et critère d'amorçage en mécanique de la rupture*. Comptes Rendus Mécanique, janvier 2004, vol 332.
- [Lorentz 99a] LORENTZ É. *lois de comportement à gradients de variables internes : constructions, formulation variationnelle et mise en œuvre numérique*. Thèse : LMT-Cachan, Université Paris 6, 1999.
- [Lorentz 99b] LORENTZ É. et ANDRIEUX S. *a variational formulation for non local damage models*. International Journal of Plasticity, 1999, vol 15, p 119–138.
- [Lorentz 01] LORENTZ É. *méthodes de pilotage du chargement*. référence du code aster, <http://www.code-aster.org/>, EDF/MTI/MMN, mai 2001.
- [Lorentz 03a] LORENTZ É. *loi d'endommagement d'un matériau élastique fragile*. Manuel de référence Code_Aster R5.03.18-A, EDF-R&D/AMA, novembre 2003. www.code-aster.org.
- [Lorentz 03b] LORENTZ É. et ANDRIEUX S. *analysis of non-local models through energetic formulations*. International Journal of Solids and Structures, 2003, vol 40, p 2905–2936.
- [Lorentz 05] LORENTZ É. et BENALLAL A. *gradient constitutive relations : numerical aspects and application to gradient damage*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2005. In press.
- [Marigo 81] MARIGO J.-J. *formulation d'une loi d'endommagement d'un matériau élastique*. C. R. Acad. Sc., mai 1981, vol 292, p 1309–1312.
- [Marigo 00] MARIGO J.-J. *l'endommagement et la rupture : hier, aujourd'hui et demain*. Rapport technique, IPSI : Comportements non linéaires des matériaux, mars 2000.

- [Masson 05] MASSON R. et BANOS C. *enrichissement tangentiel de la modélisation 1,5D du crayon combustible*. Rapport technique, EDF/MMC, 2005.
- [Maugin 04] MAUGIN G. A. *introduction à la mécanique des milieux continus généralisés et ses applications*. mécanismes et mécanique des matériaux et structures à longueur interne : comportement et effets d'échelles. Colloque National MECAMAT, janvier 2004, p 25–32.
- [Mazars 90] MAZARS J., BERTHAUD Y. et RAMTANI S. *the unilateral behaviour of damaged concrete*. Engineering Fracture Mechanics, 1990, vol 35, n° 4/5, p 629–635.
- [Michel 05] MICHEL B., PLANCQ D., STRUZIK C., GARCIA P. et LANSIART S. *pellet cladding mechanical interaction assessment using 3D modelling*. SMIRT 18-C03-4. Beijing, China. août 2005.
- [Monerie 00] MONERIE Y. *fissuration des matériaux composites : rôle de l'interface fibre/matrice*. Thèse : Université Aix-Marseille II, 2000.
- [Monerie 01] MONERIE Y., FEYEL F. et CHABOCHE J.L. *interface debonding models : a viscous regularization with a limited rate dependency*. International Journal of Solids and Structures, 2001, vol 38, p pp. 3127–3160.
- [Monerie 02] MONERIE Y. et GATT J.-M. *modèle de comportement viscoplastique de l'UO₂ vierge*. Rapport technique, CEA DEC/SESC/LLCC, janvier 2002.
- [Moreau 70] MOREAU J.J. *sur les lois de frottement, de plasticité et de viscosité*. Compte Rendu de l'Académie des Sciences série A, septembre 1970, vol 271, p 608–611.
- [Möes 02] MÖES N. et BELYTSCHKO T. *extended finite element method for cohesive crack growth*. Engineering Fracture Mechanics, 2002, vol 69, p 813–833.
- [Nguyen 87] NGUYEN Q. S. *bifurcation and post-bifurcation analysis*. J. Mech. Phys. Solids, 1987, vol 35, n° 3, p 303–324.
- [Otter 75] OTTER C. *fluage de l'oxyde d'uranium en pile et hors pile*. Rapport technique, CEA/SEAMA, 1975.
- [Peelings 02] PEELINGS R.H.J, DE BORST R., BREKELMANS W.A.M et GEERS M.G.D. *localisation issues in local and nonlocal continuum approaches to fracture*. European Journal of Mechanics A/Solids, 2002, vol 21, p 175–189.
- [Pellet 01] PELLET J. *dualisation des conditions aux limites*. référence du code aster, <http://www.code-aster.org/>, EDF-R&D/MITI/MMN, février 2001.
- [Plancq 01] PLANCQ D., STRUZIK C., GARCIA P., AGARD M. et MECUSON G. *proposition de méthodologie et interprétation de calculs de rampes de puissance appliquées à l'étude de l'interaction pastille gaine*. Rapport technique, CEA DEC/SESC/LLCC, décembre 2001.
- [Plancq 04] PLANCQ D., THOUVENIN G., RICAUD J.M., STRUZIK C., HELFER T., BENTEJAC F., THÉVENIN P. et MASSON R. *PLEIADES : a unified environment for multi-dimensional fuel performance modeling*. international meeting on LWR fuel performance. Florida. ANS, AESJ and ENS, 2004.
- [Randé 04] RANDÉ B. *équations différentielles*. Techniques de l'ingénieur. Éditions des techniques de l'ingénieur, avril 2004.
- [Raviart 98] RAVIART P.-A. et THOMAS J.-M. *introduction à l'analyse numérique des équations aux dérivées partielles*. Dunod, 1998.
- [Retel 02] RETEL V. *contribution à la modélisation mécanique et numérique de l'interaction pastille-gaine dans les crayons combustible des réacteurs nucléaires*. Thèse : U.F.R. des sciences et techniques de l'université de Franche-Comté, décembre 2002.
- [Rice 68] RICE J. R. *mathematical analysis in the mechanics of fracture*. H. Liebowitz, Fracture, volume 2, p 191–306. Academic, New York, 1968.

- [Salençon 02] SALENÇON J. *de l'élasto-plasticité au calcul à la rupture*. Les éditions de l'École Polytechnique - Ellipses, 2002.
- [Simo 85] SIMO J.C. et TAYLOR R.L. *consistent tangent operators for independent elastoplasticity*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 1985, vol 48, p 101–118.
- [Sladkoff 99] SLADKOFF M., HUET F. et MOCELLIN A. *recommandation pour la loi de fluage stationnaire de l'UO₂ non dopé : mise à jour de fin 1998 intégrant les études de fluage sur les lots L209609 et L209619*. Rapport technique, CEA DEC/SPUA/LACA, 1999.
- [Struzik 00] STRUZIK C., PIRON J.P., AGARD M., PELLETIER M., DELETTE G., MARELLE V., GARCIA P. et GUÉRIN Y. *METEOR version 1.5 : descriptive manual*. Rapport technique 00-2002, CEA DEC/SESC/LSC, octobre 2000.
- [Tijssens 00] TIJSENS M. G. A., SLUYS B. L. J. et V. D GIESSEN E. *numerical simulation of quasi-brittle fracture using damaging cohesive surfaces*. European Journal of Mechanics - A/Solids, 2000, vol 19, n° 5, p 761–779.
- [Tikhonov 76] TIKHONOV A. et ARSÉNINE V. *méthodes de résolutions de problèmes mal posés*. Mir, Moscou, 1976.
- [Tvergaard 90] TVERGAARD V. *effect of fibre debonding in a whisker reinforced metal*. Mater. Sci. Eng., 1990, vol A125, p pp. 203–213.
- [Xu 95] XU X.-P. et NEEDLEMAN A. *numerical simulations of dynamic interfacial crack growth allowing for crack growth away from the bond line*. International Journal of Fracture, 1995, vol 74, p 253–275.

RÉSUMÉ

Le travail de thèse porte sur la fissuration des pastilles combustible UO₂ des réacteurs à eau pressurisée, et ses conséquences sur le comportement mécanique du crayon combustible. La fissuration conduit :

- d'une part, à une importante relaxation des contraintes dont dépendent la plupart des autres phénomènes mécaniques et physico-chimiques ;
- d'autre part, à la fragmentation de la pastille.

Sa prise en compte est nécessaire pour une description correcte du chargement mécanique de la gaine au cours de l'irradiation.

L'approche locale de la rupture a été adoptée pour décrire la fissuration de la pastille. Des considérations pratiques nous ont amenés à privilégier une description quasi-statique de la fissuration du combustible à l'aide de modèles d'endommagement local. Ces modèles décrivent l'apparition de fissures par une perte de rigidité locale du matériau. Une telle description présente des difficultés de mise en œuvre, telles que des dépendances

des résultats au maillage éléments finis et des évolutions discontinues de l'équilibre de la structure lors de propagations instables. Ces points ont fait l'objet d'une attention particulière car ils conditionnent l'utilisation de tels modèles dans les études combustibles.

Le travail effectué s'inscrit en support des différents schémas de calculs du code ALCYONE développé au DEC/SESC au sein de la plateforme PLEIADES. Pour chacun de ces schémas, qui se différencient par les hypothèses de modélisation géométrique du crayon, nous avons proposé une modélisation des effets de la fissuration de la pastille.

La modélisation dite 2D axisymétrique du crayon combustible est la plus novatrice et a été de ce fait particulièrement étudiée. Nous montrons qu'elle est à même de rendre compte, grâce à une description appropriée de la fissuration du combustible, des principaux changements géométriques du crayon combustible intervenant en situation de fonctionnement normal ou incidentel.

MOTS CLES

Approche locale de la rupture, endommagement fragile, modélisation des crayons combustible en situation normale et incidentelle

ABSTRACT

This thesis aims to model the cracking of pressurised water reactor fuel pellets and its consequences on the mechanical behaviour of the fuel rod. Fuel cracking has two main consequences. It relieves the stress in the pellet, upon which the majority of the mechanical and physico-chemical phenomena are dependent. It also leads to pellet fragmentation. Taking fuel cracking into account is therefore necessary to adequately predict the mechanical loading of the cladding during the course of an irradiation.

The local approach to fracture was chosen to describe fuel pellet cracking. Practical considerations brought us to favour a quasi-static description of fuel cracking by means of a local damage models. These models describe the appearance of cracks by a local loss of rigidity of the material. Such a description leads to numerical difficulties, such as mesh dependency of the results and abrupt changes in the equilibrium state of the mechanical structure during unstable crack propagations. A particular at-

tention was paid to these difficulties because they condition the use of such models in engineering studies.

This work was performed within the framework of the ALCYONE fuel performance package developed at CEA/DEC/SESC which relies on the PLEIADES software platform. ALCYONE provides users with various approaches for modelling nuclear fuel behaviour, which differ in terms of the type geometry considered for the fuel rod. A specific model was developed and implemented to describe fuel cracking for each of these approaches.

The 2D axi-symmetric fuel rod model is the most innovative and was particularly studied. We show that it is able to assess, thanks to an appropriate description of fuel cracking, the main geometrical changes of the fuel rod occurring under normal and off-normal operating conditions.

KEY WORDS

Local approach to fracture, brittle damage, fuel rod modelling under normal and off-normal operating conditions