

EVALUATION DES DEFORMATIONS ENGENDREES PAR LES BULLES DE GAZ DE FISSION - MODELE MECANIQUE PAR ELEMENTS FINIS

2.1. Description des modèles analytiques et éléments finis

2.1.1. Modèle analytique

La formulation analytique est basée sur une géométrie avec une seule bulle dans un matériau élastique et isotrope. Le problème est simplifié en faisant l'hypothèse que les bulles de gaz de fission sont sphériques. La solution du problème de l'équilibre est celle de la sphère creuse homogène (rayon interne r_0 , rayon extérieur r_1) (Figure 65) [116].

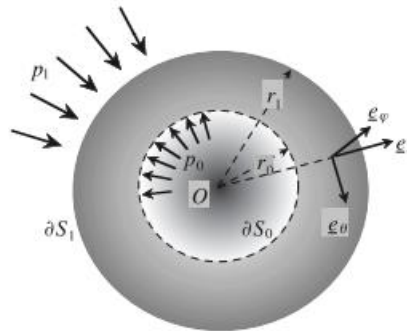


Figure 65 : Equilibre d'une sphère creuse homogène sous pression interne.

La sphère est constituée d'un solide élastique linéaire (caractérisé par son module de Young E et, le ratio de Poisson ν et la contrainte d'écoulement σ_y). Le critère de passage dans le domaine plastique est défini par Von Mises. Etant donné que la géométrie de l'ensemble et le chargement présentent une symétrie sphérique, et que le comportement du matériau est isotrope, la solution peut être construite dans un système de coordonnées sphériques (r, θ, φ) . $\underline{\sigma}$ est le tenseur des contraintes et $\underline{\varepsilon}$ est le tenseur de déformation. De plus, en raison de la symétrie sphérique, $\varepsilon_\theta = \varepsilon_\varphi$ et $\sigma_\theta = \sigma_\varphi$.

La condition à la limite P_0 est issue de la pression interne des gaz de fission et de l'équation de Laplace, (équation (19)).

$$\sigma_r = -P_0 \text{ avec } P_0 = P_{\text{int}} - \frac{2\gamma}{r} \quad (19)$$

L'équation de Laplace donne la différence de pression entre l'intérieur et l'extérieur d'une surface courbe en fonction de la tension de surface, γ et du rayon de courbure, r . Le modèle a été appliqué dans le cas de bulles de gaz dans l' UO_2 .

L'équation d'équilibre (20) et les conditions aux limites (21) peuvent être exprimées comme suit:

$$\frac{d\sigma_r}{dr} + 2\frac{(\sigma_r - \sigma_\theta)}{r} = 0 \quad (20)$$

$$\sigma_r(r = r_0) = -p_0 \text{ et } \sigma_r(r = r_1) = p_1 = 0 \quad (21)$$

La solution de ce problème (22), avec u , le déplacement radial, est la suivante:

$$u_r = C_1 r + \frac{C_2}{r^2} \quad (22)$$

$$\text{Avec } C_2 = -p_0 \frac{(1+\nu)(1-2\nu)}{E} \left[2(1-2\nu) \frac{r_1^3}{r_0^3} + (1+\nu) \right]^{-1} \text{ et } C_1 = C_2 \cdot r_1^3$$

Les déformations (23) sont :

$$\varepsilon_r = C_2 \cdot \left(1 + \frac{2r_1^3}{r^3}\right) \text{ et } \varepsilon_\theta = C_2 \cdot \left(1 - \frac{r_1^3}{r^3}\right) \quad (23)$$

2.1.2. Modèle par éléments finis

Un volume cubique a été généré avec SALOME, (<http://www.salome-platform.org/>). Ce volume représente un monocristal, orienté avec l'axe z confondu avec la direction [001]. Des bulles sphériques sont disposées de façon aléatoire dans l'élément volumique, en suivant un schéma booléen à travers l'algorithme appelé RSA (Random Sequential Addition) [117], [118]. Deux différentes conditions limites sont appliquées : une contrainte microscopique libre sur la surface S_z (surface polie de l'échantillon) et un déplacement normal uniforme, associés à une condition de contrainte macroscopique normale libre sur les autres faces. La taille du cube, le diamètre des bulles et la fraction volumique dépendent des microstructures sélectionnées telles que décrites plus loin (Figure 66).

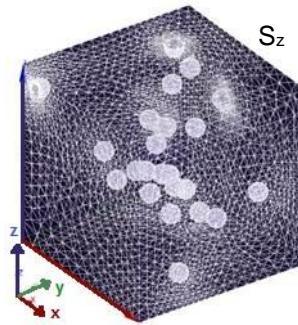


Figure 66 : VER typique et exemple de maillage avec Cast3m

Dans le cube, le maillage associé est fait d'environ 90000 éléments. Une étude de la sensibilité au maillage est donnée en annexe G. La représentativité du VER (Volume Représentatif Élémentaire) a été vérifiée avec un calcul de covariance [119]. Ce calcul permet d'évaluer la taille moyenne des hétérogénéités, la présence d'échelle et l'anisotropie du milieu. La Figure 67 est un exemple de calcul de covariance pour un VER de 4,5 μm de côté, avec 23 bulles de 400 nm de rayon correspondant à une fraction volumique, f_v , de 0,1 (Fuel 1, voir Tableau 17).

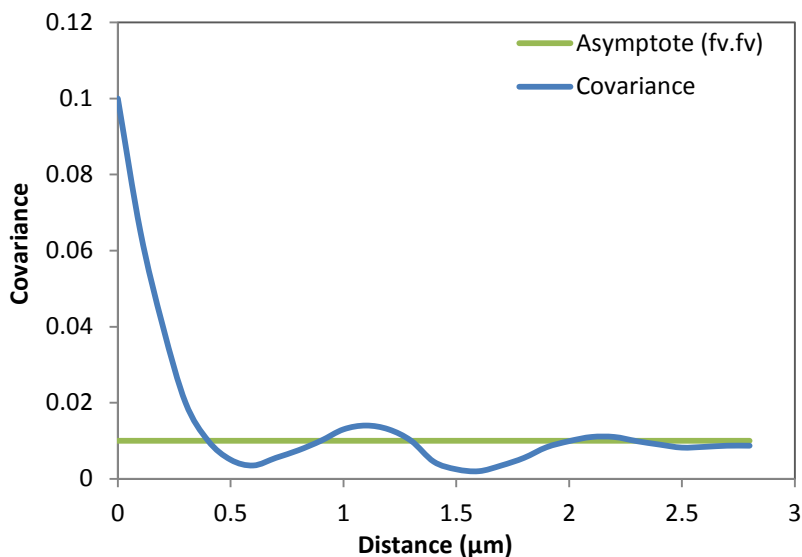


Figure 67 : Covariance pour un VER de 23 bulles.

Le calcul de covariance permet de caractériser l'échantillonnage aléatoire pour un VER. Pour chaque microstructure présentée dans le Tableau 17, la première intersection avec l'asymptote (fraction volumique au carré) correspond à la portée et donne la taille caractéristique des hétérogénéités (rayon moyen des bulles). La vérification de la stationnarité et de l'ergodicité du milieu généré passe par l'analyse de la convergence de la covariance vers l'asymptote. Dans le cas de la Figure 67, la covariance converge à partir d'environ 2 μm soit la moitié du cube, confirmant le choix des dimensions du VER.

2.1.3. Equations constitutives

Le modèle utilisé prend en compte la plasticité cristalline dans le cas des bulles très pressurisées. Les équations constitutives sont implémentées dans MFront (<http://tfel.sourceforge.net/>) et utilisées avec Cast3m (un logiciel d'éléments finis, <http://www-cast3m.cea.fr>). Le modèle élastique considère l'anisotropie de l' UO_2 avec les paramètres suivant [120] : $C_{11}=396$ GPa, $C_{12}=121$ GPa, $C_{44}=64$ GPa.

Des tests de compression sur des monocristaux d' UO_2 [121], [122], [123] ont été effectués afin de déterminer les caractéristiques des systèmes de glissement activés. Les tests ont montré que le système de glissement principal est $\{100\}\langle 110 \rangle$ pour des températures entre 700 et 1900°C [124], [125]. Cependant, d'autres systèmes $\{110\}\langle 110 \rangle$ ou $\{111\}\langle 110 \rangle$ peuvent être activés quand la température est élevée. Les contraintes de cisaillement critiques ont été mesurées pour les deux familles de systèmes principales : $\{100\}\langle 011 \rangle$ (6 systèmes) et $\{110\}\langle 1\bar{1}0 \rangle$ (6 systèmes). Des modèles élasto-viscoplastiques à l'échelle cristalline ont été proposés pour l' UO_2 dans les références [126], [127] et sont résumés dans le Tableau 16 avec l'ensemble des équations (24).

$$\left\{ \begin{array}{l} \underline{\underline{\dot{\sigma}}} = \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}_{el} \\ \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}_{el} = \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}_{tot} - \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}_{vp} \\ \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}_{vp} = \sum_s \dot{\gamma}^s \underline{\underline{m}}^s \\ \underline{\underline{m}}^s = \frac{1}{2} (\underline{\underline{n}}^s \otimes \underline{\underline{b}}^s + \underline{\underline{b}}^s \otimes \underline{\underline{n}}^s) \\ \dot{\gamma}^s = \dot{\gamma}_0 \left| \frac{\underline{\underline{m}}^s : \underline{\underline{\sigma}}}{\tau_0^s} \right|^n \text{sign}(\underline{\underline{m}}^s : \underline{\underline{\sigma}}) \end{array} \right. \quad (24)$$

Notation	Paramètres	Valeur ajustée/variable	Unité
$\underline{\underline{\varepsilon}}_{tot}$	Déformation totale	variable	-
$\underline{\underline{\varepsilon}}_{el}$	Déformation élastique	variable	-
$\underline{\underline{\varepsilon}}_{vp}$	Déformation viscoplastique	variable	-
$\underline{\underline{s}}$	Index des systèmes de glissement	12 systèmes	-
$\dot{\gamma}_s$	Déformation viscoplastique du système s	variable	-
$\underline{\underline{m}}_s$	Matrices de Schmid	Famille 1 : {100} < 011 > (6 systèmes) Famille 2 : {110} < 110 > (6 systèmes)	-
$\underline{\underline{n}}_s$	Vecteur normal au plan de glissement du système s		-
$\underline{\underline{b}}^s$	Vecteur de burgers normalisé des dislocations du système s		-
$\dot{\gamma}_0$	Vitesse de déformation de référence	$3,87 \cdot 10^7$	s^{-1}
τ_0^s	Contrainte de cisaillement critique du système s	$110 \cdot 10^6$ pour {100} <011>; $220 \cdot 10^6$ pour {110} <110>	Pa
n	Exposant	5,5	
$\underline{\underline{\sigma}}$	Contrainte	variable	Pa

Tableau 16 : Paramètres et valeurs ajustées pour le modèle de plasticité cristalline de l'UO₂

Dans ce modèle à 3 dimensions, les déformations et contraintes sont des tenseurs du second ordre. Une formulation en petites déformations a été utilisée. La déformation totale $\underline{\underline{\varepsilon}}_{tot}$ est la partie symétrique de ∇u où u est le déplacement, équation (25).

$$\underline{\underline{\varepsilon}}_{tot} = \frac{1}{2} (\nabla u^T + \nabla u) \quad (25)$$

$\underline{\underline{\varepsilon}}_{tot}$ est supposé être la somme d'une déformation élastique $\underline{\underline{\varepsilon}}_{el}$ et d'une déformation viscoplastique $\underline{\underline{\varepsilon}}_{vp}$. Cette relation peut être aussi exprimée en termes de vitesse de déformation, équation (26).

$$\underline{\underline{\dot{\epsilon}_{tot}}} = \underline{\underline{\dot{\epsilon}_{el}}} + \underline{\underline{\dot{\epsilon}_{vp}}} \quad (26)$$

Le comportement élastique est défini par la loi de Hooke équation (27).

$$\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{\epsilon}_{el}} \quad (27)$$

avec le tenseur élastique exprimé dans le repère du cristal,

$$\underline{\underline{C}} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{pmatrix}$$

$C_{11} = 396 \text{ GPa}; C_{12} = 121 \text{ GPa}; C_{44} = 64 \text{ GPa}$

2.2. Résultats

Le modèle par éléments finis est représentatif de plusieurs zones caractéristiques de la pastille irradiée. Les paramètres qui définissent chaque zone sont la taille des bulles, la fraction volumique et la pression de gaz dans les bulles. Ces données sont obtenues à partir du code de calcul MARGARET [64] et des résultats expérimentaux du chapitre 2.

Le Tableau 17 donne les caractéristiques de quatre différentes microstructures :

	Fuel 1 RIM	Fuel 2 Centre	Fuel 3 Zone intermédiaire	Fuel 4 Zone intermédiaire
Fraction volumique	0,1	0,015	0,007	0,007
Pression	6 MPa	20 MPa	220 MPa	7000 MPa
Rayon	400 nm	250 nm	25 nm	2 nm

Tableau 17 : Caractéristiques des microstructures pour le VER.

Fuel 1 est représentatif de la structure HBS en périphérie de la pastille, avec des températures de l'ordre de 400-500 °C pendant l'irradiation. Fuel 2 représente la zone centrale où la température peut atteindre 1100 °C pendant une irradiation nominale. Fuel 3 et 4 sont des zones intermédiaires, avec des températures entre 500 et 1000 °C (voir le Chapitre 1, paragraphe 3). Afin de comparer la déformation élastique calculée avec les résultats expérimentaux et la détection limite des techniques de mesure, les pressions sont sélectionnées à température ambiante.

2.2.1. Iso-valeurs des déformations et interaction

Les iso-valeurs des déformations élastiques principales maximales autour des bulles (Figure 68) ont été analysées afin d'évaluer la répartition des déformations et les interactions entre les bulles. Seule

la pression interne des bulles à froid après irradiation est considérée sans contrainte résiduelle macroscopique.

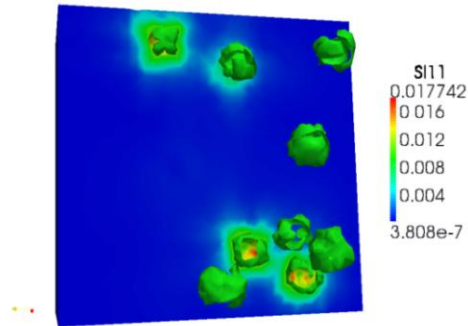


Figure 68 : Déformation principale maximale, iso-valeurs pour Fuel 4

Une première observation montre une large variation des niveaux de déformations entre les quatre types de microstructures. Tableau 18 donne la déformation maximale atteinte autour des bulles :

	Fuel 1	Fuel 2	Fuel 3	Fuel 4
Déformation principale maximale $\varepsilon_{p1,m}$	$5,1 \cdot 10^{-5}$	$8,9 \cdot 10^{-5}$	$4,3 \cdot 10^{-4}$	$1,6 \cdot 10^{-3}$

Tableau 18 : Déformation principale maximale atteinte autour des bulles pour les quatre microstructures.

Pour les Fuel 1 et 2, avec de grosses bulles proches de l'équilibre (équation (3)), les niveaux de déformation sont très faibles ($<10^{-4}$). Dans le cas des bulles nanométriques, ces dernières possèdent des déformations élevées ($>10^{-4}$), de par les niveaux de pression de l'ordre du gigapascal. Dans le cas du Fuel 4, les contraintes induites par la pression des gaz entraînent une plastification autour de la bulle.

Il est intéressant de vérifier si les déformations maximales sont modifiées lorsque les bulles sont isolées ou si des interactions entre bulles existent. Quand deux bulles sont assez proches, leur interaction modifie les déformations environnantes. La Figure 69 montre la déformation principale, ε_{p1} , au voisinage de deux bulles proches.

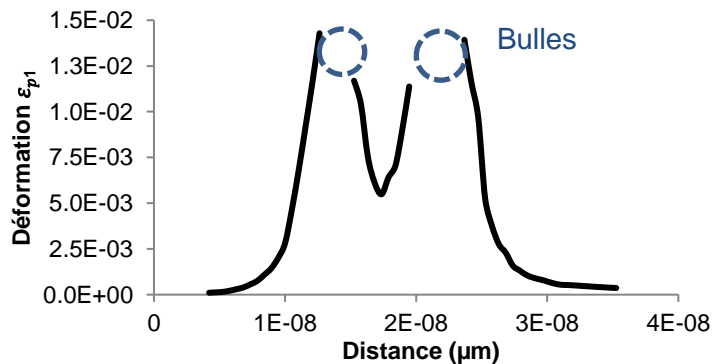


Figure 69: Evolution de la déformation principale ε_{p1} et interaction entre deux bulles proches -

Fuel 4

Suivant la fraction volumique, les effets d'interaction pourraient avoir un impact sur le niveau de déformation moyen. Cependant, sur les quatre microstructures étudiées, cette interaction n'a pas un effet considérable. L'élévation maximale de la déformation est en relatif de l'ordre de 4 %. Il est probable que dans le combustible réel, cette interaction ne soit effectivement pas significative. En effet, le mécanisme de formation de bulles conduit probablement à une distance minimale critique empêchant la présence de bulles très proches.

2.2.2. Evolution de la déformation avec la profondeur de la bulle par rapport à la surface d'un échantillon poli.

Dans cette étude, une seule bulle est considérée. La profondeur de la bulle a été modifiée, pour les Fuel 2 à 4, afin d'évaluer l'évolution de la déformation principale maximale avec la distance à la surface libre, z , du VER. Cette configuration est étudiée dans le cadre de l'utilisation de l'EBS sur le combustible irradié, dans le but de mesurer la déformation induite par la présence de bulles pressurisées sous la surface. La bulle est placée à différentes profondeurs, avec les caractéristiques données dans le Tableau 17 et le modèle élasto-viscoplastique décrit précédemment. La Figure 70 donne l'évolution de la déformation principale à la surface de la bulle et à la surface z pour trois microstructures (Fuel 2, 3 et 4).

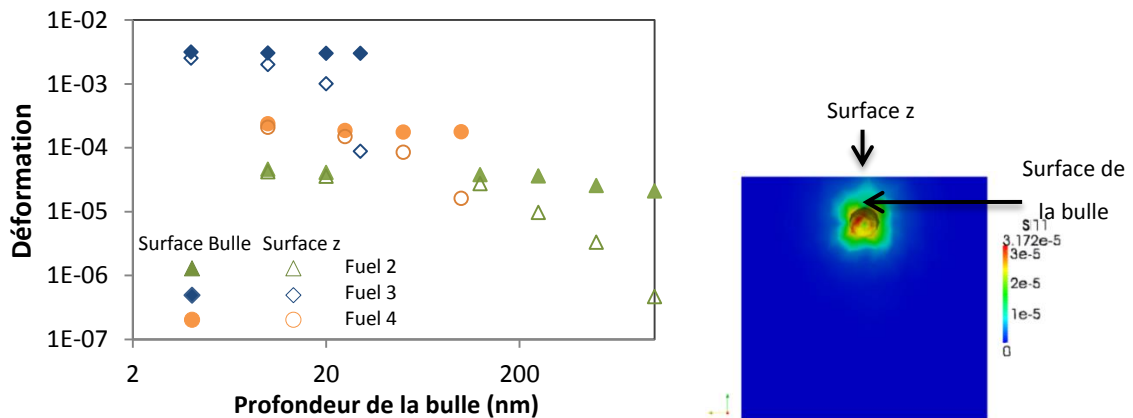


Figure 70 : Evolution de la déformation principale maximale autour des bulles et à la surface z pour les microstructures Fuel 2, 3 et 4 et une image d'une bulle isolée proche de la surface z .

La déformation principale maximale à la surface de la bulle est légèrement plus élevée lorsque la bulle est proche de la surface libre du cube. La déformation à la surface z augmente, quant à elle, rapidement et atteint une valeur proche de celle de la surface de la bulle lorsque celle-ci est à une profondeur inférieure à la valeur de son rayon.

Une simulation Monte-Carlo du volume sondé EBSD sur UO_2 , pour une tension d'accélération de 20 kV et un échantillon incliné à 70° , a permis d'estimer une résolution en profondeur d'environ 20 à 30 nm (Casino [77]). **Ainsi pour mesurer les niveaux de déformations atteints à la surface de la bulle par EBSD, la bulle doit être très proche de la surface z , soit à une distance inférieure à 30 nm. Dans le cas de bulles dont le rayon est inférieur à 30 nm, cette distance doit être**

encore plus faible. D'autre part, la mesure des déformations est moyennée dans le volume d'interaction de la sonde EBSD.

2.2.3. Evolution de la déformation autour des bulles

Nous considérons les microstructures décrites précédemment dans le Tableau 17. A 300 K, nous évaluons maintenant la déformation moyenne, ε_m , autour de chaque bulle. La déformation moyenne est obtenue par l'intégration sur une surface S, de la déformation principale, ε_{p1} , (équation (28)).

$$\varepsilon_m = \int_S \varepsilon_{p1} dS \quad (28)$$

avec S, la surface définie par une enveloppe sphérique de rayon $(r + p)$, r le rayon de la bulle et p la distance à la surface de la bulle.

La Figure 71 donne l'évolution de la déformation principale moyenne en fonction de la distance à la surface des bulles pour les quatre microstructures.

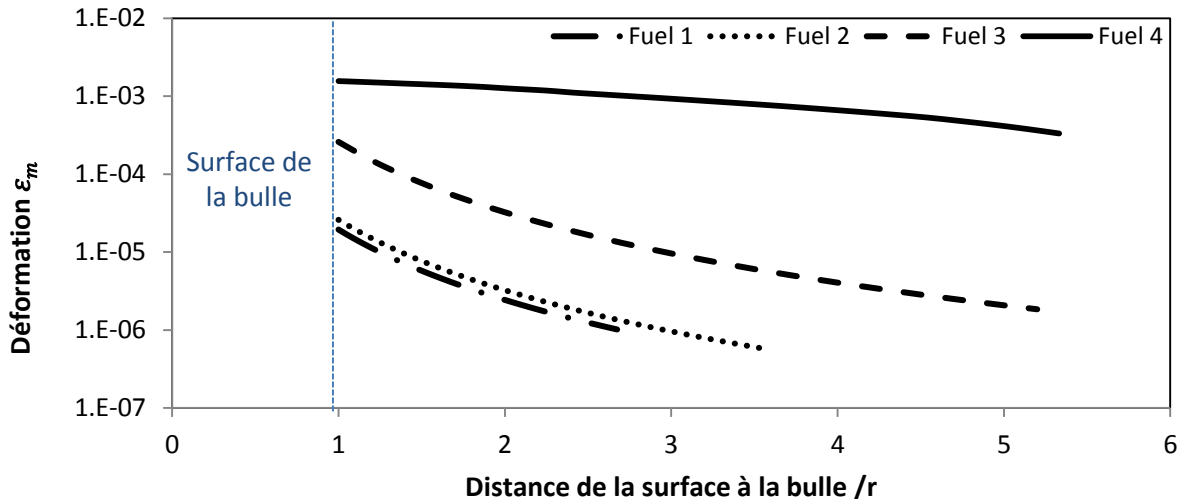


Figure 71 : Evolution de la déformation principale moyenne de la surface des bulles pour les quatre microstructures caractéristiques du combustible irradié (r : rayon de la bulle).

Pour les microstructures avec des bulles nanométriques et des pressions élevées (Fuel 3 et 4), la déformation, proche de la bulle, est supérieure à 10^{-4} . Toutefois, ce niveau de déformation élevé diminue rapidement. En effet, pour le Fuel 4, la déformation atteint 10^{-4} à environ 12 nm de la surface de la bulle et pour le Fuel 3, à environ 35 nm. Dans le cas des Fuel 1 et 2, correspondant à des bulles micrométriques avec une pression faible, inférieure à 50 MPa, la déformation reste inférieure à 10^{-4} même à la surface de la bulle.

2.3. Comparaison avec un modèle analytique

Le modèle analytique (paragraphe 2.1.1.) est appliqué aux bulles caractéristiques (diamètre et pression) du Tableau 17.

La Figure 72 présente l'évolution de la déformation élastique à partir de la surface d'une bulle pour les deux modèles (modèles par éléments finis et analytique) dans le cas d'une bulle de la zone centrale (Fuel 2). Les déformations principales, ε_{p1} , maximales et minimales calculées par le modèle d'éléments finis ont été ajoutées (équation (28)).

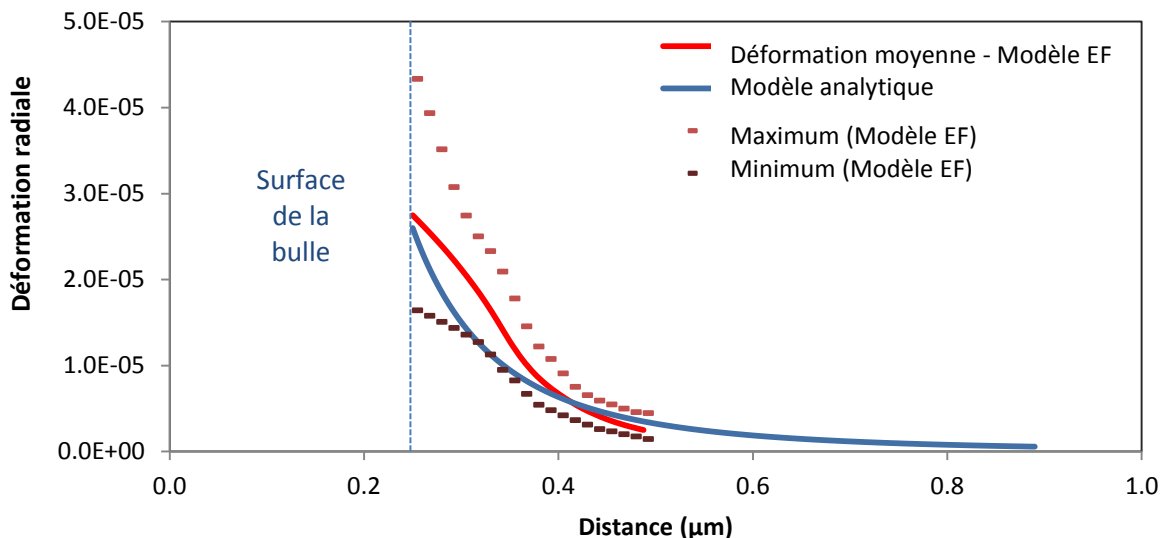


Figure 72 : Déformation en fonction de la distance à la bulle calculée à partir du modèle EF et analytique. Cas de la zone du centre (Fuel 2).

Une bonne correspondance est observée entre le modèle analytique et les valeurs moyennes du modèle par éléments finis. La même observation est faite sur les autres microstructures. Le calcul par éléments finis prend en compte les phénomènes d'interaction entre les bulles proches et considère un matériau anisotrope, d'où des valeurs minimales et maximales qui peuvent être notablement différentes du modèle analytique proche de la surface des bulles.

2.4. Conclusion

Ce chapitre propose un modèle par éléments finis qui évalue la déformation induite par la pressurisation des bulles de gaz de fission. Ces simulations sont utiles afin de comparer les déformations calculées aux limites de détection de la déformation des techniques expérimentales et ainsi déterminer les zones du combustible adaptées aux techniques (Tableau 19).

	Macro DRX	Micro DRX	EBSD
Radiation	Rayon X	Synchrotron/ X ray	MEB / Electrons
Limite de détection de la déformation élastique	5.10^{-4}	10^{-4}	2.10^{-4}
Résolutoin spatiale	~mm	~µm	~50 nm
Résolution en profondeur	µm-mm	~µm	~20 nm

Tableau 19 : Caractéristiques du faisceau de rayons X en DRX et d'électrons en EBSD.