NNT/NL : 2023AIXM0048/005ED353

THÈSE DE DOCTORAT

Soutenue à Aix-Marseille Université
16 février 2023

Hakima BOUIZEM

Construction d'un modèle de Mécanique des Champs de Dislocations appliqué au comportement viscoplastique des polycristaux de dioxyde d'uranium

Discipline
Sciences pour l'Ingénieur

Spécialité
Mécanique des solides

École doctorale
ED 353 SCIENCES POUR L'INGENIEUR :
MECANIQUE, PHYSIQUE, MICRO ET NANOELECTRONIQUE

Laboratoire/Partenaires de recherche
Laboratoire de Mécanique et d'Acoustique (LMA), Marseille
Département d'étude des combustibles, CEA CADARACHE

Composition du jury

Marc Fivel SIMAP Grenoble INP	Rapporteur
Samuel Forest Mines Paris CNRS	Rapporteur
Salima Bouvier UTC Compiegne	Présidente
Nabila Maloufi LEM3 Metz	Examinatrice
Étienne Castelier DEC CEA Cadarache	Examinateur
Vincent Taupin LEM3 Metz	Examinateur
Jean-Marie Gatt DEC CEA Cadarache	Directeur de thèse
Frédéric Lebon LMA Université d'Aix Marseille	Co-Directeur de thèse

Affidavit

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

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

Fait à Cadarache le 07 décembre 2022

BOUIZEM Hakima



Remerciements

Avant que la science ne reprenne les rênes, je voudrais, à travers les présents remerciements, rendre hommage à de nombreuses personnes, avec qui j'ai écrit l'histoire de ces trois années de thèse.

Je tiens d'abord à exprimer ma profonde gratitude à Samuel Forest et Marc Fivel pour m'avoir fait l'honneur de rapporter ce travail de thèse. Leurs remarques et leurs questions furent précieuses et pertinentes. J'adresse mes remerciements à Salima Bouvier et Nabila Maloufi, pour avoir accepté de participer à mon jury de thèse. Merci de votre temps et de l'intérêt que vous avez bien voulu porter à mon travail.

Mes sincères remerciements vont à Vincent Taupin, d'avoir accepté d'examiner mon travail de thèse. Je te remercie également pour ton implication dans mon travail depuis notre premier contact, merci de m'avoir reçue au LEM3 et pour nos nombreuses discussions enrichissantes. Merci de m'avoir initiée à la théorie de la Mécanique des Champs de Dislocations, qui est devenue par la suite le cœur de mon travail. Ton apparition dans ma thèse a été un point clé dans le cheminement de ces trois années.

Étienne Castelier a repris le suivi quotidien de mon travail en cours de route et l'a marqué de sa rigueur. C'est à cette occasion que je tiens à lui exprimer ma profonde et vive reconnaissance. Je te remercie pour tout ce que tu m'as appris, pour tes contributions, pour le goût mathématique que tu as donné à ma thèse, sans toi, je n'aurais jamais pu boucler ce travail à temps. Merci de m'avoir fait profiter de ta dureté dans le travail, qui m'a valu l'honneur d'avoir un avis exceptionnel sur la thèse. Travailler avec toi, est comme les sentiers que tu choisis sur la Sainte Victoire, toujours ardus mais qui débouchent sur de magnifiques panoramas. Merci encore et toujours.

Je tiens à exprimer mes vifs remerciements à mon directeur de thèse Jean Marie Gatt, et à mon co-directeur Frédéric Lebon, pour m'avoir confiée ce travail de recherche. Ce fut un agréable plaisir de travailler sous votre direction. Je vous remercie de la confiance que vous m'avez accordée. Merci également pour votre disponibilité et vos précieux conseils.

J'adresse mes remerciements à Thomas Helfer, pour l'aide qu'il m'a apportée au cours de ces années, en particulier par rapport à son logiciel MFront. Je te remercie pour le temps que tu nous as consacré, tes explications et encore plus pour les outils que tu as mis en place spécialement pour ma thèse.

Je remercie Bruno Michel pour les échanges que nous avons eus, pour ses précieux conseils et pour m'avoir envoyée sur de nombreuses références ciblées et intéressantes.

Mes remerciements vont également à mes chefs de laboratoire Gérald Jomard, qui a dirigé le laboratoire pendant ma première année de thèse, et Emeric Bourasseau, pendant mes deux dernières années de thèse. Je tiens à vous remercier pour votre efficacité, votre bienveillance et votre écoute ainsi que pour votre suivi de l'avancement de mes travaux de thèse.

Je voudrais remercier Régine Bousquet pour avoir résolu mes problèmes administratifs avec le sourire et une grande efficacité. Merci également pour nos sympathiques discussions.

J'aimerais remercier Isabelle Ramière pour son attention particulière, pour ses conseils judicieux et pour nos efficaces discussions qui ont toujours rendu le trajet en bus agréable.

Un grand merci à tous les collègues du SESC, permanents, doctorants et stagiaires, que j'ai eu le plaisir de côtoyer durant ces trois années, pour l'ambiance sereine et studieuse.

Une mention spéciale à mes amies, doctorantes et docteures, Amani Ksibi, Xiaoshu Ma et Héla Mensi, qui ont contribué à rendre cette période de thèse très agréable. Merci pour tous les moments chaleureux que nous avons partagés.

À mes amis Gui(Gui)lherme Henrique Dlavedolo (ou tout simplement Dalevedo) Viana et Plamen(To) Bonev, avec qui nous avons partagé de nombreux moments précieux et inoubliables, je tiens à exprimer ma profonde et sincère gratitude. Merci pour votre compagnie, votre soutien, nos rires, nos blagues, ...

Merci pour tout. Je suis reconnaissante au destin qui a fait croiser nos chemins.

À mes Soulsisters, Daria Koliesnikova et Camila Mota, j'adresse mes profonds remerciements. Je me considère très fortunée de vous avoir dans ma vie. Merci pour nos voyages, vos encouragements, nos sorties, vos conseils, ... Votre présence dans ma vie m'est très précieuse.

Mille mercis à mes amis ÉMIstes, Mouhcine EL Idrissi, Elmehdi Ait ali, Achraf Aqboub, Sarra Chourak et Houda Bajja, qui malgré la distance, vous avez été pour moi une véritable source d'encouragement et de motivation durant ces trois années de thèse. Merci pour votre amitié.

Un très grand MERCI à toute ma famille qui m'a gratifiée de son amour et m'a fourni les motivations qui ont permis l'aboutissement de mes objectifs. Je leur adresse toute ma gratitude du fond du cœur.

Je ne saurais terminer cette liste sans remercier spécialement Elon Mask, pour avoir conçu une voiture qui fait rêver, surtout si elle est rouge.

Je dédie ce travail,
à tous ceux qui ont fait partie de cette aventure,
de près ou de loin,
dans le temps comme dans l'espace.

Résumé

Le dioxyde d'uranium (UO_2) polycristallin, formé en pastilles, est utilisé comme combustible nucléaire dans les Réacteurs à Eau Pressurisée (REP). À haute température, son comportement viscoplastique est régi par le mouvement des dislocations. Pour modéliser ce comportement à l'échelle de quelques grains, les modèles de plasticité cristalline supposent que les dislocations sont distribuées de manière équilibrée dans le matériau. Ces populations de dislocations, distribuées de manière équilibrée, sont appelées SSDs (Statistically Stored Dislocations).

Des observations sur des pastilles déformées montrent que lors de la déformation, les dislocations peuvent s'agglomérer sous forme de murs, divisant parfois le grain en sous-grains. Ces dislocations, responsables de la déformation du réseau, sont des dislocations en excès, qui ne sont plus distribuées de manière équilibrée. Elles sont dites Géométriquement Nécessaires (Geometrically Necessary Dislocations ou GNDs). Les modèles standard de plasticité cristalline ne les prennent pas en compte. Pour les modéliser, il faut recourir à la Mécanique des Champs de Dislocations (Field Dislocation Mechanics ou FDM), qui ajoute des équations de transport pour assurer la circulation de ces dislocations à l'échelle des grains.

À cette fin, nous avons construit un modèle de Mécanique des Champs de Dislocations (FDM) par homogénéisation. Dans un premier temps, chaque dislocation est décrite à l'échelle microscopique par son tenseur de Nye, associé à un champ de déformation plastique. Les équations fondamentales concernant le mouvement des dislocations et la plasticité associée sont développées. Les équations microscopiques sont ensuite homogénéisées à grande échelle. Ainsi, cette homogénéisation fait apparaître les densités de SSDs et de GNDs, ainsi que les lois classiques de la plasticité cristalline (loi d'Orowan, etc.), adaptées aux deux populations. Elle fournit également des équations bilan décrivant comment les SSDs sont transformées en GNDs par le mouvement de dislocations, et vice versa.

Le modèle construit a été appliqué pour modéliser la compression d'agrégats polycristallins d'UO_2. La résolution mécanique et le transport des GNDs sont résolus par Transformée de Fourier Rapide (FFT). Les résultats montrent l'accumulation des GNDs sur les joints de grains, leur glissement dans les grains et la formation de sous-grains, ce qui reproduit qualitativement les observations expérimentales. Le modèle prédit bien le comportement moyen des polycristaux, ainsi que l'influence des conditions expérimentales : vitesse de déformation et température.

Abstract

Polycrystalline uranium dioxide (UO_2), formed into pellets, is used as nuclear fuel in Pressurized Water Reactors (PWRs). At high-temperature, its viscoplastic behaviour is governed by the dislocation flow. Traditionally, the Dislocations that generate viscoplastic deformations are referred to as Statistically Stored Dislocations (SSDs).

On the other hand, experimental observations performed on deformed pellets show a development of sub-grains. The formed sub-grains are induced by lattice rotation, and are associated to the presence of Geometrically Necessary Dislocations (GNDs). Thus, to model a viscoplastic behavior of UO_2 polycrystals, we introduce a Field Dislocation Mechanics (FDM) theory, which allows us to characterize the plastic flow of both populations of dislocations : SSDs and GNDs.

For this purpose, we have built a model of FDM. First, we describe the dislocations at the microscopic scale. Each dislocation is described by the Nye tensor, associated with the plastic deformation. Fundamental equations of plasticity, through dislocation motion, are developed. At this scale, a new formulation of the dislocation transport equation has been developed. Then, the microscopic equations are homogenized on a large scale. By this homogenization, the densities of SSDs and GNDs are outlined, and the classical laws of crystal plasticity (Orowan's law, etc.), adapted for both populations, are obtained, allowing us to construct a model of FDM. In this work we develop balance equations that describe how SSDs are transformed into GNDs, and vice versa, according to dislocations movement.

The built model has been applied to simulate the compression of polycrystalline aggregates of UO_2. Mechanical equilibrium and the transport of the GNDs are solved using Fast Fourier Transform (FFT) method. Our results show the accumulation of GNDs on the grain boundaries, their migration within grains, and the formation of sub-grains, which qualitatively reproduces the experimental observations. The proposed model predicts good average behaviour of polycrystals, as well as takes into account influence of experimental conditions : strain rate and temperature.

Table des matières

Introduction **6**

1 Contexte et motivations **8**

1.1 Contexte industriel 8

1.1.1 Réacteur à Eau Pressurisée (REP) 8

1.1.2 Fonctionnement nominal d'un REP 10

1.1.3 Le combustible en situation incidentelle et accidentelle 13

1.1.4 Simulation du comportement du combustible UO_2 14

1.2 Élasto-viscoplasticité du combustible 14

1.2.1 Propriétés élastiques de l'UO_2 14

1.2.2 Mécanismes de viscoplasticité dans l'UO_2 18

1.2.3 Coefficients d'autodiffusion de l'uranium 20

1.2.4 Modèles viscoplastiques dans PLEIADES 22

1.2.5 Évolution de la microstructure de l'UO_2 23

1.3 Contributions de la thèse 26

2 Construction d'un modèle de plasticité cristalline basé sur la théorie FDM **28**

2.1 Généralités 28

2.1.1 Historique 28

2.1.2 Description d'une boucle de dislocation 30

2.1.3 Champs élastiques des dislocations 32

2.1.4 Création de plasticité 35

2.2 Propriétés élémentaires d'une ligne de dislocation 36

2.2.1 La boucle de dislocation 36

2.2.2 Le tenseur de Nye 39

2.2.3 Distorsion plastique associée à la dislocation 41

2.2.4 Équilibre mécanique 42

2.2.5 Déplacement d'une boucle de dislocation 44

2.2.6 Évolution du tenseur de Nye . . . 46
2.3 Glissement sur les systèmes cristallographiques . . . 47
2.3.1 Systèmes de glissement . . . 47
2.3.2 La boucle de dislocation dans son système . . . 50
2.4 Montée des dislocations . . . 52
2.4.1 Force osmotique . . . 52
2.4.2 Référence de la pression osmotique . . . 53
2.4.3 Diffusion des lacunes . . . 55
2.4.4 Forces de frottement . . . 58
2.5 Changement d'échelle . . . 59
2.5.1 Homogénéisation sur un système de glissement . . . 59
2.5.2 Dislocations géométriquement nécessaires et statistiquement distribuées . . . 60
2.5.3 Vitesses moyennes . . . 61
2.5.4 Propriétés mathématiques des vitesses moyennes . . . 62
2.5.5 Montée des dislocations . . . 63
2.5.6 Vitesses de montée . . . 64
2.5.7 Transport des dislocations . . . 66
2.5.8 Contribution de tous les systèmes . . . 69
2.6 Modèles pour un calcul polycristallin . . . 71
2.6.1 Plasticité cristalline . . . 71
2.6.2 Mécanique des Champs de Dislocations . . . 73
2.6.3 Nouvelle proposition . . . 74

3 Étude du comportement viscoplastique du monocristal d'UO_2 77

3.1 Vitesse de glissement des dislocations dans l'UO_2 . . . 77
3.1.1 Mécanismes thermiquement activés . . . 78
3.1.2 Activation thermique . . . 79
3.1.3 Approche semi-empirique . . . 80
3.1.4 Prise en compte de l'écrouissage isotrope dans l'UO_2 monocristallin . . . 81
3.1.5 Évolution des densités de dislocations . . . 83
3.2 Compression uniaxiale sur monocristaux . . . 84
3.2.1 Orientation des cristaux . . . 85
3.2.2 Compression uniaxiale sur un monocristal . . . 86
3.2.3 Plasticité de la courbe . . . 87
3.2.4 Interprétation d'un essai . . . 89
3.3 Les données disponibles . . . 90

3.3.1 Bilan des essais sur monocristaux d'UO_2 . . . 90
3.3.2 Contrôle de la stoechiométrie des échantillons . . . 92
3.3.3 Données retenues . . . 93
3.4 Ajustement sur matériau déjà écroui . . . 94
3.4.1 Choix de la forme de vitesse pour l'UO_2 . . . 94
3.4.2 Méthode d'ajustement . . . 95
3.4.3 Systèmes de glissement activés . . . 98
3.4.4 Résultats d'ajustement et analyse . . . 99
3.4.5 Cristal plus écroui . . . 101
3.4.6 Contribution de la troisième famille . . . 104
3.5 Prise en compte de l'écrouissage . . . 106
3.5.1 Données expérimentales exploitées . . . 106
3.5.2 Modèles de plasticité de l'UO_2 avec écrouissage isotrope . . . 107
3.5.3 Ajustement . . . 110

4 Application au comportement viscoplastique du polycristal d'UO_2 113
4.1 Schéma et méthodes de résolution . . . 113
4.2 Résolution par méthode FFT . . . 114
4.2.1 Transformée de Fourier Discrètes (DFT) . . . 115
4.2.2 Modification du code de structure TMFFT . . . 116
4.2.3 Accélération et filtres spectraux . . . 118
4.3 Intégration des lois de comportement sur MFront . . . 119
4.4 Génération de microstructures . . . 120
4.5 Récapitulatif des modèles appliqués . . . 123
4.6 Représentativité des simulations . . . 124
4.6.1 Représentativité du VER . . . 124
4.6.2 Discrétisation et filtres spectraux . . . 126
4.7 Résultats des simulations et discussions . . . 129
4.7.1 Durcissement par écrouissage de l'UO_2 polycristallin . . . 129
4.7.2 Durcissement par joints de grains de l'UO_2 polycristallin . . . 130
4.7.3 Effet de la température et de la vitesse de déformation . . . 132
4.7.4 Distribution des champs locaux . . . 132
4.8 Comparaison avec l'expérience . . . 135
4.8.1 Données expérimentales et simulations . . . 136
4.8.2 Nye et courbure du réseau cristallin . . . 139
4.8.3 Subdivision des grains . . . 140

4.9 Bilan du chapitre 144

Conclusion **145**

A Définitions mathématiques et démonstrations **148**

A.1 Définitions et formules utiles de l'analyse vectorielle 148

A.1.1 Produits tensoriel et vectoriel 148

A.1.2 Opérateurs différentiels 149

A.1.3 Formules 150

A.2 Propriétés élémentaires d'une boucle de dislocation 151

A.2.1 Dislocations de surface 151

A.2.2 Distributions sur une courbe 153

A.2.3 Dérivées 154

A.2.4 Champs mécaniques sur la surface de discontinuité 155

A.2.5 Équation de Kröner 157

A.2.6 Démonstration de Kosevitch 160

A.2.7 Dérivée plastique 163

A.2.8 Moyenne mobile et convolution 164

A.3 Projection du tenseur de Nye 165

A.3.1 Projection régularisée 165

A.3.2 Application à la projection 166

B Éléments de cristallographie **171**

B.1 Changement de repère 171

B.2 Angles d'Euler 172

B.3 Projection stéréographique 173

B.4 Module de Young à l'échelle du grain 176

B.5 Orientations monocristallines de Sawbridge et Skyes 177

C Matrice d'interaction entre les systèmes de glissement **178**

D Intégration sur MFront : schéma implicite de Newton Raphson **180**

D.1 Sans Nye avec écrouissage immédiat (SNSE) 180

D.1.1 Équations du modèle 180

D.1.2 Discrétisation 180

D.2 Avec Nye avec écrouissage immédiat (ANSE) 181

D.2.1 Équation du modèle 181

D.2.2 Discrétisation 181

D.3 Sans Nye + Écrouissage (SNAE) 182
D.3.1 Équations du modèle 182
D.3.2 Discrétisation 182
D.4 Nye + Écrouissage (ANAE) 184
D.4.1 Modèle 184
D.4.2 Discrétisation 184

Introduction

Le dioxyde d'uranium (UO_2) est utilisé comme combustible nucléaire, sous forme de pastilles, dans les Réacteurs nucléaires à Eau Pressurisée (REP). Lors du fonctionnement incidentel, le combustible subit une forte élévation de température, d'environ 1900°C au centre des pastilles, engendrant des déformations viscoplastiques contrôlées par des mouvements de dislocations.

Des examens à l'échelle microscopique [13], sur des pastilles déformées, ont mis en évidence la formation de sous-grains, caractérisés par une faible rotation du réseau cristallin. Cette désorientation du réseau est attribuée aux Dislocations Géométriquement Nécessaires (en anglais : Geometrically Necessary Dislocations ou GNDs) [106, 72], qui sont des dislocations en excès dans le matériau, et qui se manifestent par une distorsion du réseau cristallin à l'échelle du polycristal.

D'autres dislocations existent : les Dislocations Statistiquement Stockées (en anglais : Statistically Stored Dislocations ou SSDs), qui ne participent pas à la courbure du réseau cristallin, mais contribuent cependant à l'écoulement plastique. Le présent travail traite de la modélisation du comportement viscoplastique du polycristal d'UO_2, en modélisant l'écoulement plastique des deux populations de dislocations : les SSDs et les GNDs.

La plasticité cristalline classique tient compte des seules SSDs pour déformer le matériau. Les premiers modèles développés, dans la plateforme de simulation de combustible PLEIADES [110, 139, 117], ont adopté cette approche classique pour étudier le comportement viscoplastique de l'UO_2. Ces modèles ne peuvent pas modéliser l'écoulement des GNDs à l'échelle des grains d'un polycristal.

Pour en tenir compte, la Mécanique des Champs de Dislocations (en anglais : Field Dislocation Mechanics ou FDM) [1, 2, 144], décrit les GNDs par l'intermédiaire du tenseur de Nye [106] : l'incompatibilité de déformation entre cristaux voisins d'orientations différentes produit des GNDs par l'équation d'incompatibilité de Kröner [69]. La FDM permet de calculer les contraintes internes associées à la présence des GNDs, ainsi que l'évolution de ces dernières avec une équation de transport des densités de dislocations.

Plusieurs modèles de FDM ont été proposés pour définir l'écoulement des GNDs. Les premiers s'appuyaient sur une hypothèse constitutive [39] pour attribuer une vitesse moyenne aux GNDs [4]. Cette hypothèse induit une différence d'écoulement des populations de SSDs et de GNDs, alors que ces dislocations sont physiquement les mêmes. Pourtant, une telle formulation est toujours largement appliquée en FDM [141, 45]. Elle permet d'étudier de nombreux phénomènes : incompatibilité du réseau cristallin, effets de taille de grains, etc.

L'objectif de cette thèse est de construire un modèle de Mécanique des Champs de Dislocations pour modéliser le comportement thermo-viscoplastique de polycristaux d'UO_2 dans le régime incidentel des REP, en tenant compte de l'écoulement des GNDs. Ce modèle devra permettre aux SSDs et aux GNDs de s'écouler de manière identique, et devra donc remettre en cause l'hypothèse constitutive de la FDM. Pour éviter l'utilisation de ce type d'hypothèse, les équations fondamentales des dislocations, valables à l'échelle microscopique, seront homogénéisées pour retrouver les équations de FDM :

- Les propriétés physiques d'une dislocation peuvent se résumer au tenseur de Nye. Pour appliquer ce

tenseur à une distribution unique, il faut utiliser la formulation de Kosevitch [76], qui repose sur la théorie des distributions. Les équations fondamentales montrent comment une dislocation déforme le réseau cristallin, quelles forces elle subit dans un champ de contraintes, comment elle crée de la plasticité en se déplaçant. Ces équations sont homogénéisées à l'échelle macroscopique.

- À l'échelle microscopique, toutes les dislocations sont identiques. Lorsque les densités de SSDs et de GNDs apparaissent par homogénéisation, elles sont donc traitées de manière identique pour leur écoulement.
- L'homogénéisation fait apparaître les trois types de déplacement des dislocations : le glissement, le glissement dévié ou la montée. La montée des dislocations est un phénomène contrôlé par la diffusion des lacunes, qui s'active dans l'UO_2 à haute température. Sa vitesse peut se calculer en considérant les équations de diffusion.
- La vitesse de glissement doit être identifiée sur des essais mécaniques disponibles dans la littérature.

Le modèle construit est appliqué pour simuler des essais de compression uniaxiale sur des agrégats polycristallins d'UO_2. Les résultats sont comparés à l'expérience. La loi de plasticité cristalline est implémentée en utilisant le logiciel MFront, tandis que l'évolution des GNDs et l'équilibre mécanique sont résolus avec le logiciel TMFFT par Transformées de Fourier Rapide (Fast Fourier Transform ou FFT).

Chapitre 1

Contexte et motivations

L'objectif de ce chapitre est de présenter le contexte nucléaire de la thèse et de dresser un état de l'art sur le comportement mécanique du combustible UO_2.

1.1 Contexte industriel

Dans cette partie sont exposés les éléments nécessaires à la compréhension de la problématique industrielle traitée.

1.1.1 Réacteur à Eau Pressurisée (REP)

D'après le bilan électrique français 2021, 69% de la production totale d'électricité provient de l'énergie nucléaire. Le parc nucléaire français est composé de 56 Réacteurs à Eau Pressurisée (REP) répartis dans 18 centrales. En France, le combustible des réacteurs EDF est une céramique qui peut être du dioxyde d'uranium (UO_2) enrichi en noyaux fissiles (uranium 235) ou un mélange d'oxyde d'uranium et d'oxyde de plutonium appelé MOX (Mixed Oxide). Dans la présente étude, on s'intéresse uniquement au combustible UO_2. La figure 1.1 montre le principe de fonctionnement d'un REP. Dans le cœur du réacteur, se produit

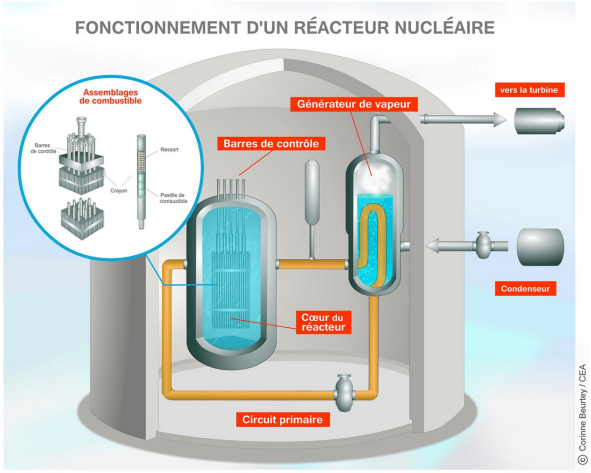


FIGURE 1.1 – Principe de fonctionnement d'un Réacteur à Eau Pressurisé (REP)

la fission d'atomes d'uranium 235 transformant un atome lourd en deux ou plusieurs atomes plus légers

et libérant ainsi une énergie importante ($\approx$ 200 MeV par atome fissionné) sous forme de chaleur. Celle-ci est utilisée pour produire de la vapeur qui entraîne une turbine, et son alternateur pour produire de l'électricité. Le dioxyde d'uranium est contenu, dans le cœur du réacteur, dans des crayons combustible.

Crayon combustible Le combustible UO_2 est introduit dans le coeur du réacteur sous forme d'assemblages. Ces dernières sont constitués d'un réseau carré de 17×17 crayons combustible. À l'intérieur de ces assemblages, circule l'eau sous pression qui évacue la chaleur dégagée par les réactions de fission qui se produisent à l'intérieur de chaque crayon. La figure 1.2 montre les dimensions ainsi que les composantes d'un crayon destiné au REP. Il est composé de pastilles combustible empilées dans une gaine (cylindre creux) en Zircaloy (alliage de zirconium). La gaine a un diamètre externe de $9,50$ mm, et un diamètre interne de $8,36$ mm permettant ainsi l'insertion des pastilles (avec un jeu pastille-gaine d'environ $0,16$ mm). De plus, le crayon combustible est composé de deux bouchons soudés, d'une chambre d'expansion (ou plénum) pour récupérer les gaz de fission libérés. Un ressort est installé en partie haute du crayon pour maintenir les pastilles lors du transport.

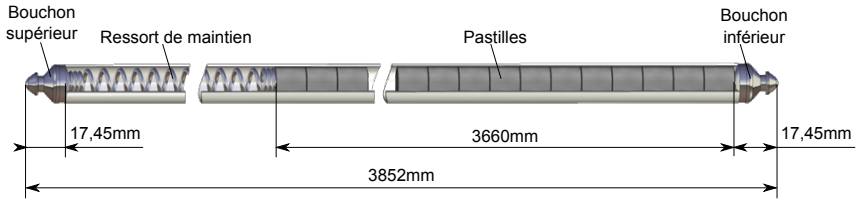


FIGURE 1.2 – Schéma d'un crayon combustible REP

Pastille combustible La figure 1.3 présente les caractéristiques géométriques d'une pastille combustible. Les pastilles sont usinées sous forme de cylindres de révolution d'une hauteur de $13,5$ mm et d'un diamètre de $8,2$ mm, elles pèsent approximativement 8 grammes. Les parties supérieure et inférieure des pastilles sont légèrement évidées pour compenser la dilatation thermique du combustible et permettre une rétention supplémentaire des produits de fission. Le chanfrein facilite l'introduction des pastilles dans la gaine.

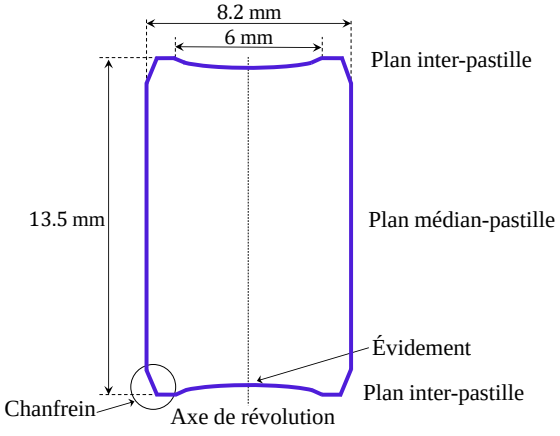


FIGURE 1.3 – Dimensions d'une pastille combustible d'un REP 900 MWe

Sûreté Pour assurer le fonctionnement des centrales nucléaires françaises dans des conditions optimales de sûreté, trois barrières de confinement des produits radioactifs contenus dans le combustible ont été définies. Les trois barrières sont contenues dans le bâtiment du réacteur, et sont les suivantes :

- la troisième est l'enceinte de confinement du réacteur, faite d'une paroi en béton armé épais. Elle est capable de résister à une certaine pression et à des agressions extérieures ;
- la deuxième est l'enveloppe métallique, en acier inoxydable très épais, qui entoure le circuit primaire. Elle maintient l'étanchéité de ce circuit qui refroidit les crayons combustible grâce à l'eau qui y circule en boucle fermée ;
- la première barrière est la gaine qui entoure les pastilles combustible et qui est destinée à retenir les produits radioactifs créés lors de la réaction de fission. La gaine est étanche et résiste à de fortes contraintes mécaniques et thermiques. Le maintien de son intégrité dans les situations de fonctionnement normale et incidentelle du réacteur est donc un enjeu essentiel vis-à-vis de la sureté nucléaire.

1.1.2 Fonctionnement nominal d'un REP

Les conditions de fonctionnement d'un réacteur se répartissent en 4 classes. Le fonctionnement en classe 1 correspond au régime nominal. Les phénomènes physiques intervenant dans le combustible nucléaire UO_2, lors de son irradiation dans un REP en régime nominal, sont décrits ci-après.

Gradient thermique Le fonctionnement nominal d'un REP est défini au niveau d'un crayon combustible, par une augmentation de la puissance lors du démarrage du réacteur et un maintien du crayon à des puissances linéiques moyennes comprises entre 150 et 250 $\mathrm{W.cm^{-1}}$. En conditions normales, la température du combustible varie de 400 °C environ en périphérie jusqu'à $1000 - 1200\,^{\circ}\mathrm{C}$ au centre de la pastille. En assimilant la pastille à un cylindre infini, et supposant une conductivité thermique uniforme qui n'évolue pas au cours de l'irradiation, le profil radial de la température peut être obtenu analytiquement :

$$T(r) = T_{coeur} - \frac{\mathcal{P}_{lin}}{4\,\pi\,k}\left(\frac{r}{R}\right)^2, \tag{1.1}$$

où :

- $\mathcal{P}_{lin}$ est la puissance linéique (puissance thermique dégagée par unité de longueur du crayon combustible) ;
- r est la distance à partir de l'axe de symétrie de la pastille et R est son rayon ;
- T_{coeur} est la température au centre (cœur) de la pastille et k est la conductivité thermique de la pastille (supposée constante, *i.e.* indépendante de la température et des effets de l'irradiation).

La figure 1.4 ci-dessous illustre l'évolution radiale de la température entre le combustible et l'eau caloporteur pour une puissance linéique de 200 $\mathrm{W.cm^{-1}}$, d'après Bailly et al. [10].

À cause de la faible conductivité du combustible, le gradient thermique dans la pastille est très fort. Ce gradient induit un gradient de dilatation thermique qui est la cause principale des fortes sollicitations induites dans le combustible. Pour illustrer ces sollicitations, nous allons exprimer l'état de contrainte dans la pastille en coordonnés cylindriques obtenu par analyse thermoélastique :

$$\sigma_r(r) = \frac{E\,\alpha\,\Delta T}{4\,(1-\nu)}\left[\left(\frac{r}{R}\right)^2 - 1\right] \tag{1.2a}$$

$$\sigma_\theta(r) = \frac{E\,\alpha\,\Delta T}{4\,(1-\nu)}\left[3\,\left(\frac{r}{R}\right)^2 - 1\right] \tag{1.2b}$$

$$\sigma_z(r) = \frac{E\,\alpha\,\Delta T}{4\,(1-\nu)}\left[4\,\left(\frac{r}{R}\right)^2 - 2\right] \tag{1.2c}$$

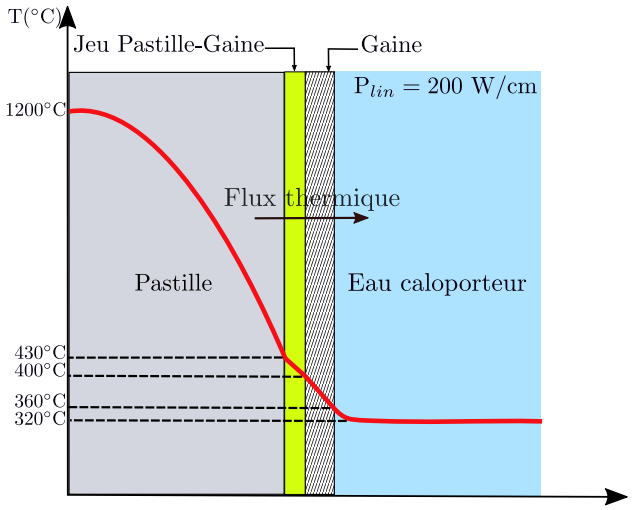


FIGURE 1.4 – Schéma du gradient thermique radial dans un crayon combustible dans les conditions normales de fonctionnement d'après Bailly et al. [10]

où ΔT est la différence de température entre le cœur de la pastille et sa périphérie, cette différence est de valeur $\Delta T = \dfrac{\mathcal{P}_{lin}}{4\,\pi\,k}$ d'après l'expression (1.1). $E = 1,5\,10^{11}\,\text{Pa}$, $\nu = 0,33$ et $\alpha = 10^{-5}\,\text{K}^{-1}$ sont respectivement le module de Young, le coefficient de Poisson et le coefficient de dilatation thermique.

Fissuration Les valeurs de contrainte prédites par l'analyse thermoélastique, avec les formules (1.2a), (1.2b) et (1.2c), ne sont jamais atteintes. En effet, le dioxyde d'uranium est une céramique, un matériau réfractaire qui reste fragile jusqu'à environ 900°C. Pour un écart de température entre le centre de la pastille et sa périphérie $\Delta T = 200$°C, établi pendant la montée en puissance du réacteur, la contrainte circonférentielle σ_θ prédite à la surface de la pastille est d'environ 290 MPa, nettement supérieure à la contrainte à rupture, qui est de l'ordre de 150 MPa, d'après Evans et Davidge [35]. Par conséquent, dès la première montée en puissance, la pastille est fragmentée selon un réseau de fissures axiales et radiales (cf. figure 1.5(a)), et les contraintes induites par le gradient thermique sont ainsi relaxées.

Fluage Les contraintes, initialement relaxées par la fissuration, sont ensuite relaxées par un autre phénomène : le fluage. Il existe deux types de fluage :

1. le fluage induit par irradiation (ou fluage athermique), qui représente le principal mécanisme de fluage en fonctionnement nominal d'un REP. Des travaux expérimentaux ont été effectués pour étudier la déformation par fluage d'irradiation du combustible, dont une synthèse est disponible dans Gatt [44]. La prise en compte du fluage d'irradiation est généralement proposée sous la forme suivante :

$$\dot{\underline{\varepsilon}}^{irr} = \frac{3}{2}\,A_{irr}\,\dot{\phi}\,\exp\left(\frac{-Q_{irr}}{RT}\right)\,\overline{s}$$

où :

- $\overline{s}$ est la contrainte déviatorique ;
- $\dot{\phi}$ est le taux de fission (en fissions . $\text{cm}^{-3}.s^{-1}$) ;
- T est la température et R est la constante des gaz parfaits ;
- et A_{irr} et Q_{irr} sont des paramètres du modèle.

2. Le fluage thermique, qui se produit principalement à haute température, dans le cas d'un fonctionnement incidentel ou accidentel du réacteur. Une synthèse des travaux effectués sur ce sujet est détaillée dans la section 1.2.4.

La thèse traite de la déformation du combustible par fluage thermique. Le fluage irradiation n'est pas pris en compte. À ce dernier s'ajoutent des déformations dues à d'autres phénomènes qui se produisent pendant l'irradiation.

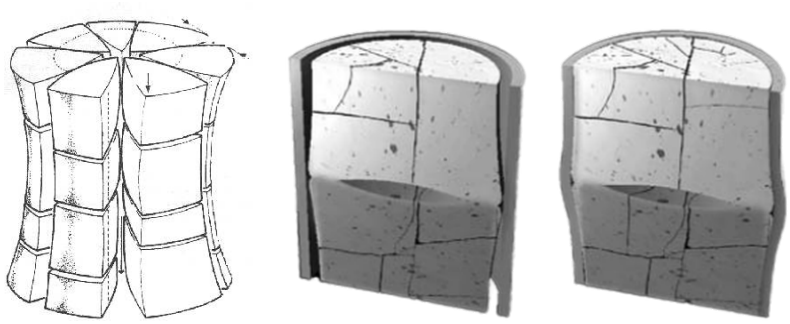
Autres phénomènes Voici brièvement des phénomènes qui se développent dans le combustible pendant son irradiation :

- 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. Il existe deux types de gonflement : le gonflement dû aux produits de fissions solides et le gonflement dû aux produits de fissions gazeux.

Interaction Pastille-Gaine À l'échelle du crayon combustible, les différents phénomènes présentés ci-dessus s'organisent selon le scénario suivant pour établir le contact entre la pastille et la gaine ; phénomène appelé Interaction Pastille-Gaine (abrégé en IPG) :

- Les fissures provoquées, en début d'irradiation, par le gradient de température conduisent à une fragmentation de la pastille (figure 1.5).
- Le gradient de température dans les fragments du combustible conduit à ce que la pastille prenne une forme particulière appelée diabolo. Cette forme, caractérisée par un plus grand diamètre en haut et en bas de la pastille (plan inter-pastille), et plus étroit au plan médian-pastille, est illustrée en figure 1.5(a).
- Au cours de la moitié du premier cycle de l'irradiation, le volume du combustible diminue par le phénomène de densification. Puis la dilatation thermique ainsi que les gonflements solide et gazeux augmentent le volume de la pastille. La gaine, en revanche subit une déformation inverse : la différence de pression entre le fluide caloporteur à l'extérieur et la pression interne, active le fluage de la gaine qui la rapproche du combustible. Ces deux phénomènes diminuent progressivement le jeu pastille-gaine.
- Le jeu continue à se réduire jusqu'à disparaître au niveau du plan inter-pastille à cause de la forme du diabolo (figure 1.5(b)). L'interaction mécanique entre la pastille et la gaine est très localisée, et génère des concentrations de contrainte. Les chanfreins dans la pastille permettent de diminuer ces concentrations pour éviter de trop solliciter la tenue mécanique de la gaine.
- Au bout de quelques cycles, le contact pastille-gaine, initialement localisé au niveau du plan-inter-pastilles, se propage à toute la pastille jusqu'à ce que la gaine vienne épouser la forme de la pastille (figure 1.5(c)).

Normalement, les réacteurs fonctionnent en régime nominal avec des transitoires d'exploitation, qui peuvent être lents avec de fortes amplitudes (jusqu'à 70% de la puissance nominale) ou rapides avec de faibles amplitudes ($\pm 5\%$ autour de la puissance moyenne), utilisés pour adapter la production électrique



(a) (b) (c)

FIGURE 1.5 – Phénoménologie de l'interaction pastille-gaine (IPG). (a) Mise en diabolo (b) Premier contact pastille-gaine (c) Contact complet pastille-gaine

à la consommation. La sûreté nucléaire définit par les régimes de fonctionnement de classe 2, classe 3 et classe 4 les accidents qui peuvent survenir lors du fonctionnement nominal des réacteurs. Ces accidents sont classés en fonction de leur fréquence et de leur gravité, et présentés ci-dessous.

1.1.3 Le combustible en situation incidentelle et accidentelle

Les phénomènes qui interviennent dans un fonctionnement de classe 2 (incidentel), et de classe 3 et 4 (accidentel) sont les suivants :

- Classe 2 : correspond aux transitoires de puissance incidentels, qui peuvent se produire lors du fonctionnement, avec une fréquence modérée, $10^{-2} \leq f \leq 1$ par réacteur par an. Dans ce cas, la température au cœur de la pastille s'accroît fortement (> 1500°C, voire > 2000°C, dans certains cas), ce qui favorise des déformations viscoplastiques thermiquement activées du combustible. Dans un transitoire incidentel, l'effet de mise en diabolo est fortement accentué et des produits de fissions volatils agressifs pour la gaine sont relâchés à travers les fissures dans la pastille. Toutes les conditions sont ainsi potentiellement réunies pour amorcer un phénomène de Corrosion Sous Contrainte (CSC) en peau interne de la gaine dans le plan interpastille, en regard d'une fissure radiale du combustible. Cette corrosion peut initier une fissure radiale de la gaine et ainsi conduire à sa rupture. Compte tenu du risque de rupture de la gaine lors des transitoires de puissance, l'interaction pastille-gaine (IPG) est donc un phénomène majeur dans l'approche de la sûreté des crayons combustible des REP ; l'intégrité de la gaine doit donc être garantie pour tous les transitoires.
- Classe 3 et 4 : correspondent aux accidents ayant une probabilité d'occurrence plus faible que pour la classe 2, mais d'une gravité considérable et peuvent endommager une ou plusieurs barrières de confinement de matières radioactives.

Nous nous intéressons dans cette thèse au comportement mécanique du combustible lors de transitoires de puissance de classe 2. Pour étudier les mécanismes de déformation des crayons combustible en fonctionnement incidentel et accidentel, deux approches complémentaires sont suivies :

- approche expérimentale en mettant en place des protocoles expérimentaux pour étudier le comportement des crayons combustible dans les réacteurs ;
- le développement de codes de simulation des crayons combustibles.

Ces deux approches sont présentées ci-après.

1.1.4 Simulation du comportement du combustible UO_2

Prévoir le maintien ou non de l'étanchéité de la gaine à l'issue d'un transitoire de puissance nécessite une modélisation précise du comportement thermo-mécanique de la pastille et de la gaine qui doit s'appuyer sur une solide base de données expérimentale.

Rampe de puissance Les bases de données existantes sont principalement centrées sur des combustibles testés selon un protocole de transitoire de classe 2, baptisé *rampe de puissance*. Ce transitoire est appliqué à un crayon expérimental court, refabriqué à partir d'un crayon père irradié en réacteur de puissance. Un essai de rampe de puissance consiste à appliquer un transitoire de puissance, à partir d'une puissance de départ proche de la puissance du régime nominal ($\sim$ 200 W.cm^{-1}), à une vitesse de montée en puissance constante (généralement 100 W. cm^{-1}. min^{-1}) jusqu'à atteindre une puissance linéique maximale de l'ordre de 400 W.cm^{-1}. Ce niveau élevé peut être maintenu jusqu'à la rupture du crayon expérimental.

Modélisation La modélisation permet d'interpréter les mesures expérimentales, de quantifier les phénomènes mis en évidence par la caractérisation expérimentale, de dimensionner les nouvelles expériences, de réaliser des études de sûreté. Les codes de simulation de crayon sont des outils de dimensionnement et d'optimisation, qui permettent de quantifier les différentes variables comme la température et les contraintes impliquées lors d'irradiation d'un crayon combustible. Le CEA développe depuis de nombreuses années avec ses partenaires industriels la plate-forme logicielle PLEIADES (Plate-forme Logicielle pour les Élements Irradiés dans les Assemblages en Démonstration, en Expérimentation ou en Service), pour la simulation du comportement des combustibles en service. Cette plateforme contient deux codes pour les REP :

- CYRANO3 : développé et utilisé par EDF, ce code est adapté à une utilisation industrielle, avec des temps de calcul raisonnables, grâce à une modélisation simplifiée du crayon combustible appelée modélisation 1D.
- ALCYONE : c'est le code de référence de la plateforme PLEIADES pour la simulation du crayon combustible dans les REP. Il permet des modélisations en différentes dimensions (1D, 2D et 3D), et avec plusieurs niveaux de complexité..

Objectif Dans le cadre de la modélisation et de la compréhension du comportement du combustible UO_2 en réacteur, l'objectif de ce travail de thèse est d'étudier le comportement viscoplastique des pastilles combustible aux températures atteintes lors de transitoires de classe 1 et 2. Les différents mécanismes qui régissent la déformation viscoplastique de l'UO_2 et les modèles proposés pour modéliser son comportement en réacteur sont présentés ci-dessous.

1.2 Élasto-viscoplasticité du combustible

Dans cette section, on présente l'état de l'art sur le comportement élasto-viscoplastique de l'UO_2 ainsi que l'évolution de la microstructure de l'UO_2 pendant les transitoires de puissance de classe 2.

1.2.1 Propriétés élastiques de l'UO_2

On décrit d'abord la structure cristalline de l'UO_2.

Structure cristalline Le dioxyde d'uranium est un solide cristallin de structure fluorine (CaF_2), et de groupe d'espace $Fm\bar{3}m$. Les ions d'uranium U^{4+} forment un réseau Cubique à Faces Centrées CFC dont les huit sites tétraédriques sont occupés par les ions d'oxygène O^{2-} (cf. figure 1.6). En fonction des conditions de température et de pression, la proportion d'oxygène peut varier, ce qui définit différentes compositions stœchiométriques du dioxyde d'uranium UO_{2+x} :

- la composition stoechiométrique correspond à $x = 0$;
- une composition sous-stoechiométrique correspond à $x < 0$;
- une composition hyper-stoechiométrique correspond à $x > 0$.

La stœchiométrie est un paramètre qui a une grande influence sur la réponse mécanique du dioxyde d'uranium, d'autant plus que son contrôle pendant les expériences est difficile (cf. chapitre 3). Pour un UO_2 stœchiométrique, non irradié et à température ambiante, le paramètre de maille vaut $a_0 = 5,47 \pm 0.001\,\mathring{A}$.

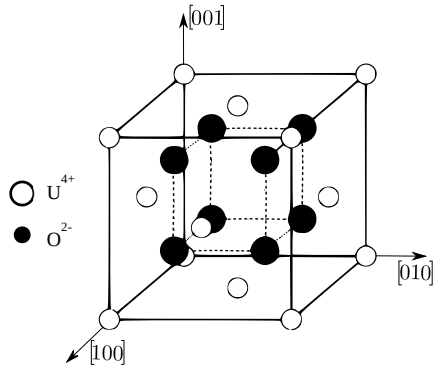


FIGURE 1.6 – Structure cristallographique de l'UO_2

L'anisotropie du comportement mécanique d'un matériau cristallin est directement corrélée à sa structure cristalline. De par sa texture, l'UO_2 est un matériau :

- orthotrope : il possède trois plans de symétrie orthogonaux entre eux : [100], [010] et [001] (cf. figure 1.6),
- à symétrie cubique : ses propriétés mécaniques sont invariantes par rotation de 90° autour de l'un quelconque des axes du repère d'orthotropie.

Déformation La déformation mécanique d'un matériau est caractérisée par le champ de déplacement $\boldsymbol{u}$. Dans l'hypothèse des petites déformations, le tenseur des déformations s'écrit :

$$\underline{\varepsilon} = \frac{1}{2}\left(\underline{\mathrm{grad}}(\boldsymbol{u}) + \underline{\mathrm{grad}}^T(\boldsymbol{u})\right).$$

Dans le document, les vecteurs sont notés en gras ($\boldsymbol{u}$), et les tenseurs d'ordre deux, en notation contravariante comme les déformations, sont soulignés d'une barre ($\underline{\varepsilon}$).

Élasticité En élasticité linéaire, les contraintes $\overline{\sigma}$ sont liées aux déformations $\underline{\varepsilon}$ par un tenseur de rigidité d'ordre quatre, noté $\overline{\overline{C}}$; ou, de manière équivalente, par un tenseur de souplesse du même ordre, noté $\underline{\underline{S}}$, tel que :

$$\overline{\sigma} = \overline{\overline{C}} : \underline{\varepsilon} \quad \text{et} \quad \underline{\varepsilon} = \underline{\underline{S}} : \overline{\sigma} \quad \text{avec} \quad \underline{\underline{S}} = \overline{\overline{C}}^{-1}. \tag{1.3}$$

Dans le document, les tenseurs d'ordre deux, en notation covariante comme les contraintes sont surlignés d'une barre. Les tenseurs d'ordre 4, en notation covariante et contravariante, comme les tenseurs de rigidité et de souplesse, sont respectivement surlignés et soulignés deux fois.

En notation de Voigt, les tenseurs symétriques du second ordre sont représentés par des vecteurs de dimension 6, ainsi les tenseurs $\overline{\sigma}$ et $\underline{\varepsilon}$ s'écrivent :

$$\underline{\varepsilon}^e = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 = \varepsilon^e_{xx} \\ \varepsilon_2 = \varepsilon^e_{yy} \\ \varepsilon_3 = \varepsilon^e_{zz} \\ \varepsilon_4 = 2\varepsilon^e_{yz} \\ \varepsilon_5 = 2\varepsilon^e_{xz} \\ \varepsilon_6 = 2\varepsilon^e_{xy} \end{pmatrix}, \quad \overline{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma^1 = \sigma^{xx} \\ \sigma^2 = \sigma^{yy} \\ \sigma^3 = \sigma^{zz} \\ \sigma^4 = \sigma^{yz} \\ \sigma^5 = \sigma^{xz} \\ \sigma^6 = \sigma^{xy} \end{pmatrix}.$$

Avec la même notation, les tenseurs de rigidité $\overline{\overline{C}}$ et de souplesse $\underline{\underline{S}}$ sont des matrices 6×6. Pour l'UO_2, qui est un matériau orthotrope à symétrie cubique, dans le repère principal défini, par les axes [100], [010] et [001], ils se simplifient pour prendre la forme suivante, d'après Decolon [30] :

$$\overline{\overline{C}} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{pmatrix}, \quad \text{et} \quad \underline{\underline{S}} = \begin{pmatrix} \frac{1}{E} & -\frac{\nu}{E} & -\frac{\nu}{E} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\nu}{E} & \frac{1}{E} & -\frac{\nu}{E} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\nu}{E} & -\frac{\nu}{E} & \frac{1}{E} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G} \end{pmatrix},$$

avec :

- les trois coefficients C_{11}, C_{12} et C_{44} de la matrice de rigidité ;
- les coefficients de l'ingénieur : le module de Young E, le coefficient de Poisson ν et le module de cisaillement G.

Ces coefficients sont liés par les relations suivantes :

$$\begin{aligned} C_{11} &= \frac{E\,(1-\nu)}{(1+\nu)(1-2\nu)}, \\ C_{12} &= \frac{E\,\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)}, \\ C_{44} &= G. \end{aligned}$$

Anisotropie monocristalline L'UO_2 monocristallin présente un comportement anisotrope. Les coefficients d'élasticité anisotrope du monocristal d'UO_2 ont été mesurés, à température ambiante, par plusieurs auteurs et sont résumées dans le tableau ci-dessous :

Le coefficient de Zener [162], donné par la formule ci-dessous, permet de mesurer le degré d'anisotropie :

$$Z = \frac{2\,C_{44}}{C_{11} - C_{12}},$$

$Z = 1$ caractérise un cristal isotrope. Pour le dioxyde d'uranium, en utilisant les valeurs des constantes données par Wolfe et al. [158], par exemple, on trouve $Z = 0,47$. Cette valeur montre que le dioxyde d'uranium présente une forte anisotropie à température ambiante. La figure 1.7 montre les variations en température des constantes de rigidité : C_{11}, C_{12} et C_{44} fournies dans les travaux de Hutchings [59]. On note sur la figure 1.7 que les coefficients C_{ij} diminuent avec la température, avec une incertitude expérimentale importante sur les valeurs du coefficient C_{12}.

Référence	C_{11}(GPa)	C_{12}(GPa)	C_{44}(GPa)
Wachtman et al. [146]	$395 \pm 0,18$	$121 \pm 0,19$	$64,1 \pm 0,17$
Brandt et al. [19]	$396 \pm 0,5$	$121 \pm 0,2$	$64 \pm 0,2$
Fritz et al. [41]	$389,3 \pm 0,17$	$118,7 \pm 0,17$	$59,7 \pm 0,3$
Clausen et al. [26]	395 ± 1	120 ± 1	63 ± 1
Wolfe et al. [158]	396	121	64

TABLE 1.1 – Constantes élastiques du dioxyde d'uranium monocristallin à température ambiante $\approx 300K$

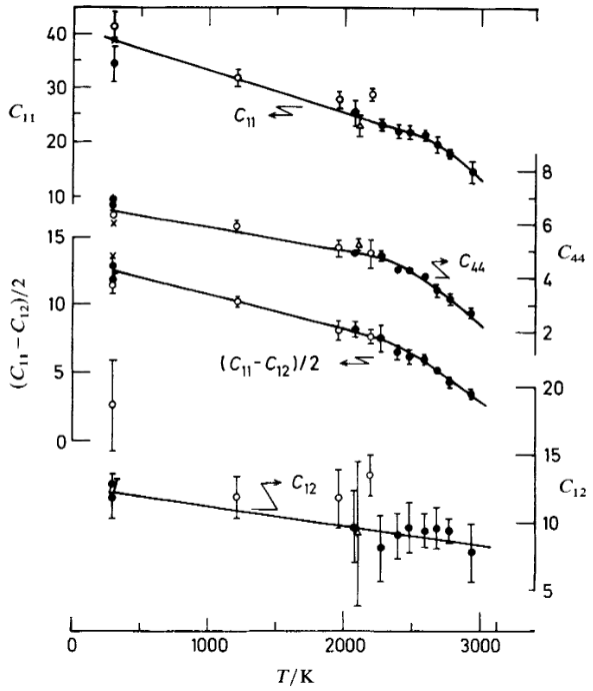


FIGURE 1.7 – Variation en température des constantes de rigidité élastique de l'UO_2 monocristallin ; résultat obtenu par Hutchings [59]

Isotropie macroscopique Dans un polycristal d'UO_2, les grains sont orientés uniformément dans toutes les directions ; puisqu'il n'y a pas d'orientation préférentielle, l'UO_2 est isotrope à l'échelle macroscopique. Ses propriétés peuvent se calculer par plusieurs formules d'homogénéisation. Les plus utilisées sont les formules de Kröner [71, 70] :

- le module de compressibilité du polycristal homogénéisé K, c'est une formule exacte qui ne dépend pas du schéma d'homogénéisation. En effet, pour un matériau à symétrie cubique, le module K est invariant par changement d'échelle. Il conserve la même formule que pour un monocristal.

$$K = \frac{C_{11} + 2\,C_{12}}{3}, \tag{1.4}$$

- le module de cisaillement G résulte d'une homogénéisation par un schéma auto-cohérent ; il s'obtient par résolution d'une équation du troisième degré :

$$8\,G^3 + (4\,G_v + 9\,K)\,G^2 - 3\,C_{44}\,(K + 4\,G_v)\,G - 6\,G_v\,C_{44}\,K = 0, \quad \text{avec} \quad G_v = \frac{C_{11} - C_{12}}{2}.$$

Dans ses travaux, Martin [84] a proposé des modèles empiriques pour l'évolution du module de Young E et du module de cisaillement G, pour l'UO_2 polycristallin. Ces modèles sont établis pour des températures allant de 273 à 2610 K et pour une configuration stœchiométrique, de l'UO_2 :

$$E = (2,27\,10^2 - 1,54\,10^{-2}T - 9,60\,10^{-6}\,T^2)\,(1 - 2,5p), \tag{1.5a}$$

$$G = (85,83 - 5,16\,10^{-3}T - 3,75\,10^{-6}\,T^2)\,(1 - 2,25p), \tag{1.5b}$$

Les coefficients E et G sont exprimés en GPa, la température T en kelvin, et la porosité p sans unité et pouvant varier de 0 à 0,3. La température et la porosité ont pour effet de diminuer les valeurs des coefficients élastiques. Les modèles ne traduisent toutefois pas l'effet de la surstoechiométrie, qui assouplit le matériau (cf. Scott et al. [132] et Igata et Domoto [60]).

Compressibilité K Le coefficient de compressibilité K, peut être déduit des mesures de Hutchings [59] avec la formule (1.4) :

$$K = \frac{C_{11} + 2\,C_{12}}{3}.$$

Il peut également être déduit des mesures de Martin [84], représentées par les formules (1.5) :

$$K = \frac{E\,G}{3\,(3\,G - E)}.$$

Or les valeurs ainsi obtenues sont différentes. Cette différence est due à la grande incertitude des mesures de Hutchings [59] pour le coefficient C_{12}, comme le montre la figure1.7.

Coefficient C_{12} Ainsi, nous avons décidé, pour augmenter la précision du coefficient C_{12}, de l'estimer à partir de la mesure de C_{11} de Hutchings, et des mesures de E et G de Martin, qui sont précises :

$$C_{12} = \frac{E\,G - C_{11}(3\,G - E)}{2\,(3\,G - E)}. \tag{1.6}$$

La figure 1.8 montre la variation de C_{12} obtenue avec la nouvelle estimation (1.6) ainsi que les résultats de mesure de Hutchings [59].

1.2.2 Mécanismes de viscoplasticité dans l'UO_2

La viscoplasticité est un phénomène physique qui engendre une déformation irréversible du matériau. Elle est produite par le mouvement de défauts de différentes natures : ponctuels (lacunes) et linéaires (dislocations) dans le matériau sous l'effet d'une contrainte externe. Ce comportement mécanique se caractérise par une vitesse de déformation dépendante de la contrainte. On réécrit l'équation (1.3) ainsi :

$$\dot{\overline{\sigma}} = \overline{\overline{C}} : (\dot{\underline{\varepsilon}} - \dot{\underline{\varepsilon}^p}) \quad \text{avec} \quad \dot{\underline{\varepsilon}^p} = f(\overline{\sigma}), \tag{1.7}$$

où :

- $\underline{\varepsilon}^p$ et $\underline{\varepsilon}$ correspondent respectivement aux déformations viscoplastique et totale ; la différence $(\underline{\varepsilon} - \underline{\varepsilon}^p)$ représente la déformation élastique,
- f est une fonction reliant la vitesse de déformation viscoplastique $\dot{\underline{\varepsilon}^p}$ à la contrainte $\overline{\sigma}$.

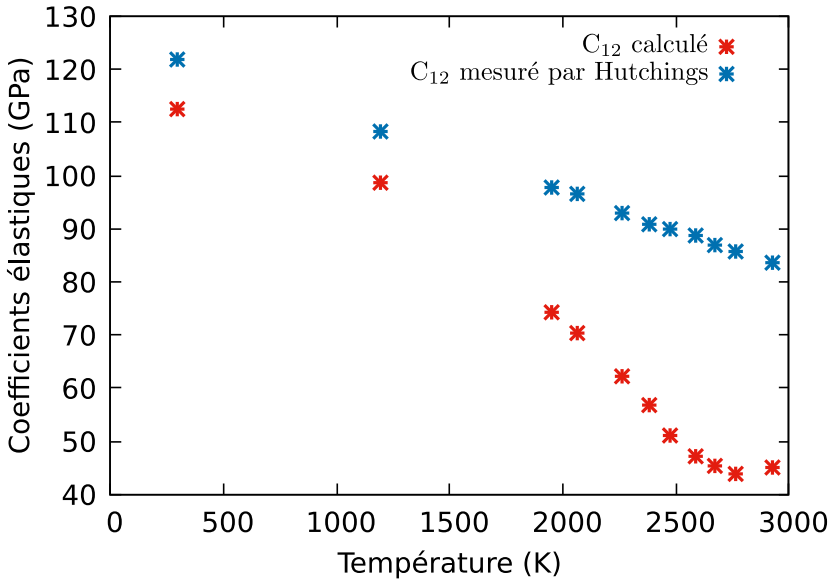


FIGURE 1.8 – Coefficient élastique C_{12} en fonction de la température : valeurs mesurées par Hutchings [59] vs les valeurs calculées par la formule (1.6)

En 1982, Frost et Ashby [42, 9] ont proposé, sur des bases théoriques et expérimentales, un diagramme permettant, en fonction de la température, de la contrainte et de la vitesse de déformation, d'identifier le mécanisme de déformation plastique activé. Ce diagramme, montré sur la figure 1.9, est établi pour l'UO_2 polycristallin avec une taille de grain fixe de 10 µm. Les auteurs définissent alors des zones représentatives de certains mécanismes de viscoplasticité décrits ci-dessous :

- la zone de *Diffusional flow* qui représente le domaine de déformation par phénomène de diffusion de lacunes. Cette dernière peut se faire dans le réseau cristallin, par le mécanisme de Nabarro Herring [102], ou aux joints de grains, par le mécanisme de Coble [27]. D'autres mécanismes existent, dont une revue est établie dans le chapitre 11 du livre de Poirier [115].
- la zone *Power Law Creep*, dont la déformation est générée par glissement simple des dislocations ou assisté par la montée. Cette dernière est contrôlée par le phénomène de diffusion.
- la zone *Plasticity* qui représente le mécanisme de glissement des dislocations pour des contraintes très importantes.

Taille de grain Le comportement viscoplastique est sensible à la taille de grain d_g.

- Dans le domaine du fluage diffusion, la déformation est directement proportionnelle à la taille de grains : $\dot{\underline{\varepsilon}} \propto \frac{1}{d_g^m}$, dont la puissance m est égale à 2 pour la diffusion en volume et à 3 pour la diffusion aux joints de grains.
- Pour les déformations par mouvement de dislocations, la vitesse de déformation diminue avec la taille de grain. Cette dépendance est classiquement expliquée, par Hall [50] et Petch [114], par un empilement des dislocations aux joints de grains. En effet, lorsque la taille des grains est petite, il y a plus de grains avec un plus grand nombre de plans de glissement alignés arbitrairement pour les dislocations dans les grains. Mais, les dislocations sont rapidement bloquées dans leur mouvement par les joints de grains. Cela limite leur déplacement et diminue ainsi la déformation générée. Ce phénomène est connu sous le nom d'effet Hall Petch.

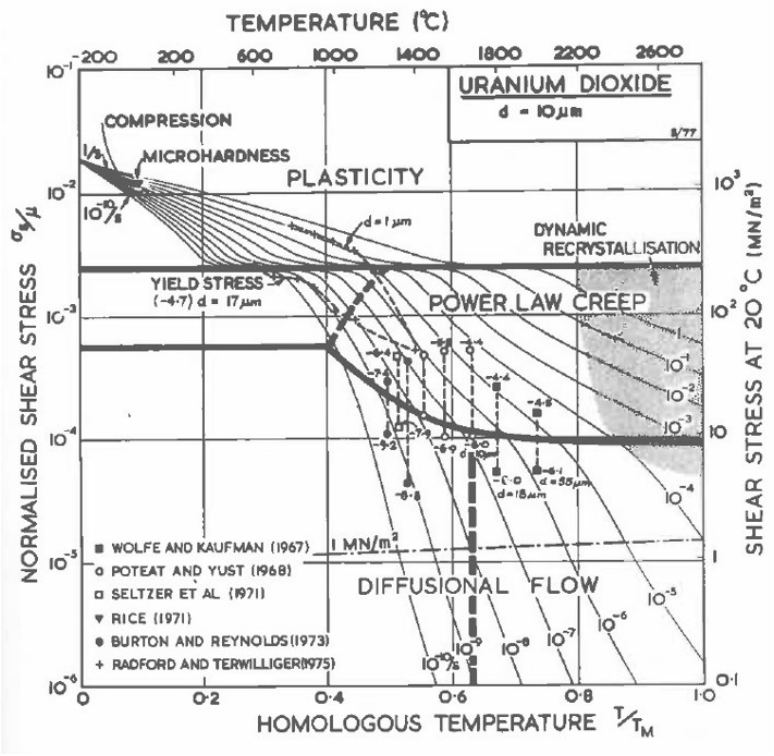


FIGURE 1.9 – Carte des mécanismes de déformation du dioxyde d'uranium stœchiométrique, d'après Frost et Ashby [42]

Dans cette thèse, les mécanismes de fluage diffusion ne sont pas abordés. On s'intéresse plutôt aux mécanismes de mouvement des dislocations.

1.2.3 Coefficients d'autodiffusion de l'uranium

La diffusion des lacunes dans l'UO_2 contrôle plusieurs mécanismes de fluage : le fluage diffusion et la la montée des dislocations, décrit dans la section 2.4. Ce paragraphe présente une revue bibliographique des mesures expérimentales du coefficient de diffusion dans l'uranium.

Autodiffusion La différence de concentration de lacunes c provoque leur diffusion, qui doit compenser cette différence. Le flux de lacunes $\boldsymbol{J}$, proportionnel au gradient de potentiel chimique, est donnée par la loi de Fick :

$$\boldsymbol{J} = -D_v \, \mathbf{grad}(c)$$

Dans la littérature, les données disponibles sur la diffusion des lacunes, ne donnent pas directement le coefficient de diffusion D_v, mais le coefficient d'autodiffusion, qui lui est associé par la formule [87, 95] :

$$D_a = f \, D_v \, c, \tag{1.8}$$

où le facteur f, appelé facteur de corrélation pour la diffusion, a pu être estimé [94] pour les cristaux CFC à une valeur de :

$$f = 0.781.$$

L'autodiffusion de l'uranium est le phénomène qui décrit le transport d'un atome d'uranium vers un nouveau site dans un cristal d'UO_2. Ce mouvement s'accompagne de la diffusion des lacunes en sens

inverse. Dans un cristal d'UO_2, l'autodiffusion de l'uranium est beaucoup plus lente que celle de l'oxygène, de sorte que la diffusion dans l'UO_2 est contrôlée par celle de l'uranium.

Coefficients La diffusion des lacunes peut se faire de deux manières : en volume, ou en passant par les joints de grains, où la diffusion est beaucoup plus rapide. Il y a donc deux types de coefficients d'autodiffusion : en volume D_a^v et aux joints de grains D_a^g. Ils dépendant de la température T [K] par une loi d'Arrhenius :

$$D_a^g = D_{a0}^g \exp\left(-\frac{Q_g}{k_B T}\right),$$
$$D_a^v = D_{a0}^v \exp\left(-\frac{Q_v}{k_B T}\right),$$

avec :

- Q_v et Q_g les énergies d'activation [J], pour la diffusion en volume et et aux joints de grains ;
- D_{a0}^v et D_{a0}^g les facteurs pré-exponentiels [$m^2.s^{-1}$] ;
- $k_B = 1,380649\,10^{-23}$ J.K^{-1} la constante de Boltzmann.

Mesures La détermination des coefficients de diffusion de l'uranium dans l'UO_2 se fait par des méthodes expérimentales utilisant différentes techniques. On peut citer, par exemple, la méthode des traceurs radioactifs utilisée dans Marlowe et Kaznoff [83] et la technique des rainures. Ces méthodes fournissent les coefficients pré-exponentiels ainsi que les énergies d'activation. Des données rassemblées de la littérature, concernant les coefficients de diffusion de l'uranium dans l'UO_2 stoechiométrique sont regroupées dans les tableaux 1.2 et 1.3.

	$D_{a0}^g(m^2s^{-1})$	Q_g(eV)	Méthode expérimentale
Matzke [85]	50	$4,7$	Traceurs radioactifs $T \in [1400, 1800]$ °C
Knorr [65]	$1,0\,10^{-2}$	$3,91$	Analyse de la littérature $T \in [600, 2200]$ °C
Henney et Jones [55]	$1,3\,10^{4}$	$4,78 \pm 0,65$	Rainures, $T \in [1200, 1400]$ °C
Marlow et Kaznoff [83]	$5,64\,10^{3}$	$5,24 \pm 0,148$	Traceurs radioactifs $T \in [1500, 1900]$ °C
Zhou et Olander [163]	$5,0\,10^{2}$	$3,13 \pm 0,651$	Traceurs radioactifs $T \in [1760, 2110]$ °C
Maiya [82]	$3,4\,10^{1}$	$4,69 \pm 0,70$	Traceurs radioactifs $T \in [1500, 1900]$ °C et rainures $T \in [1300, 1700]$ °C

TABLE 1.2 – Constantes pour les coefficients de diffusion sur les joints de grains

	$D_{a0}^v(m^2s^{-1})$	Q_v(eV)	Méthode expérimentale
Matzke [85]	$6,5\,10^{-5}$	$5,6$	Traceurs radioactifs $T \in [1400, 1800]$ °C
Knorr [65]	$1,9\,10^{-5}$	$5,65$	Analyse de la littérature $T \in [600, 2200]$ °C

TABLE 1.3 – Constantes pour les coefficients de diffusion en volume

Remarques Les valeurs des coefficients pré-exponentiels sont très différentes pour la diffusion sur les joints de grains, jusqu'à 10^3 d'écart entre deux articles de Matzke [85] et Knorr [65]. Cela peut être dû à la difficulté de contrôler la stoechiométrie pendant les mesures. Knorr [65] a en effet montré une grande influence de la stoechiométrie sur la diffusion dans l'UO_2.

Pour une taille de grains et une température données, la valeur du coefficient de diffusion en volume est beaucoup plus faible que celle du coefficient de diffusion sur les joints de grains (environ 10^{10} pour les coefficients donnés par Knorr). Ainsi, d'après Knorr et al. [65] et Farghalli et Soliman [91], la déformation par fluage diffusion dans l'UO_2, est principalement pilotée par la diffusion sur les joints de grains (mécanisme de Coble [27]), et ceci quelle que soit la taille du grain et la composition stœchiométrique de l'UO_2.

Le coefficient d'autodiffusion D_a^v en volume est si faible, qu'à l'échelle des cristaux d'UO_2, la diffusion des lacunes peut être négligée. Pourtant, cette diffusion n'est plus négligeable à l'échelle des dislocations, elle permet la montée des dislocations, qui sera détaillé en section 2.4.

1.2.4 Modèles viscoplastiques dans PLEIADES

En fonctionnement incidentel du réacteur, le combustible subit une forte élévation de la température, engendrant des déformations viscoplastiques des pastilles combustible. Plusieurs modèles ont été développés dans la plateforme PLEIADES de simulation du combustible nucléaire.

- Le modèle viscoplastique d'OTTER, introduit par Bahoboy [17] et Otter [109]. Ce modèle est utilisée pour les analyses 1D ;
- la loi viscoplastique du LPCC, introduite par Sladkoff et al. [137]. Ce modèle est couramment utilisée pour les analyses 3D ;
- le modèle de Monerie et Gatt [93] qui prend en compte l'évolution de la porosité du combustible.

La formulation de ces modèles est très senblale. Celle du modèle LPCC, qui est assez simple, servira d'exemple pour décrire tous ces modèles.

Modèle LPCC Le modèle LPCC, développé au CEA [137], est un modèle de fluage, dont la vitesse de déformation est construite à partir du déviateur des contraintes $\overline{s}$, et de la contrainte équivalente σ_{eq} :

$$\dot{\underline{\varepsilon}} = \dot{\varepsilon}\,\overline{n} \quad \text{avec} \quad \sigma_{eq} = \sqrt{\frac{3}{2}\,\overline{s} : \overline{s}} \quad \text{et} \quad \overline{n} = \frac{3\,\overline{s}}{2\,\sigma_{eq}},$$

Elle dépend d'une vitesse de déformation $\dot{\varepsilon}$, qui a été identifiée, pour l'UO_2, sur plus de 120 essais de fluage, pour des températures allant de 1200 à 1800°C, et des contraintes allant de 20 à 100 MPa.

Le modèle de vitesse identifié est le suivant :

$$\dot{\varepsilon} = \min(\max(\dot{\varepsilon}_1, \dot{\varepsilon}_2), \dot{\varepsilon}_{lim}).$$

Cette vitesse résulte de la concurrence entre deux mécanismes de fluage, de vitesses respectives $\dot{\varepsilon}_1$ et $\dot{\varepsilon}_2$: le fluage par diffusion et le fluage par mouvement des dislocations. Une vitesse limite $\dot{\varepsilon}_{lim}$ permet de limiter le fluage.

Les vitesses de fluage par diffusion $\dot{\varepsilon}_1$ et de fluage par mouvement des dislocations $\dot{\varepsilon}_2$ dépendent de la contrainte équivalente σ_{eq} :

$$\dot{\varepsilon}_1 = C_1\,\sigma_{eq}^{3,06}\,\exp\left(-\frac{Q_1}{k_B\,T}\right),$$
$$\dot{\varepsilon}_2 = C_2\,\sigma_{eq}^{8,40}\,\exp\left(-\frac{Q_2}{k_B\,T}\right),$$

avec des constantes C_1, C_2, Q_1 et Q_2. Ces deux vitesses présentent une forme identique, une combinaison de deux mécanismes : une loi puissance par rapport à la contrainte σ_{eq}, activée par une loi d'Arrhenius.

Exposant de contrainte La valeur de l'exposant de la contrainte dépend de la nature du mécanisme de déformation.

- La vitesse de fluage diffusion $\dot{\varepsilon}_1$ présente un exposant de l'ordre de 3, ce qui n'est pas conforme aux modèles de la littérature, ceux de Coble [27], Nabarro Herring [102], ou Raj. et Ashby [120] qui dépendent de manière linéaire de la contrainte.

  En revanche, cet exposant de l'ordre de 3 pourrait modéliser le fluage par montée des dislocations, pour lequel Nabarro [103] trouve un exposant de 3 et Weertman [148, 152] propose un exposant de $4,5$ pour le glissement assisté par la montée.

- La vitesse de déformation par fluage dislocation du modèle LPCC a une puissance de 8, ce qui est cohérent avec les modèles décrits dans la littérature, qui traitent de la déformation dans des niveaux de contrainte élevés, dont une synthèse se trouve dans le chapitre 6 du livre de Poirier [115]. Cet exposant de 8 a été également identifiée dans le modèle de Monerie et Gatt [93].

Couplage de mécanismes Les mécanismes de fluage diffusion et dislocation coexistent dans certaines conditions de température et de contrainte et peuvent interagir mutuellement. Ils sont pris en compte dans les modèles de plusieurs façons :

- dans le modèle LPCC, la déformation est modélisée par le mécanisme prédominant.
- Dans le modèle proposé par Bohaboy [17], les mécanismes sont supposés coexister sans interaction et les déformations s'additionnent.
- Dans le modèle proposé par Monerie et Gatt [93], pendant la déformation, la viscoplasticité peut passer de la déformation par diffusion à la déformation par mouvement des dislocations en utilisant une fonction de couplage dépendant de la contrainte et de la température.

Tous ces modèles : LPCC, OTTER et Monerie et Gatt, sont basés sur une approche phénoménologique. Ils sont validés sur un grand nombre d'expériences et prédisent bien le comportement macroscopique global des pastilles combustible en réacteur. Mais des approches microscopiques sont nécessaires, pour modéliser et comprendre les phénomènes observés à l'échelle des cristaux de l'UO_2. C'est dans ce cadre que se situe le travail présenté dans ce mémoire de thèse. Plus précisément, l'objectif est de comprendre comment le mouvement des dislocations peut expliquer une sous-structuration des grains, observée expérimentalement.

1.2.5 Évolution de la microstructure de l'UO_2

Des analyses utilisant différentes techniques de microscopie telles que :

- Microscope Électronique en Transmission (ou MET), ou à Balayage (ou MEB), et
- la diffraction d'électrons rétrodiffusés (en anglais Electron BackScatter Diffraction ou EBSD),

ont été réalisées pour étudier l'évolution de la microstructure du combustible en réacteur.

Combustible irradié De nombreuses études on été faites sur du combustible dans différentes conditions d'irradiation, par exemple : Soullard [140], Whapham et Sheldon [154], Sabathier et al. [127], He et al. [52, 51], Ray et al. [123] et Jädernäs Tejland [63]. Les principales observations sont les suivantes :

- la création d'un réseau de dislocations (cf. figure 1.10) divisant les grains en sous-grains, voire en petits grains recristallisés, a été observée. Ceci pourrait avoir une influence sur le comportement viscoplastique de l'UO_2, à travers l'effet Hall-Petch, ou dans le domaine du fluage diffusion où la déformation est directement liée à la taille des grains.

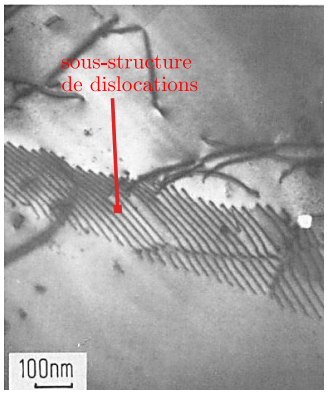
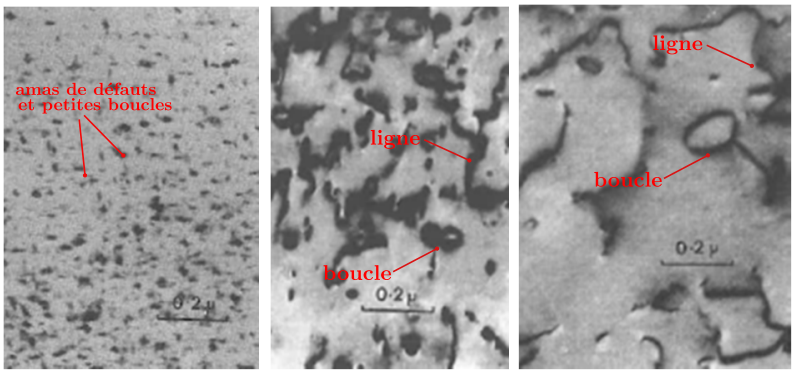


FIGURE 1.10 – Image MET d'une structure de dislocations typique observée au centre d'un échantillon testé en transitoire de puissance, montrant un sous-joint de grain de faible désorientation cristalline séparant deux sous-grains [123]

- Une création de dislocations due à l'irradiation a été observée. En effet, lors de l'irradiation, de petits amas de défauts, de l'ordre de quelques nanomètres de diamètre, se forment et croissent jusqu'à devenir des boucles de dislocations de l'ordre de quelques dizaines de nanomètres de diamètre (cf. figure 1.11). D'autres études ont montré également une augmentation significative de la densité des dislocations avec la durée de l'irradiation, ce qui influence la réponse mécanique du combustible (cf. Baron et al. [12] et Nogita et Une [105]).



(a) (b) (c)

FIGURE 1.11 – Images MET d'UO_2 irradié entre $50 - 100°C$, montrant l'évolution des défauts linéaires au cours de l'irradiation, (a) amas de défauts et petites boucles de dislocation, (b) boucles et lignes de dislocation, (c) réseau de dislocations enchevêtrées, d'après Whapham et Sheldon [154]

- Lors de l'irradiation, des produits gazeux sont générés, notamment du xénon et du krypton ainsi que de l'hélium. Une partie de ces éléments est libérée par la pastille vers les volumes libres du crayon. Une autre partie des gaz reste sous la forme de bulles de gaz, dans le matériau et entre en interaction avec les dislocations (cf. Onofri [107] et Sonoda et al. [138]). En fait, des bulles de gaz de fission de l'ordre d'une dizaine de nanomètres ont été observées épinglées sur des lignes de dislocation (cf.

figure 1.12). Les bulles épinglées grossissent par le mécanisme de *pipe diffusion* [100], i. e. la diffusion des atomes/lacunes le long des lignes de dislocations.

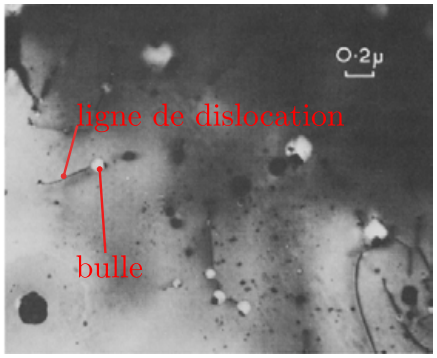


FIGURE 1.12 – Image MET d'UO_2 irradié aux neutrons puis recuit à 1500°C d'après Whapham [153]

- La périphérie de la pastille est la région la moins chaude de la pastille (environ 500°C, voir la figure 1.4), elle constitue le siège d'une évolution particulière de la microstructure. Il s'y produit davantage de fissions que dans le cœur de la pastille, ce qui conduit à une accumulation plus importante de produits de fission et de défauts d'irradiation. De plus, du fait de la température de la zone, le recuit des défauts d'irradiation et la diffusion des produits de fission est moins important. Dans ces conditions particulières, une microstructure appelée RIM, ou High Burn up Structure (HBS), se forme en périphérie de pastille. Cette structure est caractérisée par une redistribution des bulles de gaz de fission et des dislocations, ainsi que par une subdivision des grains. En fait, des grains de taille initiale, de l'ordre de 5 à 10 µm, sont divisés en des grains très fins entre $0,1$ et $0,3$ µm. Des précipités de produits de fission métalliques sont également produits. Sonoda et al. [138] et Jonnet [62] considèrent que la formation du RIM se fait par le réarrangement des dislocations en murs des dislocations (polygonisation). Pour Sonoda et al. [138] ce réarrangement est initié par des interactions entre les dislocations, les précipités de produits de fission et les bulles de gaz de fission. Cela conduit à la formation de sous-joints de grain faiblement désorientés et ancrés de bulles de gaz de fission.

Combustible vierge Les essais de transitoires de puissance et les examens post-irradiation sont des opérations coûteuses et difficiles à mener. C'est pourquoi, les études du comportement viscoplastique du combustible et de sa microstructure ont été souvent réalisées en utilisant des essais sur du combustible vierge. Ces études visent à reproduire les conditions réelles dans le réacteur, par exemple en effectuant des tests mécaniques à haute température allant de 1200 à 1900°C. Dans cette perspective, Ben Saada et al. [13], ont réalisé des essais de fluage et de Déformation à Vitesse Contrôlée (DVC) sur des pastilles combustible à une température de 1500°C. Après déformation, des examens EBSD ont été réalisés pour suivre l'évolution de la microstructure en fonction de deux paramètres : la porosité et le niveau de déformation atteint. L'étude a mis en évidence la subdivision des grains en sous-grains (cf. figure 1.13). Par exemple, des grains d'une taille d'environ 20 µm ont été divisés en grains de 5 µm. Très peu de dislocations libres ont été observées. La plus grande partie des dislocations est organisée sous la forme de murs de dislocations. Ces derniers sont représentés par les courbures blanches sur la figure 1.13, ils présentent une faible désorientation cristalline, et divisent les grains en sous-grains. Cette désorientation du réseau cristallin est attribuée aux Dislocations Géométriquement Nécessaires (en anglais Geometrically Necessary Dislocations ou GNDs), qui sont des dislocations en excès dans le matériau, et qui se manifestent par une distorsion du réseau cristallin à l'échelle du polycristal. Cet aspect sera bien détaillé dans ce manuscrit.

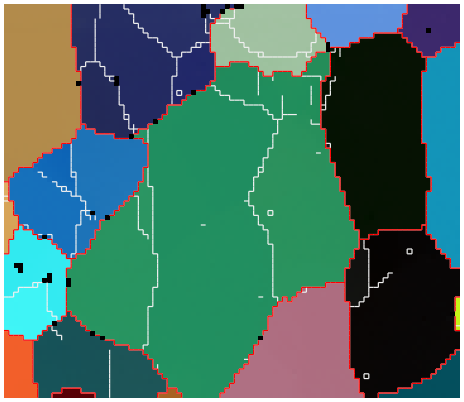


FIGURE 1.13 – Carte de subdivision des grains en sous-grains établie à partir des données EBSD fournies dans les travaux de Ben Saada et al. [13]

1.3 Contributions de la thèse

De nombreux travaux ont été réalisés sur le comportement viscoplastique de l'UO_2. La thèse doit poursuivre ce travail.

Modèles macroscopiques Les premières études du comportement viscoplastique du polycristal d'UO_2, ont utilisé des approches phénoménologiques macroscopiques. De nombreux modèles semi-empiriques ont été proposés et validés sur un grand nombre d'essais mécaniques. Ces modèles sont appliqués dans la plateforme de simulation du combustible PLEIADES pour simuler le comportement mécanique des crayons combustible dans les réacteurs (cf. sous-section 1.2.4). Les progrès des techniques expérimentales, en particulier microscopiques, ont orienté les travaux vers le développement d'approches micromécaniques qui devraient permettre d'approfondir la compréhension des phénomènes observés, décrits dans la sous-section 1.2.5.

Plasticité polycristalline Pour ce faire, des modèles classiques de plasticité cristalline ont été développés, à l'aide des techniques d'homogénéisation à champ moyen, utilisées dans la thèse de Sauter [128] ; ou par une approche à champ complet appliquée dans les travaux de thèses de Pacull [110] et Soulacroix [139]. Ces modèles permettent de déterminer le comportement des grains en fonction de leur orientation cristallographique dans les agrégats polycristallins. Ceci a permis de prendre en compte les hétérogénéités des champs locaux entre les grains du polycristal et d'étudier leurs effets sur la viscoplasticité de l'UO_2. Dernièrement, la thèse de Portelette [117] a poursuivi le développement de l'approche à champ complet. Ses travaux ont étudié les mécanismes de glissement des dislocations thermiquement activés ainsi que les interactions entre dislocations.

FDM Ces travaux ont tous été réalisés dans le cadre de la plasticité cristalline standard. Celle-ci considère que les dislocations sont distribuées de manière équilibrées (Statistically Stored Dislocations ou SSDs). Or l'écoulement des dislocations déséquilibre ces dislocations, et fait apparaître des dislocations géométriquement nécessaires (Geometrically Necessary Dislocations ou GNDs) qui courbent le réseau cristallin. Elles peuvent former des murs qui subdivisent les grains en sous-grains. Il faut pouvoir en tenir compte, c'est pourquoi ce travail de thèse s'appuie sur la Mécanique des Champs de Dislocations (Field Dislocation Mechanics ou FDM), qui modélise l'écoulement de ces dislocations à l'échelle des grains.

Les premiers modèles de FDM [1, 39], s'appuient sur une hypothèse constitutive pour modéliser l'écoulement des GNDs. Les modèles proposés formulent un écoulement différent pour les SSDs et les GNDs, ce qui est contraire à l'identité de nature de ces deux types de distributions.

Objectifs de la thèse Pour traiter de manière identique ces deux populations, nous proposons de reformuler les équations de la FDM par un travail d'homogénéisation qui part des équations fondamentales microscopiques, vérifiées par une dislocation unique. À cette échelle, les SSDs et les GNDs n'existent pas, il n'y a que des dislocations. Cette formulation est rendue possible grâce au travaux de Kosevitch [68, 78].

L'homogénéisation de ces équations fondamentales permettra de retrouver les équations de la FDM. Elle permettra notamment de préciser les notions de SSDs et de GNDs, dont les densités apparaîtront naturellement. C'est l'objet du chapitre 2.

Le modèle formulé nécessite d'identifier une loi de glissement des dislocations. Des essais sur monocristaux, issus de la littérature des années 1960-70, seront utilisés pour cela au chapitre 3. Au chapitre 4, le modèle pourra enfin être appliqué à simuler le comportement d'un polycristal d'UO_2, soumis à des essais de compression à haute température. Les résultats de simulations seront comparés à des résultats expérimentaux.

Chapitre 2

Construction d'un modèle de plasticité cristalline basé sur la théorie FDM

L'objectif de ce chapitre est donc la construction d'un modèle de Mécanique des Champs de Dislocations (FDM) par homogénéisation à partir des propriétés mécaniques d'une dislocation.

Plan Pour ce faire, ce chapitre est organisé en plusieurs sections :

1. La première présente les dislocations de manière qualitative.
2. Les propriétés élémentaires d'une dislocation sont ensuite établies,
3. puis traduites en termes cristallographiques sur un plan de glissement.
4. Une section est dédiée à la montée des dislocations.
5. La cinquième section réalise l'homogénéisation.
6. La dernière section montre comment décliner les équations obtenues, par plusieurs approximations, pour retrouver des modélisations classiques. Nous présentons également le modèle que nous adoptons.

2.1 Généralités

Les dislocations, et leurs propriétés élémentaires, sont d'abord décrites de manière qualitative.

2.1.1 Historique

Avant de présenter les dislocations, nous donnons un bref historique des travaux qui ont fondé la Mécanique des Champs de Dislocations (Field Dislocations Mechanics en anglais, ou FDM).

Début La théorie des dislocations est souvent attribuée à Orowan [108], Polanyi [116] et Taylor [142], pour leurs travaux datant de 1934. Cette théorie suppose que des défauts cristallins linéiques, les dislocations, sont présents dans le matériau. Ils le déforment localement, et, sous l'action de contraintes, se déplacent en créant de la déformation plastique. Les dislocations ne seront observées expérimentalement que plus tard [57, 88], dans les années 1950, grâce à l'invention du microscope électronique en transmission.

Pour modéliser l'influence des déformations sur les champs mécaniques, la théorie des dislocations utilise des résultats antérieurs de la théorie de l'élasticité : en 1907, le mathématicien italien Volterra [145] avait déjà décrit des défauts équivalents, qu'il appelait distorsions. En 1920, Love, dans la troisième édition de son traité d'élasticité [80], les rebaptise dislocations. Il s'agissait alors de défauts macroscopiques, dont la description mathématique pouvait s'appliquer aux défauts cristallins linéiques.

Théorie continue Les dislocations déforment le réseau cristallin. Nye [106] propose de mesurer cette déformation par un tenseur $\underline{\alpha}$, qui porte son nom. Ce tenseur correspond à la densité de dislocations nécessaires pour produire la déformation observée. Partant du travail de Nye, Kröner [73], propose de fonder une théorie continue des dislocations, qui permet de calculer la déformation du réseau cristallin, et les contraintes qui s'en déduisent, à partir de la densité de dislocations, c'est-à-dire du tenseur de Nye $\underline{\alpha}$. Parallèlement à d'autres chercheurs, Kondo, Bilby, Bullough, Smith, Kosevitch, Mura, etc., il obtient les équations fondamentales de sa théorie.

GNDs et SSDs Dans son article, Nye traite des déformations observables à grande échelle. En 1970, Ashby [8] appelle Dislocations Géométriquement Nécessaires (*Geometrically Necessary Dislocations* en anglais, ou GNDs) les dislocations responsables de telles déformations : elles sont nécessaires pour expliquer la déformation du réseau observée.

En fait les dislocations ont un signe (voir plus loin, au paragraphe 2.1.2). Pour construire la densité $\underline{\alpha}$, les dislocations appartenant à un élément de volume δV sont additionnées. Dans cette prise de moyenne, de nombreuses dislocations s'annulent entre elles. Ces dislocations, qui ont disparu dans la prise de moyenne, sont les Dislocations Statistiquement Stockées (*Statistically Stored Dislocations* en anglais, ou SSDs).

La différence entre GNDs et SSDs est purement comptable : il s'agit au départ de dislocations de même nature, différenciées par la prise de moyenne. Pourtant, elles agissent différemment :

- La déformation du réseau s'explique par les seules GNDs. Les SSDs y contribuent également, mais leurs effets s'annulent.
- En revanche, la plasticité créée par le déplacement des dislocations sous l'action d'un champ de contraintes ne dépend pas du signe des dislocations, et c'est leur nombre total qui compte. C'est la loi d'Orowan (voir plus loin). Dans ce cas, GNDs et SSDs agissent ensemble.

Ainsi, il faut faire cohabiter ces deux populations de dislocations, arbitrairement séparées par une prise de moyenne sur un élément de volume δV.

FDM En 2000, Acharya [3, 1] propose de compléter les équations fondamentales de la théorie continue des dislocations pour former un système complet d'équations, qui permet de faire évoluer les dislocations, de gérer les populations de GNDs et de SSDs. Il fonde ainsi la Mécanique des Champs de Dislocations (FDM).

Les livres de Fressengeas [39, 40] offrent une bonne synthèse de cette théorie. Celle-ci se compose :

- des équations de la théorie continue des dislocations pour calculer les contraintes liées à un champ de dislocations ;
- d'équations classiques aux modèles de Plasticité Cristalline, pour créer de la déformation plastique, faire évoluer les populations de dislocations, etc. ;
- et d'une équation qui décrit la circulation des GNDs.

Alors que la théorie continue des dislocations débouche généralement sur des formules analytiques ou semi-analytiques, la FDM se traduit souvent par des calculs numériques sur des microstructures, des aggrégats polycristallins par exemple.

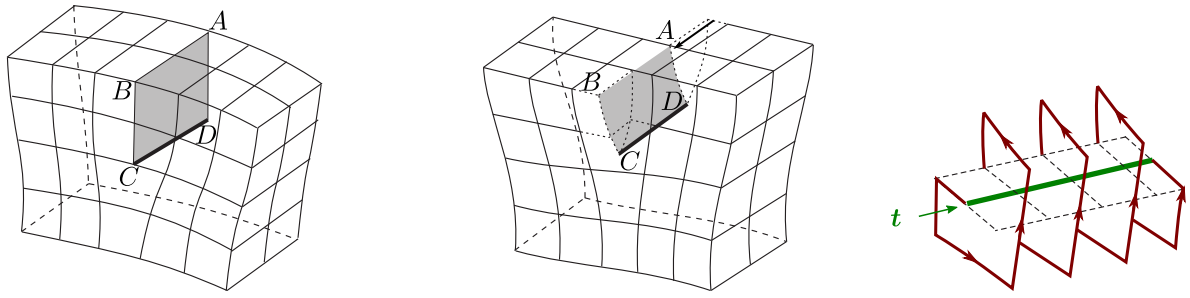
Kosevitch Un des points clef pour aborder la FDM, est de bien distinguer GNDs et SSDs. Or ces deux types de dislocations sont définies à la suite d'une prise de moyenne sur un élément de volume δV, donc dépendent de ce volume.

Pour gérer la distinction entre GNDs et SSDs, la FDM considère souvent deux tenseurs de Nye, un tenseur microscopique $\underline{\alpha}$, et un tenseur macroscopique $\langle\underline{\alpha}\rangle$, résultant de la prise de moyenne du tenseur microscopique $\underline{\alpha}$ sur l'élément de volume macroscopique δV. Cela permet de développer la théorie, mais ces considérations restent ambiguës : le tenseur $\underline{\alpha}$ reste le résultat d'une moyenne à l'échelle microscopique, qui peut annuler une quantité de dislocations.

Les travaux de Kosevitch [68, 78] permettent de lever cette ambiguïté. Il montre comment écrire le tenseur de Nye pour une dislocation unique, sans recourir à une prise de moyenne sur un ensemble de dislocations. Ce tenseur n'est plus une fonction régulière, mais une distribution. Cette apparente complexité mathématique permet en fait de simplifier la présentation de la FDM. C'est ce que nous souhaitons montrer lors de la construction de notre modèle de FDM.

2.1.2 Description d'une boucle de dislocation

Les dislocations sont des défauts cristallins, illustrés en figure 2.1. Pour simplifier la présentation, la figure montre un arrangement atomique de structure cubique simple : les sommets des cubes représentent les atomes et les arêtes les liaisons. Il existe deux types de dislocation : coin et vis.



(a) Dislocation coin (b) Dislocation vis (c) vis négative

FIGURE 2.1 – Les dislocation coin et vis d'après Hull et Bacon [58]

Dislocation coin L'arrangement des atomes autour d'une dislocation coin est illustré sur la figure 2.1(a). Pour produire une telle figure, un réseau cristallin régulier a été coupé par le demi-plan ABCD, dans lequel des atomes supplémentaires ont été ajoutés. Une fois le demi-plan ABCD ajouté, le réseau est relaxé. Les faces de la fente ont donc été déplacées d'une distance interatomique. La dislocation coin a donc été construite par l'ajout du demi-plan ABCD, pourtant elle est considérée comme un défaut linéique, associé à la seule droite CD. La raison de ceci sera expliquée plus loin.

Lorsque le demi-plan est ajouté par le haut, la dislocation coin est positive, et est représentée par le symbole $\perp$. Une dislocation négative est obtenue en insérant un demi-plan supplémentaire d'atomes par le bas, et est représentée par le symbole $\top$.

Dislocation vis Pour produire la dislocation vis de la figure 2.1(b), un réseau cristallin régulier a de nouveau été coupé par un demi-plan ABCD. Mais au lieu d'ajouter un demi-plan atomique, les lèvres de la coupure ont été décalées et recollées d'une distance interatomique. Puis, le réseau cristallin a été relaxé. La dislocation vis a été construite en décalant les atomes le long du demi-plan ABCD, et pourtant, elle est considérée comme un défaut linéique, associé à la seule droite CD.

Les dislocations vis ont également un signe. En tournant autour d'une dislocation vis, comme sur la figure 2.1(c), chaque tour change de plan cristallin, le parcours représente une vis. Lorsque ce parcours se fait dans le sens trigonométrique, et qu'il aborde les différents plans cristallins dans le sens $\boldsymbol{t}$ de la dislocation, la dislocation est positive. Dans le cas contraire, comme sur la figure 2.1(c), elle est négative.

Cœur d'une dislocation Dans la création des deux types de dislocations, après avoir inséré ou décalé le demi-plan ABCD, le réseau cristallin est relaxé. Ainsi, dans les deux cas, la plus grande perturbation concerne les atomes proches de la ligne DC. Loin de cette ligne l'arrangement des atomes ne semble pas perturbé, même pour les atomes du demi-plan.

Les atomes situés autour de la ligne de dislocation, à quelques distances atomiques, appartiennent au cœur de la dislocation. Dans cette zone, la physique du réseau cristallin peut être modifiée : la diffusion d'atomes est facilitée le long de la dislocation (Pipe diffusion), des défauts peuvent y être piégés (Nuage de Cottrell). Les champs mécaniques, calculés de manière élastique, présentent une discontinuité sur la ligne de dislocation, et ne sont plus valable dans le cœur de la dislocation.

Défaut linéique La figure (2.2) présente une dislocation coin vue de face, avec le demi-plan ajouté P_1. En fait, pour produire une tel arrangement, il aurait possible d'ajouter des atomes sur la surface S_1 et relaxer le milieu. Il aurait été également possible de retirer des atomes sur le demi-plan inférieur P_2, ou sur la surface S_2 et relaxer le milieu. En fait, le défaut lié à la dislocation coin peut être introduit par toute surface qui s'appuie sur la ligne de dislocation.

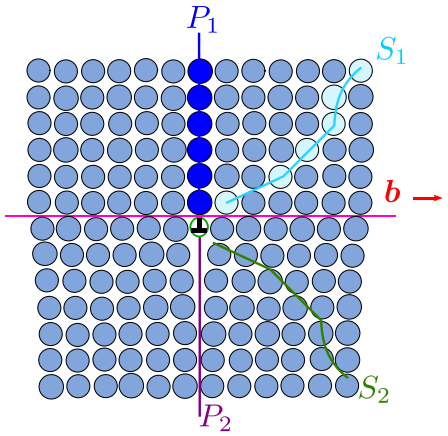


FIGURE 2.2 – La dislocation pourrait être produite par l'ajout d'un demi-plan P_1, d'une surface S_1, ou le retrait d'un demi-plan P_2 ou d'une surface S_2

Ce raisonnement montre en quoi la dislocation est un défaut linéique : la surface introduite est arbitraire, pourvue qu'elle s'appuie sur la ligne de dislocation. Une fois le milieu relaxé, il n'est pas possible de savoir quels atomes ont été ajoutés ou retirés pour produire l'arrangement cristallin de la figure (2.2).

Dislocation mixte En général, la dislocation n'est pas une ligne droite, mais une ligne courbe, comme celle présentée en figure 2.3. Dans ce cas, son type change : il passe de coin (c) à vis (v) en passant par un

type intermédiaire, le type mixte.

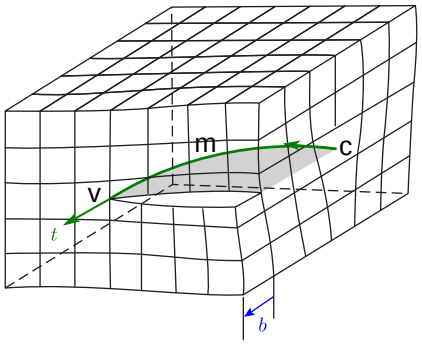


FIGURE 2.3 – Lors de son parcours, une dislocation passe de type coin (c) à vis (v) en passant par le type mixte (m)

2.1.3 Champs élastiques des dislocations

La présence de dislocations dans un cristal déforme le réseau cristallin. Les champs de déformations et de contraintes qui en résultent peuvent être calculés par la théorie de l'élasticité. Le point sera traité plus loin, dans le cas général, au paragraphe 2.2.3. Dans un premier temps, pour des raisons pédagogiques, il peut être intéressant de réaliser ces calculs dans des situations simples, en supposant les dislocations rectilignes et le matériau isotrope.

Cylindres recollés Volterra [145] est le premier à parler de dislocations. Il imagine un cylindre creux qu'il coupe suivant une surface verticale, et qu'il recolle ensuite avec un déplacement uniforme, caractérisé par un vecteur $\boldsymbol{b}$, de norme $b = |\boldsymbol{b}|$.

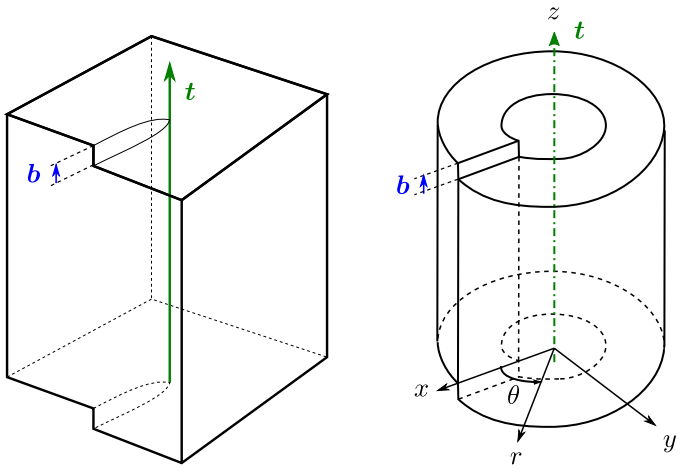
- Lorsque le vecteur $\boldsymbol{b}$ est dirigé suivant l'axe z du cylindre, comme sur la figure 2.4, la dislocation est la dislocation vis.
- Lorsque le vecteur $\boldsymbol{b}$ est dirigé suivant un axe x, perpendiculaire à l'axe du cylindre, comme sur la figure 2.5, la dislocation est la dislocation coin.

Dans les deux cas, les dislocations créées dans le cylindre correspondent aux défauts cristallins décrits au paragraphe précédent, comme le montrent les figures 2.4 et 2.5. Lorsque la dislocation correspond au défaut cristallin, le vecteur $\boldsymbol{b}$ est appelé vecteur de Burgers et dépend de la cristallographie.

Les dislocations ainsi créées sont rectilignes, dirigées suivant le vecteur directeur $\boldsymbol{t}$ de l'axe du cylindre. Dans cette configuration géométrique simple, Volterra [145] calcule les champs de déformations et de contraintes pour un milieu isotrope. Burgers [21] propose des solutions pour un milieu à symétrie cubique. Ces solutions sont également décrites dans tout livre sur les dislocations, par exemple celui de Hull et Bacon [58].

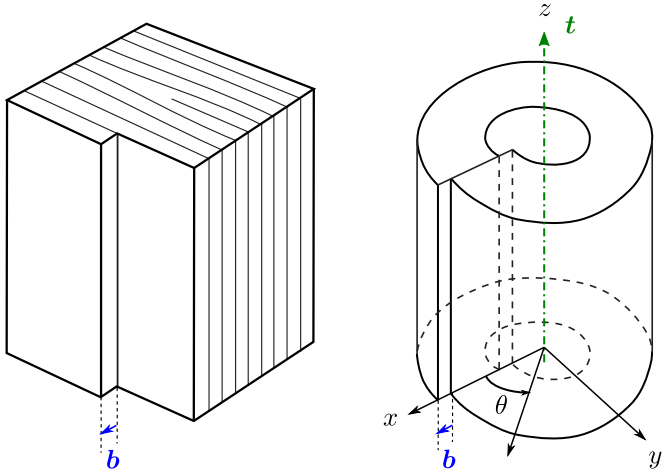
Dislocation vis La dislocation vis est la plus simple à calculer. Le champ de déplacement, en coordonnées cylindriques, vaut :

$$\boldsymbol{u} = \boldsymbol{b}\,\frac{\theta}{2\,\pi} = \frac{b\,\theta}{2\,\pi}\,\boldsymbol{t}$$



(a) Cristal (b) Cylindre creux

FIGURE 2.4 – Dislocation vis dans un cristal et dans un cylindre creux



(a) Cristal (b) Cylindre creux

FIGURE 2.5 – Dislocation coin dans un cristal et dans un cylindre creux

Les déformations $\underline{\varepsilon}$ et contraintes $\overline{\sigma}$ qui en résultent valent :

$$\begin{aligned} \varepsilon_{rr} &= \varepsilon_{\theta\theta} = 0, & \varepsilon_{\theta z} &= \frac{b}{4\,\pi\,r}, \\ \sigma_{rr} &= \sigma_{\theta\theta} = \sigma_{zz} = 0, & \sigma_{\theta z} &= \frac{G\,b}{2\,\pi\,r}. \end{aligned}$$

où, G représente le module de cisaillement du matériau.

Dislocation coin Pour la dislocation coin, le déplacement en coordonnées cylindriques vaut :

$$\begin{aligned} u_r &= \frac{b}{2\,\pi}\left(\cos(\theta)\,\theta + \frac{\sin(\theta)}{4\,(1-\nu)} - \frac{\sin(\theta)\,(1-2\,\nu)}{2\,(1-\nu)}\,\log(r)\right), \\ u_\theta &= \frac{-b}{2\,\pi}\left(\sin(\theta)\,\theta + \frac{\cos(\theta)}{4\,(1-\nu)} + \frac{\cos(\theta)\,(1-2\,\nu)}{2\,(1-\nu)}\,\log(r)\right), \\ u_z &= 0, \end{aligned}$$

avec les contraintes et déformations suivantes :

$$\begin{aligned} \varepsilon_{rr} = \varepsilon_{\theta\theta} &= -\frac{b\,\sin(\theta)\,(1-2\,\nu)}{4\,\pi\,(1-\nu)\,r}, \quad \varepsilon_{r\theta} = \frac{b\,\cos(\theta)}{4\,\pi\,(1-\nu)\,r}, \\ \sigma_{rr} = \sigma_{\theta\theta} &= -\frac{G\,b\,\sin(\theta)}{2\,\pi\,(1-\nu)\,r}, \quad \sigma_{r\theta} = \frac{G\,b\,\cos(\theta)}{2\,\pi\,(1-\nu)\,r}, \quad \sigma_{zz} = -\frac{G\,b\,\nu\,\sin(\theta)}{\pi\,(1-\nu)\,r}, \end{aligned}$$

où ν représente le coefficient de Poisson du matériau.

Cas général Pour les deux dislocations, vis et coin, le champ de déformation peut se décomposer en deux termes, principal et complémentaire :

$$\boldsymbol{u} = \boldsymbol{u}_1 + \boldsymbol{u}_2, \quad \text{avec} \quad \boldsymbol{u}_1 = \frac{\theta}{2\,\pi}\,\boldsymbol{b}. \tag{2.1}$$

Le terme complémentaire $\boldsymbol{u}_2$ est nul pour la dislocation vis, et vaut pour la dislocation coin :

$$\begin{aligned} u_{2r} &= \frac{b}{2\,\pi}\left(\frac{\sin(\theta)}{4\,(1-\nu)} - \frac{\sin(\theta)\,(1-2\,\nu)}{2\,(1-\nu)}\,\log(r)\right), \\ u_{2\theta} &= \frac{-b}{2\,\pi}\left(\frac{\cos(\theta)}{4\,(1-\nu)} + \frac{\cos(\theta)\,(1-2\,\nu)}{2\,(1-\nu)}\,\log(r)\right), \\ u_{2z} &= 0. \end{aligned}$$

C'est un déplacement périodique par rapport à l'angle θ, très régulier, sauf à proximité de la ligne de dislocation ($r = 0$).

Terme principal Le terme principal (2.1) :

$$\boldsymbol{u}_1 = \frac{\theta}{2\,\pi}\,\boldsymbol{b}$$

ne dépend pas des propriétés élastiques du matériau. Il concentre les particularités des dislocations, car il n'est pas périodique par rapport à l'angle θ. Il y a deux façons de traiter cette difficulté :

1. Les fondateurs des dislocations en théorie de l'élasticité (Volterra, Love) considéraient qu'il s'agissait d'une fonction multiforme : son domaine de définition permettait à θ de prendre tous les angles. En tournant autour de la dislocation, chaque tour ajoute un déplacement égal au vecteur de Burgers $\boldsymbol{b}$.

   Cela explique pourquoi les champs de déformations et de contraintes sont partout très réguliers, sauf à proximité de la ligne de dislocation ($r = 0$).

2. Pour éviter les fonctions multiformes, il est possible de limiter l'angle θ à un intervalle $[\theta_0; \theta_0 + 2\,\pi[$, avec un angle initial θ_0 arbitraire. Le déplacement connaît alors une discontinuité de valeur $\boldsymbol{b}$ pour la valeur initiale $\theta = \theta_0$.

   Cette discontinuité correspond au demi-plan cristallin, ajouté ou décalé, pour créer la dislocation. Nous avons remarqué que la localisation de ce plan était arbitraire, ce qui explique pourquoi l'angle de discontinuité θ_0 l'est également.

Les propriétés de la décomposition (2.1), mises en évidence dans le cas particulier de dislocations rectilignes, et pour un matériau isotrope, se généralisent, comme le montrera le paragraphe 2.2.3 à venir.

2.1.4 Création de plasticité

En plus de déformer le réseau cristallin, les dislocations se déplacent lorsque le matériau subit des contraintes et génèrent de ce fait de la plasticité.

Glissement La figure 2.6 ci-dessous illustre le processus de déformation plastique par glissement des dislocations coin. Lorsque la contrainte de cisaillement appliquée au matériau dépasse une valeur critique, les dislocations glissent jusqu'à former une marche, visible lorsqu'elles rencontrent une surface libre. Cette marche, dont la profondeur est égale à l'amplitude du vecteur de Burgers $\boldsymbol{b}$, représente la ligne de glissement.

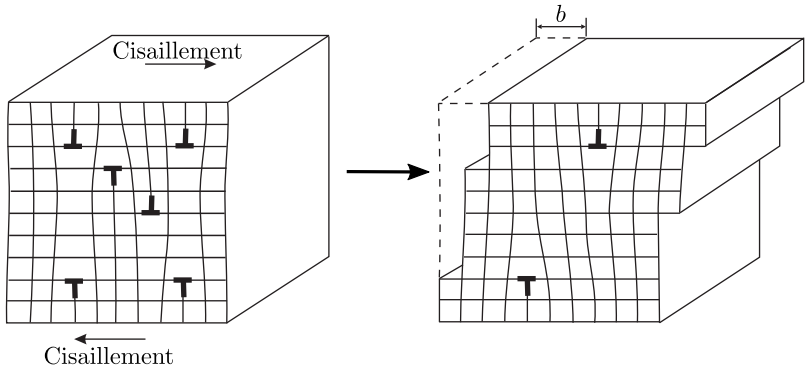


FIGURE 2.6 – Déformation plastique par glissement des dislocations pour des dislocations coin d'après Hull et Bacon [58]

La déformation du cristal, qui résulte du glissement des dislocations est une déformation plastique, irréversible. Orowan [108] a quantifié l'accroissement de déformation plastique $\dot{\gamma}$ produit par une densité ρ de dislocations coin, qui se déplacent avec une vitesse v :

$$\dot{\gamma} = \rho\, b\, v. \tag{2.2}$$

Le déplacement de chaque dislocation s'effectue dans un plan de glissement, construit par le déplacement de la ligne de dislocation dans la direction du vecteur de Burgers. Pour les dislocations coin, la direction de glissement est toujours parallèle à son vecteur de Burgers.

Dislocations vis Les dislocations vis peuvent également glisser dans le plan de glissement, dans la direction perpendiculaire au vecteur de Burger, et produire un accroissement de déformation plastique. La loi d'Orowan (2.2) s'applique également dans ce cas.

Comme une dislocation vis est parallèle au vecteur de Burgers, elle peut appartenir à plusieurs plans de glissement. Les dislocations vis peuvent ainsi passer d'un plan de glissement à un autre : c'est le mécanisme de glissement dévié.

Montée Les dislocations coin peuvent se déplacer dans une direction normale à leur plan de glissement, par un mécanisme appelé montée. Contrairement au glissement, la montée est un mécanisme non-conservateur car elle produit un changement de volume, qui doit être compensé par une diffusion de lacunes. La vitesse de montée est ainsi contrôlée par la diffusion.

Ce phénomène est illustré sur la figure 2.7 : l'enfoncement de la dislocation est rendu possible parce qu'elle absorbe de la matière, ce qui augmente la densité de lacunes. Celles-ci sont ensuite évacuées par diffusion, manifestée par les flèches rouges de la figure. La montée est décrite en détail en section 2.4.

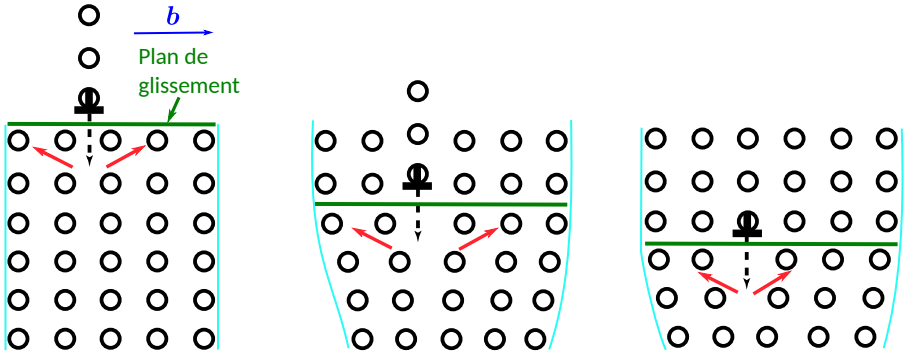


FIGURE 2.7 – Montée négative d'une dislocation coin, et diffusion des lacunes (flèches rouges) autour de la ligne de dislocation

2.2 Propriétés élémentaires d'une ligne de dislocation

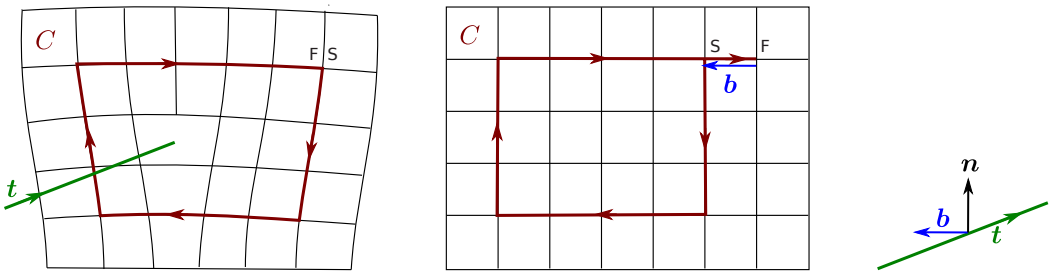
La première étape de la construction d'un modèle de FDM s'attache à décrire les propriétés élémentaires d'une ligne de dislocation.

2.2.1 La boucle de dislocation

Les premières propriétés d'une dislocation sont purement géométriques. Nous présentons les outils qui permettent de les décrire.

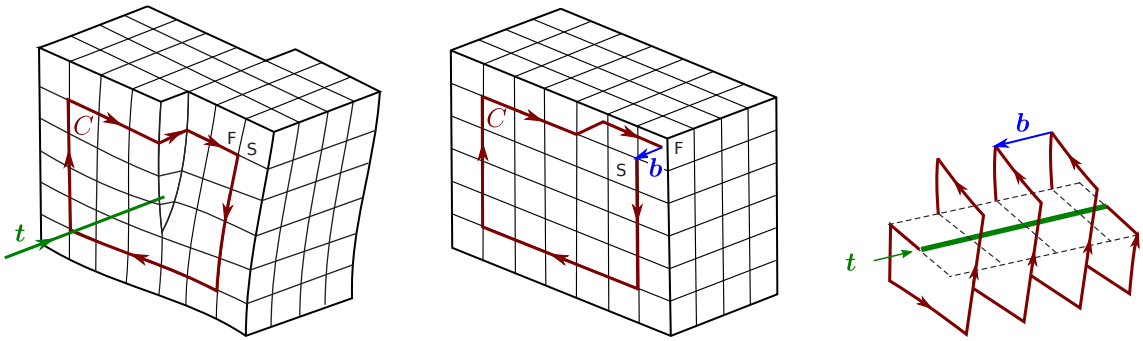
Circuit de Burgers Pour décrire des dislocations coin et vis, Burgers [20] propose un circuit qui entoure la dislocation, illustré sur les figures 2.8 et 2.9. Nous suivons la description qu'en font Bilby et al. [15], et les conventions qu'ils utilisent.

Une dislocation est orientée par son vecteur directeur $\boldsymbol{t}$. Dans le cristal réel, déformé par la dislocation, le circuit de Burgers C tourne autour de la dislocation, de manière à assurer la règle du tire bouchon de Maxwell (Right Hand Screw en anglais, ou RH). Il démarre du point S (start point) et rejoint le point de départ au point F (final point). Le même circuit sur un cristal parfait ne se referme pas. Il lui manque le vecteur $\boldsymbol{b} = \overrightarrow{FS}$: c'est ainsi qu'est défini le vecteur de Burgers.



(a) Cristal réel (b) Cristal parfait (c) Trièdre

FIGURE 2.8 – Circuit de Burgers pour une dislocation coin



(a) Cristal réel (b) Cristal parfait (c) Vis négative

FIGURE 2.9 – Circuit de Burgers pour une dislocation vis

Conventions La convention d'orientation ainsi décrite est la convention FS/RH : FS car $\boldsymbol{b} = \overrightarrow{FS}$ et RH désigne la règle du tire bouchon de Maxwell. D'autres auteurs utilisent la convention SF/RH avec $\boldsymbol{b} = \overrightarrow{SF}$. Pour transposer une formule d'une convention à l'autre, il suffit d'inverser le signe du vecteur de Burgers.

De Wit [31] a recensé les conventions utilisés par les auteurs de référence à son époque. Ces conventions affectent les signes des formules, dont la formule de Peach et Koehler (2.20), qui exprime la force exercée sur une dislocation par des contraintes. Il faut donc être prudent avec les formules de la littérature. De Wit montre que certains auteurs (Nabarro, Kröner) ont pu se tromper, heureusement sans préjudice sur leurs résultats.

Signes de dislocations Dans la suite, nous utilisons la convention FS/RH. La dislocation coin de la figure 2.8(c) est positive. Dans ce cas, le trièdre formé du vecteur de Burgers $\boldsymbol{b}$, de la direction $\boldsymbol{t}$ de la ligne de dislocation et du vecteur $\boldsymbol{n}$, dirigé vers le haut, est indirect. Ainsi, une dislocation coin est positive lorsque la quantité :

$$\varrho_c = -\frac{(\boldsymbol{b} \wedge \boldsymbol{t})^\intercal . \boldsymbol{n}}{b} \tag{2.3a}$$

est positive, et négative dans le cas contraire.

La dislocation vis de la figure 2.9 est négative, et les vecteurs de Burgers $\boldsymbol{b}$ et directeur $\boldsymbol{t}$ sont de signes opposés. Ainsi, une dislocation vis est positive lorsque la quantité :

$$\varrho_v = \frac{\boldsymbol{b}^\intercal . \boldsymbol{t}}{b} \tag{2.3b}$$

est positive, et négative dans le cas contraire.

Saut de déplacement Avec la convention FS/RH, le vecteur de Burgers vérifie :

$$\boldsymbol{b} = \boldsymbol{x}_S - \boldsymbol{x}_F,$$

où les points $\boldsymbol{x}_S$ et $\boldsymbol{x}_F$ sont les points du cristal parfait, non déformé par la dislocation. Dans le cristal réel, les atomes sont déplacés d'un champ de déplacement $\boldsymbol{u}$ par la dislocation. Comme le circuit se referme, cela signifie que :

$$\boldsymbol{x}_S + \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}_S) = \boldsymbol{x}_F + \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}_F),$$

c'est-à-dire :

$$\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}_F) = \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}_S) + \boldsymbol{b}.$$

Cette propriété peut également s'écrire en intégrant sur le circuit de Burgers C, partant du point S jusqu'au point F :

$$\oint_C \underline{\mathrm{grad}}(\boldsymbol{u}).\boldsymbol{l}\,\mathrm{d}s = \oint_C \mathrm{d}\boldsymbol{u} = \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}_F) - \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}_S) = \boldsymbol{b}. \tag{2.4}$$

Dans cette écriture, le vecteur $\boldsymbol{l}$ et le paramètre s désignent respectivement la tangente et l'abscisse curviligne le long du circuit C.

Boucle de dislocation Les dislocations sont rarement rectilignes. Elles se présentent plutôt sous forme de boucles, comme celle de la figure 2.10. La boucle est supposée appartenir à un plan de glissement, de normale $\boldsymbol{n}$, auquel appartient le vecteur de Burgers $\boldsymbol{b}$. Le parcours de la boucle, de vecteur directeur $\boldsymbol{t}$, est orienté par rapport au vecteur normal $\boldsymbol{n}$ par la règle du tire bouchon de Maxwell.

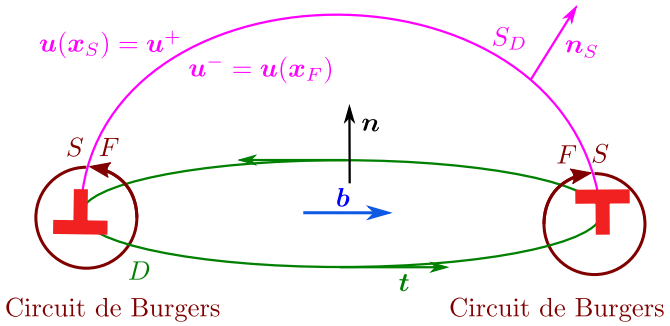


FIGURE 2.10 – Boucle de dislocation D avec sa surface de discontinuité S_D

Discontinuité Lorsque la dislocation forme une boucle, la dislocation est construite par une surface de discontinuité S_D qui s'appuie sur la boucle D. Les valeurs $\boldsymbol{u}^+$ et $\boldsymbol{u}^-$ du champ de déplacement $\boldsymbol{u}$, respectivement au dessus et en dessous de la surface, sont différentes. D'après la figure 2.10, qui montre la position du circuit de Burgers, elles correspondent respectivement à $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}_S)$ et $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}_F)$. Ainsi, d'après l'égalité (2.4), cela montre que, sur la surface S_D, le déplacement connaît une discontinuité égale au vecteur de Burgers :

$$\boldsymbol{u}^+ = \boldsymbol{u}^- - \boldsymbol{b}. \tag{2.5}$$

Un résultat important, montré par Volterra, et démontré en annexe A.2.4, est que les champs mécaniques, déformations élastiques et contraintes, produits par la dislocation sont indépendants de la surface de discontinuité S_D, pourvu que celle-ci s'appuie sur la dislocation D. De plus, ces champs mécaniques sont partout réguliers, sauf à proximité de la ligne de dislocation D. Ce résultat a déjà été mis en évidence sur les exemples du paragraphe 2.1.3.

Finalement, il n'y a pas de véritable discontinuité sur la surface S_D, puisque sa position est arbitraire. Pour éviter d'introduire une discontinuité sur une surface arbitraire, les fondateurs des dislocations (Volterra, Love, Burgers) considéraient le déplacement $\boldsymbol{u}$ comme une fonction multiforme. Pourtant l'utilisation d'une surface de discontinuité S_D peut être pratique : c'est un élément essentiel de la démonstration de Peach et Koehler [113] pour exprimer la force exercée sur une dislocation par un champ de contraintes. Nous procéderons de même, en introduisant une surface de discontinuité.

2.2.2 Le tenseur de Nye

Les propriétés mécaniques d'une dislocation unique sont maintenant décrites. Kosevitch a montré qu'une telle description est possible, à condition d'utiliser des distributions. Ce paragraphe s'appuie sur l'annexe A.2 pour en préciser les notions mathématiques. De plus, la présentation de Kosevitch fait appel à des intuitions physiques, pas toujours démontrées. C'est pourquoi certains résultats sont démontrés par un recours plus rigoureux à la théorie des distributions.

Discontinuité de surface Ce qui précède montre qu'une dislocation est caractérisée par une surface S_D arbitraire, appuyée sur sa ligne D. Sur la surface S_D, le champ de déplacement $\boldsymbol{u}$ est discontinu, avec un saut de déplacement égal au vecteur de Burgers (2.5) :

$$\boldsymbol{u}^+ = \boldsymbol{u}^- - \boldsymbol{b}.$$

D'après la formule (A.24) montrée en annexe, le gradient du déplacement $\boldsymbol{u}$ vaut à la surface :

$$\underline{\mathrm{grad}}(\boldsymbol{u}) = -\boldsymbol{b} \otimes \boldsymbol{n}_S \, \delta_{S_D}. \tag{2.6a}$$

C'est le produit de deux termes :

- la distribution δ_{S_D}, définie en annexe A.2.1, et qui correspond à une concentration uniforme de charges sur la surface S_D ;
- le produit tensoriel $\boldsymbol{b} \otimes \boldsymbol{n}_S$ des vecteurs $\boldsymbol{b}$ et $\boldsymbol{n}_S$, défini (A.1) en annexe.

Distorsion Le gradient du déplacement est également appelé tenseur de distorsion. Dans la suite, il sera noté :

$$\underline{E} = \underline{\mathrm{grad}}(\boldsymbol{u}). \tag{2.6b}$$

En petites déformations, la distorsion se décompose en tenseurs symétrique et antisymétrique, qui correspondent aux déformations et aux rotations :

$$\underline{E} = \underline{\varepsilon} + \underline{\omega} \quad \text{avec} \quad \underline{\varepsilon} = \frac{1}{2}\,(\underline{E} + \underline{E}^{\intercal}) \quad \text{et} \quad \underline{\omega} = \frac{1}{2}\,(\underline{E} - \underline{E}^{\intercal}).$$

D'après les équations (2.6a) et (2.6b) précédentes, la distorsion vaut donc :

$$\underline{E} = -\boldsymbol{b} \otimes \boldsymbol{n}_S \, \delta_{S_D}. \tag{2.6c}$$

Distorsions plastique et élastique La dislocation, qui engendre une discontinuité du champ du déplacement $\boldsymbol{u}$ sur la surface S_D, ne produit pas de discontinuité de contrainte. Pour en rendre compte, la distorsion totale est séparée en distorsions élastique et plastique :

$$\underline{E} = \underline{E}^e + \underline{E}^p. \tag{2.7}$$

Le défaut, localisé sur la surface de discontinuité S_D, est attribué à la plasticité :

$$\underline{\underline{E}}^p = -\boldsymbol{b} \otimes \boldsymbol{n}_S \, \delta_{S_D}. \tag{2.8}$$

Cette distorsion plastique correspond au demi-plan ajouté ou décalé pour produire une dislocation coin ou vis.

Les champs de distorsion totale et élastique sont égaux en dehors de la surface de discontinuité S_D :

$$\underline{\underline{E}}(\boldsymbol{x}) = \underline{\underline{E}}^e(\boldsymbol{x}) \quad \text{lorsque} \quad \boldsymbol{x} \notin S_D. \tag{2.9}$$

Tenseur de Nye Kosevitch montre que les propriétés mécaniques d'une dislocation sont portées par un tenseur le long de la ligne de dislocation D, le tenseur de Nye :

$$\underline{\underline{\alpha}} = \delta_D \, \boldsymbol{b} \otimes \boldsymbol{t}. \tag{2.10}$$

C'est le produit de deux termes :

- la distribution δ_D, définie en annexe A.2.2, et qui correspond à une concentration uniforme de charges sur la ligne de dislocation D ;
- le produit tensoriel $\boldsymbol{b} \otimes \boldsymbol{t}$ du vecteur de Burgers $\boldsymbol{b}$ et du vecteur tangent $\boldsymbol{t}$ à la ligne de dislocation.

Densité La distribution δ_D, qui permet de construire le tenseur de Nye (2.10), va apparaître sur de nombreuses formules de cette section, qui concerne une dislocation unique. Il est donc important de connaître sa nature physique.

Son intégrale sur un volume V donne la longueur de dislocation comprise dans ce volume :

$$L_V = \int_V \delta_D \, \mathrm{d}\boldsymbol{x}.$$

La distribution correspond donc à une longueur (L_V) rapportée à un volume (V), c'est-à-dire à une longueur spécifique (ou volumique), exprimée en m^{-2}.

Lorsque le volume V est suffisamment grand pour englober un grand nombre de dislocations, le rapport :

$$\rho = \frac{L_V}{V} = \frac{1}{V} \int_V \delta_D \, \mathrm{d}\boldsymbol{x} = \langle \delta_D \rangle \,, \tag{2.11}$$

construit comme la moyenne volumique de δ_D, correspond à la longueur totale de dislocations contenues dans ce volume, c'est-à-dire à la densité de dislocations, telle qu'elle est définie en théorie continue des dislocations. La distribution δ_D peut donc être vue comme une densité locale, dont la moyenne sur un grand volume devient la densité de dislocations ρ de la théorie continue des dislocations.

Équation de Kröner Le tenseur de Nye $\underline{\underline{\alpha}}$ est relié à la distorsion élastique par l'équation d'incompatibilité de Kröner :

$$\underline{\mathrm{rot}}(\underline{\underline{E}}^e) = \underline{\underline{\alpha}}. \tag{2.12a}$$

Cette équation fait apparaître le rotationnel à droite du tenseur $\underline{\underline{E}}^e$, dont l'expression (A.8) est donnée en annexe. La démonstration de Kosevitch pour l'équation de Kröner (2.12a) est présentée dans les paragraphes d'annexe A.2.5 et A.2.6. Elle soulève quelques difficultés mathématiques qui y sont également discutées.

Comme la distorsion totale est un gradient (2.6b), et compte tenu de la partition (2.7), l'équation de Kröner peut également s'écrire en fonction de la distorsion plastique :

$$\underline{\underline{\alpha}} = \underline{\mathrm{rot}}(\underline{\mathrm{grad}}(\boldsymbol{u})) - \underline{\mathrm{rot}}(\underline{\underline{E}}^p) = -\underline{\mathrm{rot}}(\underline{\underline{E}}^p). \tag{2.12b}$$

2.2.3 Distorsion plastique associée à la dislocation

Ce paragraphe montre les liens étroits entre le tenseur de Nye et la distorsion plastique qu'il engendre.

Distorsion plastique La surface de discontinuité S_D est arbitraire, pourvu qu'elle s'appuie sur la dislocation D. Pourtant elle porte une distorsion plastique (2.8) :

$$\underline{E}^p = -\boldsymbol{b} \otimes \boldsymbol{n}_S \, \delta_{S_D}.$$

Cela signifie que toute distorsion plastique de cette forme est compatible avec la dislocation. Il n'y a donc pas unicité du champ de distorsion plastique : une partie de cette distorsion est arbitraire.

Équivalence En fait, la distorsion plastique $\underline{E}^p$ n'est pas nécessairement localisée sur une surface de discontinuité. Elle peut être répartie dans l'espace $\mathbb{R}^3$ de manière diffuse. Pour le montrer, il suffit de considérer deux champs de distorsion plastique $\underline{E}^p_1$ et $\underline{E}^p_2$, vérifiant tous deux l'équation de Kröner (2.12b), avec le tenseur de Nye $\underline{\alpha}$ caractéristique de la dislocation D :

$$-\underline{\mathrm{rot}}(\underline{E}^p_1) = -\underline{\mathrm{rot}}(\underline{E}^p_2) = \underline{\alpha}.$$

D'après un résultat d'analyse vectorielle [147], il existe un champ de vecteur $\boldsymbol{\phi}$ tel que :

$$\underline{E}^p_1 - \underline{E}^p_2 = \underline{\mathrm{grad}}(\boldsymbol{\phi}).$$

Le champ de déplacement $\boldsymbol{u}_1$, correspondant à l'équilibre mécanique avec la distorsion $\underline{E}^p_1$, a pour champ de distorsion élastique :

$$\underline{E}^e = \underline{\mathrm{grad}}(\boldsymbol{u}_1) - \underline{E}^p_1 = \underline{\mathrm{grad}}(\boldsymbol{u}_1 + \boldsymbol{\phi}) - \underline{E}^p_2.$$

La deuxième égalité montre que le champ de déplacement $\boldsymbol{u}_2 = \boldsymbol{u}_1 + \boldsymbol{\phi}$, associé au champ de distorsion plastique $\underline{E}^p_2$, conduit à la même distorsion élastique, donc au même équilibre mécanique. Les deux champs $\underline{E}^p_1$ et $\underline{E}^p_2$ sont donc équivalents.

Forme générale Ainsi, pour une dislocation D, de tenseur de Nye $\underline{\alpha}$, tout champ de distorsion plastique $\underline{E}^p$, qui vérifie l'équation de Kröner (2.12b) :

$$-\underline{\mathrm{rot}}(\underline{E}^p) = \underline{\alpha},$$

peut être associée au tenseur de Nye. Deux champs, solutions de cette équation, diffèrent entre eux d'un gradient $\underline{\mathrm{grad}}(\boldsymbol{\phi})$ arbitraire.

Jauge En physique, pour lever un arbitraire, il est classique d'utiliser une jauge, c'est-à-dire une équation supplémentaire. En électromagnétique par exemple, le potentiel vecteur $\boldsymbol{A}$ est tel que le champ magnétique en dérive :

$$\boldsymbol{H} = \mathbf{rot}(\boldsymbol{A}) \tag{2.13}$$

Deux potentiels vecteurs, qui diffèrent d'un gradient :

$$\boldsymbol{A}_2 = \boldsymbol{A}_1 + \mathbf{grad}(\phi)$$

sont équivalents. La jauge de Coulomb :

$$\mathrm{div}(\boldsymbol{A}) = 0.$$

permet alors de déterminer le potentiel vecteur de façon unique.

L'équation (2.13) qui définit le potentiel vecteur, ressemble formellement à l'équation de Kröner (2.12b). Ainsi, pour obtenir un unique champ de distorsion, il suffit d'ajouter la jauge de Coulomb :

$$\mathbf{div}(\underline{E}^p) = \mathbf{0}. \tag{2.14}$$

Détermination L'équation de Kröner (2.12b), la jauge de Coulomb (2.14) et une formule d'analyse vectorielle (A.15) permettent d'écrire :

$$\underline{\mathrm{rot}}(\underline{\alpha}) = -\underline{\mathrm{rot}}(\underline{\mathrm{rot}}(\underline{E}^p)) = -\underline{\mathrm{grad}}(\mathbf{div}(\underline{E}^p)) + \underline{\Delta}(\underline{E}^p) = \underline{\Delta}(\underline{E}^p).$$

Avec la jauge de Coulomb, le champ de distorsion plastique se déduit du tenseur de Nye par résolution de l'équation de Poisson sur un domaine Ω :

$$\underline{\Delta}(\underline{E}^p) = \underline{\mathrm{rot}}(\underline{\alpha}) \quad \text{dans } \Omega, \tag{2.15a}$$

dont la solution est unique avec des conditions aux limites raisonnables, par exemple :

$$\underline{E}^p = \underline{0} \quad \text{sur } \partial\Omega. \tag{2.15b}$$

Biot et Savart Il existe une solution analytique à l'équation de Poisson (2.15), donnée par la formule de Biot et Savart. En magnétostatique, le champ magnétique $\boldsymbol{H}$ produit par un courant $\boldsymbol{j}$ vérifie les équations de Maxwell :

$$\mathbf{rot}(\boldsymbol{H}) = \mu_0\, \boldsymbol{j}, \quad \text{avec} \quad \mathrm{div}(\boldsymbol{H}) = 0, \tag{2.16}$$

où la constante μ_0 désigne la perméabilité magnétique du vide. Le champ magnétique peut alors se calculer par la formule de Biot et Savart :

$$\boldsymbol{H}(\boldsymbol{x}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_V \frac{\boldsymbol{j}(\boldsymbol{y}) \wedge (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y})}{|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}|^3}\, \mathrm{d}\boldsymbol{y}.$$

Les équations (2.16) de magnétostatique ressemblent formellement à l'équation de Kröner (2.12b) et à la jauge de Coulomb (2.14) :

$$\underline{\mathrm{rot}}(\underline{E}^p) = -\underline{\alpha}, \quad \text{avec} \quad \mathbf{div}(\underline{E}^p) = \mathbf{0}.$$

Le champ de distorsion plastique vaut donc :

$$\underline{E}^p(\boldsymbol{x}) = -\frac{1}{4\pi} \int_V \frac{\underline{\alpha}(\boldsymbol{y}) \wedge (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y})}{|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}|^3}\, \mathrm{d}\boldsymbol{y}. \tag{2.17a}$$

Compte tenu de l'expression (2.10) du tenseur de Nye, cette expression s'écrit également comme l'intégrale sur une boucle de dislocation, d'abscisse curviligne s, de point courant $\boldsymbol{x}_D(s)$ et de tangente $\boldsymbol{t}(s)$:

$$\underline{E}^p(\boldsymbol{x}) = -\frac{\boldsymbol{b}}{4\pi} \otimes \oint_D \frac{\boldsymbol{t} \wedge (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_D)}{|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_D|^3}\, \mathrm{d}s. \tag{2.17b}$$

Pure géométrie Dans l'équation de Poisson (2.15), qui calcule la distorsion plastique $\underline{E}^p$ en fonction du tenseur de Nye $\underline{\alpha}$, ou dans sa solution (2.17), aucune constante physique, aucune constante mécanique n'intervient. Cela signifie que les liens qui unissent distorsion plastique et tenseur de Nye sont de nature purement géométrique.

La nature géométrique de ces liens apparaissait clairement au paragraphe précédent, puisque la distorsion plastique se concentrait sur la surface de discontinuité S_D. L'utilisation de la jauge de Coulomb, pour fixer la localisation arbitraire de la surface S_D, ne change rien à l'affaire : dislocation et distorsion plastique sont toujours liées par des liens de nature géométrique ; la distorsion plastique n'est plus localisée sur une surface, mais diluée dans l'espace.

2.2.4 Équilibre mécanique

Nous montrons dans ce paragraphe comment calculer les champs de déformations et de contraintes induit par une dislocation.

Mécanique Une fois la distorsion plastique $\underline{E}^p$ calculée, en résolvant l'équation de Poisson (2.15), ou avec la formule de Biot et Savart (2.17), le calcul des champs de la mécanique devient un calcul élémentaire d'élasticité avec déformation libre imposée $\underline{E}^p$: trouver le champ de déplacement $\boldsymbol{u}$ qui réalise l'équilibre mécanique dans un domaine Ω :

$$\mathbf{div}(\overline{\sigma}) = \mathbf{0}, \quad \text{dans } \Omega, \tag{2.18a}$$

$$\text{avec} \quad \overline{\sigma} = \overline{\overline{C}} : \underline{E}^e, \quad \text{et} \quad \underline{E}^e = \underline{\mathrm{grad}}(\boldsymbol{u}) - \underline{E}^p. \tag{2.18b}$$

Il faut bien sûr ajouter des conditions en limite $\partial\Omega$ du domaine.

Exemple simple La méthode de résolution proposée peut être appliquée aux exemples du paragraphe 2.1.3 : le champ de déplacement autour d'une dislocation rectiligne, coin ou vis en milieu isotrope, peut se décomposer en deux termes (2.1) :

$$\boldsymbol{u} = \boldsymbol{u}_1 + \boldsymbol{u}_2, \quad \text{avec} \quad \boldsymbol{u}_1 = \frac{\theta}{2\,\pi}\,\boldsymbol{b},$$

dont le terme principal $\boldsymbol{u}_1$ est une fonction multiforme, indépendante des constantes mécaniques. Le champ de distorsion élastique, s'écrit :

$$\underline{E}^e = \underline{\mathrm{grad}}(\boldsymbol{u}) = \underline{\mathrm{grad}}(\boldsymbol{u}_1) + \underline{\mathrm{grad}}(\boldsymbol{u}_2).$$

Son terme principal vaut :

$$\underline{\mathrm{grad}}(\boldsymbol{u}_1) = \frac{\boldsymbol{b}\otimes\boldsymbol{e}_\theta}{2\,\pi\,r}, \quad \text{et vérifie} \quad \underline{\mathrm{rot}}\big(\underline{\mathrm{grad}}(\boldsymbol{u}_1)\big) = \boldsymbol{b}\otimes\boldsymbol{e}_z\,\delta_{Oz}.$$

Dans cette écriture, l'axe de la dislocation est noté Oz, et les vecteurs orthoradial et axial, $\boldsymbol{e}_\theta$ et $\boldsymbol{e}_z$. Finalement, la distorsion élastique s'écrit en remplaçant le terme principal par la distorsion plastique $\underline{E}^p$:

$$\underline{E}^e = \underline{\mathrm{grad}}(\boldsymbol{u}_2) - \underline{E}^p, \quad \text{avec} \quad \underline{E}^p = -\frac{\boldsymbol{b}\otimes\boldsymbol{e}_\theta}{2\,\pi\,r}.$$

Le déplacement se réduit alors au déplacement secondaire $\boldsymbol{u}_2$. C'est ainsi que la distorsion plastique, calculée avec la jauge de Coulomb, permet de décrire une dislocation, en évitant d'utiliser une fonction multiforme ou une discontinuité.

FDM En Mécanique des Champs de Dislocations (FDM), le calcul des champs élastiques est un peu différent. Il s'appuie sur une analyse de la distorsion élastique $\underline{E}^e$ proposée par Acharya [1]. D'après la décomposition de Helmholtz, le champ de distorsion élastique $\underline{E}^e$ peut se décomposer en deux composantes, appelées irrotationnelle et solénoïdale en électromagnétisme, et compatible et incompatible en mécanique :

$$\underline{E}^e = \underline{E}^{e\parallel} + \underline{E}^{e\perp}, \quad \text{avec} \quad \underline{E}^{e\parallel} = \underline{\mathrm{grad}}(\boldsymbol{\phi}), \quad \text{et} \quad \underline{E}^{e\perp} = \underline{\mathrm{rot}}(\underline{T}).$$

Ces composantes compatible $\underline{E}^{e\parallel}$ et incompatible $\underline{E}^{e\perp}$ dérivent respectivement d'un champ vectoriel $\boldsymbol{\phi}$ et d'un champ tensoriel $\underline{T}$. En absence de dislocations, la distorsion élastique $\underline{E}^e$ coïncide avec le gradient de déplacement $\underline{\mathrm{grad}}(\boldsymbol{u})$, donc avec sa composante compatible $\underline{E}^{e\parallel}$. La composante incompatible $\underline{E}^{e\perp}$ est donc due à la présence de dislocations.

Identification Fressengeas [40] montre comment calculer les composantes compatible $\underline{E}^{e\parallel}$ et incompatible $\underline{E}^{e\perp}$ dans un domaine Ω, en fonction du tenseur de Nye $\underline{\alpha}$, et de conditions aux limites $\partial\Omega$ raisonnables. La composante incompatible $\underline{E}^{e\perp}$ est solution d'une équation de Poisson :

$$\underline{\Delta}(\underline{E}^{e\perp}) = -\underline{\mathrm{rot}}(\underline{\alpha}) \quad \text{dans } \Omega,$$

et la composante compatible se calcule en cherchant le champ vectoriel $\boldsymbol{\phi}$ qui réalise l'équilibre mécanique :

$$\mathbf{div}(\overline{\sigma}) = \mathbf{0}, \quad \text{dans } \Omega,$$
$$\text{avec} \quad \overline{\sigma} = \overline{\overline{C}} : \underline{E}^{e}, \quad \text{et} \quad \underline{E}^{e} = \underline{E}^{e\parallel} + \underline{E}^{e\perp} = \underline{\mathrm{grad}}(\boldsymbol{\phi}) + \underline{E}^{e\perp}.$$

Ces équations sont les mêmes que l'équation de Poisson (2.15) pour la distorsion plastique et que le système (2.18) d'équilibre mécanique, avec :

$$\underline{E}^{e\perp} = -\underline{E}^{p} \quad \text{et} \quad \boldsymbol{\phi} = \boldsymbol{u}, \quad \text{c'est-à-dire} \quad \underline{E}^{e\parallel} = \underline{\mathrm{grad}}(\boldsymbol{u}) = \underline{E}.$$

Ainsi, dans la décomposition de la FDM, la composante incompatible $\underline{E}^{e\perp}$ correspond à l'opposé de la distorsion plastique $\underline{E}^{p}$, et la composante compatible $\underline{E}^{e\parallel}$ au gradient du déplacement, c'est-à-dire la distorsion totale $\underline{E} = \underline{\mathrm{grad}}(\boldsymbol{u})$.

2.2.5 Déplacement d'une boucle de dislocation

Sous l'action d'un champ de contraintes $\overline{\sigma}$, une ligne de dislocation peut se déplacer avec une vitesse $\boldsymbol{v}$. Nous étudions ici les conditions de ce déplacement.

Création de plasticité Une ligne de dislocation, qui se déplace avec une vitesse $\boldsymbol{v}$, pendant une durée Δt, crée une augmentation ΔS_D de la surface de discontinuité S_D, illustrée sur la figure 2.11.

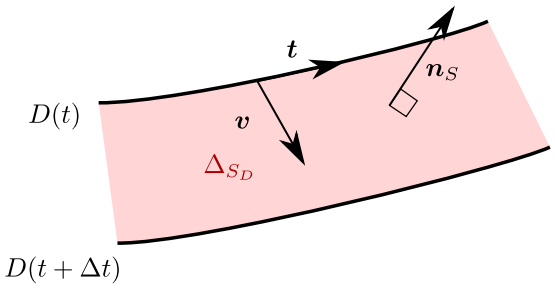


FIGURE 2.11 – Le déplacement de la ligne de dislocation D avec une vitesse $\boldsymbol{v}$ pendant une durée Δt crée une augmentation ΔS_D de la surface de discontinuité

La relation (2.8) montre que cette création de surface de discontinuité s'accompagne d'une augmentation du champ de distorsion plastique :

$$\Delta\underline{E}^{p} = -\boldsymbol{b} \otimes \boldsymbol{n}_S \, \delta_{\Delta S_D}.$$

Nous montrons en annexe (A.2.7), en utilisant les distributions, que lorsque la durée Δt tend vers 0, cette relation devient :

$$\dot{\underline{E}}^{p} = \delta_D \, \boldsymbol{b} \otimes (\boldsymbol{t} \wedge \boldsymbol{v}) = \underline{\alpha} \wedge \boldsymbol{v}. \tag{2.19}$$

Cette équation est très riche. Elle permet de démontrer

1. la formule de Peach et Koehler (voir ci-dessous),
2. loi d'Orowan (2.57) (voir au paragraphe 2.5.1),
3. Elle permet également de formuler la loi d'évolution des dislocations (voir au paragraphe 2.2.6).

Remarque Au paragraphe 2.2.3 précédent, nous avons noté que la surface de discontinuité S_D, ainsi que la distorsion plastique qui lui est associée, est arbitraire. Or, dans le raisonnement précédent, qui permet de calculer la création de plasticité (2.19), cette surface réapparaît. En fait, ce n'est pas la surface de discontinuité S_D qui compte, mais son augmentation, et la ligne de dislocation D suffit pour cela. C'est pourquoi la création de plasticité (2.19) ne dépend que du tenseur de Nye.

Augmentation de volume La création de distorsion plastique (2.19) peut s'accompagner d'une augmentation de volume, qui, d'après la propriété de la trace (A.2), vaut :

$$\mathrm{tr}(\underline{\dot{E}}^p) = \delta_D \, \boldsymbol{b}^\intercal.(\boldsymbol{t} \wedge \boldsymbol{v}).$$

La terme $\boldsymbol{b}^\intercal.(\boldsymbol{t} \wedge \boldsymbol{v})$ est le produit mixte des trois vecteurs $\boldsymbol{b}$, $\boldsymbol{t}$ et $\boldsymbol{v}$. Il est nul lorsque les trois vecteurs appartiennent à un même plan. Deux situations peuvent donc se produire :

1. La vitesse $\boldsymbol{v}$ reste dans le plan défini par le vecteur de Burgers $\boldsymbol{b}$ et la ligne de dislocation $\boldsymbol{t}$. Il n'y a pas d'augmentation de volume. Le mouvement des dislocations est appelé glissement, c'est pourquoi le plan des vecteurs $\boldsymbol{b}$ et $\boldsymbol{t}$ est appelé plan de glissement.
2. Le mouvement se fait dans la direction normale au plan de glissement. Il devrait s'accompagner d'une augmentation de volume, ce qui n'est pas possible. L'augmentation de volume doit être compensée par une diffusion de lacunes dans le matériau. Ce mouvement est appelé montée, et il est contrôlé par la diffusion.

Force de Peach et Koehler Sous l'action des contraintes $\overline{\sigma}$, le déplacement de la ligne de dislocation, d'une vitesse $\boldsymbol{v}$, s'accompagne d'une dissipation de puissance, qui s'écrit en fonction de l'augmentation de distorsion plastique (2.19) :

$$W_V = \overline{\sigma} : \underline{\dot{E}}^p = \delta_D \, (\overline{\sigma}.\boldsymbol{b})^\intercal.(\boldsymbol{t} \wedge \boldsymbol{v}).$$

Cette dissipation W_V est une puissance volumique, à cause de la multiplication par la distribution δ_D. Pour trouver la puissance dissipée par un élément infinitésimal δl de dislocation, il suffit de l'intégrer sur un volume δV qui contient la longueur δl :

$$W_{\delta l} = \int_{\delta V} W_V \, \mathrm{d}\boldsymbol{x} = (\overline{\sigma}.\boldsymbol{b})^\intercal.(\boldsymbol{t} \wedge \boldsymbol{v}) \int_{\delta V} \delta_D \, \mathrm{d}\boldsymbol{x} = (\overline{\sigma}.\boldsymbol{b})^\intercal.(\boldsymbol{t} \wedge \boldsymbol{v}) \, \delta l,$$

D'après les propriétés du produit mixte (A.5), la dissipation $W_{\delta l}$ s'écrit comme le produit scalaire d'une force $\boldsymbol{f}_{PK}$ par la vitesse de déplacement $\boldsymbol{v}$:

$$W_{\delta l} = \boldsymbol{f}_{PK}^\intercal.\boldsymbol{v} \, \delta l, \quad \text{avec} \quad \boldsymbol{f}_{PK} = (\overline{\sigma}.\boldsymbol{b}) \wedge \boldsymbol{t}. \tag{2.20}$$

Cette force correspond donc à la force linéique exercée par le champ de contrainte sur chaque ligne de dislocation : c'est la loi de Peach et Koehler [113].

Cette démonstration très simple de la loi de Peach et Koehler, qui s'appuie sur l'équation de création de plasticité (2.19), est due à Kosevitch.

Décomposition C'est la force de Peach et Koehler qui détermine la direction du mouvement d'une dislocation. Il est intéressant de la décomposer suivant les directions de glissement et de montée. La projection de la force (2.20) dans une direction de glissement ou de montée, caractérisée par un vecteur $\boldsymbol{n}$ unitaire, peut se calculer avec la propriété (A.5) du produit mixte :

$$\boldsymbol{f}_{PK}^\intercal.\boldsymbol{n} = (\overline{\sigma}.\boldsymbol{b})^\intercal.(\boldsymbol{t} \wedge \boldsymbol{n}). \tag{2.21}$$

Il reste à appliquer cette formule pour le glissement et la montée :

Glissement la force de Peach et Koehler est par construction orthogonale à la ligne de dislocation, c'est-à-dire à son vecteur tangent $\boldsymbol{t}$. Sa composante dans le plan de glissement est donc dirigée suivant le vecteur :

$$\boldsymbol{n} = \frac{(\boldsymbol{b} \wedge \boldsymbol{t})}{|\boldsymbol{b} \wedge \boldsymbol{t}|} \wedge \boldsymbol{t} = \frac{(\boldsymbol{b}^{\intercal}.\boldsymbol{t})\,\boldsymbol{t} - \boldsymbol{b}}{|\boldsymbol{b} \wedge \boldsymbol{t}|},$$

dont l'expression a été simplifiée avec la relation (A.4). D'après l'expression (2.21), la composante de la force suivant ce vecteur vaut :

$$f_g = \boldsymbol{f}_{PK}^{\intercal}.\boldsymbol{n} = (\overline{\sigma}.\boldsymbol{b})^{\intercal}.\frac{\boldsymbol{b} \wedge \boldsymbol{t}}{|\boldsymbol{b} \wedge \boldsymbol{t}|} = b\,\tau_g \quad \text{avec} \quad \tau_g = \overline{\sigma} : \underline{\beta} \quad \text{et} \quad \underline{\beta} = \frac{\boldsymbol{b}}{b} \otimes \frac{\boldsymbol{b} \wedge \boldsymbol{t}}{|\boldsymbol{b} \wedge \boldsymbol{t}|}. \tag{2.22}$$

Cette expression fait apparaître le tenseur d'orientation $\underline{\beta}$ du plan de glissement et la contrainte résolue de glissement τ_g.

Montée La direction de montée est orthogonale au plan de glissement :

$$\boldsymbol{n} = \frac{\boldsymbol{b} \wedge \boldsymbol{t}}{|\boldsymbol{b} \wedge \boldsymbol{t}|},$$

ce qui donne pour la composante (2.21) de la force de Peach et Koehler :

$$f_m = \boldsymbol{f}_{PK}^{\intercal}.\boldsymbol{n} = b\,\tau_m \quad \text{avec} \quad \tau_m = \overline{\sigma} : \frac{\boldsymbol{b}}{b} \otimes \frac{\boldsymbol{t} \wedge (\boldsymbol{b} \wedge \boldsymbol{t})}{|\boldsymbol{b} \wedge \boldsymbol{t}|}.$$

Contrairement au cas du glissement, la contrainte résolue de montée τ_m dépend du vecteur $\boldsymbol{t}$, donc du point courant sur la boucle de dislocation.

2.2.6 Évolution du tenseur de Nye

Le mouvement de la dislocation modifie le tenseur de Nye. L'évolution de ce tenseur peut se calculer en combinant l'équation (2.19) de création de distorsion plastique, à l'équation de Kröner (2.12b) :

$$\dot{\underline{\alpha}} = -\underline{\mathrm{rot}}(\underline{\alpha} \wedge \boldsymbol{v}). \tag{2.23}$$

Cette équation cache une équation de transport, qu'il faut mettre en évidence.

Nouvelle formulation Comme le tenseur de Nye est un rotationnel (2.10), il vérifie :

$$\mathbf{div}(\underline{\alpha}) = 0, \quad \text{c'est-à-dire} \quad \mathrm{div}(\delta_D\,\boldsymbol{t}) = 0.$$

Cette équation, combinée aux relations d'analyse vectorielles (A.9) et (A.11), transforme l'équation d'évolution (2.23) en :

$$\begin{aligned}\dot{\underline{\alpha}} &= -\boldsymbol{b} \otimes \Big(\boldsymbol{v}.\mathbf{grad}(\delta_D\,\boldsymbol{t}) - \boldsymbol{v}\ \mathrm{div}(\delta_D\,\boldsymbol{t}) + \delta_D\,\boldsymbol{t}.\Big(\mathrm{div}(\boldsymbol{v})\,\underline{I} - \mathbf{grad}(\boldsymbol{v})\Big)\Big) \\ &= -\boldsymbol{v}.\mathbf{grad}(\underline{\alpha}) - \underline{\alpha}.\Big(\mathrm{div}(\boldsymbol{v})\,\underline{I} - \underline{\mathrm{grad}}(\boldsymbol{v})\Big).\end{aligned}$$

C'est l'équation de transport du tenseur de Nye $\underline{\alpha}$ par la vitesse $\boldsymbol{v}$, qui peut s'écrire comme une dérivée le long de la ligne de courant :

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\underline{\alpha} = \dot{\underline{\alpha}} + \boldsymbol{v}.\mathbf{grad}(\underline{\alpha}) = -\underline{\alpha}.\Big(\mathrm{div}(\boldsymbol{v})\,\underline{I} - \underline{\mathrm{grad}}(\boldsymbol{v})\Big).$$

Le membre de droite de cette équation indique une évolution du tenseur lors de son transport : la ligne de dislocation peut en effet s'élargir ou se rétrécir lorsque la vitesse $\boldsymbol{v}$ n'est pas uniforme.

Bilan La section qui se termine a décrit les propriétés élémentaires d'une ligne de dislocation, avec de nombreuses équations. Celles-ci peuvent se résumer simplement : la dislocation est caractérisée par un tenseur de Nye (2.10) :

$$\underline{\alpha} = \delta_D \, \boldsymbol{b} \otimes \boldsymbol{t},$$

qui agit sur le cristal deux manières :

1. Il est associé à un champ de distorsion plastique $\underline{E}^p$, qui peut se calculer par la formule de Biot et Savart (2.17) :

   $$\underline{E}^p(\boldsymbol{x}) = -\frac{1}{4\pi} \int_V \frac{\underline{\alpha}(\boldsymbol{y}) \wedge (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y})}{|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}|^3} \, \mathrm{d}\boldsymbol{y},$$

   et qui perturbe les champs de distorsion élastique $\underline{E}^e$ et de contraintes $\overline{\sigma}$ lors du calcul mécanique (2.18). Le réseau cristallin en est localement déformé.

2. Un champ de contraintes $\overline{\sigma}$ exerce une force (2.20) sur la dislocation :

   $$\boldsymbol{f}_{PK} = (\overline{\sigma}.\boldsymbol{b}) \wedge \boldsymbol{t},$$

   qui peut la déplacer avec une vitesse $\boldsymbol{v}$. Cela produit une évolution de la distorsion plastique (2.19) et du tenseur de Nye (2.23) :

   $$\dot{\underline{E}}^p = \underline{\alpha} \wedge \boldsymbol{v}, \quad \text{et} \quad \dot{\underline{\alpha}} = -\underline{\mathrm{rot}}(\underline{\alpha} \wedge \boldsymbol{v}).$$

2.3 Glissement sur les systèmes cristallographiques

La boucle de dislocation, décrite en section précédente avec ses propriétés élémentaires, est maintenant décrite en termes cristallographiques.

2.3.1 Systèmes de glissement

Les systèmes de glissement de l'UO_2 sont décrits dans ce paragraphe, après un rappel sur les notations en cristallographie.

Directions cristallines Un réseau cristallin est construit comme la répétition périodique d'une maille élémentaire, de vecteurs de base $\boldsymbol{a}', \boldsymbol{b}', \boldsymbol{c}'$. En cristallographie, il est décrit par un réseau de Bravais, dont les nœuds $\boldsymbol{x}$ sont situés sur des indices entiers, (u, v, w), du réseau :

$$\boldsymbol{x} = u \, \boldsymbol{a}' + v \, \boldsymbol{b}' + w \, \boldsymbol{c}'.$$

Toute direction cristalline s'écrit de même. Les indices qui la caractérisent sont notés entre crochets $[uvw]$ et sont les indices de Miller de la direction. Les indices négatifs sont notés avec une barre au-dessus, par exemple $[\bar{u}vw]$ pour désigner $[-uvw]$.

Plans cristallins Chaque plan cristallin est défini par sa normale $\boldsymbol{n}$. Pour un réseau de Bravais, cette normale s'écrit, avec des indices entiers (h, k, l) :

$$\boldsymbol{n} = h \, \boldsymbol{a}^\star + k \, \boldsymbol{b}^\star + l \, \boldsymbol{c}^\star,$$

où les vecteurs $\boldsymbol{a}^\star, \boldsymbol{b}^\star, \boldsymbol{c}^\star$ sont les vecteurs de la base duale de la base directe $\boldsymbol{a}', \boldsymbol{b}', \boldsymbol{c}'$. Ces trois indices qui caractérisent la direction $\boldsymbol{n}$ sont les indices de Miller du plan, et sont notés avec des parenthèses (hkl). Les indices négatifs sont également notés avec une barre au-dessus.

Système de glissement Une boucle de dislocation, de vecteur de Burgers $\boldsymbol{b}$, est située dans un plan cristallographique, appelé plan de glissement. Le vecteur de Burgers, appartient au plan de glissement. Le système de glissement est caractérisé par le plan de glissement, de normale $\boldsymbol{n}$, et par la direction $\boldsymbol{m}$ du vecteur de Burgers. Ces vecteurs sont orthogonaux, comme l'illustre la figure 2.12.

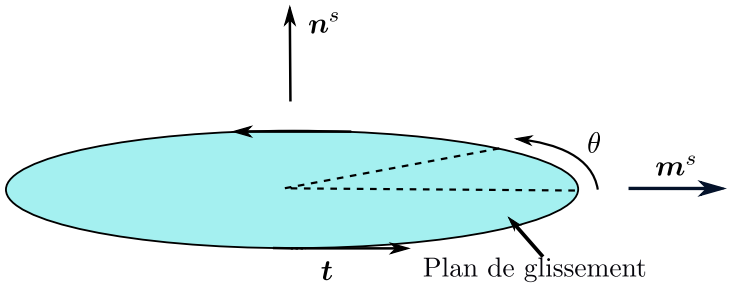


FIGURE 2.12 – Boucle de dislocations dans un plan de glissement

En indices de Miller, ces vecteurs orthogonaux $\boldsymbol{m}$ et $\boldsymbol{n}$ sont proportionnels aux directions $[uvw]$ (hkl), et le système est noté par la combinaison $[uvw](hkl)$. Du fait de la symétrie cubique de l'UO_2, certains systèmes de glissement se correspondent, et sont regroupés en familles. Chaque famille, notée $\langle uvw\rangle\{hkl\}$, regroupe des systèmes équivalents de type $[uvw](hkl)$.

Vecteur de Burgers Des travaux réalisés au moyen de techniques de microscopie [7, 16, 122] comme le MET, ont permis de déterminer le vecteur de Burgers $\boldsymbol{b}$ de l'UO_2. Il est porté par la famille de directions $\langle 110\rangle$. Il s'écrit en fonction du paramètre de maille a_0 :

$$\boldsymbol{b} = \frac{a_0}{2}\langle 110\rangle, \quad \text{de norme} \quad b = |\boldsymbol{b}| = \frac{a_0}{\sqrt{2}}.$$

Deux familles Dans l'UO_2, des observations expérimentales (cf. figure 2.13) ont montré que les dislocations peuvent glisser, suivant deux ou trois familles de systèmes de glissement [122, 160, 77]. Les deux premières familles, respectivement $\langle 110\rangle\{100\}$ et $\langle 110\rangle\{110\}$, sont les plus couramment observées. Par symétrie cubique de la maille UO_2, elles se développent en 6 systèmes de glissement chacune, classés dans le tableau 2.1 ci-dessous.

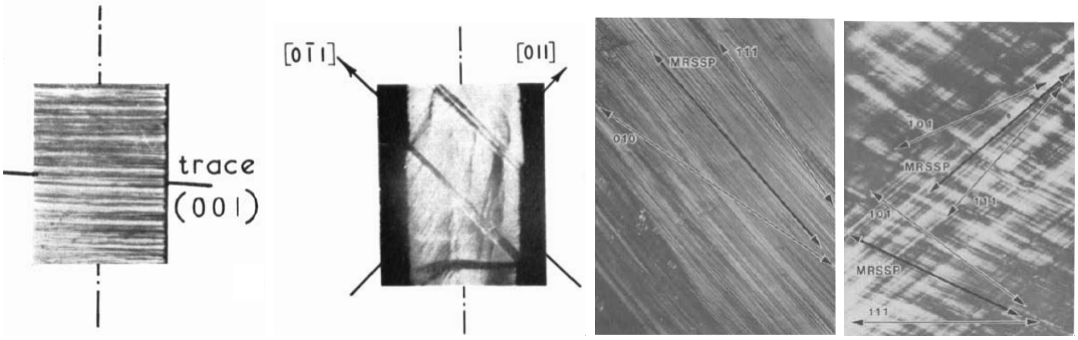
Troisième famille Certains auteurs [129, 64, 5] proposent une troisième famille, $\langle 110\rangle\{111\}$, regroupant 12 systèmes, présentés dans le tableau 2.1. Cette famille peut être vue comme une combinaison des deux premières, puisque chaque normale $\boldsymbol{n}_{3s}$ d'un système de cette famille peut s'écrire comme la combinaison de normales $\boldsymbol{n}_{1s}$ et $\boldsymbol{n}_{2s}$ de systèmes appartenant aux deux premières familles :

$$\boldsymbol{n}_{3s} = \frac{1}{\sqrt{3}}\,\boldsymbol{n}_{1s} + \sqrt{\frac{2}{3}}\,\boldsymbol{n}_{2s} \quad \text{ou} \quad \boldsymbol{n}_{3s} = \frac{1}{\sqrt{3}}\,\boldsymbol{n}_{1s} - \sqrt{\frac{2}{3}}\,\boldsymbol{n}_{2s}.$$

Référentiel Finalement, un système de glissement s est caractérisé par deux vecteurs orthogonaux, imposés par la cristallographie :

- un vecteur unitaire $\boldsymbol{m}^s$ dans la direction $[uvw]$, parallèle au vecteur de Burgers ;
- et un vecteur unitaire $\boldsymbol{n}^s$ dans la direction (hkl), normal au plan de glissement.

L'orientation de ces deux vecteurs est arbitraire. Ils sont complétés du vecteur $\boldsymbol{n}^s \wedge \boldsymbol{m}^s$ pour former un trièdre direct $(\boldsymbol{m}^s, \boldsymbol{n}^s \wedge \boldsymbol{m}^s, \boldsymbol{n}^s)$.



(a) (b) (c) (d)

FIGURE 2.13 – Les trois modes de glissement dans l'UO_2 observés expérimentalement. (a) et (b) : observation de la première et la deuxième familles par Sawbridge et Skyes [129]. (c) et (d) observation de la troisième famille combinée avec la première et la deuxième familles respectivement par Keller et al. [64]

Famille 1 $\langle 110\rangle\{100\}$	
Direction	Plan
$[0\,1\,1]$	$(1\,0\,0)$
$[0\,1\,\bar{1}]$	$(1\,0\,0)$
$[1\,0\,1]$	$(0\,1\,0)$
$[\bar{1}\,0\,1]$	$(0\,1\,0)$
$[1\,1\,0]$	$(0\,0\,1)$
$[1\,\bar{1}\,0]$	$(0\,0\,1)$

Famille 2 $\langle 110\rangle\{110\}$	
Direction	Plan
$[0\,1\,1]$	$(0\,1\,\bar{1})$
$[0\,1\,\bar{1}]$	$(0\,1\,1)$
$[1\,0\,1]$	$(\bar{1}\,0\,1)$
$[\bar{1}\,0\,1]$	$(1\,0\,1)$
$[1\,1\,0]$	$(1\,\bar{1}\,0)$
$[1\,\bar{1}\,0]$	$(1\,1\,0)$

Famille 3 $\langle 110\rangle\{111\}$	
Direction	Plan
$[0\,1\,1]$	$(1\,1\,\bar{1})$
$[0\,1\,1]$	$(1\,\bar{1}\,1)$
$[0\,1\,\bar{1}]$	$(1\,1\,1)$
$[0\,1\,\bar{1}]$	$(1\,\bar{1}\,\bar{1})$
$[1\,0\,1]$	$(\bar{1}\,1\,1)$
$[1\,0\,1]$	$(1\,1\,\bar{1})$
$[\bar{1}\,0\,1]$	$(1\,1\,1)$
$[\bar{1}\,0\,1]$	$(\bar{1}\,1\,\bar{1})$
$[1\,1\,0]$	$(1\,\bar{1}\,1)$
$[1\,1\,0]$	$(\bar{1}\,1\,1)$
$[1\,\bar{1}\,0]$	$(1\,1\,1)$
$[1\,\bar{1}\,0]$	$(\bar{1}\,\bar{1}\,1)$

TABLE 2.1 – Liste des systèmes de glissement des dislocations dans l'UO_2, par famille

2.3.2 La boucle de dislocation dans son système

Une boucle de dislocation est décrite dans le référentiel de son système de glissement s.

Boucle de dislocations L'orientation d'une boucle de dislocations, illustrée en figure 2.12, dépend des deux vecteurs $\boldsymbol{m}^s$ et $\boldsymbol{n}^s$ qui caractérisent le système, et dont l'orientation est arbitraire :

- Le parcours de la boucle, donc l'orientation de son vecteur tangent $\boldsymbol{t}$, est imposé par la normale $\boldsymbol{n}^s$ au plan de glissement, de façon à vérifier la règle du tire bouchon de Maxwell.
- Le vecteur de Burgers $\boldsymbol{b}^s$ est parallèle au vecteur $\boldsymbol{m}^s$, il s'écrit donc :

$$\boldsymbol{b}^s = \epsilon\, b\, \boldsymbol{m}^s \quad \text{avec} \quad \epsilon = \pm 1, \tag{2.24}$$

  avec un coefficient ϵ qui traduit l'orientation arbitraire du vecteur $\boldsymbol{m}^s$. Avec ce coefficient arbitraire, les deux conventions d'orientation des boucles, FS/RH et SF/RH, se rejoignent et conduisent aux mêmes formules.

Angle La boucle peut être décrite par un angle θ, comme sur la figure 2.12, et le vecteur tangent $\boldsymbol{t}$ qui parcourt la boucle vérifie alors :

$$\boldsymbol{t} = \cos(\theta)\,(\boldsymbol{n}^s \wedge \boldsymbol{m}^s) - \sin(\theta)\,\boldsymbol{m}^s. \tag{2.25}$$

Avec les quantités ϱ_c^s et ϱ_v^s, définies (2.3) pour préciser le signe de la dislocation, ce vecteur s'écrit également :

$$\boldsymbol{t} = -\epsilon\,\varrho_c^s\,(\boldsymbol{n}^s \wedge \boldsymbol{m}^s) + \epsilon\,\varrho_v^s\,\boldsymbol{m}^s, \tag{2.26a}$$

$$\text{avec} \quad \varrho_c^s = -\epsilon\,\cos(\theta) \quad \text{et} \quad \varrho_v^s = -\epsilon\,\sin(\theta). \tag{2.26b}$$

Décomposition Les quantités ϱ_c^s et ϱ_v^s ont été définies plus haut pour déterminer le signe des dislocations coin ou vis. Dans le cas général, elles correspondent à la décomposition de toute partie d'une boucle de dislocation en composantes coin ϱ_c^s et vis ϱ_v^s. Sur une boucle de dislocation, elles changent de signe. Leurs sommes s'annulent sur le parcours de la boucle :

$$\int_D \varrho_c^s\,\mathrm{d}s = 0, \quad \int_D \varrho_v^s\,\mathrm{d}s = 0, \quad \text{car} \quad \int_D \boldsymbol{t}\,\mathrm{d}s = 0.$$

Avec ces notations, le tenseur de Nye (2.10) s'écrit :

$$\underline{\alpha} = \epsilon\, b\, \boldsymbol{m}^s \otimes \boldsymbol{t}\,\delta_D = b\left(-\varrho_c^s\,\underline{\eta}^s + \varrho_v^s\,\underline{\gamma}^s\right)\delta_D, \tag{2.27a}$$

$$\text{avec} \quad \underline{\gamma}^s = \boldsymbol{m}^s \otimes \boldsymbol{m}^s \quad \text{et} \quad \underline{\eta}^s = \boldsymbol{m}^s \otimes (\boldsymbol{n}^s \wedge \boldsymbol{m}^s). \tag{2.27b}$$

Force Ces nouvelles expressions (2.26) transforment la force de Peach et Koehler (2.20) en :

$$\boldsymbol{f}_{PK} = b\,(\overline{\sigma}.\boldsymbol{m}^s) \wedge (-\varrho_c^s\,(\boldsymbol{n}^s \wedge \boldsymbol{m}^s) + \varrho_v^s\,\boldsymbol{m}^s),$$

Sa décomposition sur les trois vecteurs de base :

$$\boldsymbol{f}_{PK} = f_c^s\,\boldsymbol{m}^s + f_v^s\,(\boldsymbol{n}^s \wedge \boldsymbol{m}^s) + f_m^s\,\boldsymbol{n}^s,$$

est une combinaison de composantes de glissement et de montée :

- Les composantes de glissement font apparaître les contributions des parties coin et vis de la dislocation :

$$f_c^s = b\,\varrho_c^s\,\tau_g^s, \quad \text{et} \quad f_v^s = b\,\varrho_v^s\,\tau_g^s, \tag{2.28a}$$

avec la contrainte résolue de glissement :

$$\tau_g^s = \overline{\sigma} : \underline{\beta}^s, \tag{2.28b}$$

construite sur le tenseur d'orientation du système s :

$$\underline{\beta}^s = \boldsymbol{m}^s \otimes \boldsymbol{n}^s. \tag{2.28c}$$

- La composante de montée s'écrit avec le vecteur tangent $\boldsymbol{t}$ de la ligne de dislocation :

$$f_m^s = \overline{\sigma} : \boldsymbol{b}^s \otimes (\boldsymbol{t} \wedge \boldsymbol{n}^s) = -b\,(\varrho_c^s\,\tau_\gamma^s + \varrho_v^s\,\tau_\eta^s), \tag{2.29a}$$

et fait intervenir les parties coin et vis de la dislocation. L'expression (2.29a) fait intervenir deux contraintes résolues pour la montée des coin et des vis :

$$\tau_\gamma^s = \overline{\sigma} : \underline{\gamma}^s \quad \text{et} \quad \tau_\eta^s = \overline{\sigma} : \underline{\eta}^s, \tag{2.29b}$$

construites sur les tenseurs $\underline{\gamma}^s$ et $\underline{\eta}^s$, définis plus haut (2.27) :

$$\underline{\gamma}^s = \boldsymbol{m}^s \otimes \boldsymbol{m}^s \quad \text{et} \quad \underline{\eta}^s = \boldsymbol{m}^s \otimes (\boldsymbol{n}^s \wedge \boldsymbol{m}^s),$$

qui sont pour la montée l'équivalent du tenseur d'orientation β^s.

Distorsion plastique Sous l'action de la force de Peach et Koehler, les morceaux de la dislocation se déplacent avec une vitesse :

$$\boldsymbol{v}^s = v_c^s\,\boldsymbol{m}^s + v_v^s\,(\boldsymbol{n}^s \wedge \boldsymbol{m}^s) + v_m^s\,\boldsymbol{n}^s,$$

dont les composantes v_i^s correspondent aux composantes f_i de la force $\boldsymbol{f}_{PK}$. Ce déplacement induit un accroissement (2.19) de la distorsion plastique, qui d'après les formules (2.26) vaut :

$$\dot{\underline{E}}^{p,s} = \Big(b\,(v_c^s\,\varrho_c^s + v_v^s\,\varrho_v^s)\,\underline{\beta}^s + v_m^s\,\boldsymbol{b}^s \otimes (\boldsymbol{t} \wedge \boldsymbol{n}^s)\Big)\,\delta_D, \tag{2.30a}$$

$$= b\,\Big((v_c^s\,\varrho_c^s + v_v^s\,\varrho_v^s)\,\underline{\beta}^s - v_m^s\,(\varrho_c^s\,\underline{\gamma}^s + \varrho_v^s\,\underline{\eta}^s)\Big)\,\delta_D. \tag{2.30b}$$

Les propriétés des tenseurs, qui se démontrent avec la formule (A.2) :

$$\mathrm{tr}(\underline{\beta}^s) = 0, \qquad \mathrm{tr}(\underline{\gamma}^s) = 1, \qquad \mathrm{tr}(\underline{\eta}^s) = 0,$$

permettent de calculer l'accroissement de volume induit par l'évolution de la distorsion plastique :

$$\mathrm{tr}(\dot{\underline{E}}^{p,s}) = -\varrho_c^s\,v_m^s\,b\,\delta_D. \tag{2.31}$$

Ainsi, comme cela a été noté ci-dessus, seule la montée de la composante coin de la dislocation conduit à une augmentation de volume.

Vitesses Lors du parcours d'une boucle de dislocations, les composantes ϱ_c^s et ϱ_v^s, définies (2.3) pour marquer le signe des parties coin et vis, changent de signe. Il en est de même des composantes de la force de Peach et Koehler $\boldsymbol{f}_{PK}$, d'après les relations (2.28) et (2.29a). Or cette force est le moteur du déplacement de morceaux de dislocation : leur vitesse $\boldsymbol{v}^s$ sera dirigée dans la même direction que la force, donc ses composantes changeront de signe avec les composantes ϱ_c^s et ϱ_v^s. C'est ce qui est illustré sur la figure 2.14.

Ainsi les signes des expressions suivantes, concernant le glissement, sont positifs :

$$v_c^s\,\varrho_c^s \geq 0, \quad v_v^s\,\varrho_v^s \geq 0,$$

ce qui montre, d'après l'expression (2.30), que bien que circulant en sens opposés, les morceaux de dislocations de signes opposés contribuent au même accroissement de distorsion plastique. Ce résultat est également vrai pour la montée, mais il sera mis en évidence en section suivante.

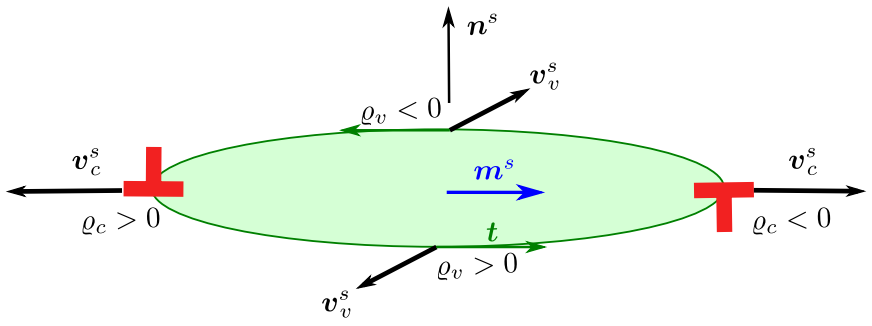


FIGURE 2.14 – Le sens de glissement des morceaux de dislocation dépend du signe de leurs composantes coin ϱ_c^s et vis ϱ_s^s.

2.4 Montée des dislocations

La montée des dislocations est plus difficile à décrire que le glissement, à cause du changement de volume qu'elle implique. Elle fait donc intervenir une diffusion de lacunes pour compenser ce changement. Elle a été décrite et modélisée par Mott [96] et Weertman [148, 149], et figure maintenant dans des ouvrages de références tels que celui de Hirth et Lothe [6].

2.4.1 Force osmotique

La montée modifie la concentration de lacunes au voisinage du cœur de la dislocation. Il en résulte une force osmotique qui bloque la montée.

Montée Des contraintes $\overline{\sigma}$ exercent sur toute partie d'une dislocation une force de Peach et Koehler, dont la composante (2.29a) orthogonale au plan de glissement vaut :

$$f_m^s = \overline{\sigma} : \boldsymbol{b}^s \otimes (\boldsymbol{t} \wedge \boldsymbol{n}^s).$$

Cette contrainte peut entraîner la dislocation à monter avec une vitesse normale au plan de glissement :

$$\boldsymbol{v}^s = v_m^s \, \boldsymbol{n}^s.$$

Pour vérifier l'inégalité de Clausius-Duhem, les composantes de la vitesse v_m^s et de la force f_m^s ont le même signe.

Accroissement de volume La montée de la dislocation provoque un accroissement de distorsion plastique de valeur (2.30) :

$$\underline{\dot{E}}^{p,s} = v_m^s \, \boldsymbol{b}^s \otimes (\boldsymbol{t} \wedge \boldsymbol{n}^s) \, \delta_D,$$

accompagné d'un accroissement de volume de valeur (2.31) :

$$\mathrm{tr}(\underline{\dot{E}}^{p,s}) = v_m^s \, b_c^s \, \delta_D \quad \text{avec} \quad b_c^s = (\boldsymbol{t} \wedge \boldsymbol{n}^s)^\intercal . \boldsymbol{b}^s = -\varrho_c^s \, b. \tag{2.32}$$

La longueur b_c^s, introduite par Hirth et Lothe [6], correspond à la projection du vecteur de Burgers $\boldsymbol{b}^s$ orthogonalement à la ligne de dislocation. Cette partie b_c^s du vecteur de Burgers est liée à la composante coin de la dislocation, qui seule provoque une augmentation de volume.

Lors de la montée, l'augmentation de volume d'un volume infinitésimal δV, contenant une longueur δl de distribution vaut :

$$\delta \dot{V} = \int_{\delta V} \mathrm{tr}(\underline{\dot{E}}^{p,s}) \, \mathrm{d}\boldsymbol{x} = v_m^s \, \delta S \quad \text{avec} \quad \delta S = b_c^s \, \delta l. \tag{2.33}$$

Cette augmentation de volume correspond au balayage du matériau par la surface infinitésimale δS, avec une vitesse v_m^s.

Force osmotique Lorsque la dislocation monte, l'augmentation de volume associée est rendue possible en absorbant de la matière autour d'elle, c'est-à-dire en créant des lacunes. La montée de la dislocation s'accompagne donc d'une augmentation de la concentration c_d de lacunes dans son voisinage, ce qui crée une pression osmotique :

$$P = \frac{k_B\,T}{\Omega_a}\,\ln\left(\frac{c_d}{c_0^r}\right), \tag{2.34}$$

où c_0^r est une concentration de référence, et Ω_a le volume atomique. La définition précise de la concentration de référence c_0^r fera l'objet du paragraphe 2.4.2 suivant.

Cette pression, appliquée à la surface δS, définie ci-dessus (2.33), crée, sur la longueur δl de dislocation, une force osmotique qui s'oppose à la montée :

$$\boldsymbol{f}_{BH}\,\delta l = -P\,\delta S\,\boldsymbol{n}^s, \quad \text{avec} \quad \boldsymbol{f}_{BH} = -b_c^s\,\frac{k_B\,T}{\Omega_a}\,\ln\left(\frac{c_d}{c_0^r}\right)\,\boldsymbol{n}^s = -\frac{k_B\,T}{\Omega_a}\,\ln\left(\frac{c_d}{c_0^r}\right)\,(\boldsymbol{b}^s \wedge \boldsymbol{t}). \tag{2.35}$$

C'est la force de Bardeen Herring [11].

Équilibre Plus la dislocation se déplace, plus l'écart de concentration c/c_0^r augmente, et avec elle, la force osmotique. Très vite, la force osmotique annule la force de Peach et Koehler :

$$0 = f_m^s - b_c^s\,\frac{k_B\,T}{\Omega_a}\,\ln\left(\frac{c_d}{c_0^r}\right), \tag{2.36}$$

et la dislocation se bloque. Ainsi, la pression osmotique empêche la montée de la dislocation, parce qu'il n'est pas possible de créer de matière dans le matériau.

L'équation d'équilibre (2.36) permet de calculer la concentration de lacunes à l'équilibre, près de la dislocation :

$$c_d = c_0^r\,\exp\left(\frac{\Omega_a\,f_m^s}{k_B\,T\,b_c^s}\right). \tag{2.37}$$

2.4.2 Référence de la pression osmotique

La concentration de référence c_0^r, qui définit la pression osmotique doit être prise avec précaution, comme nous le montrons dans ce paragraphe.

Cristal sous pression Lorsque la contrainte correspond à une pression P, la force de Peach et Koehler (2.29a) prend une forme simple :

$$\overline{\sigma} = -P\,\overline{I}, \quad \text{donc} \quad f_m^s = \overline{\sigma} : \boldsymbol{b}^s \otimes (\boldsymbol{t} \wedge \boldsymbol{n}^s) = -P\,b_c^s = \varrho_c^s\,b\,P.$$

La concentration de lacunes, au cœur de la dislocation, donnée par l'équation (2.37), devient simplement :

$$c_d = c_0^r\,\exp\left(-\frac{\Omega_a\,P}{k_B\,T}\right). \tag{2.38}$$

La vitesse de montée v_m^s est du même signe que la force de Peach et Koehler f_m^s, donc du même signe que ϱ_c^s. Ainsi, les dislocations positives montent vers haut et les négatives vers le bas, comme sur la figure 2.15. Imposer une pression P permettrait ainsi d'évacuer les dislocations positives par le haut et les négatives par le bas, et ce sur tous les systèmes cristallins. Ce serait ainsi un moyen de rendre un cristal parfait, sans dislocations.

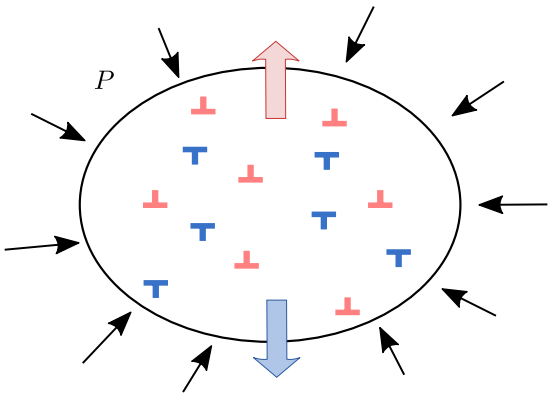


FIGURE 2.15 – Évacuation des dislocations coin positives et négatives par montée, induite par une pression P imposée sur le cristal

Paradoxe Ce principe n'a pas échappé aux expérimentateurs, qui l'ont essayé. Ainsi, Hilliard et al. [56] l'ont mis en œuvre sur plusieurs matériaux et ont montré qu'il ne se passe rien : les dislocations ne bougent pas lorsque une pression constante est imposée à un cristal.

Ce paradoxe a fait l'objet d'un débat entre Weertman, Lothe et Hirth [150, 79, 151], qui l'ont expliqué. Les auteurs s'accordent sur la physique du phénomène. Ils montrent qu'avec une concentration de référence c_0^r correctement choisie, les dislocations de l'expérience de Hilliard et al. ne peuvent pas monter. Le débat a porté sur le choix optimal de cette référence.

Concentrations à équilibre À l'équilibre thermodynamique avec une température T, la concentration de lacunes d'un cristal au repos vaut, d'après Mehrer [87] :

$$c_0 = \exp\left(-\frac{H_v}{k_B\,T} + \frac{S_v}{k_B}\right), \tag{2.39}$$

où H_v et S_v sont respectivement l'enthalpie et l'entropie (autre que l'entropie de mélange) de formation d'une lacune. Lorsque le cristal est contraint par une contrainte $\overline{\sigma}$, la concentration dépend alors du travail de la pression isostatique P sur le volume Ω_v de la lacune :

$$c_0^P = c_0\,\exp\left(-\frac{P\,\Omega_v}{k_B\,T}\right) \quad \text{avec} \quad P = -\frac{\mathrm{tr}(\overline{\sigma})}{3}. \tag{2.40}$$

Weertman [150] a utilisé cette concentration c_0^P comme référence pour la pression osmotique. Mais ce choix l'oblige à modifier la force de Peach et Koehler.

Référence Lothe et Hirth [79] proposent une autre référence, qui prend en compte le travail de changement de volume entre la lacune Ω_v et l'atome Ω_a :

$$c_0^r = c_0\,\exp\left(-\frac{P\,\Delta\Omega}{k_B\,T}\right) \quad \text{avec} \quad P = -\frac{\mathrm{tr}(\overline{\sigma})}{3} \quad \text{et} \quad \Delta\Omega = \Omega_v - \Omega_a. \tag{2.41}$$

Cette expression fait apparaître le volume $\Delta\Omega$ de relaxation des lacunes. La contrainte $\overline{\sigma}$ désigne ici, non seulement les contraintes que connaîtrait un cristal parfait soumis aux forces externes, mais également les hétérogénéités de contraintes locales induites par les défauts.

Vérification Il reste à montrer que cette référence c_0^r explique l'expérience de Hilliard et al. [56], d'un cristal soumis à une pression uniforme P. Dans ce cas, la concentration de lacunes à proximité d'une dislocation vaut (2.38) :

$$c_d = c_0^r \, \exp\left(-\frac{\Omega_a \, P}{k_B \, T}\right) = c_0 \, \exp\left(-\frac{P \, \Omega_v}{k_B \, T}\right).$$

Elle est égale à la concentration c_0^P à l'équilibre dans le reste du matériau, donnée par l'équation (2.40). L'égalité des concentrations empêche tout flux de lacunes qui pourrait débloquer les dislocations. Celles-ci ne bougent pas, en accord avec l'expérience de Hilliard et al.

Contrairement au choix de Weertman, cette référence préserve la force de Peach et Koehler. Nous l'adoptons dans la suite pour le calcul de la pression osmotique (2.34).

Potentiel chimique Les résultats de ce paragraphe, sur le choix d'une concentration de lacunes de référence c_0^r, peuvent se résumer par la construction d'un potentiel chimique. Il est pris égal à la pression osmotique définie plus haut (2.34), et qui, avec les équations (2.39) et (2.41), devient :

$$\mu_v = \frac{k_B \, T}{\Omega_a} \, \ln\left(\frac{c}{c_0^r}\right) = \frac{k_B \, T}{\Omega_a} \, \left(\ln(c) + \frac{H_v}{k_B \, T} - \frac{S_v}{k_B} - \frac{\mathrm{tr}(\overline{\sigma})}{3} \frac{\Delta\Omega}{k_B \, T}\right). \tag{2.42}$$

C'est le potentiel chimique proposé par Gao et Cocks [43]. Il permet de réécrire ce qui précède :

- La concentration (2.40) de lacunes c_0^P en équilibre avec un état de contraintes $\overline{\sigma}$, imposé à l'extérieur du cristal se calcule par l'égalité :
$$\mu_v = -P = \frac{\mathrm{tr}(\overline{\sigma})}{3}.$$
- La force osmotique (2.35) de Bardeen Herring, et l'équilibre des forces (2.36) qui s'en déduit s'écrivent respectivement :
$$\boldsymbol{f}_{BH} = \varrho_c^s \, b \, \mu_v \, \boldsymbol{n}^s, \quad \text{et} \quad 0 = f_m^s + \varrho_c^s \, b \, \mu_v. \tag{2.43}$$

2.4.3 Diffusion des lacunes

La diffusion peut débloquer la ligne de dislocation, en permettant la circulation de lacune entre la dislocation et le reste du matériau. C'est ainsi que la diffusion contrôle la montée.

Mécanisme La concentration des lacunes c_d au cœur de la dislocation, donnée par l'équation (2.37), est différente de celle du matériau, loin de la dislocation, de valeur c_M. Cette différence de concentration se traduit par une différence du potentiel chimique μ_v, défini ci-dessus (2.42). Cela provoque la diffusion des lacunes pour compenser cette différence de potentiel chimique. Le flux de lacunes $\boldsymbol{J}$, proportionnel au gradient de potentiel chimique, est donnée par la loi de Fick :

$$\boldsymbol{J} = -D_v \, \mathbf{grad}(c) = -D_\mu \, \mathbf{grad}(\mu_v) \quad \text{avec} \quad D_\mu = \frac{\Omega_a}{k_B \, T} \, c \, D_v.$$

Elle est caractérisée par le coefficient de diffusion D_v des lacunes.

Autodiffusion Dans la littérature, les données disponibles sur la diffusion des lacunes, ne donnent pas directement le coefficient de diffusion D_v, mais le coefficient d'autodiffusion, qui lui est associé par la formule (1.8) :

$$D_a = f \, D_v \, c.$$

Plusieurs valeurs de la littérature sur le coefficient d'autodiffusion dans l'UO_2 sont rassemblées dans le tableau 1.3.

Le flux de lacunes dépend donc du gradient de potentiel chimique par la formule :

$$\boldsymbol{J} = -D_\mu \, \mathbf{grad}(\mu_v) \quad \text{avec} \quad D_\mu = \frac{\Omega_a \, D_a}{k_B \, T \, f}. \tag{2.44}$$

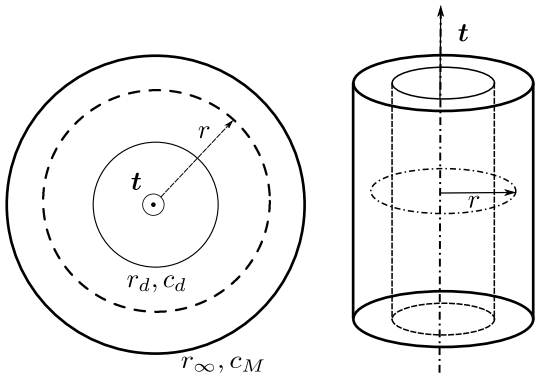


FIGURE 2.16 – Volume de contrôle autour d'une ligne de dislocation

Géométrie simplifiée Pour modéliser la diffusion, entre le cœur de la dislocation et le reste du matériau, il est classique de représenter l'environnement de la dislocation comme un tube, illustré en figure 2.16. L'intérieur du tube représente le cœur de la dislocation avec sa concentration c_d. Ainsi, sur les rayons intérieur r_d et extérieur r_∞ sont appliquées les concentrations respectives c_d et c_M. La diffusion est supposée atteindre un régime stationnaire, dont l'équation, en coordonnées cylindriques, s'écrit :

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \mu_v}{\partial r} \right) = 0. \tag{2.45}$$

Sa solution :

$$\mu_v(r) = \mu_v(c_M) + \frac{\mu_v(c_d) - \mu_v(c_M)}{\ln(r_d/r_\infty)} \ln(r/r_\infty)$$

évacue un flux de lacunes :

$$\phi^s = -2\,\pi \, D_\mu \, r \, \frac{\partial \mu_v}{\partial r} = \eta_v \, D_\mu \left(\mu_v(c_d) - \mu_v(c_M) \right) \quad \text{avec} \quad \eta_v = \frac{2\,\pi}{\ln(r_\infty/r_d)}, \tag{2.46}$$

avec un facteur géométrique η_v, introduit par Mordehai et al. [95].

Facteur géométrique Pour calculer le facteur géométrique η_v, il faut prendre des valeurs pour les rayons r_d et r_∞ du tube.

- Le rayon intérieur r_d est de l'ordre de la taille du cœur d'une dislocation : $r_d \approx 5\,b$.
- Le rayon extérieur peut être estimé par la distance entre deux dislocations, de l'ordre de :

$$r_\infty \approx \frac{1}{2\sqrt{\rho}},$$

où ρ est la densité de dislocations, estimée pour l'UO_2 [160] entre $10^{10}\,\mathrm{m}^{-2}$ et $10^{14}\,\mathrm{m}^{-2}$.

Ce qui précède conduit à l'encadrement suivant :

$$3.25 \leq \ln\left(\frac{r_\infty}{r_d}\right) \leq 7.9,$$

ce qui permet de faire l'approximation du facteur géométrique : $\eta_v \approx 1$.

Le calcul de la diffusion est finalement très approximatif : une géométrie simplifiée, avec des longueurs incertaines. L'intérêt du facteur de géométrique η_v est de réduire ce calcul à l'essentiel, montrer que le flux (2.46) est proportionnel au coefficient de diffusion D_μ, et à la différence de potentiel chimique entre le cœur de la dislocation et le matériau. Le facteur géométrique η_v est un coefficient de proportionnalité, qui résume les approximations du calcul. Il est inconnu, mais son ordre de grandeur vaut environ 1.

Vitesse D'après les valeurs des potentiels chimiques, données par les équations (2.42) et (2.43), et la valeur (2.44) du coefficient de diffusion D_μ, le flux (2.46) s'écrit :

$$\phi^s = -\frac{\eta_v\, D_a}{f}\,\left(\frac{\Omega_a}{k_B\, T}\,\frac{f^s_m}{\varrho^s_c\, b} + \ln\left(\frac{c_M}{c^r_0}\right)\right). \tag{2.47}$$

Appliqué à l'ensemble de la dislocation, il compense l'augmentation de volume (2.32) engendré par la montée :

$$\phi^s\, \delta_D = \mathrm{tr}(\underline{\dot{E}}^{p,s}), \tag{2.48}$$

ce qui permet de calculer la vitesse de montée :

$$v^s_m = -\frac{\phi^s}{\varrho^s_c\, b} = \frac{\eta_v\, D_a}{f\, \varrho^s_c\, b}\,\left(\frac{\Omega_a}{k_B\, T}\,\frac{f^s_m}{\varrho^s_c\, b} + \ln\left(\frac{c_M}{c^r_0}\right)\right). \tag{2.49}$$

C'est l'expression de Hirth et Lothe [6], calculée dans le cas général d'une dislocation mixte.

Diffusion globale Le flux ϕ^s, évacué par la montée de la dislocation et de valeur (2.47), modifie la concentration c_M du milieu environnant. Ce déséquilibre provoque de la diffusion à l'échelle un peu plus large de l'environnement de la dislocation. Ainsi, le flux se traduit par une source s^s_v dans l'équation de la diffusion dans le milieu environnant :

$$\frac{\partial c_M}{\partial t} = \mathrm{div}\left(\frac{\Omega_a\, D_a}{k_B\, T\, f}\,\mathbf{grad}\Big(\mu_v(c_M)\Big)\right) + s^s_v \quad \text{avec} \quad s^s_v = \phi^s\, \delta_D. \tag{2.50}$$

Il s'agit d'un premier changement d'échelle, puisque la concentration c_M du milieu environnant, qui est une moyenne, en devient la variable. Cette équation de diffusion a été écrite en considérant le flux de lacunes défini par l'équation (2.44).

Bilan Les équations de la montée se résument finalement au calcul de la force de Peach et Koehler (2.29a), du flux de lacunes (2.47), de la vitesse de montée (2.49) et de l'augmentation de volume (2.30) :

$$f^s_m = -b\,\overline{\sigma} : (\varrho^s_c\, \underline{\gamma}^s + \varrho^s_v\, \underline{\eta}^s), \tag{2.51a}$$

$$\phi^s = -\frac{\eta_v\, D_a}{f}\,\left(\frac{\Omega_a}{k_B\, T}\,\frac{f^s_m}{\varrho^s_c\, b} + \ln\left(\frac{c_M}{c^r_0}\right)\right), \tag{2.51b}$$

$$v^s_m = -\frac{\phi^s}{\varrho^s_c\, b}, \tag{2.51c}$$

$$\underline{\dot{E}}^{p,s} = -b\, v^s_m\, (\varrho^s_c\, \underline{\gamma}^s + \varrho^s_v\, \underline{\eta}^s)\, \delta_D. \tag{2.51d}$$

2.4.4 Forces de frottement

Les équations de la montée, présentées dans le système (2.51), posent un problème.

Dislocation vis Lorsqu'un morceau de dislocation est presque vis, ses composantes coin ϱ_c^s et vis ϱ_v^s valent :

$$\varrho_c^s \approx 0, \quad \varrho_v^s = \pm 1,$$

et, d'après les équations du système (2.51), l'accroissement de distorsion plastique devient :

$$\underline{\dot{E}}^{p,s} = \frac{1}{\varrho_c^{s2}} \frac{\eta_v \, D_a \, \Omega_a}{f \, k_B \, T} \, (\overline{\sigma} : \underline{\eta}^s) \, \underline{\eta}^s \, \delta_D.$$

Cette expression tend vers l'infini à cause du dénominateur ϱ_c^{s2}.

Cela provient de la manière dont sont construites les équations de montée, par un équilibre entre une force osmotique qui s'oppose à la force de Peach et Koehler. La montée des composantes vis se fait sans augmentation de volume, et donc ne produit pas de force osmotique. Aucune force ne s'oppose à la force de Peach et Koehler, qui fait glisser le morceau de dislocation avec une vitesse v_m^s infinie, ce qui entraîne un accroissement de distorsion plastique $\underline{\dot{E}}^{p,s}$ infini.

Force de frottement Pourtant, les conditions de montée ne sont pas extraordinaires, ce sont les mêmes que celles du glissement : pas d'augmentation de volume, donc pas de force osmotique pour contrer la force de Peach et Koehler. En fait, dans l'équilibre des forces, il manque une force de frottement f_F^s due à de nombreux phénomènes, décrits en dynamique des dislocations : tension sur la ligne de dislocation, barrières de potentiels du réseau cristallin, interactions avec d'autres défauts, etc.

Comme dans l'article de Gao et Cocks [43], l'équilibre de la montée (2.43) doit donc s'écrire :

$$0 = f_m^s + \varrho_c^s \, b \, \mu_v(c_d) + f_F^s,$$

avec une force f_F opposée à f_m^s. Avec l'expression (2.29a) de la force de Peach et Koehler, cette équation s'écrit :

$$0 = -b \, (\varrho_c^s \, \tau_\gamma^s + \varrho_v^s \, \tau_\eta^s) + \varrho_c^s \, b \, \mu_v(c_d) + f_F^s. \tag{2.52}$$

Elle fait apparaître les contraintes résolues (2.29b) de la montée, pour les composantes coin et vis :

$$\tau_\gamma^s = \overline{\sigma} : \underline{\gamma}^s \quad \text{et} \quad \tau_\eta^s = \overline{\sigma} : \underline{\eta}^s.$$

Bilan (2) Finalement, le système (2.51) peut être remplacé par un nouveau système d'équations qui résume la montée des dislocations, et qui tient compte de la force de frottement. Il se compose de l'équilibre des forces (2.52), du flux de lacunes (2.46) écrit avec le coefficient d'autodiffusion (2.44), de la vitesse de montée (2.49) et de l'augmentation de volume (2.30) :

$$0 = -b \, (\varrho_c^s \, \tau_\gamma^s + \varrho_v^s \, \tau_\eta^s) + \varrho_c^s \, b \, \mu_v(c_d) + f_F^s, \tag{2.53a}$$

$$\phi^s = \eta_v \, \frac{\Omega_a \, D_a}{k_B \, T \, f} \, \Big(\mu_v(c_d) - \mu_v(c_M) \Big), \tag{2.53b}$$

$$\varrho_c^s \, b \, v_m^s = -\phi^s, \tag{2.53c}$$

$$\underline{\dot{E}}^{p,s} = -b \, v_m^s \, (\varrho_c^s \, \underline{\gamma}^s + \varrho_v^s \, \underline{\eta}^s) \, \delta_D. \tag{2.53d}$$

Pour poursuivre la mise en équation de la montée, ce système d'équations doit être homogénéisé. Ce changement d'échelle est l'objet de la section suivante.

2.5 Changement d'échelle

Les propriétés des dislocations ont été étudiées à l'échelle d'une boucle de dislocation. Elles sont maintenant homogénéisées à l'échelle d'un cristal d'UO_2. Les premiers paragraphes de cette section ne traitent que du glissement des dislocations. La montée ne sera introduite qu'au paragraphe 2.5.5.

2.5.1 Homogénéisation sur un système de glissement

La première étape de l'homogénéisation porte sur le glissement des dislocations appartenant à un même système de glissement s.

Prise de moyenne Il est classique, pour homogénéiser une propriété, d'en prendre la moyenne sur un volume V. En général, la taille du volume V est choisie [18] suffisamment grande devant la taille des hétérogénéités à homogénéiser, et suffisamment petite devant l'échelle où sont formulées les équations homogénéisées. Ici, les hétérogénéités locales correspondent aux boucles de dislocations, et l'échelle homogène est celle du cristal d'UO_2.

Ainsi, l'homogénéisation d'une propriété, définie par une fonction f, peut s'écrire :

$$\langle f \rangle (\boldsymbol{x}) = \frac{1}{V} \int_V f(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y}) \, \mathrm{d}\boldsymbol{y}.$$

En annexe A.2.8, on montre que la prise de moyenne commute avec tout opérateur différentiel D (gradient, etc.) :

$$D \langle f \rangle = \langle Df \rangle .$$

Tenseur de Nye Sur le système s, le tenseur de Nye à l'échelle microscopique se décompose suivant la formule (2.26) :

$$\underline{\alpha}^s = -b \, \varrho_c^s \, \delta_D \, \underline{\eta}^s + b \, \varrho_v^s \, \delta_D \, \underline{\gamma}^s.$$

Par linéarité de l'opération de prise de moyenne, le tenseur de Nye devient :

$$\langle \underline{\alpha}^s \rangle = -b \, \rho_c^s \, \underline{\eta}^s + b \, \rho_v^s \, \underline{\gamma}^s, \tag{2.54}$$

avec des densités de dislocations coin ρ_c^s et vis ρ_v^s définies par les prises de moyennes :

$$\rho_c^s = \langle \varrho_c^s \, \delta_D \rangle \quad \text{et} \quad \rho_v^s = \langle \varrho_v^s \, \delta_D \rangle . \tag{2.55}$$

Cette prise de moyenne sur un grand nombre de dislocations régularise la distribution δ_D, ainsi que le tenseur de Nye qui deviennent des fonctions régulières. Les densités ρ_c^s et ρ_v^s peuvent être négatives.

Équation de Kröner Il existe deux versions de l'équation de Kröner (2.12). Prenons celle qui permet de déterminer la distorsion plastique associée au tenseur de Nye :

$$\underline{\mathrm{rot}}(\underline{E}^{p,s}) = -\underline{\alpha}^s.$$

La commutativité du rotationnel avec la prise de moyenne montre que cette équation s'homogénéise très facilement :

$$\underline{\mathrm{rot}}(\langle \underline{E}^{p,s} \rangle) = - \langle \underline{\alpha}^s \rangle . \tag{2.56}$$

Loi d'Orowan L'action d'un champ de contraintes $\overline{\sigma}$ définit dans le système de glissement s une contrainte résolue de glissement τ_g^s, qui fait glisser les dislocations avec une $\boldsymbol{v}^s$. Cela crée de la plasticité, dont l'accroissement est décrit par l'équation (2.30) :

$$\underline{\dot{E}}^{p,s} = b\,(v_c^s\,\underline{\varrho}_c^s + v_v^s\,\underline{\varrho}_v^s)\,\underline{\beta}^s\,\delta_D.$$

Par linéarité de la prise de moyenne, celle-ci prend la forme homogène suivante :

$$\left\langle \underline{\dot{E}}^{p,s} \right\rangle = b\,(\rho_{tc}^s\,V_c^s + \rho_{tv}^s\,V_v^s)\,\underline{\beta}^s, \tag{2.57a}$$

avec des densités coin et vis définies par :

$$\rho_{tc}^s = \langle |\underline{\varrho}_c^s|\,\delta_D \rangle \quad \text{et} \quad \rho_{tv}^s = \langle |\underline{\varrho}_v^s|\,\delta_D \rangle\,, \tag{2.57b}$$

et des vitesses macroscopiques de glissement coin et vis définies par :

$$V_c^s = \frac{\langle \underline{\varrho}_c^s\,v_c^s\,\delta_D \rangle}{\rho_{tc}^s} \quad \text{et} \quad V_v^s = \frac{\langle \underline{\varrho}_v^s\,v_v^s\,\delta_D \rangle}{\rho_{tv}^s}. \tag{2.57c}$$

C'est la loi d'Orowan. Les densités ρ_{tc}^s et ρ_{tv}^s, sont positives et somment les contributions de tous les morceaux de dislocation, respectivement coin et vis.

2.5.2 Dislocations géométriquement nécessaires et statistiquement distribuées

À l'échelle macroscopique, la distinction entre dislocations positives et négatives subsistent, puisqu'elles glissent en sens inverse. Approfondir cette distinction permettra de distinguer rigoureusement les dislocations géométriquement nécessaires (GNDs) et les dislocations statistiquement distribuées (SSDs).

Densités positives et négatives Lors de la prise de moyenne, les densités de dislocations coin suivantes ont été construites :

- les densités globales ρ_c^s et ρ_c^s, où les dislocations coin négatives et positives peuvent s'annuler ;
- les densités absolues ρ_{tc}^s, où toutes les dislocations s'additionnent.

D'autres densités peuvent être définies : positives $\rho_c^{s,+}$, et négatives $\rho_c^{s,-}$, où seules sont comptabilisées les contributions respectivement positives et négatives. Ces densités sont reliées aux précédentes par les équations :

$$\rho_c^s = \rho_c^{s,+} - \rho_c^{s,-}, \quad \text{et} \quad \rho_{tc}^s = \rho_c^{s,+} + \rho_c^{s,-}.$$

Il en est de même pour les densités vis :

$$\rho_v^s = \rho_v^{s,+} - \rho_v^{s,-}, \quad \text{et} \quad \rho_{tv}^s = \rho_v^{s,+} + \rho_v^{s,-}.$$

GNDs Les Dislocations Géométriquement Nécessaires (GNDs) sont les densités qui composent le tenseur de Nye (2.54) :

$$\langle \underline{\alpha}^s \rangle = -b\,\rho_c^s\,\underline{\eta}^s + b\,\rho_v^s\,\underline{\gamma}^s. \tag{2.58}$$

Il s'agit des densités globales ρ_c^s et ρ_v^s. Dans la prise de moyenne, des contributions négatives et positives se sont annulées, et il ne reste que les contributions en excès dans le matériau, avec leur signe :

$$\rho_c^s = \rho_c^{s,+} - \rho_c^{s,-}, \quad \text{et} \quad \rho_v^s = \rho_v^{s,+} - \rho_v^{s,-}, \tag{2.59}$$

Puisque ces contributions servent à construire le tenseur de Nye, ce sont elles qui déforment le réseau cristallin grâce à l'équation de Kröner (2.12)

$$\underline{\mathrm{rot}}(\underline{E}^e) = \langle \underline{\alpha}^s \rangle\,.$$

En fait, les SSDs y contribuent également, mais leurs effets s'annulent.

SSDs Dans la différence (2.59), pour construire la densité de GNDs, les densités de dislocations qui s'annulent valent :

$$\rho^s_{mc} = 2\,\min(\rho^{s,+}_c, \rho^{s,-}_c), \quad \text{et} \quad \rho^s_{mv} = 2\,\min(\rho^{s,+}_v, \rho^{s,-}_v). \tag{2.60}$$

L'indice m qui apparaît dans les notations ρ^s_{mc} et ρ^s_{mv} signifie mobile. La raison de cette appellation sera donnée plus tard, au chapitre 3. Ces densités de coin et de vis disparues dans la prise de moyenne correspondent aux Densités Statistiquement Distribuées (SSDs). Les densités absolues de dislocations s'écrivent :

$$\rho^s_{tc} = |\rho^s_c| + \rho^s_{mc}, \quad \text{et} \quad \rho^s_{tv} = |\rho^s_v| + \rho^s_{mv}.$$

Lorsque le matériau est sollicité par des contraintes $\overline{\sigma}$, c'est l'ensemble des dislocations qui glissent et créent de la plasticité à travers la loi d'Orowan (2.57) :

$$\left\langle \underline{\dot{E}}^{p,s} \right\rangle = b\,(\rho^s_{tc}\,V^s_c + \rho^s_{tv}\,V^s_v)\,\underline{\beta}^s = b\left(|\rho^s_c| + \rho^s_{mc}\right) V^s_c\,\underline{\beta}^s + b\left(|\rho^s_v| + \rho^s_{mv}\right) V^s_v\,\underline{\beta}^s. \tag{2.61}$$

Dans cette formule, GNDs et SSDs agissent ensemble par leurs densités totales.

2.5.3 Vitesses moyennes

La loi d'Orowan (2.57) fait apparaître des vitesses macroscopiques V^s_c et V^s_v, définies par une prise de moyenne. Ce paragraphe doit préciser la signification de ces vitesses.

Signification Pour donner une signification aux vitesses macroscopiques V^s_c et V^s_v, définies par les relations (2.57c), il est possible de définir une vitesse microscopique $\boldsymbol{v'}$ de composantes :

$$v^{s\prime}_c = \mathrm{sgn}(\varrho^s_c)\,v^s_c \quad \text{et} \quad v^{s\prime}_v = \mathrm{sgn}(\varrho^s_v)\,v^s_v$$

Les relations :

$$\varrho^s_c\,v^s_c = |\varrho^s_c|\,v^{s\prime}_c, \quad \text{et} \quad \varrho^s_v\,v^s_v = |\varrho^s_v|\,v^{s\prime}_v,$$

montrent que les définitions (2.57c) des vitesses macroscopiques peuvent également s'écrire :

$$V^s_c = \frac{\langle |\varrho^s_c|\,v^{s\prime}_c\,\delta_D\rangle}{\rho^s_{tc}} \quad \text{et} \quad V^s_v = \frac{\langle |\varrho^s_v|\,v^{s\prime}_v\,\delta_D\rangle}{\rho^s_{tv}}.$$

Ainsi, les vitesses macroscopiques peuvent être considérées comme les vitesses moyennes des dislocations, avec les composantes $|\varrho^s_c|$ et $|\varrho^s_v|$ prises en valeur absolue.

Vitesses moyennes Il a été remarqué plus haut, au paragraphe2.3.2, que les composantes v^s_c et v^s_v de la vitesse microscopique changent de signe avec les composantes coin ϱ^s_c et vis ϱ^s_v de la dislocation. Les vitesses moyennes V^s_c et V^s_v proviennent donc de morceaux de dislocations de signes différents circulant en sens opposé.

Ainsi, les morceaux de dislocations coin positives circulent avec une vitesse moyenne V^s_c, et les morceaux de dislocations coin négatives avec une vitesse opposée $-V^s_c$. Pour résumer, cela il suffit de dire que l'ensemble des morceaux de dislocation, dont les composantes coin ont pour signes ϵ_c circulent avec une vitesse macroscopique :

$$\boldsymbol{V}^s_c = \epsilon_c\,V^s_c\,\boldsymbol{m}^s. \tag{2.62a}$$

Cette vitesse moyenne est attribuée à la densité de dislocations coin ρ^{s,ϵ_c}_c ($\rho^{s,+}_c$ ou $\rho^{s,-}_c$ définies plus haut).

Il en est de même pour les dislocations vis : la densité de dislocations vis ρ^{s,ϵ_v}_v circule avec une vitesse macroscopique :

$$\boldsymbol{V}^s_v = \epsilon_v\,V^s_v\,(\boldsymbol{n}^s \wedge \boldsymbol{m}^s). \tag{2.62b}$$

Glissement des GNDs Les GNDs peuvent ainsi se séparer entre les densités de dislocations coin ρ_c^s et vis ρ_v^s. La formule (2.62) montre que leurs vitesses moyennes respectives peuvent s'écrire :

$$\boldsymbol{V}_c^s = \mathrm{sgn}(\rho_c^s)\, V_c^s\, \boldsymbol{m}^s \quad \text{et} \quad \boldsymbol{V}_v^s = \mathrm{sgn}(\rho_v^s)\, V_v^s\, (\boldsymbol{n}^s \wedge \boldsymbol{m}^s). \tag{2.63a}$$

La séparation des GNDs entre coin et vis permet de séparer le tenseur de Nye (2.54)

$$\langle \underline{\alpha}^s \rangle = \langle \underline{\alpha}^s \rangle_c + \langle \underline{\alpha}^s \rangle_v \quad \text{avec} \quad \langle \underline{\alpha}^s \rangle_c = -b\, \rho_c^s\, \underline{\eta}^s \quad \text{et} \quad \langle \underline{\alpha}^s \rangle_v = b\, \rho_v^s\, \underline{\gamma}^s, \tag{2.63b}$$

Ces expressions permettent d'écrire :

$$\langle \underline{\alpha}^s \rangle_c \wedge \boldsymbol{V}_c^s + \langle \underline{\alpha}^s \rangle_v \wedge \boldsymbol{V}_v^s = b\, (|\rho_c^s|\, V_c^s + |\rho_v^s|\, V_v^s)\, \underline{\beta}^s, \tag{2.63c}$$

c'est-à-dire, d'après la loi d'Orowan (2.61) :

$$\left\langle \underline{\dot{E}}^{p,s} \right\rangle = \langle \underline{\alpha}^s \rangle_c \wedge \boldsymbol{V}_c^s + \langle \underline{\alpha}^s \rangle_v \wedge \boldsymbol{V}_v^s + b \left(\rho_{mc}^s\, V_c^s + \rho_{mv}^s\, V_v^s \right) \underline{\beta}^s. \tag{2.64}$$

Cette relation peut être comparée à sa version (2.19) microscopique :

$$\underline{\dot{E}}^{p,s} = \underline{\alpha} \wedge \boldsymbol{v}.$$

Ainsi, à l'échelle microscopique, le tenseur de Nye suffit au calcul de l'accroissement de distorsion plastique ; à l'échelle macroscopique, il faut y ajouter la contribution des SSDs qui ont disparu du tenseur de Nye.

2.5.4 Propriétés mathématiques des vitesses moyennes

Les vitesses moyennes V_c^s et V_v^s seront identifiées sur des essais au chapitre 3 suivant. Elles devront vérifier des propriétés mathématiques mises en évidence dans ce paragraphe.

Démarche À l'échelle microscopique, les morceaux de dislocation sont animés d'une vitesse microscopique $\boldsymbol{v}^s$, qui résulte de l'équilibre entre la force de Peach et Koehler, exercée par la contrainte $\overline{\sigma}$, et le frottement produit par les nombreuses interactions exercées par le milieu. Ces interactions les plus importantes seront décrites au chapitre 3 suivant.

Pour éviter le problème très complexe de déterminer cette vitesse microscopique, il est préférable de considérer les vitesses macroscopiques V_c^s et V_v^s, définies par l'équation (2.57c). Dans ce paragraphe, nous montrons que ces vitesses doivent vérifier certaines propriétés mathématiques. Et au chapitre 3 suivant, elles sont identifiées à partir d'essais mécaniques sur des monocristaux d'UO_2.

Contrainte résolue Les composantes (2.28) de glissement de la force de Peach et Koehler dépendent de la seule contrainte résolue τ_g^s et des caractéristiques de la dislocation :

$$f_c^s = b\, \varrho_c^s\, \tau_g^s, \quad \text{et} \quad f_v^s = b\, \varrho_v^s\, \tau_g^s.$$

Ainsi les vitesses macroscopiques V_c^s et V_v^s, qui en résultent, ne dépendent de la contrainte $\overline{\sigma}$ qu'à travers la contrainte résolue de glissement τ_g^s : ce sont des fonctions $V_c^s(\tau_g^s)$ et $V_v^s(\tau_g^s)$ de τ_g^s.

Fonctions impaires Le tenseur d'orientation (2.28c) est construit sur les vecteurs $\boldsymbol{m}^s$ et $\boldsymbol{n}^s$ qui orientent le système de glissement s :

$$\underline{\beta}^s = \boldsymbol{m}^s \otimes \boldsymbol{n}^s.$$

Le signe arbitraire de ces vecteurs rend arbitraire celui du tenseur d'orientation qui peut donc s'écrire :

$$\underline{\beta}^s = \epsilon\, \underline{\beta}^s_0, \quad \text{avec} \quad \underline{\beta}^s_0 = \boldsymbol{m}^s \otimes \boldsymbol{n}^s, \quad \text{et} \quad \epsilon = \pm 1,$$

et la contrainte résolue (2.28b) :

$$\tau^s_g = \epsilon\, \tau^s_{g\,0}, \quad \text{avec} \quad \tau^s_{g\,0} = \overline{\sigma} : \underline{\beta}^s_0.$$

Ces équations, reportées dans la loi d'Orowan (2.28b) :

$$\left\langle \underline{\dot{E}}^{p,s} \right\rangle = b \left(\rho^s_{tc}\, \epsilon\, V^s_c(\epsilon\, \tau^s_{g\,0}) + \rho^s_{tv}\, \epsilon\, V^s_v(\epsilon\, \tau^s_{g\,0}) \right) \underline{\beta}^s_0,$$

montrent que les vitesses macroscopiques V^s_c et V^s_v doivent être des fonctions impaires de la contrainte résolue :

$$V^s_c(-\tau^s_g) = -V^s_c(\tau^s_g), \quad \text{et} \quad V^s_v(-\tau^s_g) = -V^s_v(\tau^s_g), \tag{2.65a}$$

pour que la loi d'Orowan soit indépendante du choix arbitraire du signe du tenseur d'orientation.

Dissipation positive La dissipation produite par le glissement doit vérifier l'inégalité de Clausius-Duhem, c'est-à-dire assurer que la dissipation soit positive, ce qui, d'après la loi d'Orowan (2.57), s'écrit :

$$\overline{\sigma} : \left\langle \underline{\dot{E}}^{p,s} \right\rangle = b\, (\rho^s_{tc}\, V^s_c + \rho^s_{tv}\, V^s_v)\, \tau^s_g \geq 0.$$

En séparant les vitesses de coin et de vis, cela signifie que :

$$V^s_c\, \tau^s_g \geq 0 \quad \text{et} \quad V^s_v\, \tau^s_g \geq 0. \tag{2.65b}$$

Le modèle d'écoulement identifié au chapitre 3 suivant, devra vérifier les conditions d'écoulement (2.65).

2.5.5 Montée des dislocations

L'homogénéisation qui précède ne concerne que le glissement des dislocations. Il faut maintenant considérer la montée, décrite en section 2.4.

Loi d'Orowan Comme pour le glissement, dont les vitesses de glissement macroscopiques sont définies par les expressions (2.57c), il est possible de définir des vitesses de montée macroscopiques, pour les densités coin ρ^s_{tc} et ρ^s_{tv} vis, par :

$$V^s_\gamma = \frac{\langle \varrho^s_c\, v^s_m\, \delta_D \rangle}{\rho^s_{tc}} \quad \text{et} \quad V^s_\eta = \frac{\langle \varrho^s_v\, v^s_m\, \delta_D \rangle}{\rho^s_{tv}}.$$

D'après l'expression (2.30) de l'accroissement de distorsion plastique, ses composantes de montée peuvent donc être homogénéisées sous la forme :

$$\left\langle \underline{\dot{E}}^{p,s}_m \right\rangle = -b\, \langle \varrho^s_c\, v^s_m\, \delta_D \rangle\, \underline{\gamma}^s - b\, \langle \varrho^s_v\, v^s_m\, \delta_D \rangle\, \underline{\eta}^s = -b\, \rho^s_{tc}\, V^s_\gamma\, \underline{\gamma}^s - b\, \rho^s_{tv}\, V^s_\eta\, \underline{\eta}^s. \tag{2.66}$$

C'est la loi d'Orowan pour la montée.

Vitesses moyennes La formule (2.62), obtenue pour le glissement, peut s'adapter à la montée : les densités de dislocations coin ρ_c^{s,ϵ_c} et vis ρ_v^{s,ϵ_v}, de signes respectifs ϵ_c et ϵ_v, montent avec des vitesses moyennes :

$$\boldsymbol{V}_{mc}^s = \epsilon_c\, V_\gamma^s\, \boldsymbol{n}^s \quad \text{et} \quad \boldsymbol{V}_{mv}^s = \epsilon_v\, V_\eta^s\, \boldsymbol{n}^s.$$

Cette formule, appliquée aux GNDs, montre que leur vitesses moyennes peuvent s'écrire :

$$\boldsymbol{V}_{mc}^s = \mathrm{sgn}(\rho_c^s)\, V_\gamma^s\, \boldsymbol{n}^s \quad \text{et} \quad \boldsymbol{V}_{mv}^s = \mathrm{sgn}(\rho_v^s)\, V_\eta^s\, \boldsymbol{n}^s.$$

Montée des GNDs Ces vitesses, combinées à l'expression des tenseurs de Nye macroscopiques (2.63b), permettent d'écrire :

$$\langle \underline{\alpha}^s \rangle_c \wedge \boldsymbol{V}_{mc}^s + \langle \underline{\alpha}^s \rangle_v \wedge \boldsymbol{V}_{mv}^s = -b\,|\rho_c^s|\, V_\gamma^s\, \underline{\gamma}^s - b\,|\rho_v^s|\, V_\eta^s\, \underline{\eta}^s.$$

Cette expression est l'équivalent de l'équation (2.63c), valable pour le glissement des GNDs. La loi d'Orowan pour la montée (2.66) devient ainsi :

$$\begin{aligned}\left\langle \underline{\dot{E}}_m^{p,s} \right\rangle &= -b\,(|\rho_c^s| + \rho_{mc}^s)\, V_\gamma^s\, \underline{\gamma}^s - b\,(|\rho_v^s| + \rho_{mv}^s)\, V_\eta^s\, \underline{\eta}^s, \\ &= \langle \underline{\alpha}^s \rangle_c \wedge \boldsymbol{V}_{mc}^s + \langle \underline{\alpha}^s \rangle_v \wedge \boldsymbol{V}_{mv}^s - b\,\rho_{mc}^s\, V_\gamma^s\, \underline{\gamma}^s - b\,\rho_{mv}^s\, V_\eta^s\, \underline{\eta}^s.\end{aligned}$$

Cette expression montre, comme pour le glissement, comment les GNDs et SSDs collaborent pour accroître la distorsion plastique dans la loi d'Orowan.

Bilan Les expressions du glissement et celles la montée peuvent maintenant être réunies :

- Les densités de dislocations coin ρ_c^{s,ϵ_c} et vis ρ_v^{s,ϵ_v}, de signes respectifs ϵ_c et ϵ_v, se déplacent aux vitesses moyennes :

$$\boldsymbol{V}_c^s = \epsilon_c\, V_c^s\, \boldsymbol{m}^s + \epsilon_c\, V_\gamma^s\, \boldsymbol{n}^s \quad \text{et} \quad \boldsymbol{V}_v^s = \epsilon_v\, V_v^s\, (\boldsymbol{n}^s \wedge \boldsymbol{m}^s) + \epsilon_v\, V_\eta^s\, \boldsymbol{n}^s. \tag{2.67a}$$

- Les GNDs se déplacent à une vitesse moyenne de :

$$\boldsymbol{V}^s = \mathrm{sgn}(\rho_c^s)\, V_c^s\, \boldsymbol{m}^s + \mathrm{sgn}(\rho_c^s)\, V_\gamma^s\, \boldsymbol{n}^s \quad \text{et} \quad \boldsymbol{V}^s = \mathrm{sgn}(\rho_v^s)\, V_v^s\, (\boldsymbol{n}^s \wedge \boldsymbol{m}^s) + \mathrm{sgn}(\rho_v^s)\, V_\eta^s\, \boldsymbol{n}^s. \tag{2.67b}$$

- La loi d'Orowan complète s'écrit :

$$\left\langle \underline{\dot{E}}^{p,s} \right\rangle = b\,\rho_{tc}^s\, (V_c^s\, \underline{\beta}^s - V_\gamma^s\, \underline{\gamma}^s) + b\,\rho_{tv}^s\, (V_v^s\, \underline{\beta}^s - V_\eta^s\, \underline{\eta}^s) \tag{2.67c}$$

$$\text{avec} \quad \rho_{tc}^s = |\rho_c^s| + \rho_{mc}^s \quad \text{et} \quad \rho_{tv}^s = |\rho_v^s| + \rho_{mv}^s \tag{2.67d}$$

2.5.6 Vitesses de montée

Pour compléter les équations (2.67) de la montée, il faut donner des expressions pour les vitesses macroscopiques de montée V_γ^s et V_η^s.

Équilibre des forces L'équilibre des forces de montée (2.52) peut être multiplié par la distribution δ_D :

$$0 = -b\,\varrho_c^s\,\delta_D\,\tau_\gamma^s - b\,\varrho_v^s\,\delta_D\,\tau_\eta^s + b\,\varrho_c^s\,\delta_D\,\mu_v(c_d) + f_F^s\,\delta_D,$$

ce qui permet de l'homogénéiser sous la forme :

$$0 = -b\,(\rho_c^s\,\tau_\gamma^s + \rho_v^s\,\tau_\eta^s) + b\,\rho_c^s\,\mu_v(c_d) + \langle f_F^s\,\delta_D \rangle\,,$$

avec les contraintes résolues définies (2.29b) par :

$$\tau_\gamma^s = \overline{\sigma} : \underline{\gamma}^s \quad \text{et} \quad \tau_\eta^s = \overline{\sigma} : \underline{\eta}^s. \tag{2.68}$$

Découplage La montée des dislocations coin et vis sont de nature différente : la vitesse de montée des densités coin V_γ^s est contrôlée par la diffusion des lacunes, celle des densités vis V_η^s se comporte comme une vitesse de glissement, limitée par une force de frottement. Pour traiter ce double aspect, nous supposons que ces phénomènes peuvent être découplés sous la forme :

$$\begin{aligned} 0 &= -b\,\rho_c^s\,\tau_\gamma^s + b\,\rho_c^s\,\mu_v(c_d) \\ 0 &= -b\,\rho_v^s\,\tau_\eta^s + \langle f_F^s\,\delta_D\rangle \end{aligned}$$

La première équation exprime le fait que la montée de la densité de dislocations coin ρ_c^s est contrôlée par la pression osmotique, ce qui donne le potentiel chimique au cœur de la dislocation :

$$\mu_v(c_d) = \tau_\gamma^s. \tag{2.69}$$

La seconde équation montre que les forces de frottement s'appliquent à la montée de la densité de dislocations vis ρ_v^s.

Dislocations vis Le traitement de la montée des dislocations vis ressemble à celui du glissement. La dissipation produite doit vérifier l'inégalité de Clausius-Duhem, c'est-à-dire assurer que la dissipation soit positive, ce qui, d'après la loi d'Orowan (2.66), s'écrit :

$$\overline{\sigma} : \left\langle \underline{\dot{E}}_\eta^{p,s} \right\rangle = -b\,\rho_{tv}^s\,V_\eta^s\,\tau_\eta^s \geq 0, \quad \text{c'est-à-dire} \quad V_\eta^s\,\tau_\eta^s \leq 0.$$

Pour les mêmes raisons que pour les vitesses de glissement, la vitesse de montée des dislocations vis est impaire :

$$V_\eta^s(-\tau_\eta^s) = -V_\eta^s(\tau_\eta^s).$$

Flux de lacunes Avec le potentiel chimique $\mu_v(c_d)$ au cœur de la dislocation (2.69), et celui (2.42) du milieu environnant :

$$\mu_v(c_M) = \frac{k_B\,T}{\Omega_a}\,\ln\left(\frac{c_M}{c_0^r}\right),$$

le flux (2.53b) qui fait monter la dislocation coin vaut :

$$\phi^s = \frac{\eta_v\,D_a}{f}\,\left(\frac{\Omega_a\,\tau_\gamma^s}{k_B\,T} - \ln\left(\frac{c_M}{c_0^r}\right)\right)$$

Ce flux est une source dans une équation de diffusion, qui s'obtient par homogénéisation de l'équation (2.50)

$$\frac{\partial c_M}{\partial t} = \mathrm{div}\left(\frac{\Omega_a\,D_a}{k_B\,T\,f}\,\mathbf{grad}\Big(\mu_v(c_M)\Big)\right) + \langle s_v^s\rangle \quad \text{avec} \quad \langle s_v^s\rangle = \phi^s\,\langle\delta_D\rangle = \phi^s\,\rho^s. \tag{2.70}$$

Cette équation fait apparaître la densité totale de dislocations du système de glissement s, définie par (2.11) :

$$\rho^s = \langle\delta_D\rangle\,.$$

Nous verrons plus loin comment relier cette densité aux densités de dislocations coin ρ_{tc}^s et vis ρ_{tv}^s, définies plus haut (2.57b).

Montée L'équation de vitesse la montée (2.49) peut être multipliée par la distribution δ_D :

$$b\,\varrho_c^s\,v_m^s\,\delta_D = -\phi^s\,\delta_D,$$

ce qui, par homogénéisation, donne la vitesse de montée des coin :

$$V_\gamma^s = \frac{\langle \varrho_c^s\,v_m^s\,\delta_D\rangle}{\rho_{tc}^s} = -\frac{\phi^s}{b\,\rho_{tc}^s}\,\langle\delta_D\rangle = -\frac{\rho^s\,\phi^s}{\rho_{tc}^s\,b}$$

Cette vitesse fait intervenir la densité totale ρ^s. Cette vitesse produit l'accroissement de distorsion plastique par la loi d'Orowan (2.66) :

$$\left\langle \dot{\underline{E}}_\gamma^{p,s}\right\rangle = -b\,\rho_{tc}^s\,V_\gamma^s\,\underline{\gamma}^s = \rho^s\,\phi^s\,\underline{\gamma}^s = \rho^s\,\frac{\eta_v\,D_a}{f}\,\left(\frac{\Omega_a\,\tau_\gamma^s}{k_B\,T} - \ln\left(\frac{c_M}{c_0^r}\right)\right)\,\underline{\gamma}^s. \tag{2.71}$$

Densité Pour appliquer les équations de montée des dislocations, il faut pouvoir relier la densité totale ρ^s aux densités de dislocations coin et vis, définies par l'équation (2.57b) :

$$\rho_{tc}^s = \langle|\varrho_c^s|\,\delta_D\rangle \quad \text{et} \quad \rho_{tv}^s = \langle|\varrho_v^s|\,\delta_D\rangle\,.$$

Notons pour cela, que les composantes coin ϱ_c^s et vis ϱ_v^s, définies par l'équation (2.26), vérifient l'égalité :

$$\varrho_c^{s\,2} + \varrho_v^{s\,2} = 1,$$

qui, multipliée par la distribution δ_D et homogénéisée, devient :

$$\rho^s = \left\langle(\varrho_c^{s\,2} + \varrho_v^{s\,2})\,\delta_D\right\rangle = \alpha_c\,\rho_{tc}^s + \alpha_v\,\rho_{tv}^s, \tag{2.72}$$

avec des coefficients :

$$\alpha_c = \frac{\left\langle \varrho_c^{s\,2}\,\delta_D\right\rangle}{\rho_{tc}^s} \quad \text{et} \quad \alpha_c = \frac{\left\langle \varrho_c^{s\,2}\,\delta_D\right\rangle}{\rho_{tc}^s},$$

qui dépendent de la proportion de coin et de vis des boucles de dislocation. Par exemple, pour une boucle circulaire, ils valent :

$$\alpha_c = \alpha_v = \frac{\pi}{4}.$$

Nous verrons plus loin, en section 2.6, comment fixer les valeurs de ces coefficients α_c et α_v.

2.5.7 Transport des dislocations

Le mouvement des dislocations modifie leur densité. Dans ce paragraphe, nous cherchons les équations qui décrivent cette modification.

GNDs Établir la loi d'évolution des densités de GNDs est très classique en FDM. Il suffit de combiner la loi d'Orowan (2.67) et l'équation de Kröner (2.56) pour obtenir :

$$\left\langle \dot{\underline{\alpha}}^s\right\rangle = -\underline{\mathrm{rot}}\,\left(\left\langle \dot{\underline{E}}^{p,s}\right\rangle\right) = -b\,\underline{\mathrm{rot}}\Big(|\rho_c^s|\,(V_c^s\,\underline{\beta}^s - V_\gamma^s\,\underline{\gamma}^s) + |\rho_v^s|\,(V_v^s\,\underline{\beta}^s - V_\eta^s\,\underline{\eta}^s)\Big) \tag{2.73a}$$

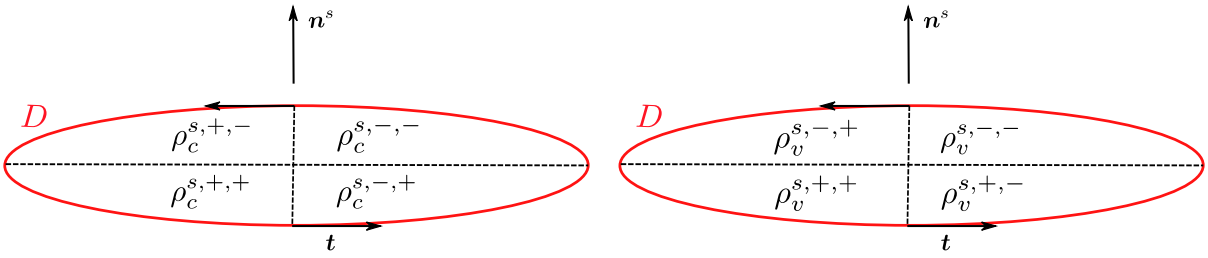
$$- b\,\underline{\mathrm{rot}}\Big(\rho_{mc}^s\,(V_c^s\,\underline{\beta}^s - V_\gamma^s\,\underline{\gamma}^s) + \rho_{mv}^s\,(V_v^s\,\underline{\beta}^s - V_\eta^s\,\underline{\eta}^s)\Big) \tag{2.73b}$$

Cette équation est composée de deux termes : le termes contenu dans les lignes (2.73a) et (2.73b) proviennent respectivement des GNDs et des SSDs.

L'origine du second terme s'explique ainsi : les SSDs sont des dislocations positives et négatives qui s'équilibrent. Comme elles s'écoulent en sens inverse, elles peuvent ne plus être équilibrées et deviennent des GNDs. Ce raisonnement qui explique la transformation de SSDs en GNDs est également valable pour la transformation inverse. Ainsi, la population de SSDs va également évoluer, et il faut en tenir compte pour calculer correctement la création de plasticité. C'est un aspect qui n'est pas souvent pris en compte.

Dislocations de signes égaux Pour suivre le déplacement des dislocations, nous séparons les morceaux de dislocation suivant les signes de leur parties coin et vis. Les morceaux de dislocation dont les parties coin et vis ont pour signes respectifs ϵ_c et ϵ_v ont pour densités de coin $\rho_c^{s,\epsilon_c,\epsilon_v}$ et vis $\rho_v^{s,\epsilon_c,\epsilon_v}$, comptées positivement par convention.

Les morceaux de dislocations qui composent ces densités sont représentés sur les schémas de la figure 2.17, pour les dislocations coin et vis.



(a) Coin (b) Vis

FIGURE 2.17 – Décomposition d'une boucle de dislocation en morceaux qui entrent dans les densités coin $\rho_c^{s,\epsilon_c,\epsilon_v}$ et vis $\rho_v^{s,\epsilon_c,\epsilon_v}$

Ces densités permettent de reconstruire les densités positives et négatives vues plus haut :

$$\rho_c^{s,+} = \rho_c^{s,+,+} + \rho_c^{s,+,-}, \qquad \rho_c^{s,-} = \rho_c^{s,-,+} + \rho_c^{s,-,-},$$
$$\rho_v^{s,+} = \rho_v^{s,+,+} + \rho_v^{s,-,+}, \qquad \rho_v^{s,-} = \rho_v^{s,+,-} + \rho_v^{s,-,-}$$

et à partir de là toutes les densités décrites ci-dessus.

Tenseur de Nye Il est possible de reprendre la construction du paragraphe 2.5.1, avec les seuls morceaux de signes ϵ_c et ϵ_v. Leurs densités de coin et vis $\rho_c^{s,\epsilon_c,\epsilon_v}$ et $\rho_v^{s,\epsilon_c,\epsilon_v}$, construisent un tenseur de Nye :

$$\langle \underline{\alpha}^{s,\epsilon_c,\epsilon_v} \rangle = -b\,\epsilon_c\,\rho_c^{s,\epsilon_c,\epsilon_v}\,\underline{\eta}^s + b\,\epsilon_v\,\rho_v^{s,\epsilon_c,\epsilon_v}\,\underline{\gamma}^s, \tag{2.74a}$$

associé au tenseur de distorsion plastique par l'équation de Kröner :

$$\underline{\mathrm{rot}}\,(\langle \underline{E}^{p,\epsilon_c,\epsilon_v} \rangle) = -\langle \underline{\alpha}^{s,\epsilon_c,\epsilon_v} \rangle\,. \tag{2.74b}$$

Sous l'action de contraintes, les dislocations glissent avec une vitesse moyenne, ce qui accroît la distorsion plastique par la loi d'Orowan (2.67) :

$$\boldsymbol{V}^s = \epsilon_c\,V_c^s\,\boldsymbol{m}^s + \epsilon_v\,V_v^s\,(\boldsymbol{n}^s \wedge \boldsymbol{m}^s) + (\epsilon_c\,V_\gamma^s + \epsilon_v\,V_\eta^s)\,\boldsymbol{n}^s, \tag{2.74c}$$

$$\left\langle \dot{\underline{E}}^{p,\epsilon_c,\epsilon_v} \right\rangle = b\left(\rho_c^{s,\epsilon_c,\epsilon_v}\,(V_c^s\,\underline{\beta}^s - V_\gamma^s\,\underline{\gamma}^s) + \rho_v^{s,\epsilon_c,\epsilon_v}\,(V_v^s\,\underline{\beta}^s - V_\eta^s\,\underline{\eta}^s)\right). \tag{2.74d}$$

La loi d'Orowan, sous sa forme (2.67), peut s'appliquer en remplaçant les densités totales ρ_{tc}^s et ρ_{tv}^s par les densités $\rho_c^{s,\epsilon_c,\epsilon_v}$ et $\rho_v^{s,\epsilon_c,\epsilon_v}$, car ces densités sont positives, et additionnent toutes les contributions.

Évolution De premières équations d'évolution s'obtiennent par les manipulations suivantes :

1. D'après les définitions (2.28c) et (2.27) des tenseurs $\underline{\beta}^s$, $\underline{\gamma}^s$ et $\underline{\eta}^s$, et la formule (A.13) d'analyse

vectorielle, le rotationnel de la loi d'Orowan (2.74d) s'écrit :

$$\begin{aligned}\underline{\mathrm{rot}}\left(\left\langle \underline{\dot{E}}^{p,\epsilon_c,\epsilon_v}\right\rangle\right) &= b\,\boldsymbol{m}^s \otimes \mathbf{rot}\Big((\rho_c^{s,\epsilon_c,\epsilon_v}\,V_c^s + \rho_v^{s,\epsilon_c,\epsilon_v}\,V_v^s)\,\boldsymbol{n}^s - \rho_c^{s,\epsilon_c,\epsilon_v}\,V_\gamma^s\,\boldsymbol{m}^s - \rho_v^{s,\epsilon_c,\epsilon_v}\,V_\eta^s\,(\boldsymbol{n}^s\wedge\boldsymbol{m}^s)\Big)\\ &= b\,\boldsymbol{m}^s \otimes \mathbf{rot}\Big(\mathbf{grad}(\rho_c^{s,\epsilon_c,\epsilon_v}\,V_c^s + \rho_v^{s,\epsilon_c,\epsilon_v}\,V_v^s)\wedge\boldsymbol{n}^s\\ &\qquad - \mathbf{grad}(\rho_c^{s,\epsilon_c,\epsilon_v}\,V_\gamma^s)\wedge\boldsymbol{m}^s - \mathbf{grad}(\rho_v^{s,\epsilon_c,\epsilon_v}\,V_\eta^s)\wedge(\boldsymbol{n}^s\wedge\boldsymbol{m}^s)\Big)\end{aligned}$$

2. Dériver l'équation de Kröner (2.74b), y introduire l'expression (2.74a) du tenseur de Nye permet d'obtenir :
$$\underline{\mathrm{rot}}\left(\left\langle \underline{\dot{E}}^{p,\epsilon_c,\epsilon_v}\right\rangle\right) = b\,\boldsymbol{m}^s \otimes \Big(\epsilon_c\,\dot{\rho}_c^{s,\epsilon_c,\epsilon_v}\,(\boldsymbol{n}^s\wedge\boldsymbol{m}^s) - \epsilon_v\,\dot{\rho}_v^{s,\epsilon_c,\epsilon_v}\,\boldsymbol{m}^s\Big).$$

3. L'égalité de ces deux rotationnels conduit à deux équations d'évolution pour les dislocations coin et vis :
$$\dot{\rho}_c^{s,\epsilon_c,\epsilon_v} = -\mathbf{grad}\Big(\rho_c^{s,\epsilon_c,\epsilon_v}\,\epsilon_c\,V_c^s + \rho_v^{s,\epsilon_c,\epsilon_v}\,\epsilon_c\,V_v^s\Big)^{\intercal}.\boldsymbol{m}^s - \mathbf{grad}\Big(\rho_c^{s,\epsilon_c,\epsilon_v}\,\epsilon_c\,V_\gamma^s\Big)^{\intercal}.\boldsymbol{n}^s, \tag{2.75a}$$
$$\dot{\rho}_v^{s,\epsilon_c,\epsilon_v} = -\mathbf{grad}\Big(\rho_c^{s,\epsilon_c,\epsilon_v}\,\epsilon_v\,V_c^s + \rho_v^{s,\epsilon_c,\epsilon_v}\,\epsilon_v\,V_v^s\Big)^{\intercal}.(\boldsymbol{n}^s\wedge\boldsymbol{m}^s) - \mathbf{grad}\Big(\rho_v^{s,\epsilon_c,\epsilon_v}\,\epsilon_v\,V_\eta^s\Big)^{\intercal}.\boldsymbol{n}^s. \tag{2.75b}$$

Pour achever l'identification, il a fallu utiliser les propriétés du produit mixte (A.5).

Transport (1) Les équations d'évolution (2.75) sont en fait des équations de transport. Pour le montrer, il faut les modifier en deux étapes.

Dans une première étape, notons qu'elles sont construites comme des sommes de termes : $\mathbf{grad}(\rho\,V)^{\intercal}.\boldsymbol{n}$, où $\boldsymbol{n}$ est un vecteur de base ($\boldsymbol{m}^s$, $(\boldsymbol{n}^s\wedge\boldsymbol{m}^s)$ ou $\boldsymbol{n}^s$). La formule d'analyse vectorielle (A.12) permet de les écrire sous la forme :

$$\mathbf{grad}(\rho\,V)^{\intercal}.\boldsymbol{n} = \mathrm{div}(\rho\,V\,\boldsymbol{n}) = \rho\,\mathrm{div}(V\,\boldsymbol{n}) + \mathbf{grad}(\rho)^{\intercal}.(V\,\boldsymbol{n}).$$

Les équations (2.75) deviennent ainsi :

$$\dot{\rho}_c^{s,\epsilon_c,\epsilon_v} = -\mathbf{grad}(\rho_c^{s,\epsilon_c,\epsilon_v})^{\intercal}.\boldsymbol{V}_c^s - \rho_c^{s,\epsilon_c,\epsilon_v}\,\mathrm{div}(\boldsymbol{V}_c^s) - \mathrm{div}\left(\rho_v^{s,\epsilon_c,\epsilon_v}\,\epsilon_c\,V_v^s\,\boldsymbol{m}^s\right), \tag{2.76a}$$
$$\dot{\rho}_v^{s,\epsilon_c,\epsilon_v} = -\mathbf{grad}(\rho_v^{s,\epsilon_c,\epsilon_v})^{\intercal}.\boldsymbol{V}_v^s - \rho_v^{s,\epsilon_c,\epsilon_v}\,\mathrm{div}(\boldsymbol{V}_v^s) - \mathrm{div}\left(\rho_c^{s,\epsilon_c,\epsilon_v}\,\epsilon_v\,V_c^s\,(\boldsymbol{n}^s\wedge\boldsymbol{m}^s)\right) \tag{2.76b}$$

avec les vitesses moyennes $\boldsymbol{V}_c^s$ et $\boldsymbol{V}_v^s$ des densités $\rho_c^{s,\epsilon_c,\epsilon_v}$ et $\rho_v^{s,\epsilon_c,\epsilon_v}$, définies plus haut (2.67a) :

$$\boldsymbol{V}_c^s = \epsilon_c\,V_c^s\,\boldsymbol{m}^s + \epsilon_c\,V_\gamma^s\,\boldsymbol{n}^s \quad\text{et}\quad \boldsymbol{V}_v^s = \epsilon_v\,V_v^s\,(\boldsymbol{n}^s\wedge\boldsymbol{m}^s) + \epsilon_v\,V_\eta^s\,\boldsymbol{n}^s.$$

Transport (2) Dans une deuxième étape, le tenseur de Nye construit (2.74a) sur les densités de dislocations coin $\rho_c^{s,\epsilon_c,\epsilon_v}$ et vis $\rho_v^{s,\epsilon_c,\epsilon_v}$ vérifie :

$$\mathbf{div}(\langle\underline{\alpha}^{s,\epsilon_c,\epsilon_v}\rangle) = \mathbf{0},$$

c'est-à-dire, d'après les expressions (2.27) et (2.74a) des tenseurs d'orientation et du tenseur de Nye :

$$\epsilon_c\,\mathbf{grad}(\rho_c^{s,\epsilon_c,\epsilon_v})^{\intercal}.(\boldsymbol{n}^s\wedge\boldsymbol{m}^s) = \epsilon_v\,\mathbf{grad}(\rho_v^{s,\epsilon_c,\epsilon_v})^{\intercal}.\boldsymbol{m}^s.$$

Cette équation transforme les équations (2.76) en :

$$\frac{\mathrm{d}\rho_c^{s,\epsilon_c,\epsilon_v}}{\mathrm{d}t} = \dot{\rho}_c^{s,\epsilon_c,\epsilon_v} + \mathbf{grad}(\rho_c^{s,\epsilon_c,\epsilon_v})^{\intercal}.\boldsymbol{V}_{2c}^s = -\rho_c^{s,\epsilon_c,\epsilon_v}\,\mathrm{div}(\boldsymbol{V}_c^s) - \rho_v^{s,\epsilon_c,\epsilon_v}\,\mathrm{div}(\epsilon_c\,V_v^s\,\boldsymbol{m}^s), \tag{2.77a}$$
$$\frac{\mathrm{d}\rho_v^{s,\epsilon_c,\epsilon_v}}{\mathrm{d}t} = \dot{\rho}_v^{s,\epsilon_c,\epsilon_v} + \mathbf{grad}(\rho_v^{s,\epsilon_c,\epsilon_v})^{\intercal}.\boldsymbol{V}_{2v}^s = -\rho_c^{s,\epsilon_c,\epsilon_v}\,\mathrm{div}(\epsilon_v\,V_c^s\,(\boldsymbol{n}^s\wedge\boldsymbol{m}^s)) - \rho_v^{s,\epsilon_c,\epsilon_v}\,\mathrm{div}(\boldsymbol{V}_v^s), \tag{2.77b}$$

avec des vitesses $\boldsymbol{V}^s_{2c}$ et $\boldsymbol{V}^s_{2v}$ macroscopiques, pour les densités vis et coin, différentes de celles définies plus haut (2.67a) :

$$\boldsymbol{V}^s_{2c} = \boldsymbol{V}^s_c + \epsilon_v\, V^s_v\, (\boldsymbol{n}^s \wedge \boldsymbol{m}^s) = \epsilon_c\, V^s_c\, \boldsymbol{m}^s + \epsilon_c\, V^s_\gamma\, \boldsymbol{n}^s + \epsilon_v\, V^s_v\, (\boldsymbol{n}^s \wedge \boldsymbol{m}^s), \tag{2.77c}$$

$$\boldsymbol{V}^s_{2v} = \boldsymbol{V}^s_v + \epsilon_c\, V^s_c\, \boldsymbol{m}^s = \epsilon_v\, V^s_v\, (\boldsymbol{n}^s \wedge \boldsymbol{m}^s) + \epsilon_v\, V^s_\eta\, \boldsymbol{n}^s + \epsilon_c\, V^s_c\, \boldsymbol{m}^s \tag{2.77d}$$

Ces équations ont la forme d'équations de transport, pour des vitesses $\boldsymbol{V}^s_{2c}$ et $\boldsymbol{V}^s_{2v}$. La dérivée droite $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}$ désigne la dérivée particulaire, et les termes de droites sont des sources.

Bilan Les équations (2.77) permettent de calculer l'évolution des densités de dislocations coin et vis au cours de leur mouvement, en fonction de leurs signes ϵ_c et ϵ_v. Pour suivre les populations sur un système de glissement s, il faut donc considérer huit équations, pour les quatre populations de coin :

$$\rho_c^{s,+,+}, \quad \rho_c^{s,+,-}, \quad \rho_c^{s,-,+}, \quad \rho_c^{s,-,-},$$

et les quatre populations de vis :

$$\rho_v^{s,+,+}, \quad \rho_v^{s,+,-}, \quad \rho_v^{s,-,+}, \quad \rho_v^{s,-,-}.$$

Il est possible d'en déduire les densités de dislocations totales :

$$\rho^s_{tc} = \rho_c^{s,+,+} + \rho_c^{s,+,-} + \rho_c^{s,-,+} + \rho_c^{s,-,-},$$
$$\rho^s_{tv} = \rho_v^{s,+,+} + \rho_v^{s,+,-} + \rho_v^{s,-,+} + \rho_v^{s,-,-},$$

pour calculer l'accroissement de distorsion plastique en appliquant la loi d'Orowan (2.67) :

$$\left\langle \underline{\dot{E}}^{p,s} \right\rangle = b\, \rho^s_{tc}\, (V^s_c\, \underline{\beta}^s - V^s_\gamma\, \underline{\gamma}^s) + b\, \rho^s_{tv}\, (V^s_v\, \underline{\beta}^s - V^s_\eta\, \underline{\eta}^s)$$

Sources Nous n'avons pas considéré ici les phénomènes physiques qui eux aussi modifient les densités de dislocations : les sources de Frank Read [38], l'annihilation des dislocations, le blocage des dislocations, etc. qui seront décrits au chapitre 3 suivant. Il faudra les ajouter comme des termes sources dans les équations (2.77).

2.5.8 Contribution de tous les systèmes

La dernière étape de l'homogénéisation consiste à sommer les contributions de tous les systèmes de glissement. Le modèle de plasticité cristalline, construit par homogénéisation des équations élémentaires, peut enfin apparaître, avec ses équations.

Notations Dans les paragraphes précédents de cette section, l'homogénéisation des équations mécaniques sur chaque système de glissement s a été réalisée par une prise de moyenne, et les champs qui en résultaient étaient notés $\langle X^s \rangle$. Maintenant que cette prise de moyenne est réalisée, et pour simplifier les notations, nous n'utiliserons plus la notation $\langle \cdot \rangle$: le tenseur de Nye, la distorsion plastique, etc., qui additionnent les contributions des différents systèmes, seront notés simplement $\underline{\alpha}$, $\underline{E}^p$, etc.

Plasticité Le tenseur de Nye est la somme des contributions de tous les systèmes (2.54) :

$$\underline{\alpha} = \sum_s \langle \underline{\alpha}^s \rangle\,, \quad \text{avec} \quad \langle \underline{\alpha}^s \rangle = -b\,\rho_c^s\,\underline{\eta}^s + b\,\rho_v^s\,\underline{\gamma}^s. \tag{2.78}$$

À ce tenseur de Nye est associée une distorsion plastique, qui peut être calculée par la formule de Biot et Savart (2.17) :

$$\underline{E}^p(\boldsymbol{x}) = -\frac{1}{4\pi}\int_{\mathbb{R}^3} \frac{\underline{\alpha}(\boldsymbol{y}) \wedge (\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|^3}\,\mathrm{d}\boldsymbol{y},$$

ou en résolvant l'équation de Poisson (2.15) :

$$\underline{\Delta}(\underline{E}^p) = \underline{\mathrm{rot}}(\underline{\alpha}).$$

Le calcul de la distorsion plastique n'est nécessaire qu'à l'état initial, si le tenseur de Nye est non nul.

Écoulement plastique L'action de contraintes $\overline{\sigma}$ met en mouvement les dislocations avec des vitesses macroscopiques :

$$V_c^s(\tau_g^s), \quad V_v^s(\tau_g^s), \quad V_\gamma^s(\tau_\gamma^s), \quad V_\eta^s(\tau_\eta^s)$$

qui sont des fonctions des contraintes résolues de glissement, et de montée :

$$\tau_g^s = \overline{\sigma} : \underline{\beta}^s, \quad \tau_\gamma^s = \overline{\sigma} : \underline{\gamma}^s, \quad \tau_\eta^s = \overline{\sigma} : \underline{\eta}^s.$$

Cet écoulement provoque un accroissement de distorsion plastique, qui s'obtient en sommant les contributions des loi d'Orowan (2.67) :

$$\dot{\underline{E}}^p = \sum_s \left\langle \dot{\underline{E}}^{p,s} \right\rangle, \quad \text{avec} \quad \left\langle \dot{\underline{E}}^{p,s} \right\rangle = b\,\rho_{tc}^s\,(V_c^s\,\underline{\beta}^s - V_\gamma^s\,\underline{\gamma}^s) + b\,\rho_{tv}^s\,(V_v^s\,\underline{\beta}^s - V_\eta^s\,\underline{\eta}^s). \tag{2.79}$$

Pour calculer correctement cet écoulement, il faut connaître les densités de dislocations coin ρ_{tc}^s et vis ρ_{tv}^s. Les équations (2.77) permettent notamment de suivre leur évolution.

Contraintes mécaniques L'état de contrainte dans le cristal Ω se calcule simplement par résolution d'un problème d'élasticité : trouver un champ de déplacement $\boldsymbol{u}$ qui vérifie l'équilibre mécanique :

$$\begin{aligned} &\mathbf{div}(\overline{\sigma}) = \mathbf{0}, \quad \text{dans } \Omega, \\ &\text{avec} \quad \overline{\sigma} = \overline{\overline{C}} : \underline{E}^e, \quad \text{et} \quad \underline{E}^e = \underline{\mathrm{grad}}(\boldsymbol{u}) - \underline{E}^p. \end{aligned}$$

Diffusion Lorsque la montée des dislocations est active, elle modifie localement la concentration c_M des lacunes. Pour les équations de diffusion, la montée est une source (2.70), qui, sommée sur tous les systèmes, vaut :

$$s_v = \sum_s \langle s_v^s \rangle = \sum_s \rho^s\,\phi^s \quad \text{avec} \quad \phi^s = \frac{\eta_v\,D_a}{f}\,\left(\frac{\Omega_a\,\tau_\gamma^s}{k_B\,T} - \ln\left(\frac{c_M}{c_0^r}\right)\right).$$

Le flux ϕ^s dépend de la contrainte résolue $\tau_\gamma^s = \overline{\sigma} : \gamma^s$ de montée des dislocations coin.

L'équation de diffusion s'écrit ensuite en tenant compte de cette source :

$$\frac{\partial c_M}{\partial t} = \mathrm{div}\left(\frac{\Omega_a\,D_a}{k_B\,T\,f}\,\mathbf{grad}\Big(\mu_v(c_M)\Big)\right) + s_v \quad \text{avec} \quad \mu_v(c_M) = \frac{k_B\,T}{\Omega_a}\,\ln\left(\frac{c_M}{c_0^r}\right). \tag{2.80}$$

Dans l'UO_2, la diffusion dans le grain est extrêmement lente et peut être négligée. L'équation de diffusion (2.80) se simplifie en équation d'évolution :

$$\frac{\partial c_M}{\partial t} = \sum_s \rho^s\,\frac{\eta_v\,D_a}{f}\,\left(\frac{\Omega_a\,\tau_\gamma^s}{k_B\,T} - \ln\left(\frac{c_M}{c_0^r}\right)\right).$$

Système complexe Le modèle décrit ici, qui résulte de l'homogénéisation mise en œuvre dans ce travail de thèse, est plus complexe que les modèles traditionnels de plasticité cristalline ou de FDM. Cette complexité provient des points suivants :

- Contrairement à ce qui se fait d'habitude, il ne faut pas considérer une seule densité de dislocation ρ^s par système de glissement, mais tenir compte des dislocations coin ρ^s_c et vis ρ^s_v.
- Pour ces dislocations, il faut considérer quatre vitesses macroscopiques V_c, V_v, V_γ et V_η, dont trois doivent être identifiées sur des essais.
- L'évolution des densités de dislocations doit tenir compte de leurs signes, c'est-à-dire de huit populations de dislocations par système de glissement, et il faut les suivre en intégrant huit équations d'évolution correspondantes.

Nous verrons en section suivante comment simplifier cela pour retrouver les modèles classiques de plasticité cristalline ou de FDM.

2.6 Modèles pour un calcul polycristallin

Le début du chapitre a décrit la construction d'un modèle de plasticité cristalline, par homogénéisation des équations microscopiques fondamentales vérifiées par les dislocations. Ce modèle un peu complexe doit être simplifié, ce qui permettra de retrouver les modèles classiques de plasticité cristalline et de Mécanique des Champs de Dislocations (FDM).

2.6.1 Plasticité cristalline

La complexité du modèle construit par homogénéisation, est de gérer deux densités de dislocations, coin et vis. Fusionner la densité de dislocations vis permettrait de retrouver des descriptions classiques en plasticité cristalline.

Dislocations coin et vis L'homogénéisation fait apparaître des densités de coin et de vis. Pour le glissement des dislocations, ces deux densités agissent de manière symétrique dans la loi d'Orowan (2.57), pour créer de la distorsion plastique :

$$\left\langle \underline{\dot{E}}^{p,s}_g \right\rangle = b\,(\rho^s_{tc}\,V^s_c + \rho^s_{tv}\,V^s_v)\,\underline{\beta}^s,$$

avec des vitesses macroscopiques V^s_c et V^s_v qui sont des fonctions de la contrainte résolue de glissement $\tau^s_g = \overline{\sigma} : \underline{\beta}^s$.

Cette loi pourrait s'écrire simplement :

$$\left\langle \underline{\dot{E}}^{p,s}_g \right\rangle = b\,\rho^s_t\,V^s_g\,\underline{\beta}^s, \tag{2.81a}$$

en considérant une densité unique et une vitesse macroscopique unique :

$$\rho^s_t = \rho^s_{tc} + \rho^s_{tv} \quad \text{et} \quad V^s_g(\tau^s_g) = \frac{\rho^s_{tc}\,V^s_c(\tau^s_g) + \rho^s_{tv}\,V^s_v(\tau^s_g)}{\rho^s_t}. \tag{2.81b}$$

Identification D'un point de vue pratique, les fonctions V_c^s et V_v^s doivent être identifiées à partir d'essais mécaniques sur des monocristaux. Compte tenu de la forme de la loi d'Orowan, il n'est pas possible de distinguer la contribution des composantes coin ou vis des dislocations. Regrouper ainsi les deux populations dans une loi d'Orowan simplifiée (2.81) simplifie donc l'identification et l'expression de la loi d'Orowan.

Montée Pour la montée, les densités de dislocations coin et vis n'agissent plus de manière symétrique. L'accroissement de distorsion plastique dû à la montée, donné par la loi d'Orowan (2.66), fait apparaître les deux contributions :

$$\left\langle \underline{\underline{\dot{E}}}_m^{p,s} \right\rangle = -b\,\rho_{tc}^s\,V_\gamma^s\,\underline{\underline{\gamma}}^s - b\,\rho_{tv}^s\,V_\eta^s\,\underline{\underline{\eta}}^s.$$

- La vitesse V_γ^s de montée de la densité coin ρ_{tc}^s dépend de la contrainte résolue $\tau_\gamma^s = \overline{\sigma} : \underline{\underline{\gamma}}^s$. Elle est contrôlée par la diffusion des lacunes.
- La vitesse V_η^s de montée de la densité vis ρ_{tv}^s dépend de la contrainte résolue $\tau_\eta^s = \overline{\sigma} : \underline{\underline{\eta}}^s$. Elle n'est pas prise en compte dans la littérature. Nous pouvons la supposer nulle.

Avec cette simplification, l'accroissement de distorsion plastique de la montée (2.71) s'écrit simplement :

$$\left\langle \underline{\underline{\dot{E}}}_m^{p,s} \right\rangle = \rho^s\,\phi^s\,\underline{\underline{\gamma}}^s, \quad \text{avec le flux de lacunes} \quad \phi^s = \frac{\eta_v\,D_a}{f}\left(\frac{\Omega_a\,\tau_\gamma^s}{k_B\,T} - \ln\left(\frac{c_M}{c_0^r}\right)\right). \tag{2.82}$$

C'est l'équation donnée par les articles qui modélisent la montée [95, 46, 159].

Pour l'appliquer, il faut relier la densité ρ^s à la densité fusionnée ρ_t^s, définie plus haut (2.81b). D'après la relation (2.72), ces deux densités sont reliées entre elles par :

$$\rho^s = \alpha_c\,\rho_{tc}^s + \alpha_v\,\rho_{tv}^s = \alpha\,\rho_t^s,$$

avec un coefficient géométrique α de l'ordre de 1. Compte tenu des approximations contenues dans le facteur de forme η_v, il est possible d'écrire :

$$\rho^s \approx \rho_t^s.$$

Fusion Finalement, en considérant la loi d'Orowan pour le glissement et la montée, il est naturel de fusionner les densités coin et vis dans une densité globale (2.81b) :

$$\rho_t^s = \rho_{tc}^s + \rho_{tv}^s.$$

Les expressions de la loi d'Orowan correspondent aux expressions rencontrées traditionnellement en plasticité cristalline.

GNDs et SSDs Il reste un point fondamental où la distinction entre dislocations coin et vis, positives et négatives, est essentiel : ce sont les équations de transport des dislocations (2.77), qui permettent de suivre leur évolution. Derrière ces populations se trouve la distinction entre GNDs et SSDs.

Dans la suite de ce travail, les équations de transport des dislocations (2.77) ne sont pas mises en œuvre. Nous décrivons deux stratégies pour les remplacer :

1. Dans les modèles de plasticité cristalline au sens strict, il n'y a qu'une seule population de dislocation, les SSDs. Leur densité n'est pas affectée par leur transport. Elle évolue par des phénomènes physiques : création, annihilation, blocage ou déblocage, etc., qui seront décrits plus loin.
2. La Mécanique des champs de Dislocations considère en plus des SSDs une population de GNDs. Nous montrons, aux paragraphes 2.6.2 et 2.6.3 suivants, comment introduire cette population.

2.6.2 Mécanique des Champs de Dislocations

Le grand intérêt de la Mécanique des Champs de Dislocations (FDM) par rapport aux approches traditionnelles de plasticité cristalline, est de gérer deux populations de dislocations, les SSDs et les GNDs.

GNDs et SSDs La distinction de ces deux populations a été décrite en détail au paragraphe (2.5.2), nous en rappelons les points principaux. Les dislocations ont deux effets mécaniques :

- Les dislocations géométriquement nécessaires (GNDs) déforment le réseau cristallin. Leur présence, mesurée par le tenseur de Nye, est révélée par l'équation de Kröner (2.12b) :

$$\underline{\alpha} = -\underline{\mathrm{rot}}(\underline{E}^p).$$

- Toutes les dislocations GNDs et SSDs produisent un accroissement de distorsion plastique, à travers la loi d'Orowan. Pour le glissement, celle-ci s'écrit (2.81) :

$$\dot{\underline{E}}^p = \sum_s b\, \rho_t^s\, V_g^s\, \underline{\beta}^s. \tag{2.83}$$

  La densité de dislocations ρ_t^s de chaque système de glissement s somme les densités de GNDs et de SSDs.

Première Hypothèse de la FDM Pour tenir compte de ces deux populations, la FDM pose une première hypothèse :

- Comme pour la plasticité standard, la population de SSDs n'évolue pas par ses déplacements, comme cela est décrit au paragraphe 2.5.7. Elle n'évolue que sous l'effet de phénomènes physiques : création, annihilation, blocage ou déblocage, etc.
- À cette population vient s'ajouter la population GNDs, mise en évidence par l'équation de Kröner, et contenue dans le tenseur de Nye $\underline{\alpha}$.

Cette première hypothèse n'est pas formulée explicitement dans les livres de Fressengeas [39, 40], ni dans les articles de FDM. Elle est pourtant la base des calculs.

Équation constitutive Une deuxième hypothèse, formulée par Acharya [1], est appelée Équation Constitutive. À l'échelle microscopique, un tenseur de Nye $\underline{\alpha}$ qui se déplace à vitesse $\boldsymbol{v}$ produit un accroissement de distorsion plastique donné par l'équation (2.19) :

$$\dot{\underline{E}}^p = \underline{\alpha} \wedge \boldsymbol{v}.$$

L'équation constitutive consiste à supposer que le tenseur de Nye macroscopique, noté ici $\langle\underline{\alpha}\rangle$, se déplace à une vitesse moyenne $\boldsymbol{V} = \langle\boldsymbol{v}\rangle$, et qu'il produit une distorsion plastique :

$$\dot{\underline{E}}^p_G = \langle\underline{\alpha}\rangle \wedge \boldsymbol{V}. \tag{2.84a}$$

qui s'ajoute à celle des SSDs, donnée par la loi d'Orowan (2.81) :

$$\dot{\underline{E}}^p = \dot{\underline{E}}^p_G + \dot{\underline{E}}^p_S, \quad \text{avec} \quad \dot{\underline{E}}^p_S = \sum_s b\, \rho_m^s\, V_g^s\, \underline{\beta}^s.$$

Vitesse des GNDs Il reste à déterminer le sens et la norme de la vitesse $\boldsymbol{V}$ des GNDs. Le sens de la vitesse, est déterminé par les considérations suivantes :

- La partie GNDs doit engendrer une déformation plastique isochore,
- La dissipation d'énergie qu'elle engendre doit être positive, et maximale.

Nous ne donnons pas les équations. Notons que la vitesse est alors proportionnelle à un vecteur $\boldsymbol{g}$:

$$\boldsymbol{V} = \frac{V}{|\boldsymbol{g}|}\,\boldsymbol{g}. \tag{2.84b}$$

Plusieurs propositions ont été faite pour déterminer la norme de la vitesse. Richeton et al. [125] proposent que les GNDs glissent avec une vitesse comparable aux SSDs. Pour la norme, ils utilisent donc une moyenne des vitesses de glissement des SSDs $|V^s|$ sur les systèmes, pondérées par les taux de glissement $|\dot{\varrho}^s|$ des systèmes.

$$V = \frac{\sum_s |\dot{\varrho}^s\, V^s|}{\sum_s |\dot{\varrho}^s|}. \tag{2.84c}$$

Autre proposition Le modèle de contribution des GNDs (2.84) ainsi formulé pose deux problèmes :

- Il suppose que les GNDs circulent avec une vitesse unique, alors qu'elles ont une vitesse différente sur chaque système de glissement.
- Dans ces équations (2.84), le traitement des GNDs est différent de celui des SSDs, alors que ces dislocations sont physiquement identiques.

Pour y remédier, Richeton et al. [124] proposent de gérer un tenseur de Nye $\langle \underline{\alpha}^s \rangle$ par système de glissement, qui glisse avec la vitesse $\boldsymbol{V}^s$ des SSDs. L'accroissement de distorsion plastique sur chaque système tient compte des SSDs et GNDs :

$$\left\langle \underline{\dot{E}}^{p,s} \right\rangle = \left\langle \underline{\dot{E}}^{p,s}_G \right\rangle + \left\langle \underline{\dot{E}}^{p,s}_S \right\rangle = \langle \underline{\alpha}^s \rangle \wedge \boldsymbol{V}^s + b\,\rho^s_m\,|\boldsymbol{V}^s|\,\underline{\beta}^s.$$

Il faut ensuite gérer l'évolution des tenseurs de Nye de chaque système s :

$$\langle \dot{\underline{\alpha}}^s \rangle = -\underline{\mathrm{rot}}\left(\left\langle \underline{\dot{E}}^{p,s} \right\rangle\right).$$

Application Cette nouvelle proposition est intéressante, car elle traite les SSDs et GNDs de la même manière. Pour la mettre en œuvre sur un polycristal, il faut pouvoir gérer le passage des GNDs sur la frontière des grains, avec des équations spécifiques. Richeton et al. [124] ont adopté pour cela une résolution par éléments finis, qui permet d'utiliser des éléments frontière, pour modéliser ces équations spécifiques.

Le modèle que nous avons développé utilise une résolution par transformées de Fourier rapides (FFT), pour laquelle une telle description paraît difficile. c'est pourquoi nous avons dû développer une autre approche.

2.6.3 Nouvelle proposition

Le modèle que nous proposons pour les calculs sur polycristaux est décrit maintenant. Il s'inscrit dans le cadre de la Mécanique des Champs de Dislocations (FDM), avec une approche originale pour traiter la population de GNDs.

Modèle de FDM Le modèle que nous présentons a été construit dans le cadre de la FDM, en s'appuyant notamment sur la première hypothèse de la FDM. Cette hypothèse suppose que la population de SSDs n'évolue pas par ses déplacements. Elle n'évolue que sous l'effet de phénomènes physiques : création, annihilation, blocage ou déblocage, etc.

Cette hypothèse est en contradiction avec les équations (2.77), qui montrent comment évoluent les populations de dislocations coin et vis, positives et négatives. Nous avons découvert ces équations trop tardivement pour les prendre en compte, et notre modèle s'appuie donc sur la première hypothèse de la FDM.

Résolution par FFT Le modèle que nous présentons a été construit pour une résolution des équations par transformées de Fourier rapides (FFT) par le logiciel TMFFT. Il n'est pas possible de gérer la population de GNDs avec la proposition de Richeton et al. [124], qui s'appuie sur une résolution par éléments finis.

Pour éviter de traiter de manière différente les SSDs et les GNDs, nous n'utilisons pas non plus les équations (2.84) de « l'Équation constitutive ». C'est pourquoi proposons une approche originale pour gérer les GNDs, basée sur la projection du tenseur de Nye.

Loi d'Orowan L'équation fondamentale des modèles de plasticité cristalline est la loi d'Orowan, qui exprime l'accroissement de distorsion plastique du cristal sous l'action de contraintes $\overline{\sigma}$. Avec la fusion des densités de dislocation coin et vis du paragraphe 2.6.1, cette équation combine les distorsions plastiques par glissement (2.81) et par montée (2.82) :

$$\underline{\dot{E}}^p = \sum_s \rho_t^s \, (b \, V_g^s \, \underline{\beta}^s + \phi^s \, \underline{\gamma}^s).$$

Dans cette équation, la vitesse de glissement V_g^s et le flux ϕ^s dépendent des contraintes à travers les contraintes résolues de glissement τ_g^s et de montée τ_γ^s :

$$V_g^s = V_g^s(\tau_g^s), \quad \phi^s = \frac{\eta_v \, D_a}{f} \left(\frac{\Omega_a \, \tau_\gamma^s}{k_B \, T} - \ln\left(\frac{c_M}{c_0^r} \right) \right), \quad \text{avec} \quad \tau_g^s = \overline{\sigma} : \underline{\beta}^s, \quad \tau_\gamma^s = \overline{\sigma} : \underline{\gamma}^s.$$

La densité de dislocations ρ_t^s de la loi d'Orowan regroupe l'ensemble des dislocations coin et vis, positives et négatives, d'un système s. C'est la somme des SSDs ρ_m^s, et des GNDs coin ρ_c^s et vis ρ_v^s :

$$\rho_t^s = \rho_m^s + |\rho_c^s| + |\rho_v^s|.$$

Nous supposons connue la densité de SSDs. Pour utiliser la loi d'Orowan, il faut pouvoir connaître les densités de GNDs ρ_c^s et ρ_v^s.

Tenseur de Nye Les densités de GNDs ρ_c^s et ρ_v^s des différents systèmes se combinent pour former le tenseur de Nye (2.78) :

$$\underline{\alpha} = \sum_s \Big(- b \, \rho_c^s \, \underline{\eta}^s + b \, \rho_v^s \, \underline{\gamma}^s \Big).$$

Il est possible de suivre l'évolution de ce tenseur au cours du temps, en utilisant l'accroissement de distorsion plastique de la loi d'Orowan dans l'équation de Kröner (2.12b) :

$$\dot{\underline{\alpha}} = -\underline{\mathrm{rot}}(\underline{\dot{E}}^p).$$

Projection Pour utiliser la loi d'Orowan, il faut pouvoir récupérer les densités de GNDs ρ_c^s et ρ_v^s du tenseur de Nye. Cependant, le tenseur de Nye est trop pauvre pour contenir une information sur toutes les densités de GNDs ρ_c^s et ρ_v^s. Nous utilisons alors une projection, décrite ici en plusieurs étapes :

1. Puisque les dislocations coin et vis sont fusionnées, il est possible de ne récupérer que des densités coin, et d'écrire le tenseur de Nye sous la forme :

$$\underline{\alpha} = -b \sum_s \rho_c^s \, \underline{\eta}^s$$

2. Le tenseur de Nye est ensuite projeté sur les tenseurs d'orientation $\underline{\eta}^s$, pour minimiser la densité de GNDs :

$$\min \sum_s \rho_c^{s\,2}.$$

   Cette projection, dont les équations sont données en annexe A.3, donne donc des densités de dislocations coin, notées symboliquement :

$$\rho_c^s = \mathit{\Pi}^s(\underline{\alpha}).$$

Avec cette projection, la loi d'Orowan s'écrit alors :

$$\underline{\dot{E}}^p = \sum_s (|\mathit{\Pi}^s(\underline{\alpha})| + \rho_m^s) \, (b \, V_g^s \, \underline{\beta}^s + \phi^s \, \underline{\gamma}^s).$$

Identification Le modèle de FDM que nous proposons pour les modéliser le comportement plastique des polycristaux d'UO_2 est prêt. Il reste à identifier la vitesse de glissement $V_g^s(\tau_g^s)$ à partir d'essais sur monocristaux. C'est l'objet du chapitre 3 suivant.

Chapitre 3

Étude du comportement viscoplastique du monocristal d'UO_2

Le chapitre 2 précédent a construit un modèle de Mécanique des Champs de Dislocations par l'homogénéisation des équations microscopiques fondamentales des dislocations. Pour appliquer ce modèle, il reste à identifier la vitesse de glissement des dislocations sur des essais de compression réalisés sur des monocristaux d'UO_2.

Modèle de plasticité cristalline Dans le cas du glissement des dislocations, le modèle d'écoulement plastique, qui résulte des développements du chapitre 2, est le suivant : lorsqu'une déformation $\underline{\varepsilon}$ est appliquée au cristal, les contraintes $\overline{\sigma}$ sont données par :

$$\overline{\sigma} = \overline{\overline{C}} : (\underline{\varepsilon} - \underline{E}^p) \quad \text{avec} \quad \underline{\dot{E}}^p = \sum_F \sum_{s \in F} b\, \rho_m^s\, V_g^F(\tau_g^s)\, \underline{\beta}^s \quad \text{et} \quad \tau_g^s = \overline{\sigma} : \underline{\beta}^s. \tag{3.1}$$

La contrainte $\overline{\sigma}$ fait glisser les dislocations de chaque système de glissement s avec une vitesse V_g^F, qui est une fonction de la contrainte résolue τ_g^s. Pour des raisons de symétrie matérielle, la vitesse de glissement V_g^F est la même pour les systèmes d'une même famille, c'est pourquoi cette écriture regroupe les contributions des systèmes $s \in F$ de chaque famille F.

Identification L'objectif de ce chapitre est d'identifier les vitesses V_g^F des familles à partir d'essais de compression uniaxiale sur des monocristaux d'UO_2. Cette identification nécessite plusieurs étapes :

- Dans un premier temps, il faut considérer la physique mise en jeu par le glissement des dislocations. Ces considérations théoriques aident à formuler un modèle, notamment à prendre en compte l'activation thermique.
- La vitesse de glissement dépend d'une part de la contrainte et de la température, mais également de l'évolution du matériau, appelée écrouissage. L'identification de la vitesse procédera en deux étapes : un modèle simple sera d'abord identifié pour un niveau d'écrouissage donné. Ce modèle sera ensuite enrichi pour faire varier le niveau d'écrouissage.

3.1 Vitesse de glissement des dislocations dans l'UO_2

Pour formuler une loi d'écoulement plastique, il est important de comprendre les interactions en jeu lors du mouvement des dislocations.

3.1.1 Mécanismes thermiquement activés

L'activation thermique permet le glissement des dislocations. Nous commençons par décrire les mécanismes de déformation correspondants.

Contrainte de Peierls-Nabarro Le glissement de dislocations se produit par un ré-arrangement local des atomes. Le réseau cristallin s'oppose à la propagation de la dislocation dans son plan de glissement par une contrainte dite *contrainte de Peierls-Nabarro*. Cette dernière correspond à la contrainte de cisaillement nécessaire pour activer le glissement des dislocations à une température de 0 K. Tant que la contrainte résolue est inférieure à la contrainte de Peierls-Nabarro, la dislocation ne peut pas glisser sous l'effet de la seule contrainte, mais nécessite une activation thermique. Dans ce cas, la déformation est activée thermiquement, et peut se produire par différents mécanismes : le glissement des dislocation par double décrochements, le glissement dévié, et le glissement assisté par la montée des dislocations. Ces mécanismes sont décrits ci-dessous.

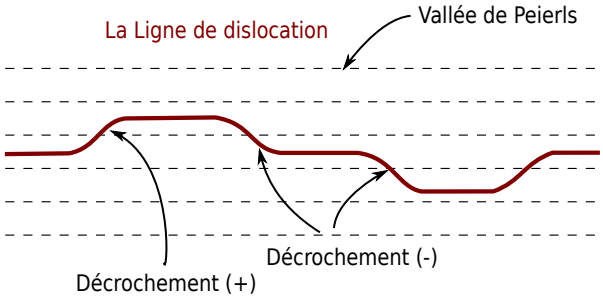


FIGURE 3.1 – Double décrochements le long d'une ligne de dislocation

Double décrochement Le glissement par *double décrochements* d'une ligne de dislocation est illustré en figure 3.1. À l'équilibre la dislocation est bloquée dans une vallée d'énergie (ou vallée de Peierls). Le glissement de la ligne dépend du franchissement de la vallée d'énergie pour passer dans une autre vallée. Seule une partie de la ligne de dislocation traverse la vallée, faisant apparaître des décrochements reliant les parties de part et d'autre de celle-ci. Ces mécanismes sont décrits dans de nombreux travaux notamment Guyot et Dorn [49], Kocks et al. [67].

Glissement dévié Une dislocation vis peut appartenir à plusieurs plans de glissement. Elle peut donc changer de plan de glissement parce que le glissement est bloqué par un obstacle dans le plan initial, ou parce qu'au début de la déformation plastique la dislocation se retrouve dans un plan moins favorisé par la contrainte.

Pour qu'une dislocation change de plan, elle doit surmonter une barrière d'énergie, et peut être aidée pour cela par l'agitation thermique. Le glissement dévié est donc activé thermiquement et peut contrôler la déformation à haute température. Plusieurs modèles existent pour décrire ce phénomène, par exemple celui de Wolf [157] pour les matériaux CFC.

Dans le cas de l'UO_2, Lefebvre [77] a constaté la déviation du glissement des dislocations du plan {100} au plan {111} dans certaines conditions de température et d'orientation cristalline. Il n'a cependant pas approfondi la question.

Glissement assisté par la montée des dislocations La montée des dislocations élimine les obstacles rencontrés par les dislocations lors de leur glissement [148]. Comme la vitesse de montée dépend de la température, le glissement assisté par la montée est thermiquement activé. À des températures élevées comme celles atteintes par l'UO_2 dans les transitoires de puissance, la diffusion permet d'activer facilement la montée des dislocations.

Modèles De nombreux modèles ont été introduits, pour décrire les mécanismes présentés ci-dessus, dont Poirier [115] a fait une synthèse.

D'après plusieurs travaux de Byron [23], de Lefebvre [77] et de Seltzer et al. [134], le glissement des dislocations dans l'UO_2 est thermiquement activé. Mais, les mécanismes physiques impliqués ne sont pas clairement identifiés : rien ne permet de savoir s'il s'agit d'un glissement par double décrochements ou dévié.

3.1.2 Activation thermique

Des considérations thermodynamiques sur l'activation thermique aident à formuler un modèle de glissement des dislocations.

Obstacle Une contrainte $\overline{\sigma}$ exerce sur une dislocation une force de Peach et Koehler, dont la composante f_g^s dans le plan de glissement (2.22), proportionnelle à la contrainte résolue de glissement τ_g^s, l'incite à glisser :

$$f_g^s = b\,\tau_g^s \quad \text{avec} \quad \tau_g^s = \overline{\sigma} : \underline{\beta}^s.$$

La contrainte résolue peut suffire à franchir des obstacles, mais ce n'est pas toujours le cas. Elle doit souvent être accompagnée par l'agitation thermique.

D'un point de vue thermodynamique, un obstacle est un mur de potentiel à franchir. La différence d'enthalpie libre (de Gibbs) avant et après le franchissement de l'obstacle peut s'écrire :

$$\Delta G^s = \Delta F^s - \tau_g^s\,\Omega^\star. \tag{3.2}$$

C'est une décomposition (3.2) de l'enthalpie libre en deux composantes :

- l'énergie libre ΔF^s, qui représente l'agitation thermique,
- et le travail mécanique exercé par la contrainte résolue de glissement τ_g^s. Ce travail fait intervenir un volume d'activation $\Omega^\star$.

Agitation thermique En physique statistique [87], l'agitation thermique fait bouger les atomes d'un cristal avec une fréquence voisine de la fréquence de Debye ν_D. Celle-ci est liée à la température de Debye Θ_D par la formule :

$$\nu_D = \Theta_D\,\frac{k_B}{\hbar},$$

où le symbole $\hbar$ désigne la constante de Planck réduite. D'après Willis [155], et Eser et al. [33], la température de Debye, pour l'UO_2, vaut 377 K, et la fréquence de Debye à $4.94\,10^{13}\,\mathrm{s}^{-1}$.

Cette agitation, permettra de franchir l'obstacle avec une probabilité égale au facteur de Boltzmann :

$$\mathcal{P} = \exp\left(-\frac{\Delta G^s}{k_B\,T}\right),$$

c'est-à-dire avec une fréquence :

$$\nu = \nu_D \, \mathcal{P} = \nu_D \, \exp\left(-\frac{\Delta G^s}{k_B \, T}\right).$$

Vitesse L'obstacle franchi fait progresser la dislocation d'une distance d, qu'on peut supposer égale à la longueur du vecteur de Burgers b. La dislocation, soumise à l'action de la contrainte résolue de glissement τ_g^s progressera donc avec une vitesse :

$$V_g^s = b \, \nu_D \, \exp\left(-\frac{\Delta G^s}{k_B \, T}\right)$$

D'après la loi d'Orowan (2.81), cette vitesse crée une distorsion plastique :

$$\underline{\dot{E}}_g^{p,s} = \dot{\gamma}^s \, \underline{\beta}^s \quad \text{avec} \quad \dot{\gamma}^s = b \, \rho_m^s \, V_g^s = \rho_m^s \, b^2 \, \nu_D \, \exp\left(-\frac{\Delta G^s}{k_B \, T}\right). \tag{3.3}$$

Dans cette expression,

- nous avons introduit la vitesse de cisaillement $\dot{\gamma}^s$,
- et nous avons négligé la population de GNDs, réduisant la densité ρ_t^s totale des dislocations à celle des SSDs ρ_m^s. C'est justifié dans ce chapitre, qui vise à identifier une vitesse de glissement avec des essais sur monocristaux.

3.1.3 Approche semi-empirique

Une approche semi-empirique permet de combiner les considérations théoriques précédentes avec des résultats expérimentaux, pour formuler un modèle au plus près des données expérimentales, mais qui conserve une signification physique. Cette approche est largement adoptée dans la littérature pour modéliser la plasticité cristalline, dont le chapitre 4 de Poirier [115] fait un état de l'art. Les modèles les plus courants sont présentés ici.

Factorisation La décomposition (3.2) de l'enthalpie libre en énergie libre et travail mécanique :

$$\Delta G^s = \Delta F^s - \tau_g^s \, \Omega^\star,$$

permet de factoriser l'expression (3.3) de la vitesse de cisaillement :

$$\dot{\gamma}^s = \rho_m^s \, b^2 \, \nu_D \, \exp\left(-\frac{\Delta F^s}{k_B \, T}\right) \, \exp\left(\frac{\tau_g^s \, \Omega^\star}{k_B \, T}\right).$$

Dans cette expression, l'enthalpie libre ΔF^s et le volume d'activation $\Omega^\star$, sont a priori des fonctions de la température T et de la contrainte et de la contrainte $\overline{\sigma}$. Cependant, de nombreux modèles de la littérature supposent que cette factorisation peut s'écrire sous la forme :

$$\dot{\gamma}^s = \rho_m^s \, b^2 \, \nu_D \, \exp\left(-\frac{\Delta F^s}{k_B \, T}\right) \, f\left(\frac{\tau_g^s}{\tau_0^s}\right), \tag{3.4}$$

en séparant les rôles de la température T et de la contrainte τ_g^s en deux facteurs indépendants :

- L'enthalpie libre ΔF^s peut être supposée constante, ce qui fait apparaître une température d'activation T_A^s, qui permet d'écrire le facteur d'agitation thermique sous la forme :

$$\exp\left(-\frac{T_A^s}{T}\right) \quad \text{avec} \quad T_A^s = \frac{\Delta F^s}{k_B}.$$

- Le second facteur dépend d'une fonction f inconnue, à identifier sur les données expérimentales. Le facteur τ_0^s sert à rendre l'argument de cette fonction sans dimension.

Modèles semi-empiriques Pour des métaux, Sellars et Tegart [133] et Jonas et al. [61] ont proposé, en utilisant de nombreuses données expérimentales, à haute température ($\approx$ 1100C), de modéliser la fonction f par une fonction sinh :

$$f\left(\frac{\tau_g^s}{\tau_0^s}\right) = \left(\sinh\left(\frac{\tau_g^s}{\tau_0^s}\right)\right)^n.$$

Ce modèle couvre une large gamme de contraintes. Il peut se simplifier :

- pour de faibles contraintes $\tau^s \ll \tau_0^s$, c'est-à-dire de faibles vitesses de déformation, cette loi devient une loi puissance :

$$f\left(\frac{\tau_g^s}{\tau_0^s}\right) = \left(\frac{\tau_g^s}{\tau_0^s}\right)^n.$$

- Pour des niveaux de contraintes importants : $\tau^s \gg \tau_0^s$, les fonctions sinh, cosh et exp sont équivalentes :

$$\sinh\left(\frac{\tau^s}{\tau_0^s}\right) \approx \cosh\left(\frac{\tau^s}{\tau_0^s}\right) \approx \frac{1}{2}\exp\left(\frac{\tau^s}{\tau_0^s}\right).$$

Ces modèles sont utilisés pour décrire la plasticité cristalline de nombreux matériaux, notamment l'aluminium, le fer, etc. La forme de la fonction f sera déterminée pour l'UO_2 au paragraphe 3.4.1 à partir de résultats expérimentaux.

3.1.4 Prise en compte de l'écrouissage isotrope dans l'UO_2 monocristallin

Les mécanismes décrits ci-dessus ne traitent pas de l'interaction entre les dislocations des différents systèmes.

Écrouissage Ces interactions sont à l'origine de l'écrouissage, où la résistance du réseau cristallin au glissement des dislocations augmente avec la déformation plastique. Ce phénomène est observé sur les courbes contrainte-déformation issues d'essais de compression effectués sur des monocristaux d'UO_2, par Byron [23] et Sawbridge et Skyes [129].

Mécanisme Les dislocations se gênent au cours de leur glissement :

- si elles sont dans le même plan de glissement, elles s'attirent ou se repoussent, limitant leur propagation ;
- si elles sont dans des plans orthogonaux, elles s'épinglent mutuellement : phénomène des *arbres de la forêt*.

Le blocage des dislocations entraîne une perte de leur mobilité, ce qui se traduit par une augmentation de la limite d'élasticité, et donc par le durcissement du matériau. Celui-ci est modélisé par l'écrouissage *isotrope*.

Par contre, dans ce manuscrit, on ne traite pas de l'écrouissage cinématique qui modélise l'effet Bauschinger, lequel détermine le comportement plastique du matériau sous chargement cyclique. En effet, ce type de chargement est rarement observé dans les transitoires de puissance accidentel et incidentel.

Modèle de Taylor Pour décrire l'écrouissage isotrope, Taylor [142] propose un modèle pour estimer l'interaction entre dislocations. Les dislocations, dans leur mouvement, sont freinées par des forces à longue portée dues aux autres dislocations. La contrainte résolue τ_g^s doit dépasser la contrainte d'écrouissage τ_h due à ces interactions.

Taylor [142], modélise cette contrainte en considérant les forces qui s'opposent à deux dislocations coin parallèles, appartenant au même plan de glissement. La contrainte τ_h qui en résulte peut se déduire des calculs élastiques en milieu isotrope de Volterra, présentés au paragraphe 2.1.3. Pour des dislocations espacées d'une distance l, elle est proportionelle au module de cisaillement G et à la norme b du vecteur de Burgers :

$$\tau_h = \frac{\alpha\, G\, b}{l},$$

avec une constante α de l'ordre de 0.1. La distance l entre dislocations peut être estimée à partir de la densité ρ de dislocations par $l \approx 1/\sqrt{\rho}$, ce qui donne le modèle de Taylor :

$$\tau_h = \alpha\, G\, b\, \sqrt{\rho}. \tag{3.5}$$

D'après de nombreux travaux, notamment : Madec et al. [81], Sevillano [136], Saada et Washburn [126] et Schoeck et Freedman [130], le coefficient α pour les métaux CFC, vaut $\alpha = 0,35 \pm 0,15$. Le modèle de Taylor permet de considérer la densité des dislocations ρ comme une variable interne, caractéristique de la microstructure.

Arbres de la forêt Les densités de dislocations (nous ne considérons ici que les SSDs) ont été notées ρ_m^s, avec un indice m pour désigner leur mobilité. Une partie de ces dislocations va être bloquée, épinglée par des défauts ou d'autre dislocations. Ces dislocations sont dites *forêt*, et sont supposées responsables de l'écrouissage.

Bien que Taylor ait écrit son modèle (3.5) en considérant des dislocations coin appartenant au même plan de glissement, ce modèle est couramment utilisé pour décrire l'écrouissage provenant des dislocations forêt. Il s'écrit alors en fonction de leur densité notée ρ_f :

$$\tau_h = \alpha\, G\, b\, \sqrt{\rho_f}. \tag{3.6}$$

Modification Pour tenir compte des interactions des dislocations du système s avec les dislocations forêt de tous les autres systèmes j, de densité ρ_f^j, le modèle de Taylor (3.6) a été enrichi (cf. Franciosi et al. [37]), la contrainte d'écrouissage des dislocations du système s se calcule en faisant intervenir une matrice d'interaction a_{ij} :

$$\tau_h^s = G\, b \sqrt{\sum_j a_{sj}\, \rho_f^j}. \tag{3.7}$$

Coefficients d'interaction La matrice d'interaction a_{ij} peut être calculée par Dynamique des Dislocations Discrète (DDD) (cf. Madec et al. [81]). Elle a été calculée pour l'UO_2 par Portelette et al. [118]. Leur

résultats sont présentés dans l'annexe C : la matrice d'interaction C.1 et le tableau C.2 précisent le type d'interaction et la valeur des coefficients pour les systèmes appartenant à trois familles de glisement. Les valeurs trouvées par Portelette et al. [118] sont proches des coefficients d'interaction donnés par Kubin et ses collègues [74, 81], pour les cristaux cubiques. Pour la plupart des interactions, leurs coefficients sont égaux et peuvent être remplacées par une valeur moyenne $\bar{a}$ telle que :

$$\bar{a} = \sqrt{\alpha} \quad \text{avec} \quad \alpha = 0,35 \pm 0,15.$$

3.1.5 Évolution des densités de dislocations

Au cours de la déformation, les densités de dislocations évoluent, par plusieurs phénomènes que nous décrivons ci-dessous.

Interactions Dans chaque système de glissement s se trouvent deux types de dislocations :

- les dislocations mobiles, de densité ρ_m^s qui créent de la plasticité en se déplaçant, dont l'accroissement est donné par la loi d'Orowan (3.3) :
$$\dot{\gamma}^s = b\,\rho_m^s\,V_g^s; \tag{3.8}$$
- et les dislocations forêt, de densité ρ_f^s, responsables de l'écrouissage par la loi de Taylor modifiée (3.7) :
$$\tau_h^s = G\,b\,\sqrt{\sum_j a_{sj}\,\rho_f^j}.$$

Au cours de leur mouvement, les dislocations mobiles croisent des obstacles de différentes natures : dislocations, précipités ou autres, existant dans le matériau. Ces interactions vont modifier les densités de dislocations ρ_m^s et ρ_f^s par les mécanismes de multiplication, de restauration et de stockage décrits ci-dessous.

Multiplication Le mécanisme de Frank et Read [38] est une source qui multiplie la densité de dislocations mobiles. Pour produire une nouvelle dislocation, il suit les étapes ci-dessous, illustrées sur la figure 3.2 :

1. Les segments de dislocations sont épinglés entre deux nœuds de Frank, notés A et B. Ces deux nœuds peuvent être des défauts ponctuels, des précipités ou d'autres dislocations, normales au plan de glissement.
2. Les parties épinglées restent fixes. Sous l'action de la contrainte résolue de glissement τ_g^s, les parties mobiles vont se courber autour de l'épinglage.
3. La boucle ainsi formée va grandir jusqu'à ce que les deux extrémités se rencontrent ; à ce moment, la boucle se sépare en deux pour former une grande boucle et un nouveau segment de dislocations. Ce segment pourra à nouveau se courber et générer une nouvelle boucle de dislocations.

Restauration et stockage Certaines dislocations disparaissent, elles sont éliminées aux interfaces ou surfaces, ou annihilées par combinaison avec des dislocations de signe opposé : c'est le phénomène de restauration.

Certaines dislocations mobiles se bloquent en rencontrant des obstacles : autres dislocations, précipité présents dans le matériau. On parle de stockage.

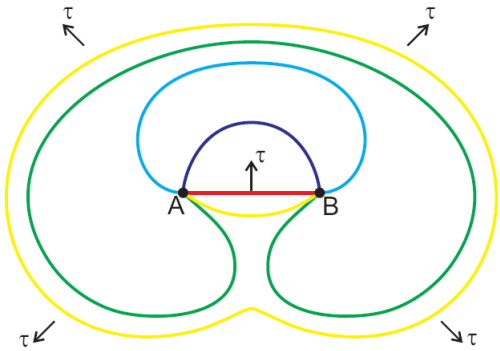


FIGURE 3.2 – Mécanisme de Frank et Read : un segment de dislocation (rouge) fixé à ses extrémités A et B se déforme sous l'action la contrainte résolue τ ; les étapes successives sont représentées en bleu marine, bleu clair, vert et jaune

Kocks-Mecking Plusieurs modèles proposent de reproduire l'évolution des densités de dislocations due aux mécanismes de multiplication, stockage et restauration, décrits ci-dessus. Le modèle de Kocks-Mecking [86, 66] décrit l'évolution des dislocations forêt par l'équation différentielle suivante :

$$\dot{\rho}_f^s = (K_f - C_3\,\rho_f^s)\,|\dot{\gamma}^s|. \tag{3.9}$$

Il modélise deux mécanismes la création de dislocations forêt, et leur disparition, paramétrées par les termes K_f et C_3. L'évolution de la densité $\dot{\rho}_f^s$ du système s n'est possible que si le système est actif, ce que traduit le terme $|\dot{\gamma}^s|$.

Kubin Les phénomènes décrits ci-dessus ne sont pas tous modélisés par le modèle de Kocks-Mecking (3.9), notamment les interactions entre les dislocations mobiles et forêt. Kubin et ses collègues [34, 75] proposent un système d'équation qui fait varier les deux populations :

$$\dot{\rho}_m^s = \left(K_m + C_1 \sum_j \sqrt{\rho_f^j} - K_f - C_2 \sum_j \sqrt{\rho_f^j \rho_m^s}\right) |\dot{\gamma}^s|\,, \tag{3.10a}$$

$$\dot{\rho}_f^s = \left(K_f + C_2 \sum_j \sqrt{\rho_f^j \rho_m^s} - C_3\,\rho_f^s\right) |\dot{\gamma}^s|\,. \tag{3.10b}$$

Différents mécanismes sont ainsi modélisés :

- la multiplication des dislocations mobiles, avec ou sans interaction avec les dislocations forêt (paramètres K_m et C_1),
- la transformation des dislocations mobiles en forêt, avec ou sans interaction avec les dislocations forêt, (paramètres K_f et C_2),
- et la disparition (ou saturation) des dislocations forêt (paramètre C_3).

3.2 Compression uniaxiale sur monocristaux

Les essais de compression uniaxiale vont servir à identifier les vitesses de glissement. Nous décrivons ce type d'essai, et montrons comment accéder expérimentalement à la vitesse de glissement.

3.2.1 Orientation des cristaux

Les systèmes de glissement sont classés en deux (ou trois) familles, décrites au paragraphe 2.3.1. Suivant l'orientation du monocristal, un test activera un ou plusieurs systèmes, appartenant à l'une ou l'autre famille. L'orientation du monocristal est donc un paramètre important des tests, et nous donnons ici la convention d'orientation utilisée.

Repères Pour décrire les tests sur monocristaux, il faut considérer deux repères : le repère du laboratoire noté L, et le repère du monocristal noté c.

Dans le repère du cristal, la normale à un plan cristallin, donnée par ses indices de Miller (hkl), correspond à un vecteur :

$$\boldsymbol{n}_{hkl} = \begin{pmatrix} n_x \\ n_y \\ n_z \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}} \begin{pmatrix} h \\ k \\ l \end{pmatrix}. \tag{3.11}$$

L'orientation utilisée en cristallographie est la suivante : une normale (h, k, l) coïncide avec la direction de compression $\boldsymbol{e}_z$ dans le repère du laboratoire, ce qui s'écrit :

$$\boldsymbol{n}_{hkl} = \mathbf{a}^T.\boldsymbol{e}_z \quad \text{et} \quad \boldsymbol{e}_z = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{3.12}$$

Dans cette expression, la matrice $\mathbf{a}$ désigne la matrice de Bunge, qui est la matrice de passage du repère du laboratoire au repère cristallin. Son calcul est détaillé dans l'annexe B.

Pôle inverse Pour représenter graphiquement une orientation cristalline, il est classique d'utiliser une figure de pôle inverse. Elle est obtenue par une projection stéréographique, qui est décrite dans l'annexe B.3. Dans cette projection, la direction cristalline $\boldsymbol{n}_{hkl}$ est un point du plan $(x, y, z = 0)$, dont les coordonnées sont données par les formules :

$$x = \frac{n_x}{n_z + 1}, \quad y = \frac{n_y}{n_z + 1}, \quad z = 0.$$

Pour des raisons de symétrie, les orientations possibles des cristaux d'UO_2 sont regroupés dans un triangle standard présenté sur la figure 3.3 dont les sommets sont généralement : $(1, 0, 0)$, $(1, 0, 0)$ et $(1, 1, 1)$.

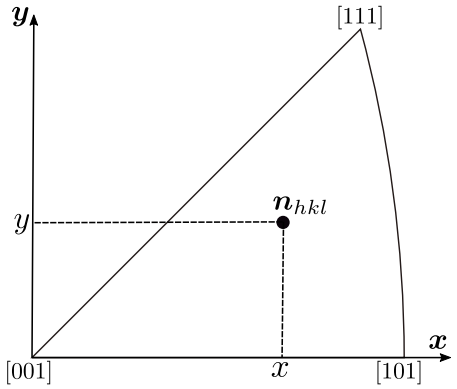


FIGURE 3.3 – Figure de pôle inverse dans le cas d'un matériau à symétrie cubique

3.2.2 Compression uniaxiale sur un monocristal

L'essai de compression sur monocristal est décrit ici de manière qualitative, puis quantitative. Pour simplifier les figures, nous décrivons une traction au lieu d'une compression.

Essai Un cristal, orienté pour que sa normale $\boldsymbol{n}_{hkl}$ coïncide avec la direction de traction $\boldsymbol{e}_z$, subit une déformation contrôlée suivant l'axe $\boldsymbol{e}_z$. L'essai, sur un monocristal cylindrique, est illustré en figure 3.4(a).

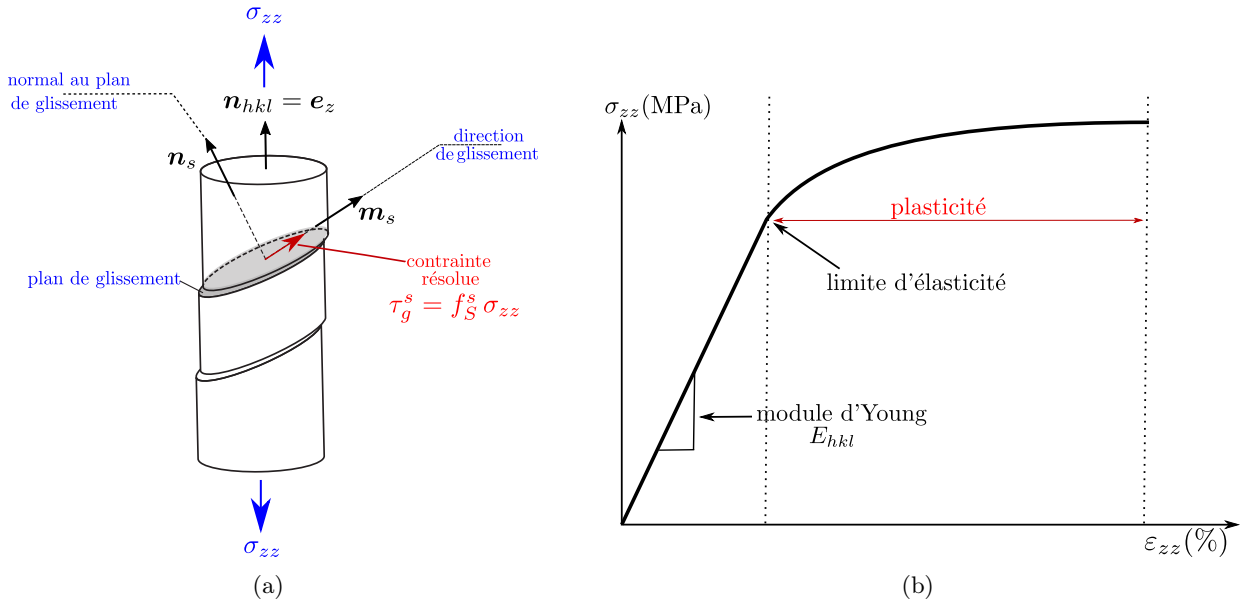


FIGURE 3.4 – Cristal cylindrique d'orientation $\boldsymbol{n}_{hkl}$ lors d'un essai de traction uniaxial, et courbe contrainte-déformation enregistrée

L'allongement et la force résultante sont enregistrés au cours de l'essai, et sont représentés sous forme d'une courbe contrainte-déformation, illustrée en figure 3.4(b). Cette courbe présente plusieurs comportements mécaniques : élastique, puis plastique. Le matériau a initialement un comportement élastique linéaire : la contrainte et la déformation sont liées de façon linéaire, et la déformation est réversible. À partir d'une contrainte dite *limite d'élasticité* (cf. figure 3.4(b)), le matériau commence à se déformer plastiquement, de manière irréversible, par mouvement des dislocations.

Élasticité Pour décrire la courbe d'essai, il faut commencer par la partie élastique. Sur cette partie, l'équation de comportement est simple, mais doit être écrite dans les repères du laboratoire et du cristal :

$$\overline{\sigma}^L = \overline{\overline{C}}^L : \underline{\varepsilon}^L \quad \text{et} \quad \overline{\sigma}^c = \overline{\overline{C}}^c : \underline{\varepsilon}^c. \tag{3.13}$$

Dans le repère du laboratoire, la contrainte lors d'un essai de traction uniaxiale présente une forme simple :

$$\overline{\sigma}^L = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{zz}^L \end{pmatrix} = \sigma_{zz}^L\, \boldsymbol{e}_z \otimes \boldsymbol{e}_z. \tag{3.14}$$

Ainsi, dans ce repère, la contrainte et la déformation dans l'axe valent respectivement :

$$\sigma_{zz}^L = \boldsymbol{e}_z^T . \overline{\sigma}^L . \boldsymbol{e}_z \quad \text{et} \quad \varepsilon_{zz}^L = \boldsymbol{e}_z^T . \underline{\varepsilon}^L . \boldsymbol{e}_z. \tag{3.15}$$

Repère du cristal Pourtant, dans le repère du cristal, la matrice d'élasticité $\overline{\overline{C}}^c$ est simple, et les directions cristallines sont connues. Il faut pouvoir passer les tenseurs des contraintes et déformations d'un repère à l'autre avec la matrice de Bunge :

$$\overline{\sigma}^L = \mathbf{a}.\overline{\sigma}^c.\mathbf{a}^T \quad \text{et} \quad \underline{\varepsilon}^L = \mathbf{a}.\underline{\varepsilon}^c.\mathbf{a}^T. \tag{3.16}$$

Compte tenu de la propriété (3.12) de cette matrice, les contraintes et déformations axiales (3.15) s'écrivent ainsi simplement :

$$\sigma^L_{zz} = \boldsymbol{n}^T_{hkl}.\overline{\sigma}^c.\boldsymbol{n}_{hkl} \quad \text{et} \quad \varepsilon^L_{zz} = \boldsymbol{n}^T_{hkl}.\underline{\varepsilon}^c.\boldsymbol{n}_{hkl}. \tag{3.17}$$

Nous montrons alors dans l'annexe B.4 que la loi de l'élasticité (3.13) prend une forme simple suivant l'axe de traction :

$$\sigma^L_{zz} = E_{hkl}\,\varepsilon^L_{zz}. \tag{3.18a}$$

Le coefficient E_{hkl} correspond au module de Young suivant la direction monocristalline $\boldsymbol{n}_{hkl}$ et vaut :

$$E_{hkl} = \left(\left(\frac{1+\nu}{E} - \frac{1}{2\,G} \right) \frac{h^4+k^4+l^4}{(h^2+k^2+l^2)^2} - \frac{\nu}{E} + \frac{1}{2\,G} \right)^{-1}, \tag{3.18b}$$

où : G, E et ν sont, respectivement, le module de cisaillement, le module de Young et de coefficient de Poisson.

La figure 3.5 montre les variations du module d'Young E_{hkl}, en fonction de l'orientation $\boldsymbol{n}_{hkl}$, en figure de pôle inverse. Ce module est fortement anisotrope, environ deux fois plus important suivant la direction [001] que selon la direction [111].

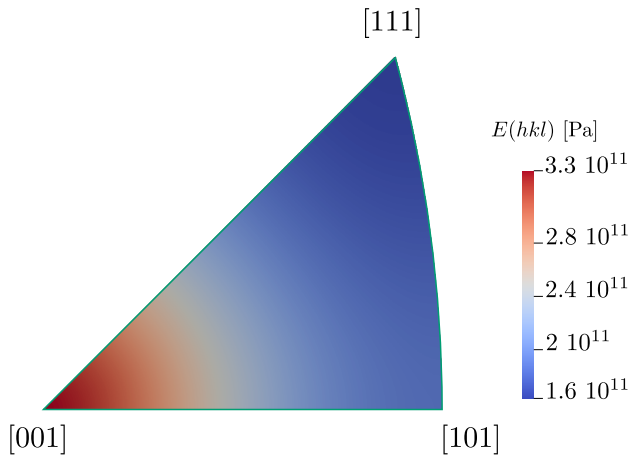


FIGURE 3.5 – Module d'Young du monocristal suivant l'orientation du cristal en figure de pôle inverse

3.2.3 Plasticité de la courbe

La description de la courbe d'essai, illustrée en figure 3.4, continue par la partie plastique de la courbe.

Contrainte résolue Après la déformation élastique, le matériau commence à se déformer plastiquement, de manière irréversible, par mouvement des dislocations. Pour comprendre la physique en jeu, il faut s'appuyer sur les équations (3.1) du glissement.

Les dislocations de chaque système s sont sollicitées par une contrainte résolue :

$$\tau^s_g = \overline{\sigma}^c : \underline{\beta}^s.$$

La contrainte résolue doit se calculer dans le repère du cristal, et implique donc la contrainte $\overline{\sigma}^c$. Celle-ci s'obtient à partir de la contrainte $\overline{\sigma}^L$ dans le repère laboratoire (3.14), avec la règle de transformation (3.16) :

$$\overline{\sigma}^c = \mathbf{a}^T.\overline{\sigma}^L.\mathbf{a} = \sigma^L_{zz}\, \boldsymbol{n}_{hkl} \otimes \boldsymbol{n}_{hkl}. \tag{3.19}$$

Finalement, avec la valeur du tenseur d'orientation (2.28c), la contrainte résolue pour le système s s'écrit :

$$\tau^s_g = \sigma^L_{zz}\, f^s_S \quad \text{avec} \quad f^s_S = (\boldsymbol{m}^{sT}.\boldsymbol{n}_{hkl})\,(\boldsymbol{n}^{sT}.\boldsymbol{n}_{hkl}). \tag{3.20}$$

C'est le produit de la contrainte axiale par un facteur géométrique f^s_S, appelé facteur de Schmid.

Activation des systèmes Lors du test, chaque système de glissement s est sollicité par sa contrainte résolue τ^s_g. Lorsqu'un système dépasse une valeur critique, τ^s_0, appelée contrainte critique résolue, il s'active et produit de la déformation plastique. La limite d'élasticité de la courbe en figure 3.4 correspond au premier système qui s'active.

Les essais de traction (ou compression) sont réalisés dans des directions privilégiées pour n'activer qu'un petit nombre de systèmes, appartenant à une même famille. Souvent, les expérimentateurs font l'hypothèse qu'un seul système s'active. Nous verrons au paragraphe 3.4.3 comment estimer le nombre de systèmes actifs.

Cisaillement Le système activé s produit une distorsion plastique donnée par le modèle de glissement (3.1) :

$$\underline{\dot{E}}^{p,s} = \dot{\gamma}^s\, \underline{\beta}^s \quad \text{avec} \quad \dot{\gamma}^s = b\, \rho^s_m\, V^s_g,$$

dont la déformation axiale peut être calculée avec la formule (3.17) :

$$\dot{\varepsilon}^{pL}_{zz} = \dot{\gamma}^s\, \boldsymbol{n}^T_{hkl}.\underline{\beta}^s.\boldsymbol{n}_{hkl} = \dot{\gamma}^s\, f^s_S.$$

Le facteur de Schmid apparaît à nouveau : c'est le coefficient de proportionnalité entre le cisaillement $\dot{\gamma}^s$ dans le système de glissement et son effet sur la déformation axiale.

En réalité, lors de la déformation, plusieurs systèmes de glissement s'activent. La déformation plastique axiale le long de la direction du chargement est ainsi la somme des déformations produites sur chaque système de glissement :

$$\dot{\varepsilon}^{pL}_{zz} = \sum_s \dot{\gamma}^s\, f^s_S. \tag{3.21}$$

Modèle de glissement axial Finalement, le modèle de glissement (3.1) se simplifie dans le cas de l'essai axial : il se compose de l'équation d'élasticité (3.18), de la contrainte résolue (3.20) et de l'accroissement de déformation plastique (3.21)

$$\sigma = E_{hkl}\,(\varepsilon - \varepsilon^p) \quad \text{avec} \quad \dot{\varepsilon}^p = \sum_F \sum_{s\in F} \dot{\gamma}^F(\tau^s_g)\, f^s_S \quad \text{et} \quad \tau^s_g = \sigma\, f^s_S. \tag{3.22}$$

Ce modèle (3.22) de glissement dans l'axe est très simple. Son expression demande quelques explications :

- Pour simplifier cette écriture, les indices zz et l'exposant L ont été supprimés pour écrire la contrainte axiale, les déformations totale et plastique dans l'axe :

$$\sigma = \sigma^{pL}_{zz}, \quad \varepsilon = \varepsilon^L_{zz} \quad \text{avec} \quad \varepsilon^p = \varepsilon^{pL}_{zz}.$$

- L'objet de ce chapitre est d'identifier les fonctions de cisaillement $\dot{\gamma}^F$ des deux (ou trois) familles sur des essais. Ces fonctions dépendent de la contrainte résolue τ_g^s du système s. Elles doivent vérifier les mêmes conditions (2.65) que les vitesses V_g^F sur lesquelles elles sont construites : elles sont impaires et doivent assurer une dissipation positive :

$$\dot{\gamma}^F(-\tau) = -\dot{\gamma}^F(\tau) \quad \text{et} \quad \dot{\gamma}^F(\tau)\,\tau \geq 0.$$

3.2.4 Interprétation d'un essai

Nous montrons comment interpréter un essai uniaxial.

Les essais Deux type d'essais de traction (ou compression) uniaxiale sont couramment réalisés :

- L'essai de fluage, dans lequel l'échantillon est sollicité par une contrainte axiale σ constante. Le modèle glissement (3.22) devient une équation différentielle, dont la variable est la déformation axiale ε :

$$\dot{\varepsilon} = \sum_F \sum_{s \in F} \dot{\gamma}^F(\sigma\, f_S^s)\, f_S^s.$$

- L'essai de déformation à vitesse contrôlée (DVC) dans lequel la vitesse de déformation $\dot{\varepsilon}$ est constante. Le modèle de glissement (3.22) devient une équation différentielle, dont la variable est la contrainte axiale σ :

$$\dot{\sigma} = E_{hkl} \left(\dot{\varepsilon} - \sum_F \sum_{s \in F} \dot{\gamma}^F(\sigma\, f_S^s)\, f_S^s \right). \tag{3.23}$$

Les essais que nous exploiterons sont des essais DVC.

Écrouissage Les fonctions de cisaillement $\dot{\gamma}^F$ dépendent de la contrainte résolue τ_g^s du système de glissement s. Elles dépendent également des densités de dislocations des différents systèmes, qui évoluent lors de l'écrouissage du matériau. Pour identifier ces fonctions, nous procéderons en deux temps.

- Dans un premier temps, nous considérerons des états du matériau en fin de courbe de traction, avec un important niveau d'écrouissage. Cela permet de considérer les fonctions de cisaillement $\dot{\gamma}^F$ comme ne dépendant que de la contrainte résolue, et cela donnera lieu à l'ajustement d'un modèle simple, en section 3.4.
- Une fois ce premier ajustement réalisé, le modèle sera enrichi de nouvelles variables pour décrire l'évolution des populations de dislocations lors de l'écrouissage. Cela conduira à un nouvel ajustement en section 3.5.

Essai DVC La première étape de cet ajustement a souvent été mise en œuvre par les expérimentateurs dont nous utilisons les données. Lors de leurs essais de compression, ils compriment les échantillons, avec une vitesse déformation $\dot{\varepsilon}$ constante, jusqu'à un niveau de déformation $\varepsilon_{\max}$ donné. Ce niveau est caractérisé par la contrainte $\sigma_{\max}$, solution de l'équation différentielle (3.23).

Les essais sont réalisés dans des directions privilégiées pour n'activer que quelques systèmes d'une famille particulière. Les systèmes actifs, au nombre de n_s, sont ceux dont le facteur de Schmid $|f_S^s|$ est le plus élevé en valeur absolue.

CRSS Pour interpréter les essais, il est classique de se placer dans le système de glissement le plus actif, qui est souvent considéré comme le seul système actif. Deux variables caractérisent l'essai :

- La contrainte résolue obtenue dans le système actif :

$$\tau_{g_{\max}} = \sigma_{\max} f_S^s. \tag{3.24a}$$

  Cette contrainte est appelée conventionnellement par les expérimentateurs Critical Resolved Shear Stress (CRSS), et pourtant, elle ne correspond pas à la contrainte critique résolue τ_0^s.

- La deuxième variable, est la vitesse de cisaillement obtenue dans le système actif en fin d'essai :

$$\dot{\gamma}_{\max} = \dot{\gamma}^F(\tau_{g_{\max}})$$

  En négligeant la déformation élastique, donc en annulant $\dot{\sigma}$ dans l'équation différentielle (3.23), cette variable est calculée à partir de la vitesse de déformation $\dot{\varepsilon}$:

$$\dot{\varepsilon} = \sum_F \sum_{s\in F} \dot{\gamma}^F(\sigma_{\max} f_S^s)\, f_S^s = n_s\, \dot{\gamma}_{\max}\, f_S^s, \quad \text{c'est-à-dire} \quad \dot{\gamma}_{\max} = \frac{\dot{\varepsilon}}{n_s\, f_S^s}. \tag{3.24b}$$

  Les expérimentateurs déterminent le nombre n_s de systèmes actifs par des observations expérimentales. Nous montrons au paragraphe 3.4.3 comment le déterminer plus rigoureusement.

Fonction recherchée Finalement, les deux variables expérimentales, la CRSS $\tau_{g_{\max}}$ et la vitesse de cisaillement $\dot{\gamma}_{\max}$ dépendent l'une de l'autre par la fonction de cisaillement recherchée :

$$\dot{\gamma}_{\max} = \dot{\gamma}^F(\tau_{g_{\max}}). \tag{3.25}$$

Ainsi, en faisant varier le facteur de Schmid à travers l'orientation, ainsi que la vitesse de déformation $\dot{\varepsilon}$, les expérimentateurs obtiennent plusieurs couples $(\dot{\gamma}_{\max}, \tau_{g_{\max}})$ et peuvent remonter à la forme de la fonction $\dot{\gamma}^F$ recherchée.

Il faut noter toutefois que les différents expérimentateurs considèrent des niveaux de déformation $\varepsilon_{\max}$ différents, donc des états d'écrouissage différents. La fonction de cisaillement $\dot{\gamma}^F$ identifiée en dépend. Ce n'est qu'après le travail sur l'écrouissage en section 3.5, qu'il sera possible d'harmoniser les différentes données expérimentales.

3.3 Les données disponibles

Les données expérimentales utilisées pour identifier les vitesses de glissement sont présentées maintenant. Il s'agit d'essais réalisés dans les années 1960-70.

3.3.1 Bilan des essais sur monocristaux d'UO_2

Les essais sont d'abord présentés de manière synthétique.

Des essais de fluage et de vitesse de déformation contrôlée (DVC) ont été réalisés sur des monocristaux d'UO_2 pour identifier les phénomènes physiques influençant la réponse du matériau monocristallin et mesurer leurs effets. Le nombre d'essais disponibles dans la littérature est limité à cause de la difficulté de fabriquer les échantillons de monocristaux. Les essais ont été faits à différentes :

- températures $T \in [600 : 1600]$ en °C,

- contraintes $\overline{\sigma} \in [0 : 150]$ en MPa,
- vitesses de déformation $\dot{\underline{\varepsilon}} \in [10^{-5} : 10^{-3}]$ en s^{-1},
- compositions stoechiométriques (le ratio U/O),
- orientations cristallines.

La plage de température est choisie pour que le glissement des dislocations soit thermiquement activé dans l'UO_2, comme le montre la figure 1.9.

Les résultats de ces essais, publiés dans la littérature, sont :

- des courbes contrainte-déformation, reproduites sur des figures peu précises ;
- des valeurs de CRSS ($\tau_{g_{\max}}$) en fonction de la température, mesurées à des niveaux de déformation maximale $\varepsilon_{\max}$ différents suivant les expérimentateurs ;
- des valeurs de contrainte limite d'élasticité en fonction de la température.

Données Les données expérimentales disponibles dans la littérature sont regroupées dans le tableau 3.1 ci-dessous. Ce dernier décrit le type d'essai effectué, la température de l'essai, la déformation maximale atteinte, la composition stœchiométrique, la vitesse de chargement ainsi que l'orientation de l'axe de compression. Les données manquantes dans le tableau n'ont pas été renseignées par les auteurs.

Référence	Type d'essai	Déformation atteinte (%)	Température (K)	U/O	Vitesse (s^{-1})	Axe de compression (AC)
Lefebvre [77]	DVC et relaxation	0.5, 0.3 et 0.1	973 à 1673	1.993, 2 et 2.001	10^{-5} à 10^{-3}	Lef_1 Lef_2 Lef_3 Lef_4 (100) (110)
Sawbridge et Skyes [129]	DVC	2	1600	2.00	10^{-4}	ϕ et Ω
Yust et Mc Hargue [160]	DVC	–	823 à 1673	2.00	10^{-5} à 10^{-1}	$\phi = 45°$
Yust et Mc Hargue [161]	DVC	–	1073 à 1273	2.06 à 2.10	10^{-5} et 10^{-4}	cf. Yust et Mc Hargue [161]
Byron [23]	DVC	–	873 à 2073	2.001	$3.33\,10^{-4}$	By_1 By_2 By_3
Seltzer et al. [135]	Fluage	–	1373 à 1573	2.0001 à 2.01	–	(100)
Nadeau [104]	DVC	–	1173 à 1873	2.001 et 2.10	$2.8\,10^{-4}$	–

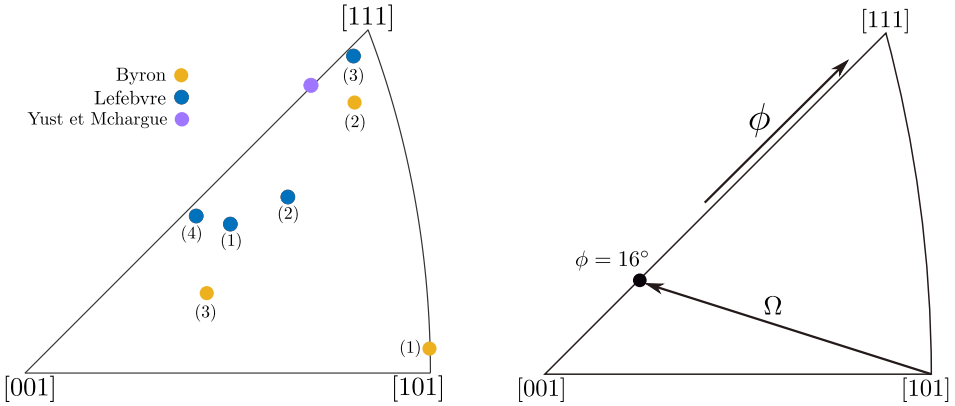
TABLE 3.1 – Description des données expérimentales disponibles dans la littérature

Orientation Les échantillons étudiés par Lefebvre [77], Byron [22] et Yust et Mc Hargue [160], sont compressés selon différentes orientations, reportées sur la figure de pôle inverse 3.6(a). Les échantillons compressés par Sawbridge et Skyes [129] ont des orientations définies par deux angles ϕ et Ω, représentés sur la figure 3.6(b) :

- la première direction cristalline est définie par un angle ϕ, dans le plan porté par les directions [0 0 1] et [1 1 1]. Ces deux directions correspondent à des valeurs de ϕ respectivement égales à 0 et $54,7°$.

- Afin de balayer le centre de la figure de pôle inverse, une seconde direction cristalline est définie par un angle Ω dans le plan porté par les directions : [1 0 1] et la direction qui correspond à $\phi = 16°$.

L'annexe B.5 donne les formules pour transformer ces angles ϕ et Ω en directions cristallines.



(a) Lefebvre, Byron, Yust et Mc Hargue (b) Sawbridge et Skyes

FIGURE 3.6 – (a) Orientations des monocristaux étudiés Lefebvre [77], Byron [22] et Yust et Mc Hargue [160] (b) Angles définis par Sawbridge et Skyes [129]

Les différentes orientations retenues par les expérimentateurs ont été choisies pour activer des systèmes appartenant à une famille précise. La cartographie de la figure 3.9(a) du paragraphe (3.4.3) à venir, permet de savoir quelles familles sont activées par les directions représentées sur la figure 3.6.

3.3.2 Contrôle de la stoechiométrie des échantillons

Les expérimentateurs qui ont fait varier la stœchiométrie des échantillons ont noté l'influence considérable de ce paramètre sur les résultats. Or ce paramètre est très difficile à contrôler expérimentalement.

Effet de la stoechiométrie L'influence de la composition stœchiométrique sur la réponse viscoplastique de l'UO_2 a été étudiée dans les travaux de Seltzer et al. [135], Keller et al. [64], Nadeau [104], et Yust et Mc Hargue [160]. Ses effets se manifestent de différentes manières : par une diminution de CRSS facilitant le glissement des dislocations, ou par l'activation de nouveaux systèmes de glissement. Ils dépendent de la famille de systèmes de glissement activée. Compte tenu de son influence notable, la stœchiométrie doit donc être étroitement contrôlée pendant les essais.

Contrôle La stœchiométrie de l'UO_2 dépend de trois grandeurs thermodynamiques intensives qui déterminent sa composition : la température, la pression totale et la pression partielle de l'oxygène, par la réaction chimique :

$$UO_2\,(\text{solide}) + \frac{x}{2}\,O_2 \quad \rightleftharpoons \quad O_{2+x}.$$

Les expérimentateurs des années 1960-70 prétendaient contrôler la stœchiométrie en travaillant sous atmosphère inerte pour éviter que l'échantillon ne s'oxyde. Mais un tel dispositif ne suffit pas. Récemment, Parise et al. [112] ont étudié l'effet de l'activité de l'oxygène sur les déformations viscoplastiques de l'UO_2. Il en ressort que l'écart x est très difficile à contrôler in situ, et qu'à proximité de la stœchiométrie, un petit écart x à l'équilibre produit des grands effets. Le contrôle de la stœchiométrie n'est possible qu'avec un dispositif spécial pour tamponner, et fixer de ce fait la pression d'oxygène.

Incertitude de mesure Ainsi, les expérimentateurs des années 1960-70 ne contrôlaient pas correctement la stœchiométrie, ce qui peut expliquer les disparités de leurs résultats expérimentaux. Leurs résultats sont donc entachés d'une incertitude expérimentale qu'il faut accepter.

De plus, nous n'utiliserons que les essais sur des échantillons stœchiométriques, car la stœchiométrie étant mal maîtrisée, il est difficile d'ajouter ce paramètre, pourtant important, dans la formulation du modèle de glissement des dislocations à identifier.

3.3.3 Données retenues

Toutes les données expérimentales recueillies dans le tableau 3.1 ne sont pas utilisables.

Critères Nous avons utilisés deux critères pour conserver un jeu de données expérimentales :

1. Nous avons vu que la déformation maximale $\varepsilon_{\max}$ qui définit la CRSS, correspond à un niveau d'écrouissage. Il est donc important de connaître ce paramètre expérimental, pour comparer les résultats entre eux.
2. Les essais réalisés sur des échantillons non stœchiométriques ne sont pas retenus, pour ne pas ajouter la stœchiométrie, difficilement maîtrisable, comme paramètre du modèle.

Finalement, seuls les essais de Lefebvre [77] et de Sawbridge et Skyes [129] sont exploitables. Les essais de ces auteurs sont très complémentaires.

Lefebvre Les essais de Lefebvre sont des essais DVC, réalisés en faisant varier de nombreux paramètres : la vitesse $\dot{\varepsilon}$, la température et la stœchiométrie. Le nombre de directions des échantillons est plutôt faible, mais suffisant pour activer les deux premières familles. Compte tenu de l'analyse de l'essai DVC du paragraphe 3.2.4, cela montre que ces données permettent d'identifier la forme des fonctions $\dot{\gamma}^F$ pour les deux premières familles.

Les données de Lefebvre ne reportent que les CRSS. De plus la déformation maximale $\varepsilon_{\max}$ est faible, de l'ordre de 0.1%. ce qui correspond à un état peu écroui.

Sawbridge et Skyes Sawbridge et Skyes ont réalisé des essais DVC à une seule température $T = 1600\,\mathrm{K}$, avec une seule vitesse de déformation $\dot{\varepsilon} = 10^{-4}\,\mathrm{s}^{-1}$. Ces informations ne permettent pas d'identifier la forme des fonctions $\dot{\gamma}^F$. Pourtant les essais de Sawbridge et Skyes sont très intéressants car ils complètent ceux de Lefebvre :

- Les essais Sawbridge et Skyes mesurent la CRSS pour une déformation maximale de $\varepsilon_{\max} = 2\,\%$, donc pour un état plus écroui que ceux de Lefebvre.
- Les essais Sawbridge et Skyes explorent de nombreuses directions de traction caractérisées par les angles ϕ et Ω de la figure 3.6(b). Les essais suivant l'angle Ω sont une occasion pour les auteurs d'examiner l'existence d'une éventuelle troisième famille.
- En plus des CRSS, l'article présentent des courbes de compression dans des figures, certes peu précises. Il est toutefois possible d'en récupérer les données expérimentales, ce qui permettra de modéliser l'écrouissage en section 3.5.

Finalement les données de Lefebvre et Sawbridge et Skyes sont très complémentaires pour identifier un modèle de glissement des dislocations en trois étapes :

1. les données de Lefebvre permettent d'identifier la forme des fonctions $\dot{\gamma}^F$ pour un matériau peu écroui, et de formuler un premier modèle de matériau déjà écroui
2. Les CRSS de Sawbridge et Skyes permettent de reprendre l'ajustement du premier modèle pour un niveau d'écrouissage plus important.
3. Les courbes de compression de Sawbridge et Skyes permettent enfin d'enrichir le premier modèle pour prendre en compte l'écrouissage.

3.4 Ajustement sur matériau déjà écroui

L'objectif de cette section est de proposer un modèle simplifié de glissement des dislocations, valable pour un matériau dans un état d'écrouissage donné.

3.4.1 Choix de la forme de vitesse pour l'UO_2

La forme du modèle simplifié de glissement des dislocations peut maintenant être déterminée.

Forme proposée Cette forme suit la proposition (3.4) du paragraphe 3.1.3 : une loi d'Arrhenius pour l'activation thermique, et un modèle de dépendance à la contrainte f, qui dépend de la contrainte résolue τ_g^s :

$$\dot{\gamma}^F(\tau_g^s) = \rho_m^s\, b^2\, \nu_D\, \exp\left(-\frac{\Delta F^F}{k_B\, T}\right)\, f\left(\frac{\tau_g^s}{\tau_0^F}\right).$$

Les résultats du paragraphe 3.2.4 ont montré que dans les essais de fluage ou DVC, on mesure des vitesses de cisaillement $\dot{\gamma}_{\max}$ et des CRSS $\tau_{g_{\max}}$ qui se correspondent, ce qui permet de remonter à la forme (3.25) de la fonction de cisaillement $\dot{\gamma}^F$:

$$\dot{\gamma}_{\max} = \dot{\gamma}^F(\tau_{g_{\max}}) = \rho_m^s\, b^2\, \nu_D\, \exp\left(-\frac{\Delta F^F}{k_B\, T}\right)\, f\left(\frac{\tau_{g_{\max}}}{\tau_0^F}\right),$$

donc à la forme de la fonction f. Ainsi, les essais reportés dans la littérature sur l'UO_2 permettent de fixer la forme de cette fonction.

Littérature Les quelques travaux sur l'UO_2 de la littérature proposent une loi puissance pour la fonction f :

- Seltzer et al. [135] ont soumis des monocristaux d'UO_2 à des essais de fluage sur une large plage de température : de 1100°C à 1400°C. Ils ont reporté les vitesses d'essai $\dot{\varepsilon}$ et la contrainte de fluage σ dans le diagramme $\log(\sigma)$-$\log(\dot{\varepsilon})$ de la figure 3.7(a). Pour chaque température d'essai, il est possible d'ajuster les points expérimentaux par une droite de pente n. Ainsi, la vitesse de fluage dépend de la contrainte par une loi puissance $\dot{\varepsilon} \propto \sigma^n$, dont l'exposant n dépend de la stœchiométrie. Pour une composition stœchiométrique de l'UO_2, l'exposant vaut $n = 7$.

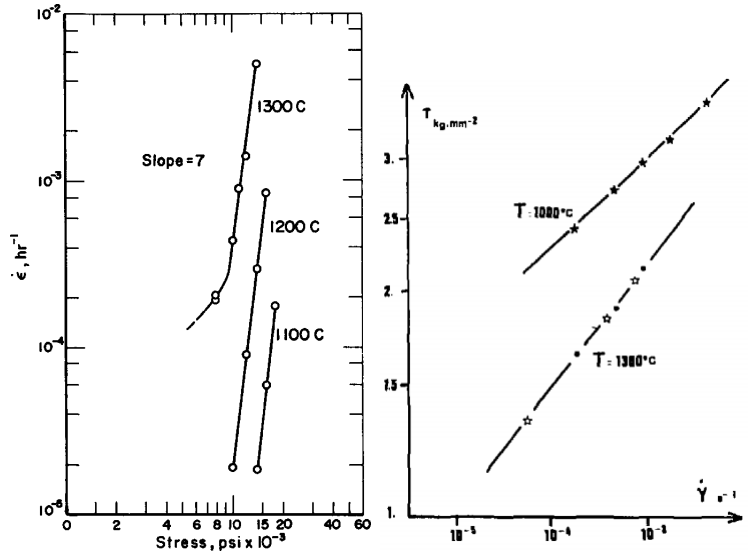
  Compte tenu des relations (3.24) :

  $$\dot{\gamma}_{\max} = \frac{\dot{\varepsilon}}{n_s\, f_S^s} \quad \text{et} \quad \tau_{g_{\max}} = \sigma\, f_S^s,$$

  la fonction $\dot{\gamma}^F$, et donc la fonction f, sont également des lois puissance, d'exposant n.

  Cette loi puissance a pu être observée sur des polycristaux, dans des travaux réalisés plus tard par les mêmes auteurs [134].

- Les travaux de Lefebvre [77] confirment cela. Des tests DVC ont été réalisés sur des monocristaux d'UO_2 à des températures allant de 700°C à 1400°C. Une loi puissance a été identifiée entre la vitesse de cisaillement $\dot{\gamma}_{\max}$ et la CRSS $\tau_{g_{\max}}$, comme le montre la figure 3.7(b). Les exposants dépendent de la température, et sont proches des valeurs déterminées par Seltzer et al. [135].



(a) Seltzer et al. [134] (b) J.M. Lefebvre [77]

FIGURE 3.7 – Lois puissance observées par Seltzer et al. [134] et Lefebvre [77]

Modèle choisi Finalement, avec une loi puissance pour la dépendance à la contrainte, la fonction de cisaillement (3.4) de la famille F peut s'écrire :

$$\dot{\gamma}^F(\tau_g^s) = \exp\left(-\frac{T_A^F}{T}\right)\left(\frac{|\tau_g^s|}{a_A^F}\right)^{n_F}\operatorname{sgn}(\tau_g^s) \quad \text{avec} \quad T_A^F = \frac{\Delta F^F}{k_B} \quad \text{et} \quad a_A^F = \frac{\tau_0^F}{(\rho_m^s\, b^2\, \nu_D)^{1/n_F}}. \tag{3.26}$$

Pour chaque famille F, ce modèle dépend de trois constantes : T_A^F, a_A^s et n_F. Dans la suite, pour simplifier, nous supposons que les familles ont une même température d'activation et une même loi puissance :

$$T_A^F = T_A \quad \text{et} \quad n_F = n.$$

Les coefficients a_A^F restent différents pour chaque famille, pour permettre de les activer différemment. Dans la suite, à part au paragraphe 3.4.6, qui s'interroge sur l'existence d'une éventuelle troisième famille, seules deux familles seront considérées. Dans ce cas, les essais sur monocristaux doivent permettre d'ajuster les quatre coefficients du modèle : T_A, n, a_A^1 et a_A^2.

3.4.2 Méthode d'ajustement

Le modèle de glissement peut maintenant être ajusté par moindres carrées sur les données expérimentales. La méthode d'ajustement est maintenant présentée.

Modèle Le modèle de l'essai DVC se compose de l'équation différentielle (3.23), vérifiée par la contrainte axiale σ, et du choix des fonctions de cisaillement (3.26) de deux (ou trois) familles :

$$\dot{\sigma} = E_{hkl}\left(\dot{\varepsilon} - \sum_F \sum_{s\in F} \dot{\gamma}^F(\sigma\, f_S^s)\, f_S^s\right) \quad \text{avec} \quad \dot{\gamma}^F(\tau_g^s) = \exp\left(-\frac{T_A}{T}\right)\left(\frac{|\tau_g^s|}{a_A^F}\right)^n \operatorname{sgn}(\tau_g^s). \tag{3.27}$$

Cette équation est intégrée jusqu'à la déformation $\varepsilon_{\max}$ choisie par les expérimentateurs pour mesurer la CRSS, c'est-à-dire jusqu'au temps :

$$t_{\max} = \frac{\varepsilon_{\max}}{\dot{\varepsilon}} \quad \text{avec} \quad \varepsilon_{\max} = \varepsilon(t_{\max}) \quad \text{et} \quad \sigma_{\max} = \sigma(t_{\max}).$$

Moindres carrés La contrainte obtenue $\sigma_{\max}$ en fin d'essai dépend de deux jeux de paramètres :

- les conditions de l'essai : la température T, la déformation maximale $\varepsilon_{\max}$, la vitesse $\dot{\varepsilon}$ et la direction de compression ϖ, qui sont rangés dans un vecteur :

$$X^\intercal = (T, \varepsilon_{\max}, \dot{\varepsilon}, \varpi),$$

- et les paramètres des fonctions de cisaillement, rangés dans un vecteur :

$$P^\intercal = (T_A, n, a_A^1, a_A^2).$$

La contrainte maximale peut ainsi s'écrire symboliquement :

$$\sigma_{\max} = \sigma_{\max}(X, P)$$

Expérimentalement, chaque essai DVC, indicé par i, se fait dans les conditions X_i et obtient une contrainte $\sigma_{\max}^i$. Les paramètres sont ajustés pour minimiser l'écart entre la mesure et le modèle, au sens des moindres carrés :

$$P = \underset{P^*}{\operatorname{argmin}} \sum_i \Big(\sigma_{\max}^i - \sigma_{\max}(X_i, P^*)\Big)^2.$$

État adjoint La méthode utilisée pour minimiser les moindres carrés est la méthode de Gauss Newton. Elle nécessite de pouvoir calculer les dérivées partielle de la fonction $\sigma_{\max}(X, P)$ par rapport aux paramètres p du vecteur P :

$$\frac{\partial \sigma_{\max}}{\partial p}(X, P)$$

Une méthode d'état adjoint est utilisée pour cela.

La dérivation partielle de l'équation différentielle (3.23) par rapport à un des paramètres p conduit à :

$$\frac{\partial y_p}{\partial t} = -E_{hkl} \sum_F \sum_{s \in F} \left(\frac{\partial \dot{\gamma}^F}{\partial \sigma} \, f_S^s \, y_p + \frac{\partial \dot{\gamma}^F}{\partial p} \right) f_S^s, \quad \text{avec} \quad y_p = \frac{\partial \sigma}{\partial p}.$$

C'est une équation différentielle de variable y_p. La dérivée partielle cherchée vaut :

$$y_p(t_{\max}) = \frac{\partial \sigma_{\max}}{\partial p}(X, P).$$

Ainsi, pour connaître la contrainte maximale $\sigma_{\max}$ et ses dérivées partielles, il faut intégrer un système différentiel, composé de l'équation principale (3.23), et de ses dérivées partielles par rapport à tous les paramètres $p \in P$:

$$\begin{aligned}
\dot{\sigma} &= E_{hkl} \left(\dot{\varepsilon} - \sum_F \sum_{s \in F} \dot{\gamma}^F (\sigma \, f_S^s) \, f_S^s \right), \\
\dot{y}_p &= -E_{hkl} \sum_F \sum_{s \in F} \left(\frac{\partial \dot{\gamma}^F}{\partial \sigma} (\sigma \, f_S^s) \, f_S^s \, y_p + \frac{\partial \dot{\gamma}^F}{\partial p} (\sigma \, f_S^s) \right) f_S^s \quad \forall p \in P.
\end{aligned}$$

Lefebvre Le modèle est d'abord ajusté sur les données de Lefebvre [77], car elles sont complètes :

- elles sont obtenues à plusieurs températures, ce qui permet d'ajuster la température d'activation T_A ;
- elles sont obtenues avec plusieurs vitesses $\dot{\varepsilon}$, ce qui permet de vérifier la loi puissance et d'ajuster son exposant n ;
- elles sont obtenues dans des directions choisies pour activer la première ou la deuxième famille, ce qui permet d'ajuster les coefficients a_A^1 et a_A^2 des deux familles.

Les valeurs ajustées de ces paramètres sont regroupées dans le tableau 3.2 ci-dessous. Les valeurs identifiées de T_A et n sont comparables à celles identifiées par Seltzer et al. [135].

Coefficient	T_A [K]	n	a_A^1	a_A^2
Valeur	20 697	9.26	$1.19\,10^7$	$2.29\,10^7$

TABLE 3.2 – Paramètres de la fonction de cisaillement (3.26) pour les familles 1 et 2 ajustés sur les données de Lefebvre [77]

Qualité d'ajustement Pour apprécier la qualité d'un ajustement par moindres carrés, il faut pouvoir comparer les données expérimentales avec les réponses du modèle ajusté. C'est l'objet de la figure 3.8, qui présente en abscisse la mesure de la contraintes σ et en ordonnée la réponse du modèle. Les points sont proches de la ligne noire, qui représente la bissectrice $y = x$, ce qui traduit un ajustement de qualité : le modèle est bien choisi, et ses paramètres bien ajustés.

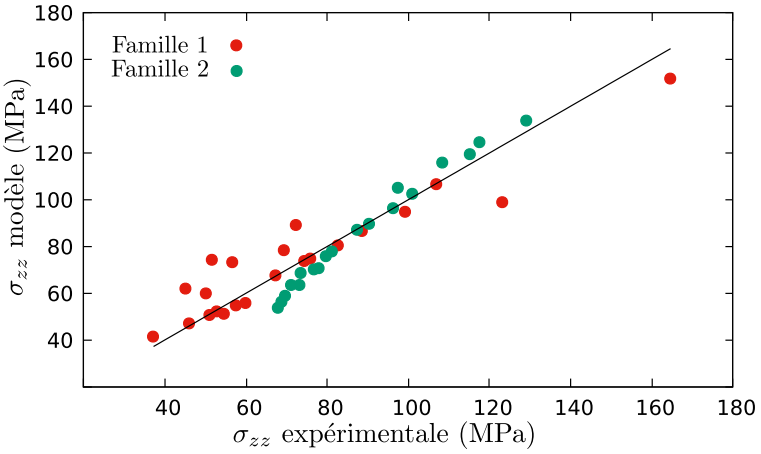


FIGURE 3.8 – Comparaison de la contrainte axiale σ entre les données expérimentales de Lefebvre [77] et la réponse du modèle ajusté

Les points de la figure 3.8 sont organisés suivant la famille sollicitée pendant l'essai : en rouge la première famille et en vert la deuxième famille. Les points de la deuxième famille sont mieux ajustés que ceux de la première famille. D'après Lefebvre [77], cette plus grande dispersion pourrait être due à un effet géométrique provenant de la forme des échantillons testés. En effet, les résultats sont issus de deux lots distincts de monocristaux, pour lesquels les éprouvettes étaient cylindriques et parallélépipédiques.

3.4.3 Systèmes de glissement activés

Pour examiner plus attentivement l'ajustement réalisé, il faut pouvoir estimer le nombre n_s de systèmes actifs lors de chaque essai.

Système le plus actif Avec la forme (3.26) choisie pour le glissement, la déformation plastique due au glissement des dislocations (3.22) peut s'écrire :

$$\dot{\varepsilon}^p = \exp\left(-\frac{T_A}{T}\right) |\sigma|^n \operatorname{sgn}(\sigma) \sum_F \sum_{s\in F} \frac{|f_S^s|^{n+1}}{{a_A^F}^n}. \tag{3.28}$$

La plupart des systèmes de cette somme sont inactifs. Le système $s_{\max}$, appartenant à la famille $F_{\max}$, qui contribue le plus à cette création de plasticité vérifie :

$$\frac{|f_S^{s_{\max}}|^{n+1}}{{a_A^{F_{\max}}}^n} \geq \frac{|f_S^s|^{n+1}}{{a_A^F}^n} \quad \text{pour les autres systèmes } s. \tag{3.29}$$

C'est le système le plus actif.

Nombre de systèmes actifs Un tel système peut ne pas être unique. S'il y a un nombre de n_s de systèmes actifs, la somme (3.28) peut alors s'écrire :

$$\dot{\varepsilon}^p = \exp\left(-\frac{T_A}{T}\right) |\sigma|^n \operatorname{sgn}(\sigma)\, n_s \frac{|f_S^{s_{\max}}|^{n+1}}{{a_A^{F_{\max}}}^n}.$$

Par comparaison avec la somme (3.28), le nombre de systèmes actifs peut ainsi s'écrire :

$$n_s = \frac{1}{|f_S^{s_{\max}}|^{n+1}} \sum_F \sum_{s\in F} |f_S^s|^{n+1} \left(\frac{a_A^{F_{\max}}}{a_A^F}\right)^n. \tag{3.30}$$

Ce nombre n_s, ainsi calculé, est le plus souvent non entier. Cette expression prend en compte des systèmes auxiliaires qui s'activent moins que le système principal.

Valeur Le nombre n_s de systèmes actifs a été calculé avec les valeurs ajustées sur les données de Lefebvre, et reportées dans le tableau 3.2. Il est représenté sur la figure de pôle inverse 3.9(a) en fonction de toutes les directions possibles. Deux points sont à noter :

- Il peut y avoir jusqu'à quatre systèmes actifs. Lefebvre [77] a cherché à observer les systèmes de glissement actifs sur des échantillons compressés suivant la direction [101]. Il en a a observé deux, alors qu'il aurait pu en voir quatre.
- La figure montre à quelle famille appartiennent les systèmes actifs, suivant la direction de compression. La frontière entre l'activité des deux familles et déterminées par leurs coefficients a_A^1 et a_A^2. Ainsi, comme $a_A^1 < a_A^2$, la première famille s'active plus facilement que la seconde.
- La figure 3.9(b) montre les valeurs du facteur de Schmid maximum de chaque famille en figure de pôle inverse, en fonction de toutes les directions possibles. Les valeurs les plus fortes correspondent aux systèmes qui vont s'activer.

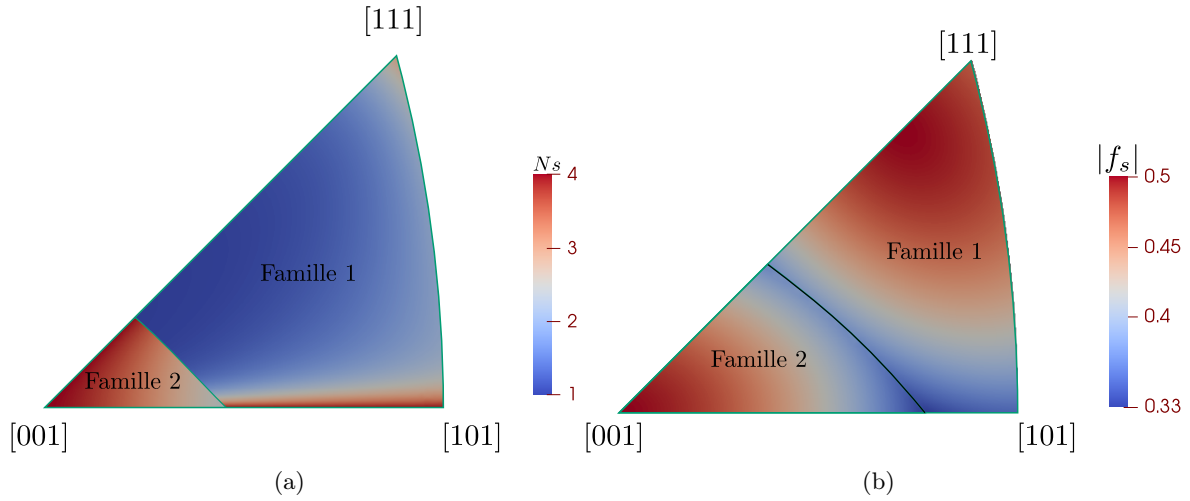


FIGURE 3.9 – (a) Nombre de systèmes activés (b) Facteur de Schmid maximun par famille

Simplification Loin de la limite d'activation entre les familles 1 et 2, l'expression (3.30) du nombre de systèmes actifs se simplifie pour ne plus dépendre que de l'exposant n :

$$n_s = \frac{1}{|f_S^{s_{\max}}|^{n+1}} \sum_F \sum_{s \in F} |f_S^s|^{n+1}.$$

3.4.4 Résultats d'ajustement et analyse

Une fois déterminé le nombre n_s de systèmes actifs, il est maintenant possible d'examiner les résultats de l'ajustement de la fonction de cisaillement (3.26) sur les données de Lefebvre.

Construction Les essais de compression de Lefebvre sont caractérisés par leurs conditions expérimentales : la température T, la vitesse $\dot{\varepsilon}$ et la direction de compression ϖ. En fin d'essai, caractérisée par une déformation maximale $\varepsilon_{\max}$, une contrainte axiale σ est mesurée.

Nous avons vu que ces données ne sont pas faciles à interpréter, et qu'il faut leur préférer la vitesse de cisaillement et la CRSS, définies dans le système le plus actif par les relations (3.24) :

$$\dot{\gamma} = \frac{\dot{\varepsilon}}{n_s \, f_S^s} \quad \text{et} \quad \tau_g = \sigma \, f_S^s.$$

Pour calculer cette transformation, il faut pouvoir calculer le nombre de systèmes actifs avec la relation (3.30).

Les courbes que nous construisons pour examiner les résultats d'ajustement sont construites sur ces changements de variables.

Comparaison Les paramètres du modèle (3.27) de compression DVC ont été ajustés sur les données expérimentales de Lefebvre [77]. Une première comparaison est présentée en figure 3.10. Le modèle, présenté sous forme de courbes, est comparé aux points expérimentaux dans un espace 3D représentant la vitesse de cisaillement $\dot{\gamma}^s$ en fonction de la température T et de la CRSS. Une couleur est attribuée à la famille active : rouge pour la famille 1 et bleue pour la famille 2.

Le modèle représente bien les points expérimentaux, il prédit bien la dépendance de la CRSS en fonction de la température et de la vitesse de cisaillement. Dans les conditions équivalentes de température T et de

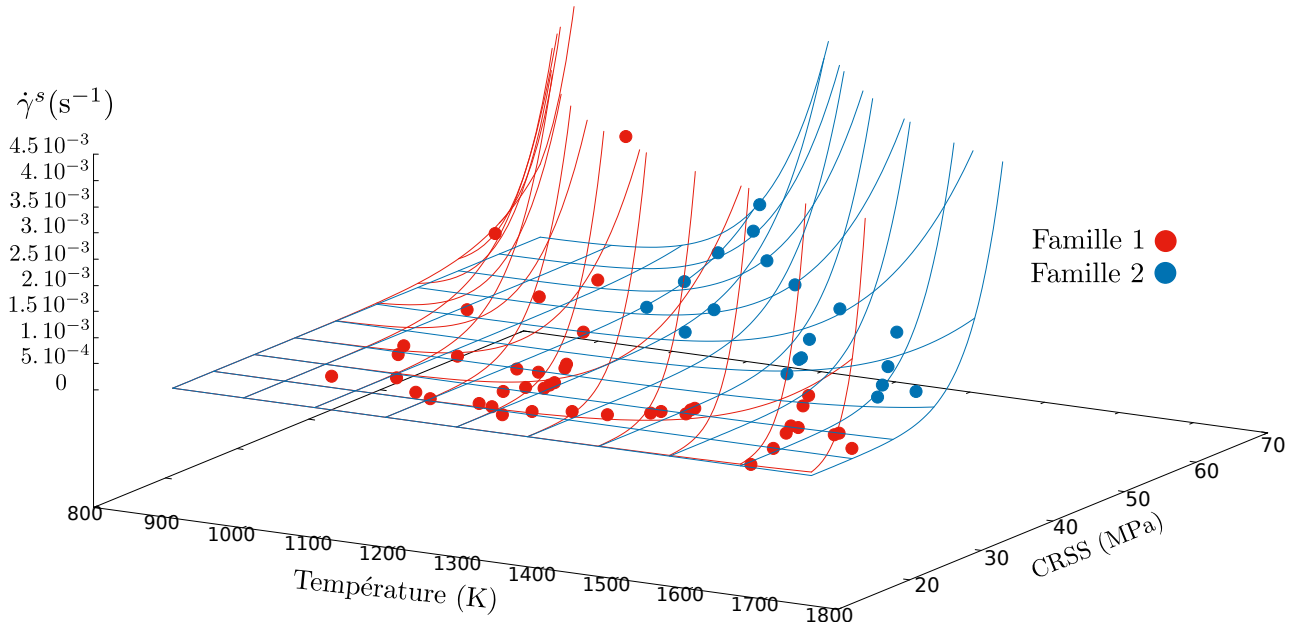


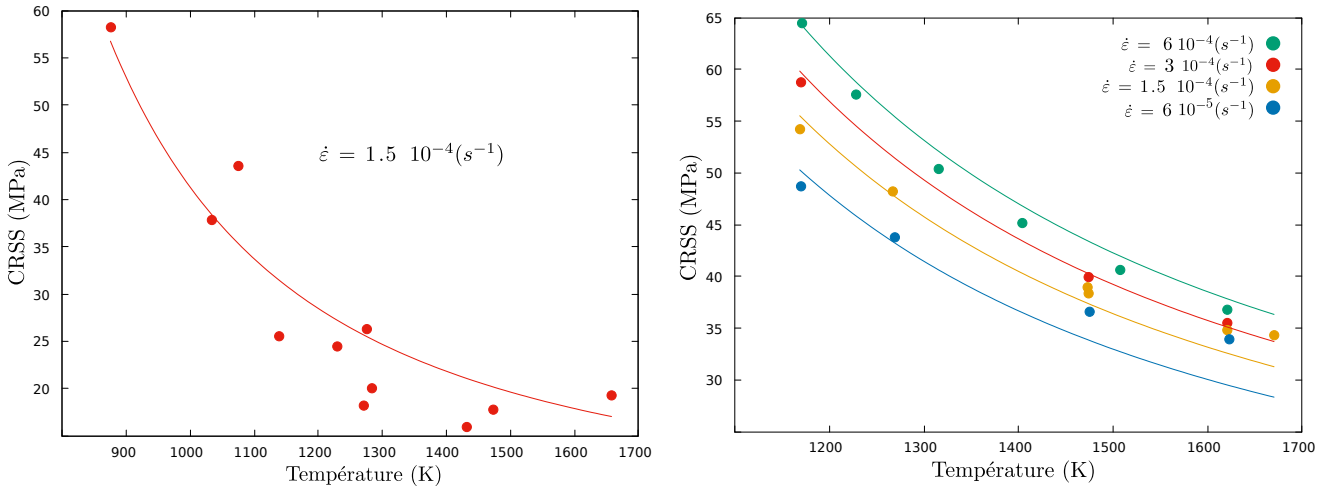
FIGURE 3.10 – Modèle ajusté vs. données brutes de Lefebvre

vitesse d'essai $\dot{\varepsilon}$, l'activation la première famille est plus facile que celle de la deuxième. C'est dû aux valeurs ajustées des paramètres $a_A^1 < a_A^2$. Ce résultat est cohérent avec les observations expérimentales figurant dans l'ensemble des travaux de Rapperport et Huntress [122], Sawbridge et Skyes [129], Lefebvre [77] et Alamo et al. [5].

Modèle de CRSS La combinaison de l'expression (3.24) de la vitesse de cisaillement et du choix (3.26) de la fonction de glissement permet de formuler un modèle pour décrire les variations de CRSS du système actif en fonction des conditions expérimentales : température T, vitesse $\dot{\varepsilon}$, et direction ϖ, représentée par le facteur de Schmid f_S^s :

$$\tau_g^s = a_A^F \exp\left(\frac{T_A}{n\,T}\right) \left(\frac{|\dot{\varepsilon}|}{n_s\,|f_S^s|}\right)^{1/n} \mathrm{sgn}(f_S^s\,\dot{\varepsilon}).$$

La variation de CRSS donnée par cette formule est tracée en fonction de la température sur les deux figures 3.11(a) et 3.11(b) pour les deux familles. Chaque courbe correspond à une vitesse $\dot{\varepsilon}$ expérimentale. Ces courbes sont comparées aux données expérimentales de Lefebvre [77]. La comparaison est satisfaisante pour les deux familles : les courbes théoriques reproduisent bien les variations de la CRSS des données expérimentales en fonction de la température.



(a) Famille 1 (b) Famille 2

FIGURE 3.11 – Dépendance de la CRSS en fonction de la température pour plusieurs vitesses d'essai $\dot{\varepsilon}$

Vitesse de cisaillement La figure 3.12 reproduit la variation de CRSS en fonction de différentes vitesses de cisaillement. Les données expérimentales correspondent à celles de la figure 3.7(b). Les courbes proviennent du modèle ajusté, qui reproduit bien les données expérimentales pour les deux températures.

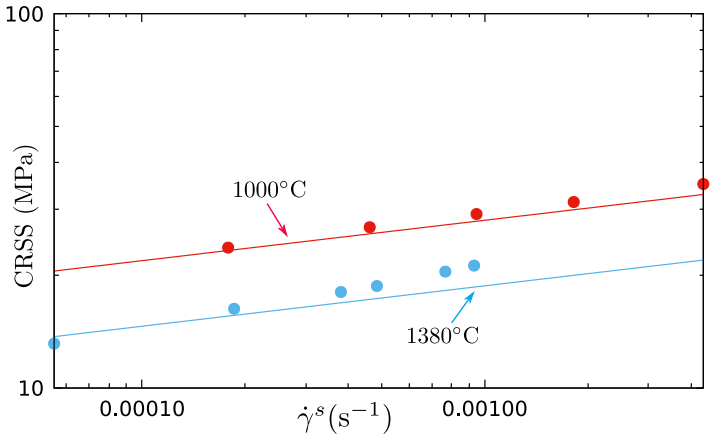


FIGURE 3.12 – Variation de CRSS en fonction de la vitesse de déformation pour les deux températures 1000°C et 1380°C, famille 1

3.4.5 Cristal plus écroui

Le modèle de vitesse de glissement a été ajusté sur les données de Lefebvre, sur un cristal peu écroui. Comment évolue ce modèle avec un niveau d'écrouissage plus important, comme celui des données de Sawbridge et Skyes [129] ?

Influence de l'écrouissage En figure 3.8, pour apprécier la qualité de l'ajustement, nous avions comparé la contrainte axiale σ expérimentale avec la réponse du modèle. Le modèle ajusté sur les données de Lefebvre était comparé à ces mêmes données. En figure 3.13, le même modèle est également comparé aux données de Sawbridge et Skyes [129]. Ces données sont systématiquement supérieures aux réponses du modèle.

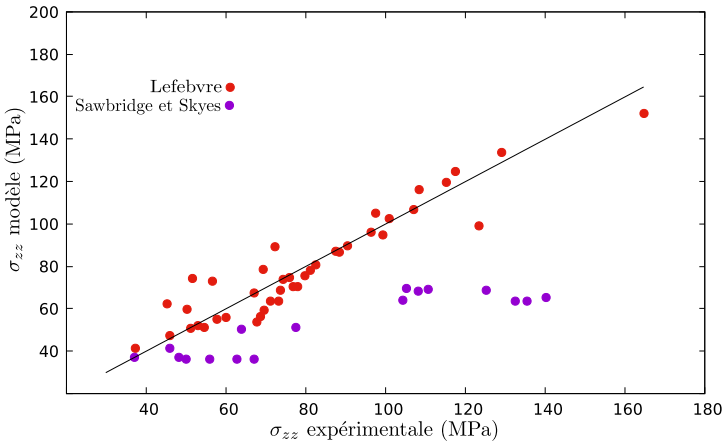


FIGURE 3.13 – Comparaison de la contrainte axiale σ entre les données expérimentales de Lefebvre [77] et de Sawbridge et Skyes [129] avec la réponse du modèle ajusté

Cela provient du niveau d'écrouissage des données de Sawbridge et Skyes, qui ont été obtenues avec une déformation de $\varepsilon_{\max} = 2\%$, bien supérieure à celui des échantillons de Lefebvre. La figure 3.14 montre la sensibilité de la contrainte au niveau de mesure de la déformation correspondant : sur la courbe $\phi = 2°$, les niveaux de déformation imposés par chaque auteur sont représentés : 0.5% pour Lefebvre et 2% pour Sawbridge et Skyes. Cela entraîne une différence importante de CRSS.

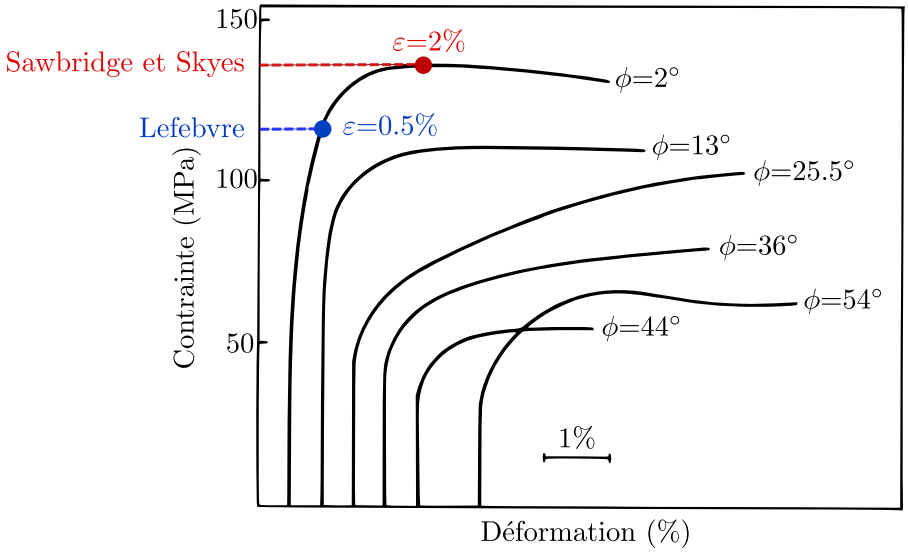


FIGURE 3.14 – Courbes contrainte-déformation issues des résultats expérimentaux de Sawbridge et Skyes [129] ; l'angle ϕ correspond à l'orientation notée sur la figure 3.6

Ajustement Les données de Sawbridge et Skyes [129] peuvent servir à ajuster les paramètres de la vitesse de glissement (3.26). L'ajustement ne peut pas porter sur les paramètres suivants :

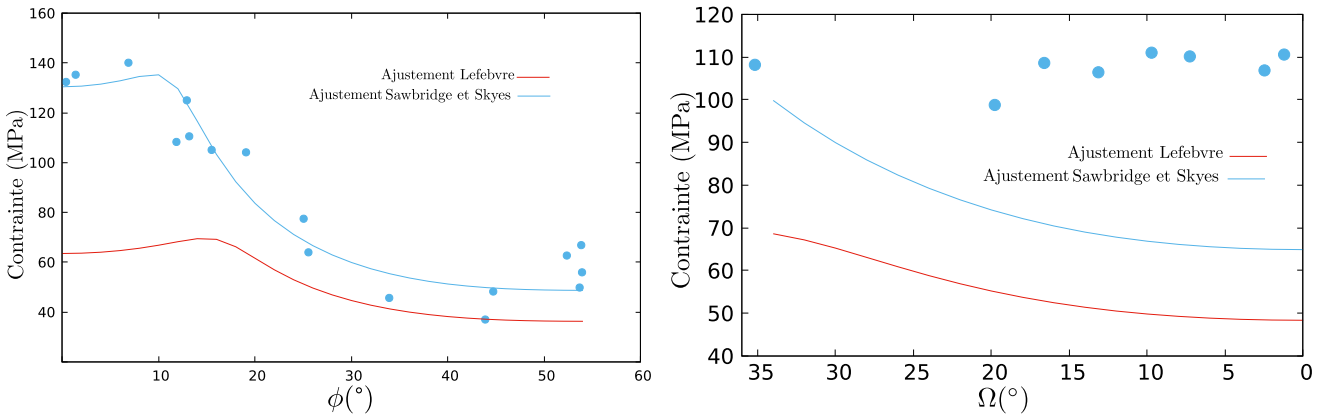
- sur la température d'activation T_A, car tous les essais sont réalisés avec une seule température de $T = 1600$ K ;
- sur l'exposant n de la loi puissance, car les essais sont réalisés avec une seule vitesse de déformation $\dot{\varepsilon} = 10^{-4}\,\mathrm{s}^{-1}$.

L'ajustement porte donc sur les coefficients a_A^1 et a_A^2, et converse les valeurs trouvées pour T_A et n. Les résultats du nouvel ajustement sont rassemblés dans le tableau 3.3.

Coefficient	T_A [K]	n	a_A^1	a_A^2
Valeur	20 697	9.26	$1.60\,10^7$	$4.70\,10^7$

TABLE 3.3 – Paramètres de la fonction de cisaillement (3.26) pour les familles 1 et 2 ajustés sur les données de Sawbridge et Skyes [129]

Qualité de l'ajustement Les essais de compression de Sawbridge et Skyes [129] ne font varier que l'orientation du cristal, caractérisée par les angles ϕ et Ω représentés sur la figure 3.16. La contrainte mesurée pour ces deux angles, est comparée aux prédictions du modèle sur les figures 3.15(a) et 3.15(b) : en bleu, le modèle est ajusté avec les données Sawbridge et Skyes, en rouge avec celles de Lefebvre.



(a) Angle ϕ (b) Angle Ω

FIGURE 3.15 – Contrainte axiale en fonction de l'orientation correspond aux angles ϕ et Ω décrits sur la figure 3.16

Quelques remarques concernent le résultat de cet ajustement :

- La figure 3.16 montre les directions représentées par les angles ϕ et Ω. Elle montre également quelle famille est active lorsque ces angles varient, et combien de systèmes sont alors activés. Cela permet de mieux interpréter les courbes des figures 3.15(a) et 3.15(b).
- La comparaison du modèle avec des paramètres ajustés sur les données de Lefebvre [77] et sur celles de Sawbridge et Skyes [129] confirment ce qui précèdent. L'écrouissage augmente la CRSS. C'est l'objet de la section 3.5 de modéliser cela.
- La figure 3.15(a) présente la contrainte en fonction de l'angle ϕ. L'ajustement est correct. La courbe est séparée en deux zones d'influence des deux familles de systèmes.

  On peut noter toutefois une dispersion des valeurs expérimentales, particulièrement facile à observer vers $\phi \approx 54°$. Cette dispersion peut être attribuée à l'incertitude expérimentale due au contrôle insuffisant de la stœchiométrie.
- La figure 3.15(b) représente la variation de la contrainte en fonction de l'angle Ω. Sur cette figure, le modèle reproduit mal les données expérimentales : à part pour l'angle $\Omega = 34°$, qui correspond à l'angle $\phi = 16°$, le modèle sous-estime systématiquement les données expérimentales. C'est une des

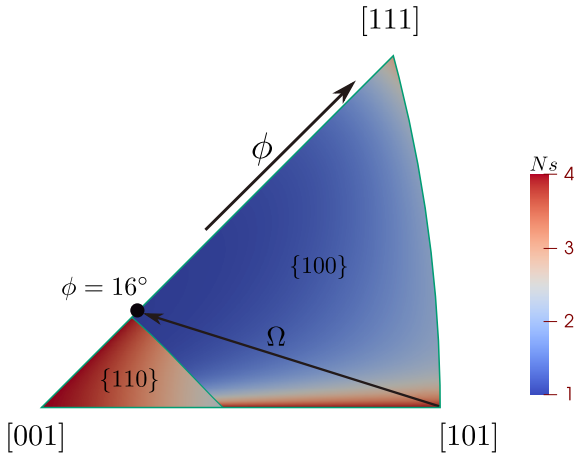


FIGURE 3.16 – Nombre de systèmes actifs par famille et l'angle Ω

raisons pour lesquelles Sawbridge et Skyes ont envisagé l'existence d'une troisième famille. Ce point est discuté au paragraphe 3.4.6 suivant.

3.4.6 Contribution de la troisième famille

Puisque certains auteurs, comme Sawbridge et Skyes [129] ont envisagé l'existence d'une troisième famille, il nous faut aborder ce point.

Rappel Certains auteurs [129, 64, 5] constatent l'existence d'une troisième famille, regroupant 12 systèmes. Cette famille peut être vue comme une combinaison des deux premières, puisque chaque normale $\boldsymbol{n}_{3s}$ d'un système de cette famille peut s'écrire comme la combinaison de normales $\boldsymbol{n}_{1s}$ et $\boldsymbol{n}_{2s}$ de systèmes appartenant aux deux premières familles :

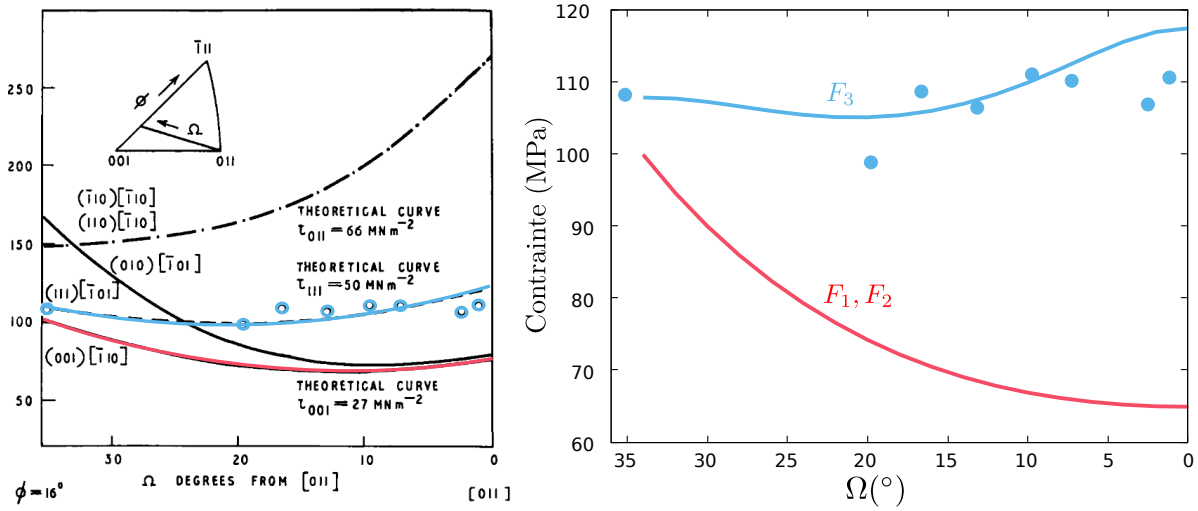
$$\boldsymbol{n}_{3s} = \frac{1}{\sqrt{3}}\,\boldsymbol{n}_{1s} + \sqrt{\frac{2}{3}}\,\boldsymbol{n}_{2s} \quad \text{ou} \quad \boldsymbol{n}_{3s} = \frac{1}{\sqrt{3}}\,\boldsymbol{n}_{1s} - \sqrt{\frac{2}{3}}\,\boldsymbol{n}_{2s}.$$

Il faut noter, à propos de cette famille, que ses systèmes de glissement ne sont jamais observés seuls, mais toujours en présence de systèmes de la première ou deuxième famille. Il est alors difficile de distinguer le glissement d'un système de la troisième famille, du glissement conjoint de deux systèmes des deux premières familles. Certains auteurs [77] contestent l'existence de cette troisième famille.

Angle Ω Un des arguments de Sawbridge et Skyes [129] est que sans cette troisième famille, il est difficile d'expliquer les variations de la contrainte avec l'angle Ω. La figure 3.17(a), qui se trouve dans leur article, présente les variations de la contrainte en fonction de l'angle Ω. En rouge nous avons souligné la courbe, que nous avons reproduite ci-dessus, en figure 3.15(b), et en bleue une courbe qui s'appuie sur la troisième famille et qui passe par les points expérimentaux.

Leur argument paraît très convaincant. Il faut pourtant expliquer le paradoxe suivant : si la courbe de la famille 1, en rouge sur la figure, est située sous la courbe de la famille 3, cela signifie que les systèmes de la famille 1 s'activent avant ceux de la famille 3. Et dans ce cas, la famille 3 ne peut pas être activée, et se trouve de ce fait inutile. Sawbridge et Skyes se taisent sur ce point essentiel.

Ajustement Nous avons repris l'ajustement proposé par Sawbridge et Skyes : pour cela les familles 1 et 2 sont désactivées, et le coefficient a_A^3 de la troisième famille est ajusté sur les points expérimentaux



(a) Sawbridge et Skyes

(b) Modèle de la thèse

FIGURE 3.17 – Contrainte axiale en fonction de l'orientation Ω. (a) données expérimentales [129] et (b) tracées à partir du modèle

obtenus en faisant varier l'angle Ω. La valeur ajustée du coefficient a_A^3 est reportée dans le tableau 3.4. Le modèle obtenu (en bleu) est comparé aux données expérimentales sur la figure 3.17(b). Sur la figure, le modèle précédent, ajusté avec les deux premières familles est reproduit en rouge. Son allure est due uniquement au coefficient a_A^1 première famille.

Coefficient	a_A^1	a_A^2	a_A^3
Valeur	$1.60\,10^7$	$4.70\,10^7$	$3.38\,10^7$

TABLE 3.4 – Paramètres ajustés pour les trois familles : a_A^1 et a_A^2 sur les angles ϕ, et a_A^3 sur les angles Ω

Finalement, l'ajustement reproduit en figure 3.17(b) est comparable à celui de Sawbridge et Skyes de la figure 3.17(a).

Angle ϕ Les modèles ajustés sur les deux premières familles et sur la troisième famille sont comparés en figure 3.18 aux données expérimentales obtenues en faisant varier l'angle ϕ. L'ajustement sur les deux premières familles (en rouge) est bien meilleur que celui ajusté avec la troisième famille (en bleu).

Sur la courbe rouge, il faut noter qu'elle se sépare en deux :

- pour $\phi \leq 12\,°$, la déformation est contrôlée par la deuxième ou la troisième famille. C'est celle dont le coefficient a_A^F est le plus faible qui est activée.
- pour $\phi \geq 12\,°$, la déformation est gouvernée par la seule première famille. Pour qu'elle s'active correctement, il faut que son coefficient soit inférieur à celui de la troisième famille : $a_A^1 < a_A^3$.

Relations d'ordre Finalement, pour reproduire la courbe bleue de la figure 3.17(b) et la courbe rouge de la figure 3.18, qui reproduisent bien les données expérimentales, il faut que les coefficients a_A^F des trois familles vérifient des relations d'ordre contradictoires :

- Pour reproduire fidèlement le début de la courbe rouge de la figure 3.18, caractérisé par l'angle

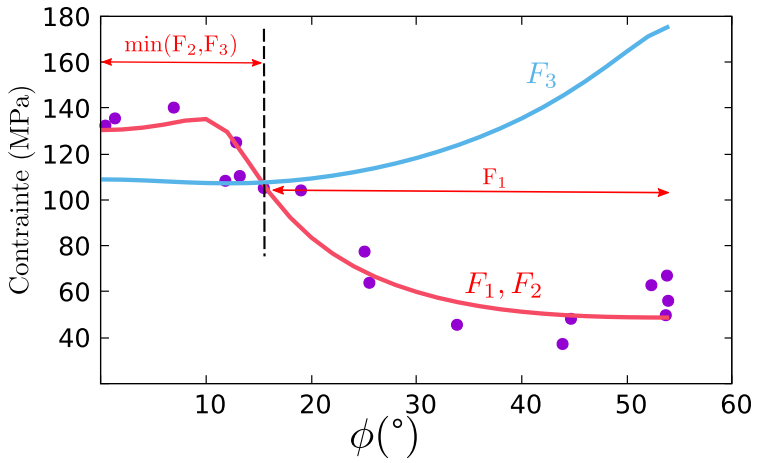


FIGURE 3.18 – Contrainte axiale en fonction de l'orientation ϕ

$\phi \leq 12\,°$, les coefficients a_A^2 et a_A^3 des deux dernières familles doivent vérifier :

$$\min(a_A^2, a_A^3) = 4.70\,10^7.$$

- Pour reproduire fidèlement la fin de la courbe rouge de la figure 3.18, caractérisée par l'angle $\phi \geq 12\,°$, les coefficients a_A^1 et a_A^3 doivent vérifier :

$$a_A^1 = 1.60\,10^7 \leq a_A^3.$$

- Pour reproduire fidèlement la fin la courbe bleue de la figure 3.17(b), qui traduit la variation de l'angle Ω, les coefficients a_A^1 et a_A^3 doivent vérifier :

$$a_A^3 = 3.38\,10^7 \leq a_A^1.$$

Il est impossible de vérifier simultanément les trois conditions. L'existence d'une troisième famille pose plus de problèmes qu'elle n'en résout. Nous montrons en section 3.5 suivante que l'écrouissage permet d'améliorer la reproduction des données expérimentales de la figure 3.17(b), suivant l'angle Ω, sans recourir à une troisième famille.

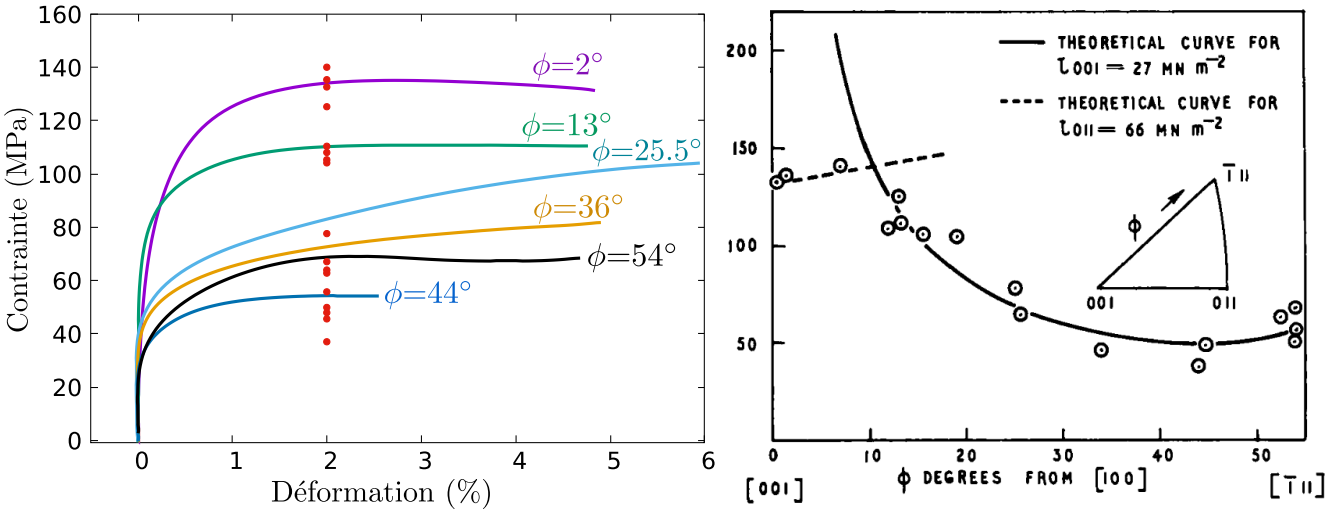
3.5 Prise en compte de l'écrouissage

Le modèle de glissement identifié en section précédente est simplifié, car il considère un cristal déjà écroui. Il faut maintenant enrichir ce modèle pour tenir compte de l'écrouissage.

3.5.1 Données expérimentales exploitées

Les données utilisées pour identifier un modèle de glissement avec écrouissage sont maintenant présentées.

Données exploitables Pour ajuster un modèle qui tienne compte de l'écrouissage, il faut disposer des courbes contrainte/déformation mesurées lors des essais de compression. Les seules courbes exploitables que nous avons trouvées dans la littérature sont celles fournies par Sawbridge et Skyes [129] et reportées sur la figure 3.19(a). Elles proviennent de la figure 3.14, issue de l'article de Sawbridge et Skyes.



(a) Courbes contrainte-déformation

(b) Variabilité des mesures

FIGURE 3.19 – Courbes contrainte-déformation données par Sawbridge et Skyes [129], et variabilité des mesures selon l'angle ϕ

Elles correspondent à des essais de compression avec une vitesse de $10^{-4}\,\mathrm{s}^{-1}$, une température fixe de 1600 K, et pour plusieurs orientations cristallines, caractérisées par l'angle $\phi(°)$, montré sur la figure de pôle inverse 3.6(b).

Variabilité Les contraintes d'écoulement mesurées à 2% de déformation, et présentées en fonction de l'angle ϕ sur la figure 3.19(b) sont reportées sur les courbes de contrainte-déformation 3.19(a). On remarque que la plupart de ces mesures ne passent pas parfaitement par des courbes qui correspondent à des orientations (d'angle ϕ) équivalentes. Cela montre une variabilité des mesures de Sawbridge et Skyes. Cette incertitude expérimentale pourrait provenir d'un contrôle insuffisant de la stœchiométrie des échantillons, que nous avons évoqué plus haut, au paragraphe 3.3.2.

La faible qualité des données a un impact sur le modèle que nous pouvons proposer. Elle ne permet pas d'envisager un modèle trop complexe.

3.5.2 Modèles de plasticité de l'UO_2 avec écrouissage isotrope

Le modèle de glissement, identifié en section précédente, est maintenant enrichi pour tenir compte de l'écrouissage. L'écrouissage fait intervenir deux phénomènes, décrits respectivement par les paragraphes 3.1.4 et 3.1.5 : l'interaction de la dislocation avec son environnement, notamment avec les autres dislocations, et l'évolution des densités de dislocations. La modélisation proposée doit aborder ces deux aspects.

Forme de la loi Dans la littérature, l'écrouissage est modélisé par une contrainte d'écrouissage τ_h^s, qui augmente avec la présence d'impuretés, de dislocations bloquées, etc., et qui traduit le durcissement du matériau.

Suivante les modèles, les auteurs peuvent faire intervenir cette contraintes de deux manières :

- En général, pour les matériaux CFC, la contrainte d'écrouissage τ_h^s est utilisée comme diviseur de la

contrainte de cisaillement résolue τ_g^s : $\dfrac{\tau_g^s}{\tau_h^s}$, comme dans le modèle de Richeton et al. [124] :

$$\dot{\gamma}^s = \dot{\gamma}_0^s \, \exp\left(-\frac{\Delta F^F}{k_B \, T}\right) \, \left(\frac{|\tau_g^s|}{\tau_h^s}\right)^n \, \mathrm{sgn}(\tau_g^s).$$

- D'autres auteurs considèrent que la contrainte d'écrouissage τ_h^s doit être soustraite à la contrainte de cisaillement résolue τ_g^s. C'est le cas de Fressengeas [39], qui propose la loi exponentielle suivante :

$$\dot{\gamma}^s = \rho_m^s \, b^2 \, \nu_D \, \exp\left(-\frac{\Delta F^s}{k_B \, T}\right) \, \exp\left(\frac{V \, (\tau^s - \tau_h^s)}{k_B \, T}\right).$$

Compte tenu de la forme de la loi déjà identifiée (3.26), nous adoptons la première manière, qui permet de conserver la loi puissance déjà validée. La vitesse de cisaillement devient ainsi :

$$\dot{\gamma}^s(\tau_g^s) = \rho_m^s \, b^2 \, \nu_D \, \exp\left(-\frac{T_A}{T}\right) \, \left(\frac{|\tau_g^s|}{\tau_h^s}\right)^n \, \mathrm{sgn}(\tau_g^s). \tag{3.31}$$

Dislocations forêt Pour décrire la contrainte d'écrouissage τ_h^s, nous reprenons le modèle proposé Franciosi et al. [37], et décrit au paragraphe 3.1.4. Cette contrainte, due aux interactions des dislocations mobiles avec les interactions de la forêt, de densité ρ_f^s sur chaque système s, s'écrit au moyen d'une matrice d'interaction a_{ij} sous la forme (3.7) :

$$\tau_h^s = G \, b \, \sqrt{\sum_j a_{sj} \, \rho_f^j}.$$

Les coefficients a_{ij} ont été calculés pour l'UO_2 par Portelette et al. [118]. Ils sont semblables. Ainsi, une densité ρ_f^s sur un système s, gênent de manière équivalente le glissement de tous les systèmes. Il est ainsi naturel de regrouper toutes ces densités :

$$\rho_f = \sum_s \rho_f^s. \tag{3.32}$$

Simplification Avec le modèle proposé par Kubin et al. [75], les densités de dislocations de la forêt évoluent avec l'équation différentielle (3.10b) :

$$\dot{\rho}_f^s = \left(K_f + C_2 \sum_j \sqrt{\rho_f^j \rho_m^s} - C_3 \, \rho_f^s\right) |\dot{\gamma}^s| \, .$$

Elles évoluent donc sur les n_s systèmes actifs, d'indice a, de sorte que la contrainte d'écrouissage (3.7) et leur somme (3.32) peuvent s'écrire :

$$\tau_h^s \approx G \, b \, \sqrt{\sum_a a_{sa} \, \rho_f^a} \approx G \, b \, \alpha \, \sqrt{\rho_f}, \quad \text{avec} \quad \alpha = \sqrt{\frac{\sum_a a_{sa}}{n_s}}, \quad \text{et} \quad \rho_f \approx n_s \, \rho_f^a.$$

Cette simplification revient à utiliser la loi (3.6) proposée par Taylor.

Une telle loi ne permet pas de distinguer les deux familles de systèmes de glissement, qui ont été caractérisées par les coefficients a_A^F en section précédente. Pour faire cette distinction, la contrainte d'écrouissage dépendra de chaque famille de systèmes de glissement F, avec un paramètre α_F par famille :

$$\tau_h^F = \alpha_F \, G \, b \, \sqrt{\rho_f}. \tag{3.33}$$

Cinétique d'évolution La cinétique d'évolution (3.10b) des densités de dislocations de la forêt, proposée par Kubin et al. [75], est complexe. Compte tenu de la qualité des données expérimentales disponibles, nous avons préféré utiliser l'équation de Kocks-Mecking (3.9)

$$\dot{\rho}_f^s = \left(K_f - C^\star\,\rho_f^s\right)|\dot{\gamma}^s|\,,$$

avec simplement un terme de création K_f et un terme de saturation $C^\star$. En regroupant les dislocations de tous les systèmes, et en considérant que les dislocations n'évoluent que sur n_s systèmes actifs, cette équation devient :

$$\dot{\rho}_f = (K_f - C\,\rho_f)\sum_s |\dot{\gamma}^s| \quad \text{avec} \quad \rho_f = \sum_s \rho_f^s \approx n_s\,\rho_f^a \quad \text{et} \quad C = \frac{C^\star}{n_s}.$$

Elle peut prendre une forme très simple :

$$\dot{\varrho}_f = C\,(1-\varrho_f)\sum_s |\dot{\gamma}^s| \quad \text{avec} \quad \varrho_f = \frac{\rho_f}{\rho_{f\,\infty}} \quad \text{et} \quad \rho_{f\infty} = \frac{K_f}{C_3}. \tag{3.34}$$

Dans cette équation, la variable ϱ_f représente le degré d'écrouissage, qui part d'une valeur initiale $\varrho_{f0} < 1$ pour un échantillon non écroui, et vaut 1 une fois l'échantillon écroui.

Pour que la vitesse d'évolution dépende de la famille active, nous avons pris un coefficient C_F par famille, et l'équation (3.34) devient finalement :

$$\dot{\varrho}_f = (1-\varrho_f)\sum_F C_F \sum_{s\in F} |\dot{\gamma}^s| \tag{3.35}$$

Vitesse de glissement En remplaçant la loi de Taylor (3.33) par :

$$\tau_h^F = a_A^F\,(\rho_m^s\,b^2\,\nu_D)^{1/n}\,\sqrt{\varrho_f} \quad \text{avec} \quad a_A^F = \frac{\alpha_F\,G\,b\,\sqrt{\rho_{f\,\infty}}}{(\rho_m^s\,b^2\,\nu_D)^{1/n}}.$$

la vitesse glissement décrite par l'équation (3.31) devient :

$$\dot{\gamma}^s(\tau_g^s) = \exp\left(-\frac{T_A}{T}\right)\left(\frac{|\tau_g^s|}{a_A^F\,\sqrt{\varrho_f}}\right)^n \operatorname{sgn}(\tau_g^s). \tag{3.36}$$

La densité des dislocations mobiles ρ_m^s est considérée ici comme constante. Cette hypothèse est peu importante car, dans l'expression du coefficient a_A^F, cette densité apparaît avec une puissance $1/n$.

Cette loi de glissement ressemble beaucoup à la loi déjà identifiée (3.26) pour un matériau déjà écroui. Elle n'en diffère que par le terme $\sqrt{\varrho_f}$ qui définit le niveau d'écrouissage, et qui vaut 1 lorsque matériau est écroui. Ainsi, il sera facile de s'appuyer sur l'ajustement réalisé en section précédente.

Récapitulatif Finalement le modèle de glissement des dislocations, qui tient compte de l'écrouissage, est composé de deux équations :

1. l'équation (3.35) d'évolution du niveau d'écrouissage :

$$\dot{\varrho}_f = (1-\varrho_f)\sum_F C_F \sum_{s\in F} |\dot{\gamma}^s|\,; \tag{3.37a}$$

2. et la loi (3.36) de vitesse de glissement.

$$\dot{\gamma}^s = \exp\left(-\frac{T_A^s}{T}\right)\left(\frac{|\tau^s|}{a_A^F\sqrt{\varrho_f}}\right)^n \operatorname{sgn}(\tau^s). \tag{3.37b}$$

Ce modèle dépend des paramètres suivants : un coefficient a_A^F et une vitesse d'évolution C_F pour chaque famille F, une température d'activation T_A, l'exposant n de la loi puissance, ainsi que le niveau initial d'écrouissage ϱ_{f0}.

3.5.3 Ajustement

Les paramètres du modèle (3.37) de glissement avec écrouissage sont maintenant ajustés sur les courbes de Sawbridge et Skyes. La méthode d'ajustement est très voisine de celle décrite dans le paragraphe 3.4.2, pour un modèle sans écrouissage.

Essai DVC Le système d'équations différentielles qui décrit l'essai DVC, est très voisin de celui (3.27) formulé plus haut. Il ajoute la variable ϱ_f, ainsi que l'équation (3.35) qui gère son évolution :

$$\begin{aligned}
\dot{\varrho}_f &= (1-\varrho_f)\sum_F C_F \sum_{s\in F} |\dot{\gamma}^s|\,,\\
\dot{\gamma}^s &= \exp\left(-\frac{T_A^s}{T}\right)\left(\frac{|\tau^s|}{a_A^F\sqrt{\varrho_f}}\right)^n \operatorname{sgn}(\tau^s),\\
\dot{\sigma} &= E_{hkl}\left(\dot{\varepsilon} - \sum_F\sum_{s\in F}\dot{\gamma}^F(\sigma\, f_S^s)\, f_S^s\right).
\end{aligned}$$

Moindres carrés Les données expérimentales sur lesquelles est ajusté le modèle sont des courbes contrainte/déformation, obtenues lors des tests de compression à vitesse imposée. Un essai peut être décrit par ses conditions expérimentales : la température T, la vitesse $\dot{\varepsilon}$ et la direction de compression ϖ, qui peuvent être rangées dans un vecteur :

$$X^\intercal = (T, \dot{\varepsilon}, \varpi).$$

Lors de cet essai, des valeurs expérimentales de contrainte σ_i et de déformation ε_i sont mesurées.

Le modèle dépend de ses paramètres, qui peuvent être rangés dans un vecteur :

$$P^\intercal = (T_A, n, a_A^1, a_A^2, C_1, C_2, \varrho_{f0}).$$

Pour chaque déformation ε_i, de chaque essai DVC indicé par c, le modèle peut calculer la contrainte correspondante :

$$\sigma(t_i, X_c, P) \quad \text{avec} \quad t_i = \frac{\varepsilon_i}{\dot{\varepsilon}},$$

qui peut être comparée à la contrainte mesurée σ_i. L'ajustement consiste à minimiser l'écart entre le calcul et la mesure, en ajustant les valeurs des paramètres :

$$P = \underset{P^*}{\operatorname{argmin}} \sum_c \sum_{i\in c} \Big(\sigma(t_i, X_c, P^*) - \sigma_i\Big)^2.$$

De même qu'au paragraphe 3.4.2, une méthode de Gauss Newton est utilisée pour cela, et les dérivées partielles de la fonction $\sigma(t, X, P)$ par rapport aux paramètres du vecteur P sont calculées par une méthode d'état adjoint.

Ajustement Comme les essais de Sawbridge et Skyes sont réalisés avec une seule température T et une seule vitesse $\dot{\varepsilon}$, il n'est pas possible d'ajuster la température d'activation T_A et l'exposant n de la loi puissance. Ces paramètres sont repris de l'ajustement sur les données de Lefebvre, et se trouvent dans le tableau 3.2.

L'ajustement porte donc sur les cinq paramètres suivants : a_A^1, a_A^2, C_1, C_2 et ϱ_{f0}. Les paramètres ajustés sont regroupés dans le tableau 3.5.

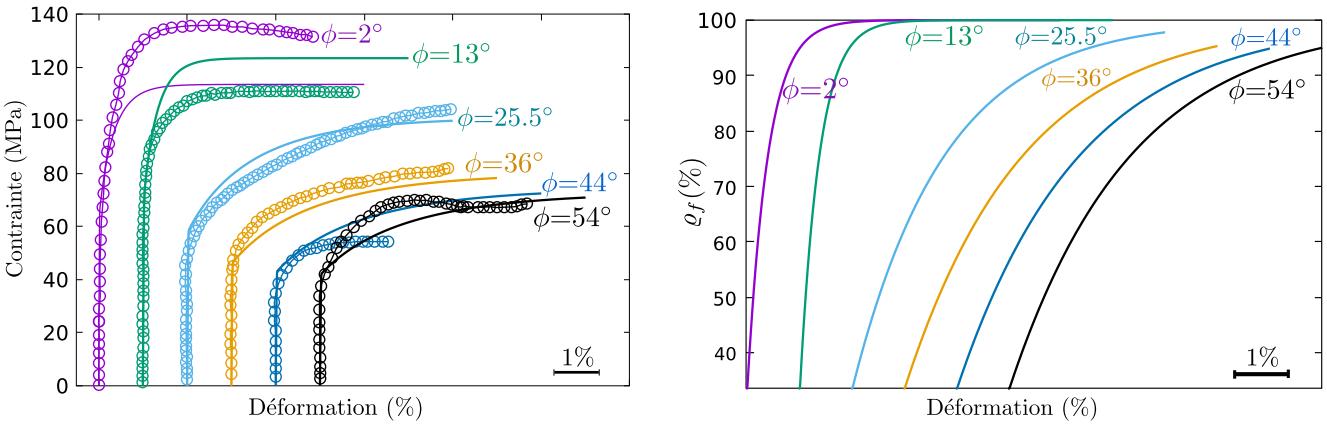
Coefficient	T_A [K]	n	a_A^1	a_A^2	C_1	C_2	ϱ_{f0}
Valeur	20 697	9.26	$2,38\,10^7$	$4,10\,10^7$	$20,51$	$130,14$	$0,33$

TABLE 3.5 – Paramètres du modèle de glissement avec écrouissage

Courbes Le modèle de glissement avec écrouissage, avec les paramètres ajustés du tableau 3.5, peut reproduire les courbes de contrainte/déformation de Sawbridge et Skyes [129]. La comparaison du modèle et des points expérimentaux est présentée en figure 3.20(a).

Les essais de Sawbridge et Skyes font varier l'orientation cristalline avec l'angle ϕ décrit sur la figure 3.16.

- Comme le montre la figure 3.16, les essais dans les orientations d'angle ϕ de $25,5°$, $36°$, $44°$ et $54°$ activent la première famille ; les essais dans les orientations d'angle ϕ de $2°$ et $13°$ activent la deuxième famille.
- Les essais qui activent la première famille sont globalement mieux reproduits que ceux qui activent la deuxième famille.
- La figure 3.20(b) reproduit le degré d'écrouissage au cours de chaque essai. L'allure des courbes traduisent les valeurs ajustées des vitesses d'écrouissage, $C_1 = 20,51$ et $C_2 = 130,14$: l'écrouissage est plus rapide lorsque la famille 2 est activée. Cela explique-t-il pourquoi les courbes de la première famille sont mieux reproduites que celle de la seconde famille ?
- Nous avons vu les incertitudes de mesures de ces courbes. Compte tenu de ces incertitudes, l'ajustement est satisfaisant.

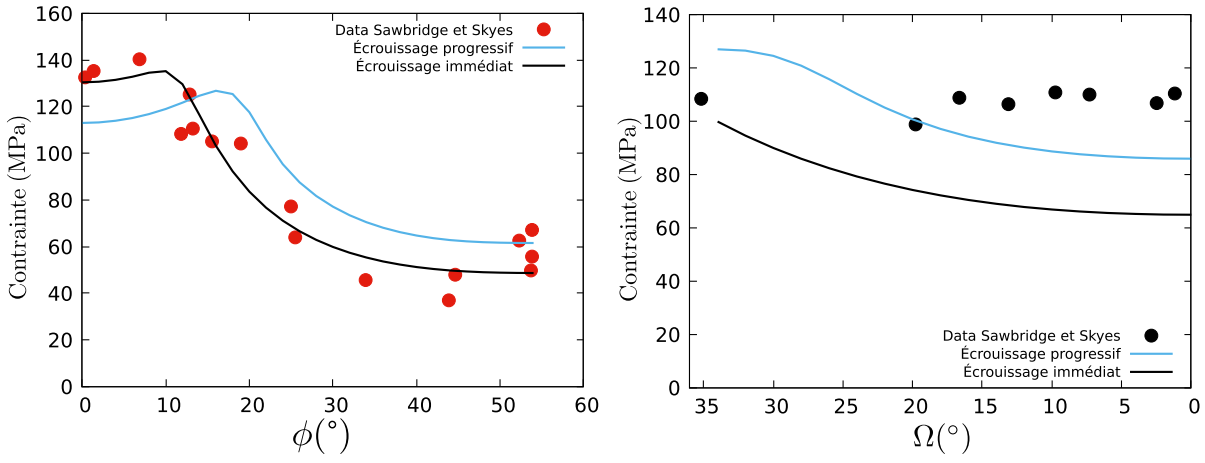


(a) Contrainte (b) Écrouissage

FIGURE 3.20 – Modèle avec écrouissage : (a) Comparaison avec les courbes expérimentales de contrainte-déformation ; (b) Évolution de l'écrouissage lors des essais

Comparaison Les deux modèles, avec et sans écrouissage, peuvent être comparés aux données expérimentales obtenues par Sawbridge et Skyes [129] pour une déformation maximale de $\varepsilon_{\max} = 2\%$. La comparaison est faite sur la figure 3.21 :

- La figure 3.21(a) présente la contrainte en fonction d'orientations caractérisées par l'angle $\phi(°)$. Le modèle sans écrouissage (sur matériau déjà écroui) est plus proche des données expérimentales. Il était prévisible que l'introduction de l'écrouissage, et l'ajustement sur de nouvelles données (les courbes contrainte/déformation), dégrade un peu le bon ajustement du modèle simplifié.
- La figure 3.21(b) présente la contrainte en fonction d'orientations caractérisées par l'angle $\Omega(°)$. Le modèle simplifié, sur matériau déjà écroui, ne pouvait reproduire correctement les données. C'est sur ce constat que Sawbridge et Skyes [129] avait introduit une troisième famille, sans résoudre vraiment le problème. L'écrouissage améliore la reproduction des données expérimentales, et il n'est plus besoin de recourir à une troisième famille pour expliquer les données expérimentales.



(a) (b)

FIGURE 3.21 – Contrainte en fonction des directions d'angles $\phi(°)$ et $\Omega(°)$: comparaison des données expérimentales de Sawbridge et Skyes [129] avec les modèles identifiés

Chapitre 4

Application au comportement viscoplastique du polycristal d'UO_2

Dans ce chapitre, nous nous intéressons à la simulation du comportement de polycristaux d'UO_2. Dans le chapitre 2, nous avons construit un modèle de Mécanique des Champs de Dislocations, qui tient compte de la présence de GNDs, et qui modélise la plasticité par glissement et montée de dislocations. Un modèle de vitesse de glissement des dislocations a ensuite été identifié au chapitre 3, à partir d'essais mécaniques réalisés sur des monocristaux d'UO_2. Ces modèles sont maintenant appliqués pour simuler le comportement de polycristaux d'UO_2. Faute de temps, les simulations effectuées n'ont pas inclus la montée des dislocations. Un schéma de résolution numérique des équations du modèle sera proposé et présenté. Les résultats des simulations seront analysés et comparés à l'expérience.

4.1 Schéma et méthodes de résolution

La résolution numérique est réalisée par communication entre le code de structure TMFFT [25, 24] et la loi de comportement générée par le logiciel MFront [53].

Équilibre mécanique Le code de structure TMFFT cherche à résoudre l'équilibre mécanique :

$$\mathrm{div}(\overline{\sigma}) = 0,$$

en utilisant les Transformées de Fourier Rapides (en anglais : Fast Fourier Transform ou FFT) sur une grille périodique. L'équilibre est obtenu par un dialogue avec le modèle de comportement : TMFFT propose un champ de déformations $\underline{\varepsilon}$, la loi de comportement calcule les contraintes $\overline{\sigma}$ correspondantes, TMFFT examine l'équilibre de la structure, et corrige le champ de déformations en conséquence. Ce dialogue se poursuit de manière itérative jusqu'à atteindre l'équilibre.

Comportement mécanique La loi de comportement est générée avec le logiciel MFront [53]. Elle reçoit du code de structure (TMFFT) une estimation des déformations $\underline{\varepsilon}$, et doit calculer les contraintes $\overline{\sigma}$ correspondantes. Pour prendre en compte le glissement des GNDs, elle reçoit le tenseur de Nye $\underline{\alpha}$ comme une variable externe. Le calcul des contraintes consiste à intégrer les équations de la loi de comportement, qui regroupent : l'expression du taux de glissement (cf. équations (4.1a) et (4.1b)), le calcul des densités de dislocations de la forêt dissimulée en degré d'écrouissage (4.1c), l'évolution de la déformation plastique et la projection du tenseur de Nye (4.1d) ainsi que la loi d'élasticité (4.1e). Le système d'équations est le

suivant :

$$\dot{\gamma}^s = \exp\left(-\frac{T_A}{T}\right)\left(\frac{|\tau_g^s|}{\tau_h^F}\right)^n \operatorname{sgn}(\tau_g^s) \quad \text{avec} \quad \tau_g^s = \overline{\sigma} : \underline{\beta}^s, \tag{4.1a}$$

$$\tau_h^F = a_F \sqrt{\varrho_f} \quad (F \text{ pour désigner la famille de systèmes de glissement}), \tag{4.1b}$$

$$\varrho_f = (\varrho_{f_0} - 1)\, X + 1 \quad \text{avec} \quad X = \exp\left(-\left(C_1 \sum_{s\in F_1} |\gamma^s| + C_2 \sum_{s\in F_2} |\gamma^s|\right)\right), \tag{4.1c}$$

$$\underline{\dot{E}}^p = \sum_s \left(1 + \frac{|\rho_G^s|}{\rho_m^s}\right) \dot{\gamma}^s(\tau_g^s)\, \underline{\beta}^s \quad \text{avec} \quad \rho_G^s = \Pi^s(\underline{\alpha}), \tag{4.1d}$$

$$\overline{\sigma} = \overline{\overline{C}} : (\underline{\varepsilon} - \underline{E}^p), \tag{4.1e}$$

où T_A, a_F, n, ϱ_{f_0}, C_1 et C_2 sont les paramètres du modèle avec écrouissage identifiés dans le chapitre 3.

Couplage GNDs et SSDs La densité des dislocations mobiles ρ_m^s est supposée être constante dans le modèle, et identique pour tous les systèmes de glissement d'une même famille F. Cette densité participe aux coefficients a_A^F de la vitesse de cisaillement (3.26) :

$$\dot{\gamma}^F(\tau_g^s) = \exp\left(-\frac{T_A^F}{T}\right)\left(\frac{|\tau_g^s|}{a_A^F}\right)^{n_F} \operatorname{sgn}(\tau_g^s) \quad \text{avec} \quad a_A^F = \frac{\tau_0^F}{(\rho_m^s\, b^2\, \nu_D)^{1/n_F}},$$

qui ont été identifiés au chapitre précédent.

Les densités des GNDs ρ_G^s interviennent également dans la loi d'Orowan (4.1d), couplées aux SSDs par le terme $\left(1 + \frac{\rho_G^s}{\rho_m}\right)$. Puisque les SSDs sont déjà prises en compte dans les coefficients a_A^F, le paramètre ρ_m^s n'affecte pas la plasticité due aux SSDs, mais seulement celle due aux GNDs. Plus il est grand, moins les GNDs interviennent, et moins le matériau est plastique.

Évolution des GNDs Le code TMFFT doit également assurer l'écoulement des GNDs. Pour ce faire, il calcule le tenseur de Nye par l'équation d'incompatibilité de Kröner :

$$\underline{\alpha} = -\underline{\operatorname{rot}}(\underline{E}^p), \tag{4.2}$$

qu'il transfert au modèle de comportement comme une variable externe. Le tenseur de Nye est ainsi une variable non-locale, agissant sur la structure.

4.2 Résolution par méthode FFT

À l'origine, la méthode FFT a été conçue par Moulinec et Suquet [98] pour estimer les propriétés effectives des matériaux hétérogènes, en se basant directement sur une image pixelisée de la microstructure. La méthode présente les caractéristiques suivantes :

- Elle permet de réaliser des calculs sur microstructures périodiques discrétisées en une grille régulière (pixels en 2D ou voxels en 3D de même taille).
- La condition de périodicité y est naturelle, contrairement à la méthode des éléments finis [89].
- Les calculs sont souvent beaucoup plus rapides par rapport à la méthode des éléments finis : il est possible de réaliser des calculs sur des millions d'éléments (voxels) en des temps raisonnables.

Dans cette section, nous décrivons le principe de résolution par la méthode FFT ainsi que le code de structure TMFFT utilisé. La modification de ce dernier pour résoudre l'équation de Kröner (4.2) est également décrite.

4.2.1 Transformée de Fourier Discrètes (DFT)

Les méthodes FFT font appel à des routines de Transformées de Fourier Discrètes (en anglais Discrete Fourier Transform ou DFT) pour passer de l'espace réel $\mathbb{R}$ au domaine complexe $\mathbb{C}$.

VER Ω_e Les calculs s'effectuent sur un Volume Élémentaire Représentatif (VER) Ω_e. La figure 4.1 montre un VER composé de 20 grains dont la taille moyenne est de 14 µm. Une étude détaillée sur les caractéristiques ainsi que la représentativité des VER sera présentée dans la section 4.4.

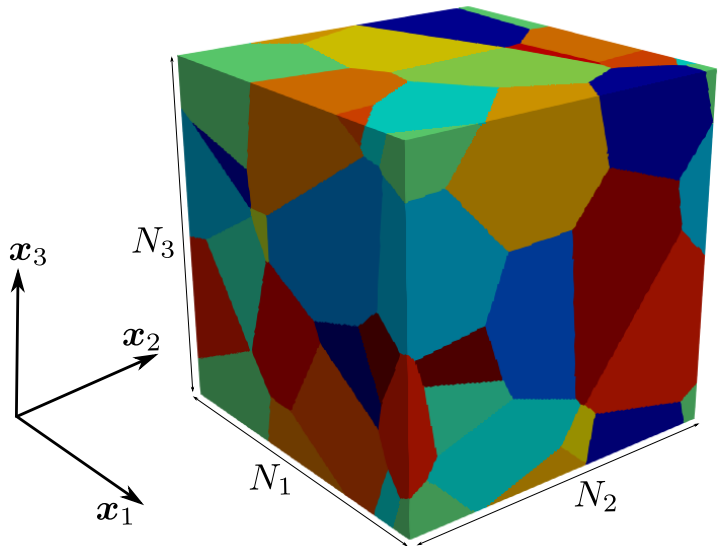


FIGURE 4.1 – VER constitué de 20 grains, d'une taille moyenne de 14 µm, générés par un pavage de Voronoï 3D périodique

Transformation Le VER Ω_e, présenté dans la figure 4.1, est discrétisé en une grille cubique régulière de $\mathrm{N}_1 \times \mathrm{N}_2 \times \mathrm{N}_3$ voxels avec un vecteur position $\boldsymbol{x} = ((i_1 - 1)\, d_1, (i_2 - 1)\, d_2, (i_3 - 1)\, d_3)$, où :

- $i_1 \in [0, N_1 - 1]$, $i_2 \in [0, N_2 - 1]$ et $i_3 \in [0, N_3 - 1]$. C'est la convention C++ et celle utilisée dans le logiciel TMFFT.
- d_1, d_2 et d_3 sont les tailles des pixels dans les directions $\boldsymbol{x}_1$, $\boldsymbol{x}_2$ et $\boldsymbol{x}_3$.

Le nombre total de points sur la grille FFT est donné par $N_{tot} = N_1 \times N_2 \times N_3$. La FFT d'une fonction f est $\hat{f} = \mathrm{FFT}(f)$ et sa transformée de Fourier inverse est $f = \mathrm{FFT}^{-1}(\hat{f})$. Elles s'écrivent :

$$f(\boldsymbol{x}) = \sum_{\boldsymbol{\xi} \in \mathbb{C}} \hat{f}(\boldsymbol{\xi}) \, \exp\left(\imath \, \boldsymbol{\xi}.\boldsymbol{x}\right) \quad \text{avec} \quad \imath^2 = -1,$$

$$\hat{f}(\boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{N_{tot}} \sum_{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}} f(\boldsymbol{x}) \, \exp\left(-\imath \, \boldsymbol{\xi}.\boldsymbol{x}\right),$$

où $\boldsymbol{\xi}$ est le vecteur de Fourier, dont les composantes ξ_i s'écrivent :

$$\xi_i = \frac{2\pi\, k_i}{N_i} \quad \text{avec} \quad k_i = \begin{cases} 1-(N_i/2), ..., N_i/2 & \text{si } N_i \text{ est paire} \\ -(N_i-1)/2, ..., (N_i-1)/2 & \text{si } N_i \text{ est impaire} \end{cases}$$

Opérateurs L'opérateur dérivé classique dans l'espace de Fourier, correspond à la multiplication par les composantes du vecteur de Fourier. Pour un champ $\hat{f}$ donné, la transformée de Fourier de ses dérivées est donnée par les relations classiques :

$$\frac{\partial \hat{f}(\boldsymbol{\xi})}{\partial x_i} = -\imath\, \xi_i\, \hat{f}, \tag{4.3a}$$

$$\frac{\partial^2 \hat{f}(\boldsymbol{\xi})}{\partial^2 x_i} = \xi_i^2\, \hat{f}, \tag{4.3b}$$

$$\frac{\partial^2 \hat{f}(\boldsymbol{\xi})}{\partial x_i \partial x_j} = \xi_i \xi_j\, \hat{f}. \tag{4.3c}$$

La fréquence de dérivation partielle "classique" ξ_i est modifiée dans le cas d'une dérivation suivant des schémas de différences finies, ce qui correspond au filtrage décrit dans la sous-section 4.2.3.

4.2.2 Modification du code de structure TMFFT

Les principales étapes du schéma de base de la résolution avec le code de structure TMFFT [99] sont maintenant détaillées.

Schéma de base Le schéma de base de la méthode FFT doit résoudre l'équilibre mécanique d'une structure périodique, soumise à un chargement externe. Le schéma décrit dans ce document traite du cas d'un chargement piloté par une déformation moyenne $\langle \underline{\varepsilon} \rangle$, variable dans le temps t, c'est-à-dire que le chargement est contrôlé en imposant l'historique de la déformation moyenne $\langle \underline{\varepsilon} \rangle$. Les autres conditions de chargement (contraintes moyennes, etc.) ne sont pas abordées ici.

Équilibre mécanique Les conditions de l'équilibre mécanique sont les suivantes :

$$\mathbf{div}(\overline{\sigma}) = 0 \qquad \text{équilibre local,} \tag{4.4a}$$

$$\underline{\varepsilon} \quad \text{périodique} \qquad \text{conditions aux limites,} \tag{4.4b}$$

$$\langle \underline{\varepsilon} \rangle\,(t) \qquad \text{pilotage en fonction du temps} \tag{4.4c}$$

Dans ces équations, $\overline{\sigma}(\boldsymbol{x})$ désigne le tenseur de contrainte au point $\boldsymbol{x}$, et $\underline{\varepsilon}(\boldsymbol{x})$ le tenseur de déformation au point $\boldsymbol{x}$.

Comportement mécanique Le modèle de comportement mécanique, donné par le système d'équations (4.1) doit compléter le jeu d'équations précédent (4.4). Il est utilisé sous sa forme intégrale, qui exprime la contrainte $\overline{\sigma}(t_n)$ au pas de temps t_n :

$$\overline{\sigma}(t_n) = \boldsymbol{F}(\underline{\varepsilon}(t_n), \dots)$$

Le calcul de la contrainte $\overline{\sigma}(t_n)$ nécessite *a minima* de connaître les déformations $\underline{\varepsilon}(t_n)$, mais il dépend également de nombreuses variables internes, décrites dans le système d'équations (4.1), dissimulées ici derrière les points de suspension.

Algorithme itératif La méthode FFT doit résoudre une série d'équilibres mécaniques pour une série de dates $t_0 < \cdots < t_N$. Supposons l'équilibre de la date précédente t_{n-1} réalisé, et montrons comment résoudre celui de la date actuelle t_n. Entre ces deux dates, le pilotage passe d'une valeur $\langle \underline{\varepsilon} \rangle_{n-1}$ à une valeur $\langle \underline{\varepsilon} \rangle_n$.

Pour la date t_n, la méthode FFT résout l'équilibre mécanique (4.4) au moyen d'un algorithme itératif. À chaque itération k, les contraintes $\overline{\sigma}(t_n)$ et déformations $\underline{\varepsilon}(t_n)$ sont évaluées par des approximations $\overline{\sigma}^k$ et $\underline{\varepsilon}(t_n)^k$, jusqu'à ce qu'un test d'erreur décide que l'équilibre mécanique est vérifié.

Ce schéma de calcul TMFFT a été modifié pour calculer en plus le tenseur de Nye $\underline{\alpha}$ à chaque itération. Le paragraphe suivant présente les étapes du nouvel algorithme de calcul.

Itération L'itération réalise le calcul de la nouvelle approximation $\underline{\varepsilon}^{k+1}$, $\overline{\sigma}^{k+1}$ et $\underline{\alpha}^{k+1}$ à partir de la précédente $\underline{\varepsilon}^k$, $\overline{\sigma}^k$ et $\underline{\alpha}^k$:

1. **MFront.** La densité scalaire de GNDs $\rho_G^{s,k}$, sur un système de glissement s, est calculée avec MFront par projection du tenseur de Nye $\underline{\alpha}^k$. Elle est donnée par :

$$\rho_G^{s,k} = \mathit{\Pi}^s(\underline{\alpha}^k).$$

2. **MFront.** Les distorsions $\underline{E}^{p,k}$ sont calculées en intégrant la dérivée plastique :

$$\dot{\underline{E}}^{p,k} = \sum_s \left(1 + \frac{|\rho_G^{s,k}|}{\rho_m^s}\right) \dot{\gamma}^{s,k}\, \underline{\beta}^s,$$

avec MFront. Les contraintes $\overline{\sigma}^k$ sont également calculées avec la loi de Hooke :

$$\overline{\sigma}^k = \boldsymbol{F}(\underline{\varepsilon}^k, \underline{\alpha}^k, \dots).$$

$\Longrightarrow$ **Les distorsions $\underline{E}^{p,k}$ et les contraintes $\overline{\sigma}^k$ sont transmises au code de structure TMFFT.**

3. **TMFFT.** L'algorithme vérifie si les forces résiduelles sont négligeables, c'est-à-dire si le critère :

$$|\mathbf{div}(\overline{\sigma}^k)| < \epsilon,$$

est atteint. Ce critère se caractérise par une norme $|.|$ et un réel ϵ suffisamment petit. Une norme couramment utilisée pour mesurer la divergence est la norme euclidienne :

$$|\mathbf{div}(\overline{\sigma}^k)| = \sqrt{\langle \mathbf{div}(\overline{\sigma}^k)_{x_1}^2 \rangle + \langle \mathbf{div}(\overline{\sigma}^k)_{x_2}^2 \rangle + \langle \mathbf{div}(\overline{\sigma}^k)_{x_3}^2 \rangle}.$$

Lorsque l'équilibre mécanique n'est pas vérifié, les étapes de calcul ci-après sont effectuées.

4. **TMFFT.** Les transformées de Fourier des contraintes $\hat{\overline{\sigma}}^k$ et des distorsions $\hat{\underline{E}}^{p,k}$ sont calculées.

5. **TMFFT.** En utilisant l'équation de Lippmann-Schwinger, dans l'espace de Fourier, la transformée de Fourier des déformations $\hat{\underline{\varepsilon}}$ est calculée :

$$\hat{\underline{\varepsilon}}^{k+1} = \hat{\underline{\varepsilon}}^k - \hat{\underline{\mathit{\Gamma}}}^0 * \hat{\overline{\sigma}}^k,$$

avec : $\underline{\mathit{\Gamma}}^0$ l'opérateur de Green de référence dont on a une expression analytique simple dans l'espace de Fourier donnée dans Willot [156].

6. **TMFFT.** Le tenseur de Nye $\underline{\alpha}$ est calculée par application de l'équation de Kröner(2.56). Le rotationnel est calculé sur les transformées de Fourier, c'est-à-dire :

$$\hat{\underline{\alpha}}^{k+1} = -\hat{\underline{\mathrm{rot}}}(\hat{\underline{E}}^{p,k+1}).$$

7. **TMFFT.** Enfin, les déformations et le tenseur de Nye sont calculés dans le domaine réel par application de la transformée de Fourier inverse FFT^{-1} :

$$\underline{\varepsilon}^{k+1} = \mathrm{FFT}^{-1}(\hat{\underline{\varepsilon}}^{k+1}) \quad \text{et} \quad \underline{\alpha}^{k+1} = \mathrm{FFT}^{-1}(\hat{\underline{\alpha}}^{k+1}).$$

$\Longrightarrow$ La nouvelle estimation des déformations $\underline{\varepsilon}^{k+1}$ et le tenseur de Nye actualisé $\underline{\alpha}^{k+1}$ sont transmis au logiciel MFront.

Pas de temps Dans la loi de comportement MFront, la distorsion plastique est intégrée de manière explicite, c'est-à-dire pour un pas de temps Δt :

$$\underline{E}^{p,k+1} = \underline{E}^{p,k} + \Delta t \sum_s \left\langle \dot{\underline{E}}^{p,s} \right\rangle,$$

avec la dérivée plastique donnée par la loi d'Orowan, qui d'après les équations (2.64) et (2.81), s'écrit :

$$\left\langle \dot{\underline{E}}^{p,s} \right\rangle = \langle \underline{\alpha}^s \rangle \wedge \boldsymbol{V}_g^s + b\, \rho_m^s\, V_g^s\, \underline{\beta}^s.$$

Cela implique, que pour chaque système s, le tenseur de Nye est lui aussi intégré de manière explicite :

$$\langle \underline{\alpha}^s \rangle^{k+1} = \langle \underline{\alpha}^s \rangle^k - \Delta t\, \underline{\mathrm{rot}}(\langle \underline{\alpha}^s \rangle^k \wedge \boldsymbol{V}_g^s) + \Delta t\, \rho_m^s\, b\, \underline{\beta}^s \wedge \mathbf{grad}(V_g^s).$$

Or d'après ce qui précède, au paragraphe (2.2.6), c'est une équation de transport avec une vitesse $\boldsymbol{V}_g^s$. Une telle intégration est instable, si lors du pas de temps Δt, le transport dépasse un voxel. Le pas de temps Δt est donc choisi comme le minimum des pas de temps calculés pour l'ensemble des systèmes de glissement :

$$\Delta t = \min\left(\frac{d_i}{|\boldsymbol{n}_i^s\, V_g^s|}\right),$$

avec d_i la taille du voxel et $\boldsymbol{n}_i^s$ la composante du vecteur normal $\boldsymbol{n}^s$ dans la direction i.

Le choix du pas de temps Δt est donc limité par la vitesse V_g^s et la taille des voxels. Dans la pratique cela induit des temps de calculs très longs (plusieurs jours) pour des discrétisations raisonnables. Pour s'affranchir d'une telle limitation, il faudrait proposer une résolution implicite de l'équation de transport.

4.2.3 Accélération et filtres spectraux

Depuis l'introduction de la technique de résolution par FFT par Moulinec et Suquet en 1994, il y a eu de nombreux progrès dans la méthode, concernant notamment l'optimisation de la convergence :

- Accélération par Lagrangien augmenté [90], schéma de Eyre et Milton [36] et celui de Monchiet et Bonnet [92]. Ces techniques présentent une certaine ressemblance et sont comparées dans [97]. Elles permettent la convergence de l'algorithme, quel que soit le milieu de référence.
- Accélération par algorithme de Anderson [121]. Cette accélération a été utilisée dans le code d'éléments finis CASTEM du CEA, puis introduite dans les codes de FFT du CEA (TMFFT et AMITEX).
- Filtres spectraux basés sur des opérateurs de différences finies.

Dans ce document, nous ne développons pas l'aspect accélération. Nous présentons plutôt les filtres spectraux existants dans le code TMFFT, les expressions des filtres utilisés dans les calculs sont données.

Filtre Le filtrage est largement utilisé dans les méthodes spectrales pour contrôler à la fois les fortes oscillations inhérentes aux approches FFT et les instabilités numériques ainsi que pour accélérer la convergence des calculs. Les formules des filtres spectraux sont obtenues en calculant les dérivées partielles de la transformée de Fourier d'un champ $\hat{f}$ sur une grille voxélisée par des schémas différences finies : centrées et centrées tournées "Rotated scheme". L'article de Willot [156] en présente une description.

TMFFT possède quatre filtres dont trois : le filtre centré (CENTERED), le filtre par rotation (ROTATION) et un filtre original de Willot [156] (WILLOT). Le quatrième filtre (ROTCENT) est une variante du filtre par rotation, réécrit de manière centrée.

Les deux filtres utilisés dans cette thèse sont : CENTERED (exposant C) et ROTCENT (exposant RC. Leur utilisation revient à remplacer chaque composante ξ_i du vecteur par :

$$\xi_i^C = \imath \frac{\sin(\xi_i)}{d_i}, \tag{4.5a}$$

$$\xi_i^{RC} = \imath \frac{\sin(\xi_i)}{d_i} \prod_{m \neq i} \cos(\xi_m), \tag{4.5b}$$

où d_i désigne la taille des voxels dans la direction $\boldsymbol{x}_i$.

Modification des fréquences L'application du filtre centré, par exemple, revient à modifier les dérivées partielles classiques dans l'équation 4.3 :

$$\frac{\partial \hat{f}(\boldsymbol{\xi})}{\partial x_i} = -\imath \, \xi_i^C \, \hat{f},$$
$$\frac{\partial^2 \hat{f}(\boldsymbol{\xi})}{\partial^2 x_i} = \xi_i^{C^2} \, \hat{f},$$
$$\frac{\partial^2 \hat{f}(\boldsymbol{\xi})}{\partial x_i \partial x_j} = \xi_i^C \xi_j^C \, \hat{f}.$$

Le champ $\hat{f}$ est filtré dans le domaine spectral avant d'être rapporté dans l'espace réel par transformation inverse. La comparaison de ces filtres et leur influence sur les solutions seront discutées dans la sous-section 4.6.2.

4.3 Intégration des lois de comportement sur MFront

En dehors du comportement élastique, le code TMFFT ne possède pas de modèle de comportement mécanique en propre. Pour utiliser un modèle de comportement, il fait appel à une librairie externe, à travers une interface, qui est l'interface UMAT de CAST3M. Le logiciel MFront offre la possibilité d'écrire des modèles de comportement respectant le formalisme TMFFT.

MFront Le logiciel MFront [54] est un composant de la plateforme PLEIADES du CEA. Il propose plusieurs schémas d'intégration implicites et explicites pour intégrer les lois de comportement. Dans notre cas, nous avons retenu une intégration implicite de type thêta-méthode pour l'intégration numérique du système non-linéaire (4.1).

À chaque instant t, les grandeurs connues sont $\underline{\varepsilon}$ et la variable externe $\underline{\alpha}$. Les grandeurs inconnues sont les distorsions plastiques $\underline{E}^p$ (déterminées par intégration de l'équation (4.1d)) et les contraintes $\overline{\sigma}$ (déterminées par l'équation (4.1e)).

Nous rappelons ci-dessous sommairement le principe de la méthode implicite. L'annexe D détaille l'intégration de chacun des modèles de comportement utilisés, issus des simplifications du système complet (4.1).

Intégration implicite (Cas général) Notons par X une variable qui dépend du temps telle que :

$$\dot{\boldsymbol{X}} = \boldsymbol{G}(\boldsymbol{X}, t),$$

avec $\boldsymbol{G}$ une fonction a priori non linéaire et supposée a minima continûment dérivable.

Considérons $[t\ ,\ t+\Delta t]$ l'intervalle d'intégration, et $\Delta\boldsymbol{X}$ la différence entre la valeur de $\boldsymbol{X}$ à l'instant $t+\Delta t$ et la valeur de $\boldsymbol{X}$ à l'instant t :

$$\Delta\boldsymbol{X} = \boldsymbol{X}_{|t+\Delta t} - \boldsymbol{X}_{|t}.$$

Dans le cas d'une intégration implicite thêta-méthode, le système s'écrit de la manière suivante :

$$F(\Delta\boldsymbol{X}) = \Delta\boldsymbol{X} - \Delta t\,\boldsymbol{G}\left((1-\theta)\boldsymbol{X}_{|t} + \theta\,\boldsymbol{X}_{|t+\Delta\,t}, t+\theta\Delta t\right) = 0.$$

L'objectif est donc de déterminer l'inconnue qui correspond au vecteur d'incréments $\Delta\boldsymbol{X}$, ce qui revient à trouver le zéro de la fonction F. Pour ce faire, nous avons utilisé la méthode itérative de Newton Raphson, implémentée dans MFront. À chaque itération k, connaissant une estimation $\Delta\boldsymbol{X}^k$ de la solution, la fonction F peut être approchée dans un voisinage $\Delta\boldsymbol{X}^k$ par :

$$F(\Delta\boldsymbol{X}) = F(\Delta\boldsymbol{X}^k) + \left(\frac{d\,F}{d\Delta\boldsymbol{X}}\right)_{\Delta\boldsymbol{X}=\Delta\boldsymbol{X}^k}\left(\Delta\boldsymbol{X} - \Delta\boldsymbol{X}^k\right).$$

où : $\dfrac{d\,F}{d\Delta\boldsymbol{X}}$ est la matrice jacobienne de la fonction F, qui sera notée J_F. Une nouvelle estimation $\Delta\boldsymbol{X}^{k+1}$ est choisie en annulant cette approximation de F, ce qui conduit à l'expression suivante :

$$\Delta\boldsymbol{X}^{k+1} = \Delta\boldsymbol{X}^k - [J_F^{-1}(\Delta\boldsymbol{X}^k)]F(\boldsymbol{X}^k).$$

MFront offre la possibilité d'évaluer numériquement la matrice jacobienne, permettant une mise en œuvre facile de la procédure de résolution. Cependant, afin d'accélérer l'algorithme, les expressions exactes des matrices jacobiennes ont été analytiquement calculées et ensuite implémentées, pour l'ensemble des modèles étudiés. Un schéma purement implicite est choisi pour l'intégration des équations ($\theta = 1$), afin de donner des résultats précis. Les systèmes résolus ainsi que les matrices jacobiennes calculées sont présentés dans l'annexe D.

4.4 Génération de microstructures

Pour simuler la réponse mécanique des polycristaux d'UO_2, nous avons besoin d'un volume élémentaire représentatif (VER) de l'UO_2 polycristallin.

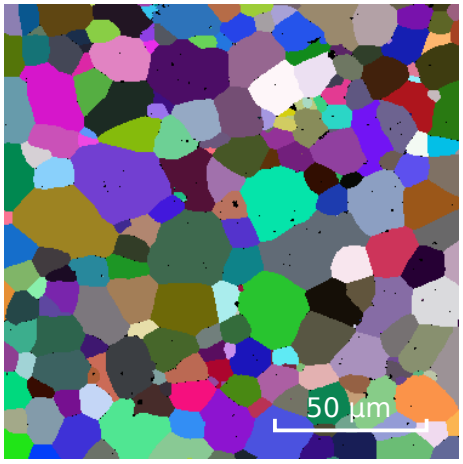
Microstructures 2D Pour étudier la microstructure du combustible UO_2, des cartographies EBSD acquises par Ben Saada [14] sont utilisées. Il s'agit d'une vingtaine de cartographies d'environ $520\times360\,\mu m^2$, comprenant des milliers de grains.

Pour reconstruire un milieu 3D à partir de ces cartographies, il faut pouvoir déterminer la surface moyenne S_{2D} d'un grain sur ces cartographies en dimension 2. Pour cela tous les grains interceptant un

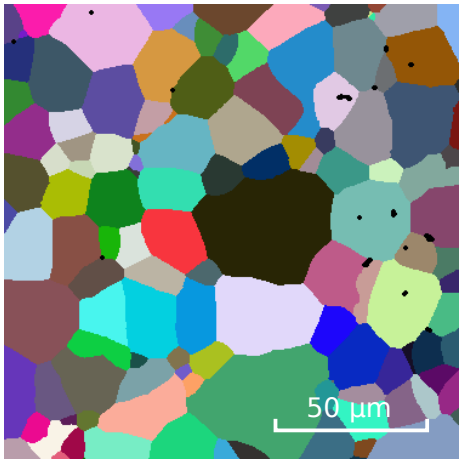
bord sont supprimés : il reste N_g grains occupant une surface S_T. La surface moyenne S_{2D} et la taille moyenne l_{2D} d'un grain peuvent ainsi être définies par :

$$S_{2D} = \frac{S_T}{N_g} \quad \text{et} \quad l_{2D} = \sqrt{S_{2D}}. \tag{4.6}$$

Cette taille est variable suivant les échantillons. Elle varie de 9.9 à 14 µm. Des extraits des échantillons P16 et P33, sont présentés en figure 4.2. Ce sont les échantillons avec la taille moyenne l_{2D} respectivement la plus petite et la plus grande.



(a) P16



(b) P33

FIGURE 4.2 – Extraits des cartes EBSD établies par Ben Saada [14] pour les échantillon P16 et P33

Une surface moyenne peut être calculée sur l'ensemble des échantillons en additionnant les surfaces et les nombres de grains :

$$S_T = \sum_i S_{Ti} \quad \text{et} \quad N_g = \sum_i N_{g_i}.$$

et en reprenant les formules (4.6). La taille moyenne l_{2D} d'un grain 2D pour l'ensemble des cartographies vaut $11,9\,\mu m$.

Voronoï Pour modéliser en 3D la microstructure représentée par les cartographies de la figure 4.2, nous avons choisi de les modéliser par un pavage de Poisson-Voronoï. Ce modèle est couramment utilisé pour modéliser les polycristaux. Ses propriétés, décrites par Møller [101], permettent de reconstruire un milieu 3D à partir de mesures de son intersection avec un plan 2D. Il sera ainsi possible de disposer de microstructures 3D compatibles avec les cartographies 2D.

Ce modèle se construit en deux étapes :

- Un tirage aléatoire doit placer N points $\boldsymbol{x}_i$ dans un volume V suivant un processus de Poisson. En théorie, le nombre N de points est une variable aléatoire, qui suit une loi de Poisson. Nous avons choisi de fixer ce nombre. Pour un grand nombre de grains, cette modification est peu importante. Les N points $\boldsymbol{x}_i$ sont ensuite disposés indépendamment les uns des autres par un tirage aléatoire uniforme dans le volume V.
- Les grains correspondent aux zones du volume V les plus proches des points Poissoniens $\boldsymbol{x}_i$:

$$\boldsymbol{x} \in G_i \quad \Leftrightarrow \quad ||\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_i|| < ||\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_j|| \, \forall \, j \neq i.$$

En 3D, chaque cellule de Voronoï G_i (ou grain) est donc un polyèdre convexe.

Mesures d'un grain Møller [101] donne quelques caractéristiques des grains d'un pavage de Voronoï. Un grain G peut être mesuré de plusieurs manières :

- par son volume $|G|$,
- par son diamètre moyen $D(G)$. Dans la direction ω, le diamètre $D_\omega(G)$ est la plus grande longueur du grain. Son diamètre moyen est la moyenne de ces diamètres suivant la direction :
$$D(G) = \frac{1}{4\,\pi} \int D_\omega(G)\,\mathrm{d}\omega$$
- un grain G est un polyèdre convexe. Il est possible de mesure la longueur totale de ses arêtes $L(G)$ et la diviser par le volume $|G|$. C'est la longueur volumique d'arêtes :
$$L_V(G) = \frac{L(G)}{|G|}.$$

Grain aléatoire Le grain G d'un pavage de Voronoï est un ensemble aléatoire. Il est possible de prendre l'espérance $\mathrm{E}[]$ des mesures précédentes. Elle correspond à la moyenne de ces mesures prise sur un grand nombre de grains.

Møller montre les relations suivantes :

- le volume moyen $\mathrm{E}[|G|]$ est proportionnel à la densité θ de grains :
$$\mathrm{E}[|G|] = \frac{1}{\theta},$$
- le diamètre moyen $\mathrm{E}[D(G)]$, le diamètre moyen $\mathrm{E}[D(G)]$ et la moyenne $\mathrm{E}[L_V(G)]$ sont liés à la densité par la formule :
$$\mathrm{E}[D(G)] = \frac{\mathrm{E}[L_V(G)]}{4\,\theta}$$

Stéréologie Sur une coupe du pavage de Voronoï, les grains sont coupés par le plan de coupe. Il est possible de mesurer la surface de toutes les surfaces des grains coupés. C'est la surface S_{2D} mesurée plus haut sur les cartographies EBSD. Elle est maintenant notée $\mathrm{E}[S_{2D}(G)]$ pour tenir compte du caractère aléatoire du grain.

Une formule de Crofton permet ensuite de relier cette surface moyenne 2D aux mesures 3D :

$$\mathrm{E}[S_{2D}(G)] = \frac{\mathrm{E}[|G|]}{\mathrm{E}[D(G)]} = \frac{4}{\mathrm{E}[L_V(G)]}.$$

C'est une formule de stéréologie, qui consiste à relier les caractéristiques 2D et 3D d'un même objet.

Hypothèse Poissonienne Dans le cas où le pavage de Voronoï est engendré par un processus de Poisson la densité d'arêtes vaut :

$$\mathrm{E}[L_V(G)] = \frac{16}{15}\left(\frac{3}{4}\right)^{1/3} \pi^{5/3}\,\Gamma(\frac{4}{3})\,\theta^{2/3} \approx 5.832\,\theta^{2/3},$$

ce qui permet de relier la densité θ (et le volume moyen $\mathrm{E}[|G|]$) à la moyenne des surfaces de coupe :

$$\theta = \frac{1}{\mathrm{E}[|G|]} = \frac{f_B}{\mathrm{E}[S_{2D}(G)]^{3/2}} \quad \text{avec} \quad f_B = \frac{15}{4}\sqrt{\frac{5}{\pi^5\,\Gamma^3(\frac{4}{3})}} \approx 0.568.$$

La taille moyenne d'un grain peut être définie par la racine cubique de son volume moyen :

$$l_{3D} = \sqrt[3]{\mathrm{E}[|G|]}$$

La taille moyenne des grains, calculée à partir des cartographies EBSD, varie de 11.9 à 16.9 µm. Sur l'ensemble des cartographies, elle vaut 14 µm.

4.5 Récapitulatif des modèles appliqués

Pour étudier l'influence de différents phénomènes tels que l'écrouissage et les GNDs, plusieurs modèles de comportement mécanique ont été appliqués. L'ensemble des modèles simulés est décrit ici, ainsi que les acronymes associés qui seront utilisés dans la suite de ce chapitre.

ANAE C'est le modèle intégral qui prend en compte le flux des GNDs et considère le phénomène d'écrouissage, dû aux interactions entre dislocations, par le phénomène des arbres de la forêt. ANAE pour Avec Nye Avec Écrouissage. Il est donné par le système d'équations (4.1).

SNSE Lorsque le tenseur de Nye $\underline{\alpha}$ est nul, et avec le modèle de comportement identifié sur le matériau déjà écroui, le système d'équations (4.1) devient :

$$\begin{aligned}
\dot{\gamma}^s &= \exp\left(-\frac{T_A}{T}\right)\left(\frac{|\tau_g^s|}{a_A^s}\right)^n \operatorname{sgn}(\tau_g^s) \quad \text{avec} \quad \tau_g^s = \overline{\sigma} : \underline{\beta}^s, \\
\underline{\dot{E}}^p &= \sum_s \dot{\gamma}^s(\tau_g^s)\,\underline{\beta}^s, \\
\overline{\sigma} &= \overline{\overline{C}} : (\underline{\varepsilon} - \underline{E}^p).
\end{aligned}$$

SNSE pour Sans Nye Sans évolution des densités de dislocations de la forêt.

ANSE Avec la circulation des GNDs, et avec le modèle de comportement identifié sur le matériau déjà écroui, le système d'équations (4.1) s'écrit :

$$\begin{aligned}
\dot{\gamma}^s &= \exp\left(-\frac{T_A}{T}\right)\left(\frac{|\tau_g^s|}{a_A^s}\right)^n \operatorname{sgn}(\tau_g^s) \quad \text{avec} \quad \tau_g^s = \overline{\sigma} : \underline{\beta}^s, \\
\underline{\dot{E}}^p &= \sum_s \left(1 + \frac{|\rho_G^s|}{\rho_m^s}\right)\dot{\gamma}^s(\tau_g^s)\,\underline{\beta}^s \quad \text{avec} \quad \rho_G^s = \Pi^s(\underline{\alpha}), \\
\overline{\sigma} &= \overline{\overline{C}} : (\underline{\varepsilon} - \underline{E}^p).
\end{aligned}$$

ANSE pour avec Nye Sans évolution des densités de dislocations de la forêt.

SNAE En considérant l'écrouissage sans écoulement des GNDs, le système d'équations est le suivant :

$$\begin{aligned}
\dot{\gamma}^s &= \exp\left(-\frac{T_A}{T}\right)\left(\frac{|\tau_g^s|}{\tau_h^F}\right)^n \operatorname{sgn}(\tau_g^s) \quad \text{avec} \quad \tau_g^s = \overline{\sigma} : \underline{\beta}^s, \\
\tau_h^F &= a_F \sqrt{\varrho_f}, \\
\varrho_f &= (\varrho_{f_0} - 1)\, X + 1 \quad \text{avec} \quad X = \exp\left(-\left(C_1 \sum_{s\in F_1} |\gamma^s| + C_2 \sum_{s\in F_2} |\gamma^s|\right)\right), \\
\underline{\dot{E}}^p &= \sum_s \dot{\gamma}^s(\tau_g^s)\, \underline{\beta}^s, \\
\overline{\sigma} &= \overline{\overline{C}} : (\underline{\varepsilon} - \underline{E}^p).
\end{aligned}$$

SNAE pour sans Nye avec écrouissage.

4.6 Représentativité des simulations

Dans cette section, des simulations sont effectuées pour étudier la sensibilité des résultats à de nombreux critères numériques, notamment la discrétisation et le filtrage spectral. Un travail sur la recherche d'un pavage aléatoire de Voronoï représentatif sera également présenté.

Simulations Dans les simulations étudiées, le polycristal est soumis à une compression uniaxiale, suivant l'axe $\boldsymbol{x}_1$, avec des conditions périodiques. Les sollicitations correspondent à une déformation moyenne $\langle \varepsilon_{x_1} \rangle$ imposée, et des contraintes moyennes nulles $\langle \sigma^{ij} \rangle$ pour les autres directions. La vitesse de déformation imposée est $\dot{\varepsilon}_{x_1} = 10^{-4}\,\mathrm{s}^{-1}$, avec une déformation maximale de 1 %. La température des simulations est de 1500°C. Pour toutes les simulations, les tenseurs de distorsion plastique $\underline{E}^p$ et de Nye $\underline{\alpha}$ sont initialement nuls. Les modèles de comportement mécanique utilisés sont résumés ci-dessus, et ils seront désignés par leurs acronymes. La valeur de la densité des dislocations mobiles est supposée identique pour tous les systèmes de glissement dans les simulations. Dans cette section, nous la fixons à une valeur de : $\rho_m = 10^{12}\,\mathrm{m}^{-2}$.

Les paramètres du matériau utilisés dans les simulations tels que : le coefficient de Poisson et les constantes élastiques C_{ij} sont reportés dans le chapitre 1.

4.6.1 Représentativité du VER

Par définition, la taille moyenne d'un grain est définie par la racine cubique de son volume moyen. Le volume du VER s'écrit donc :

$$d_g^3\, N_g = L^3, \tag{4.7}$$

d_g, N_g et L sont respectivement la taille moyenne des grains, le nombre de grains et la taille du VER.

Nombre de grains La taille moyenne des grains est fixée à $d_g = 14\,\mu\mathrm{m}$, la valeur évaluée sur les cartes EBSD. Nous faisons varier le rapport $\dfrac{L}{N_g^{1/3}}$ pour identifier le nombre de grains représentatif du comportement du VER. La discrétisation du milieu est prise à 64^3 voxels afin d'avoir des calculs peu lourds, l'effet de la discrétisation sur les calculs sera discuté dans la sous-section qui suit.

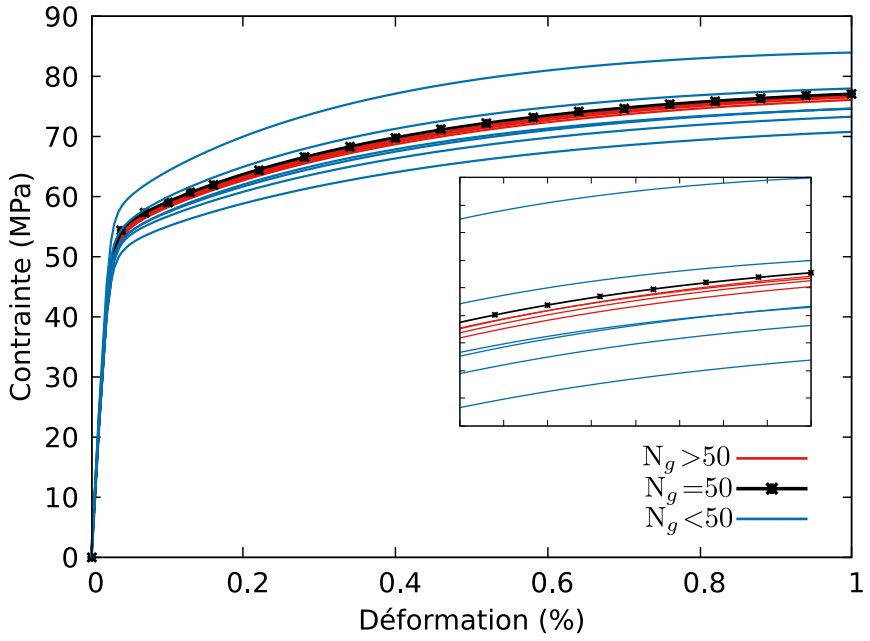


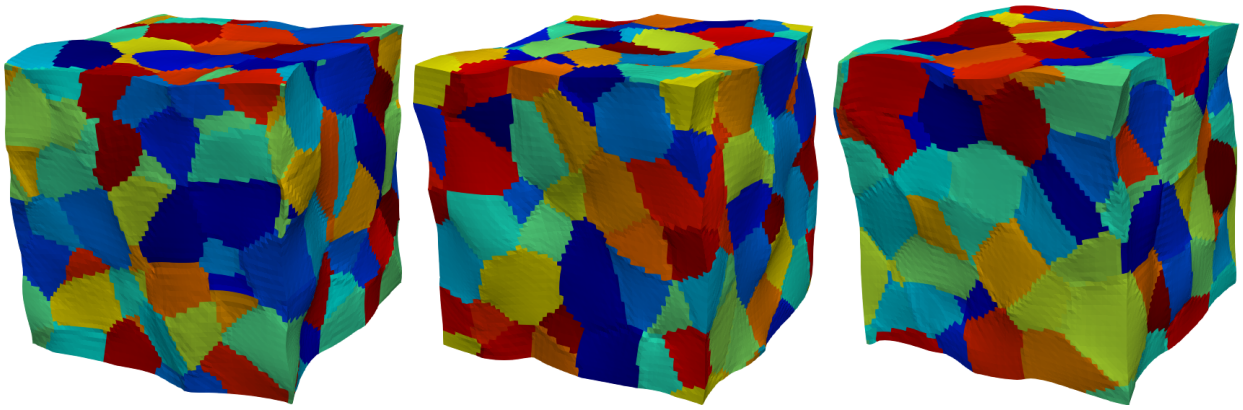
FIGURE 4.3 – Courbes contrainte-déformation obtenues avec le modèle ANAE pour une taille moyenne des grains de $d_g = 14\,\mu m$ et avec différents nombres de grains N_g

La figure 4.3 montre les courbes moyennes contrainte-déformation obtenues avec le modèle ANAE sur des VER avec différents nombres de grains N_g. En bleu, les courbes qui correspondent à un nombre de grains inférieur strictement à 50. La courbe noire donne le résultat avec 50 grains. Et, les rouges sont les courbes avec un nombres de grains supérieur à 50.

On remarque, qu'à partir d'un nombre de grains au-dessous de 50, le tirage aléatoire n'est pas représentatif car le comportement moyen commence à diverger. Ceci peut être expliqué qu'une réduction du nombre de grains dans l'épaisseur de l'échantillon s'accompagne d'une réduction de l'activité des systèmes de glissements. Plus le nombre de grains dans l'épaisseur des échantillons est faible, plus la probabilité de rencontrer un grain favorablement orienté diminue, réduisant donc la capacité du matériau à se déformer.

Pour avoir un VER suffisamment représentatif, on choisit de fixer le nombre de grains à 100.

Tirage aléatoire Les grains sont tirés au sort de manière aléatoire. Ici, nous faisons varier le tirage pour un VER de 100 grains, d'une taille moyenne de $d_g = 14\,\mu m$. Trois tirages sont réalisés et montrés sur la figure 4.4.



(a) Tirage 1 (b) Tirage 2 (c) Tirage 3

FIGURE 4.4 – Trois tirages aléatoires réalisés avec 100 grains d'une taille moyenne de $d_g = 14\,\mu m$

Avec les trois tirages, les simulations sont effectuées en utilisant le modèle ANAE avec une discrétisation de 64^3 voxels. La figure 4.5 présente les courbes moyennes contrainte-déformation issues des trois calculs. Les résultats montrent une légère différence entre les courbes obtenues avec les trois tirages. On en déduit que 100 grains est un nombre suffisant pour que le côté aléatoire du tirage n'influence pas les calculs.

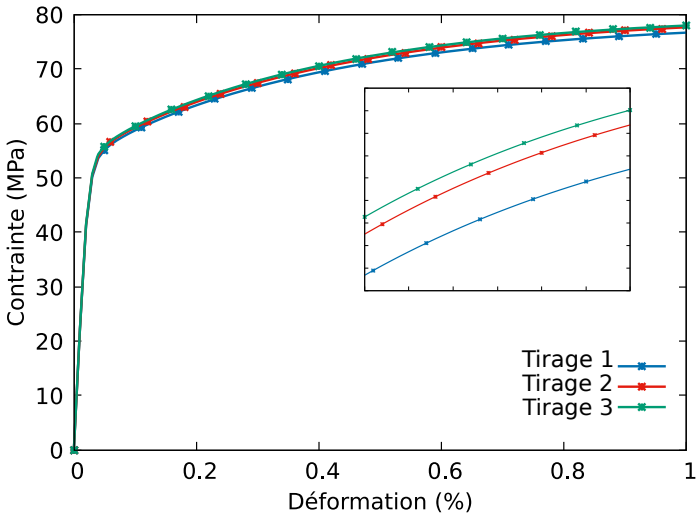


FIGURE 4.5 – Courbes contrainte-déformation obtenues avec le modèle ANAE pour les trois tirages aléatoires de 100 grains

Milieu à utiliser Lorsque l'on s'intéresse au comportement moyen, suite aux études réalisées, le VER qui sera utilisé devra comporter 100 grains d'une taille moyenne de $d_g = 14\,\mu m$.

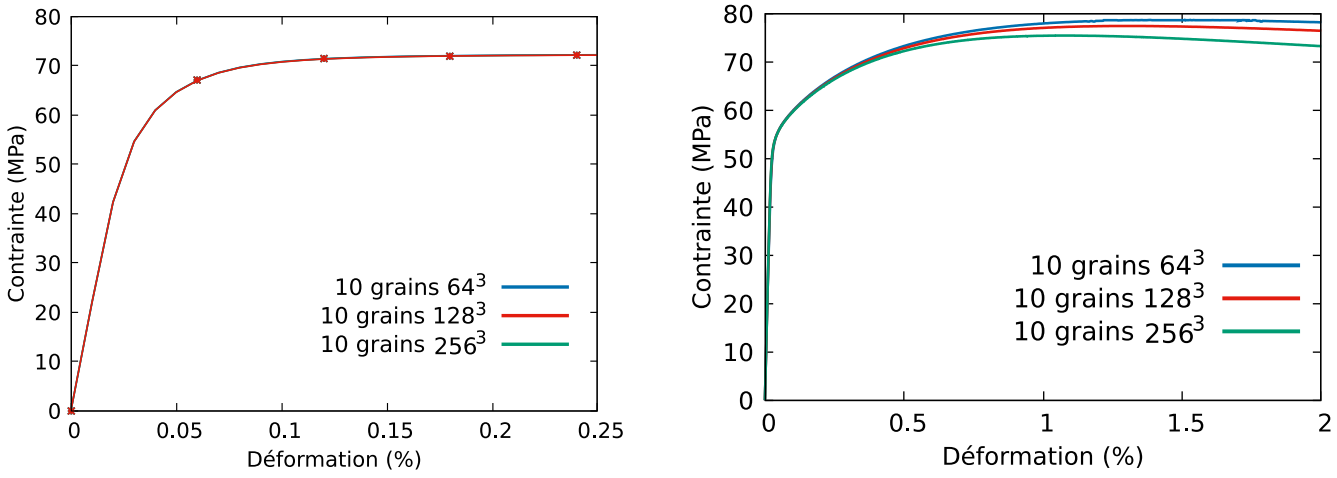
4.6.2 Discrétisation et filtres spectraux

Dans cette sous-section, on étudie l'effet de la discrétisation du milieu et du filtrage sur les résultats.

Discrétisation Trois discrétisations sont testées : $N_1 \times N_2 \times N_3 = 64 \times 64 \times 64$, $128 \times 128 \times 128$ et $256 \times 256 \times 256$; sur un VER composé de 10 grains. Les courbes contrainte-déformation moyennes obtenues

avec le modèle SNSE (sans Nye) et ANAE (avec Nye) sont présentées, respectivement, sur les figures 4.6(a) et 4.6(b).

- Pour le modèle SNSE, qui ne considère pas le tenseur de Nye (GNDs), les courbes de la figure 4.6(a), qui correspondent aux trois discrétisations, sont confondues et la discrétisation n'a pas d'effet.
- En revanche, sur la figure 4.6(b), les courbes du modèle ANAE, qui prend en compte les GNDs, ne convergent pas avec la discrétisation. Cette divergence est due au calcul du tenseur de Nye par l'équation de Kröner, qui utilise un rotationnel, donc une dérivée. La discrétisation fait intervenir toujours plus de hautes fréquences. Il faudrait pouvoir la régulariser en ajoutant une longueur caractéristique à déterminer.



(a) Sans Nye

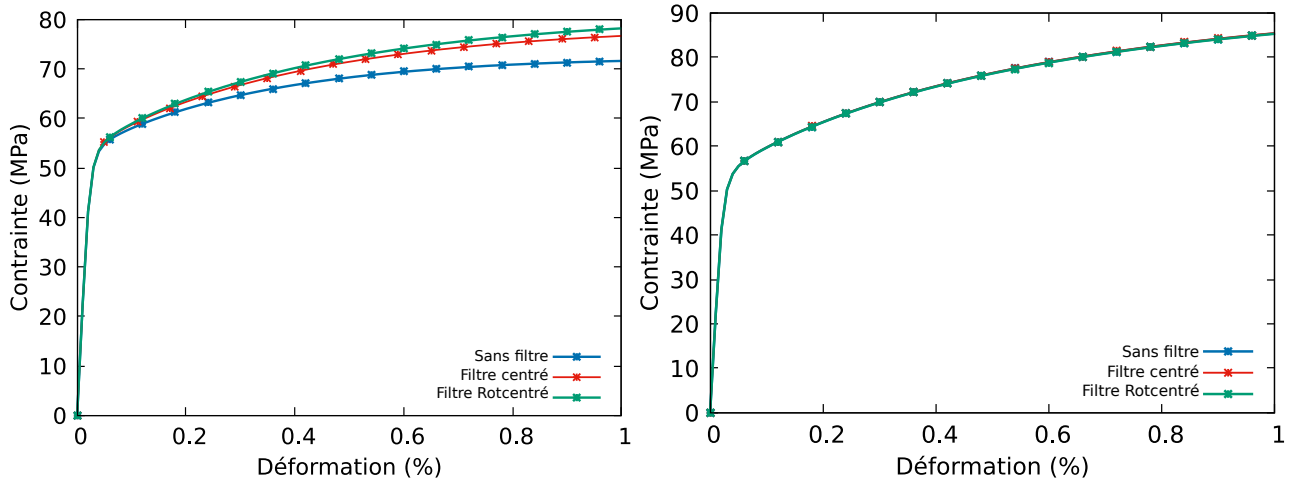
(b) Avec Nye

FIGURE 4.6 – Courbes moyennes de contrainte-déformation obtenues par le modèle ANAE pour différentes discrétisations du milieu avec 10 grains

Pour des raisons de temps de calcul, nous serons amenés à faire des calculs avec 64^3 voxels lorsqu'il s'agira du comportement moyen puisque nous sommes limités par le temps. Les calculs avec 128^3 voxels seront effectués mais avec moins de grains pour étudier les champs locaux, dans l'intérêt d'avoir une bonne résolution des images.

Filtres Les deux filtres testés sont le centré et le Rotcent, dont les expressions sont données dans l'équation (4.5). Les figures 4.7(a) et 4.7(b) montrent, respectivement, les courbes moyennes contrainte-déformation, obtenues avec les modèles ANAE (avec Nye) et SNAE (sans Nye), sur un VER composé de 100 grains. Le milieu est discrétisé en 64^3 voxels.

On remarque que les filtres ont un effet lorsque l'écoulement des GNDs est considéré à travers le modèle ANAE. Les courbes du modèle SNAE, qui ne tient pas compte des GNDs, sont confondues, et les filtres n'ont aucun effet. En effet, le filtrage du tenseur de Nye dans le domaine fréquentiel élimine les hautes fréquences et réduit donc la quantité des GNDs.

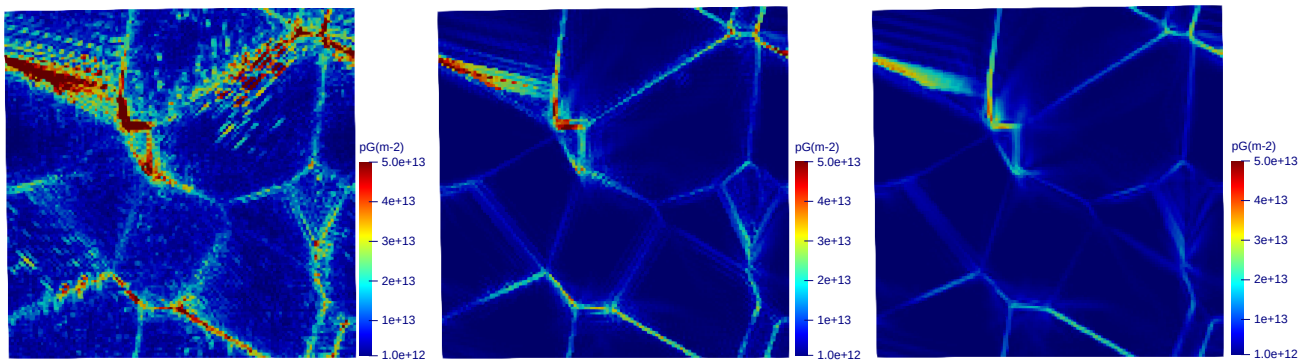


(a) ANAE (b) SNAE

FIGURE 4.7 – Courbes moyennes contrainte-déformation obtenues par les modèles ANAE et SNAE avec et sans filtres pour 100 grains et 64^3 voxels

Champs locaux Les figures 4.8(a), 4.8(b) et 4.8(c), montrent, respectivement, les distributions des GNDs obtenues avec le modèle ANAE, sans filtre, avec le filtre centré et le filtre Rotcentré. Le calcul est effectué avec un VER de 20 grains, 128^3 voxels et la déformation atteinte est $0,25\%$ de la déformation macroscopique.

Par comparaison des trois figures, on constate que les filtres éliminent les oscillations produites par la FFT. Le filtre Rotcentré est plus fort que le filtre centré. D'ailleurs cette différence est visible même sur les courbes moyennes (cf. figure 4.7(a)) où la courbe correspondant au filtre Rotcentré est au-dessus de celle du filtre centré.



(a) Sans filtre (b) Filtre Centré (c) Filtre RotCentré

FIGURE 4.8 – Cartes 2D de distribution des GNDs issues du modèle ANAE à $0,25\%$ de la déformation macroscopique avec 20 grains et 128^3 voxels

Conclusion À partir des études effectuées ci-dessous, les conclusions suivantes sont prises pour les calculs qui vont suivre.

- Le VER représentatif du comportement moyenne du matériau doit être composé de 100 grains.
- Afin de filtrer les oscillations sans trop lisser, le reste des calculs est réalisé avec le filtre centré.

- Pour les calculs des champs moyens, une discrétisation de 64^3 voxels sera utilisée. Les calculs qui auront pour but l'étude des champs locaux comme la distribution des GNDs dans les grains seront menés avec une discrétisation de 128^3 voxels et pour réduire le temps de calcul on choisira des milieux à 20 grains.

4.7 Résultats des simulations et discussions

L'objectif de cette section est d'étudier la prédiction des modèles de comportement mécanique développés pour le comportement du polycristal UO_2. Plusieurs modèles sont considérés pour étudier l'influence de différents phénomènes dont l'écrouissage, durcissement des joints de grains ainsi que la distribution des champs locaux après déformation.

La compression uniaxiale simulée est décrite dans le paragraphe 4.6.

4.7.1 Durcissement par écrouissage de l'UO_2 polycristallin

L'effet des GNDs ainsi que le durcissement du matériau sont étudiés dans cet paragraphe.

Couplage La première étude porte sur le couplage des SSDs et des GNDs. Dans le modèle (4.1) ANAE, présenté au paragraphe 4.1, le paramètre ρ_m est un coefficient de couplage, qui pondère l'action des GNDs : plus il est grand, moins les GNDs n'interviennent dans la plasticité.

Des essais de compression ont été simulés pour trois valeurs de ρ_m : 10^{10}, 10^{12}, et $10^{14}\,\mathrm{m}^{-2}$. Un quatrième essai est réalisé avec le modèle SNAE, qui ne prend pas en compte les GNDs.

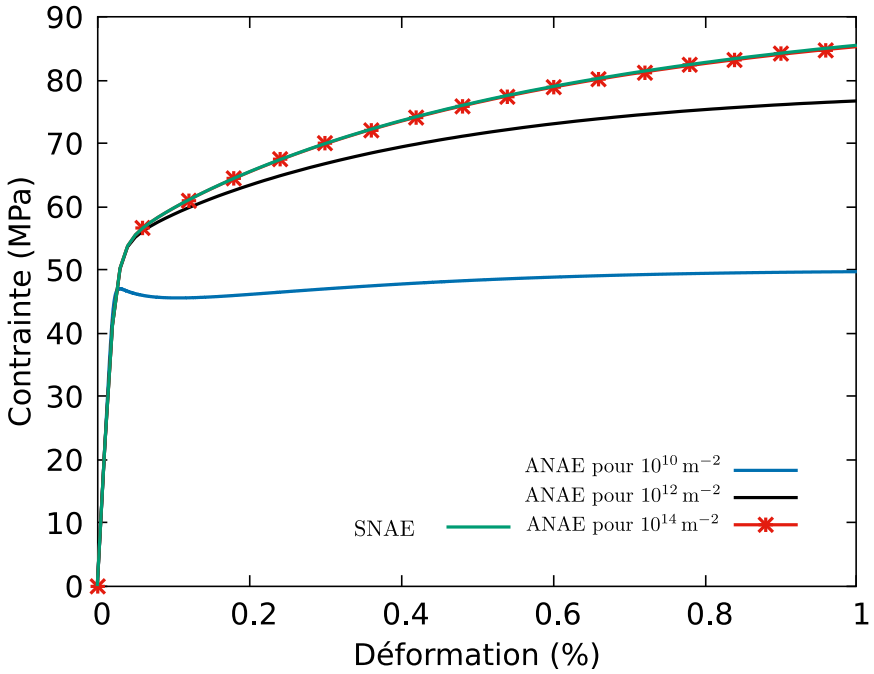


FIGURE 4.9 – Courbes contrainte-déformation obtenues pour différentes valeurs de ρ_m, par application des modèles ANAE et SNAE. Les calculs ont utilisé un VER de 100 grains avec 64^3 voxels

Les courbes moyennes contrainte-déformation sont présentées en figure 4.9.

- Avec le modèle ANAE pour les différentes valeurs de ρ_m : $10^{10}\,\mathrm{m}^{-2}$ (en bleu), $10^{12}\,\mathrm{m}^{-2}$ (en noir), et $10^{14}\,\mathrm{m}^{-2}$ (en rouge).
- Avec le modèle SNAE en vert.

Plus le paramètre ρ_m augmente, moins les GNDs agissent, et plus matériau se durcit. Pour une valeur de $\rho_m = 10^{14}\,\mathrm{m}^{-2}$, le modèle ANAE se comporte comme le modèle SNAE, l'action de GNDs est alors négligeable.

Dans la suite, toutes les simulations utiliseront une valeur de $\rho_m = 10^{12}\,\mathrm{m}^{-2}$.

Écrouissage Le modèle ANSE est une simplification du modèle ANAE, qui ne prend pas en compte la phase d'écrouissage en supposant le matériau déjà écroui. Ces deux modèles sont comparés sur un essai de compression qui atteint une déformation maximale de 5%. Les courbes de compression sont présentées en figure 4.10.

La courbe obtenue avec le modèle ANSE montre un durcissement immédiat puis un adoucissement dû aux GNDs. Le modèle ANAE montre un durcissement progressif du matériau, avant que les GNDs ne viennent adoucir le matériau.

L'intérêt du modèle ANSE est de réduire le temps de calcul. Il permet d'éviter la phase d'écrouissage, et d'atteindre rapidement des situations qui nécessiteraient de longs temps de calcul.

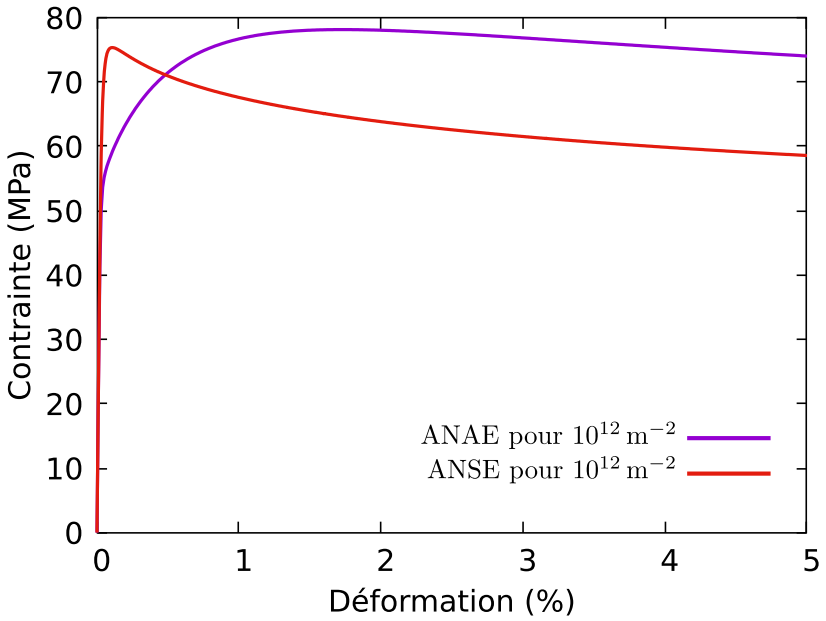


FIGURE 4.10 – Courbes contrainte-déformation obtenues avec les deux modèles ANSE et SNAE pour une valeur de $\rho_m = 10^{12}\,\mathrm{m}^{-2}$. Les calculs ont utilisé un VER de 100 grains avec 64^3 voxels

4.7.2 Durcissement par joints de grains de l'UO_2 polycristallin

Les joints de grains sont des frontières pour le mouvement des dislocations. Le comportement d'une dislocation arrivant sur un joint de grains varie suivant la contrainte appliquée, la température du matériau ou encore la géométrie du joint de grain. Suivant la nature de ces différents paramètres, la dislocation pourra ainsi se stocker au voisinage du joint, s'intégrer à ce joint ou encore le traverser. Les modes de réaction d'une dislocation avec un joint de grains sont illustrés sur la figure 4.11. Le fait de freiner le

mouvement des dislocations à travers les joints de grains entrave l'apparition de la plasticité et augmente donc la limite d'élasticité du matériau. Ce phénomène est d'autant plus important que la taille des grains est petite, puisque les dislocations auront moins de distance à parcourir pour rejoindre les joints de grains. La contrainte d'écoulement plastique s'exprime selon la loi expérimentale de Hall-Petch.

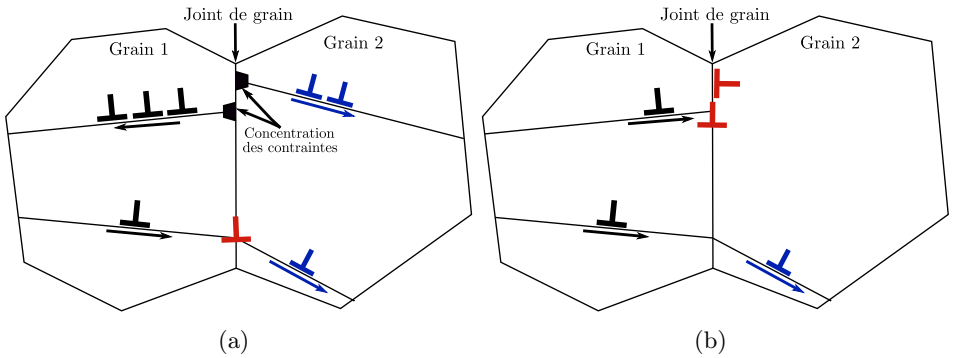


FIGURE 4.11 – Cas d'interaction entre dislocations et joints de grains, d'après Priester [119]

Relation Hall-Petch Hall [50] suivit par Petch [114] furent les premiers à proposer un modèle montrant la dépendance de la contrainte d'écoulement à la taille de grain avec la formule suivante :

$$\sigma = \sigma_0 + \frac{k}{\sqrt{d_g}}$$

avec σ la contrainte d'écoulement pour une déformation donnée, σ_0 la contrainte équivalente à une taille de grain infinie et k le coefficient de Hall-Petch donnant la dépendance à la taille de grain d_g. Cette relation traduit l'augmentation de la contrainte d'écoulement avec la diminution de la taille des grains.

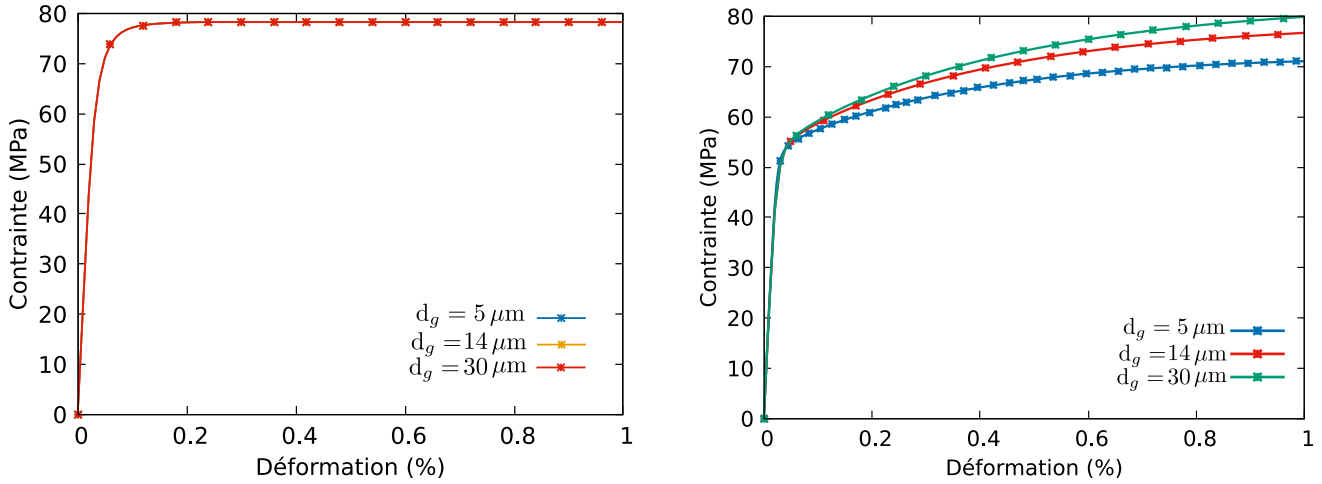
Les simulations réalisées pour étudier la prédiction de notre modèle ANAE au phénomène de durcissement par joints de grains sont présentées ci-dessous.

Simulation Les conditions du test de compression simulé sont données dans le paragraphe 4.6. Les calculs sont effectués sur des VER de différentes tailles moyennes de grains et avec 64^3 voxels. Le modèle de comportement utilisé est ANAE. Trois tailles moyennes de grain sont considérées : 5, 14 et 30 µm. La relation qui associe la taille moyenne des grains, le nombre de grains et la taille du VER, est donnée par l'équation (4.7). Le nombre de grains représentatifs de la microstructure est fixé à 100. Afin de faire varier la taille moyenne des grains, la taille de la boîte L est modifiée pour chaque taille de grain fixée.

Résultats La figure 4.12 montre les courbes moyennes contrainte-déformation obtenues avec 100 grains d'une taille moyenne : 5, 14 et 30 µm. La figure 4.12(a) montre les résultats obtenus sans tenir compte du tenseur de Nye (GNDs), et la figure 4.12(b) montre les résultats avec le tenseur de Nye.

Les courbes obtenues par le modèle SNAE, sans tenir compte du tenseur de Nye (GNDs), sont confondues pour les trois tailles de grains étudiées. L'effet de la taille des grains n'est pas reproduit par notre modèle, car les dislocations peuvent franchir sans obstacles les joints de grains.

Sur la figure 4.12(b), dont les courbes sont calculées avec le modèle ANAE, qui prend en compte les GDNs, un effet Hall-Petch inverse semble se produire : plus les grains sont petits, plus le matériau s'adoucit. Il s'agit en fait d'un artefact numérique. Nous avons montré plus haut, au paragraphe 4.6.2, que plus la discrétisation est fine, plus le tenseur de Nye incorpore de hautes fréquences, ce qui adoucit le matériau. C'est ce qui se passe ici, lorsque la taille des grains diminue.



(a) Sans Nye (b) Avec Nye

FIGURE 4.12 – Comparaison des courbes contrainte-déformation obtenues, avec le modèle ANAE pour 100 grains de tailles moyennes 5, 14 et 30 µm

Bibliographie Plusieurs travaux ont porté sur la modélisation des joints de grain, dans le cadre de la théorie de la Mécanique des Champs de Dislocations : le travail de Djaka [32] avec une résolution par FFT, l'article de Richeton et al. [124] et la thèse de Daveau [29] avec une résolution par éléments finis. Ceci ouvre des perspectives de développements pour l'étude du comportement de l'UO_2.

4.7.3 Effet de la température et de la vitesse de déformation

L'effet de la vitesse et de la température est étudié. Les calculs sont effectués avec 100 grains et avec le modèle ANAE et pour une discrétisation de 64^3 voxels.

L'effet de la vitesse est étudié avec trois vitesses de déformation : 10^{-5}, 10^{-4}, $10^{-3}\,s^{-1}$. Quatre températures ont été étudiées : 900, 1500, 2000 et 3000°C.

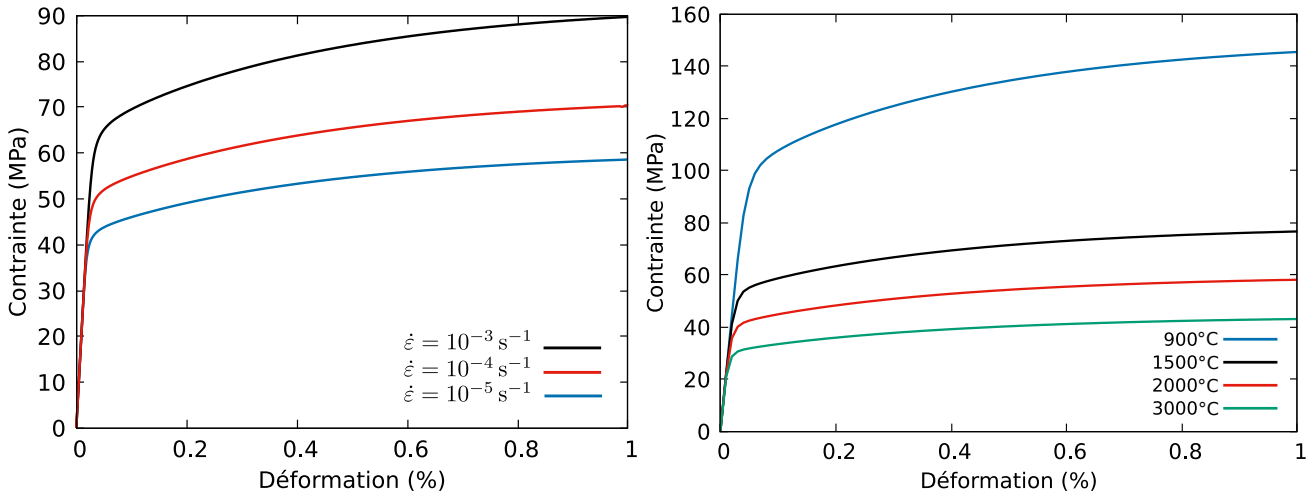
Les courbes contrainte-déformation, pour différentes vitesse de déformation et différentes températures, sont montrées, respectivement, sur les figures 4.13(a) et 4.13(b).

Sur la figures 4.13(a), on note que, plus que la vitesse est élevée, plus la contrainte d'écoulement est importante. La figure 4.13(b) montre que la contrainte d'écoulement diminue avec l'augmentation de la température. Les résultats du modèle sont en bon accord avec les résultats expérimentaux donnés par Guérin [48].

4.7.4 Distribution des champs locaux

Jusqu'à présent, nous avons étudié le comportement moyen du polycristal d'UO_2 lors d'un essai de compression et sa sensibilité à différents phénomènes. Dans cette sous-section, on s'intéresse aux distributions des champs locaux : les distorsions plastiques $|\underline{E}^p|$, les GNDs $\rho_G = \dfrac{|\underline{\alpha}|}{b}$, et le degré d'écrouissage ϱ_f, dans l'UO_2 déformé.

Simulation La description de l'essai de compression uniaxiale simulé est donnée au paragraphe 4.6. Le milieu utilisé est composé de 20 grains avec 128^3 voxels. Trois modèles sont étudiés : ANAE, ANSE et SNSE avec post-traitement du tenseur de Nye.



(a) Effet de la vitesse

(b) Effet de la température

FIGURE 4.13 – Effet de la vitesse et de la température sur les courbes moyennes contrainte-déformation, obtenues avec le modèle ANAE

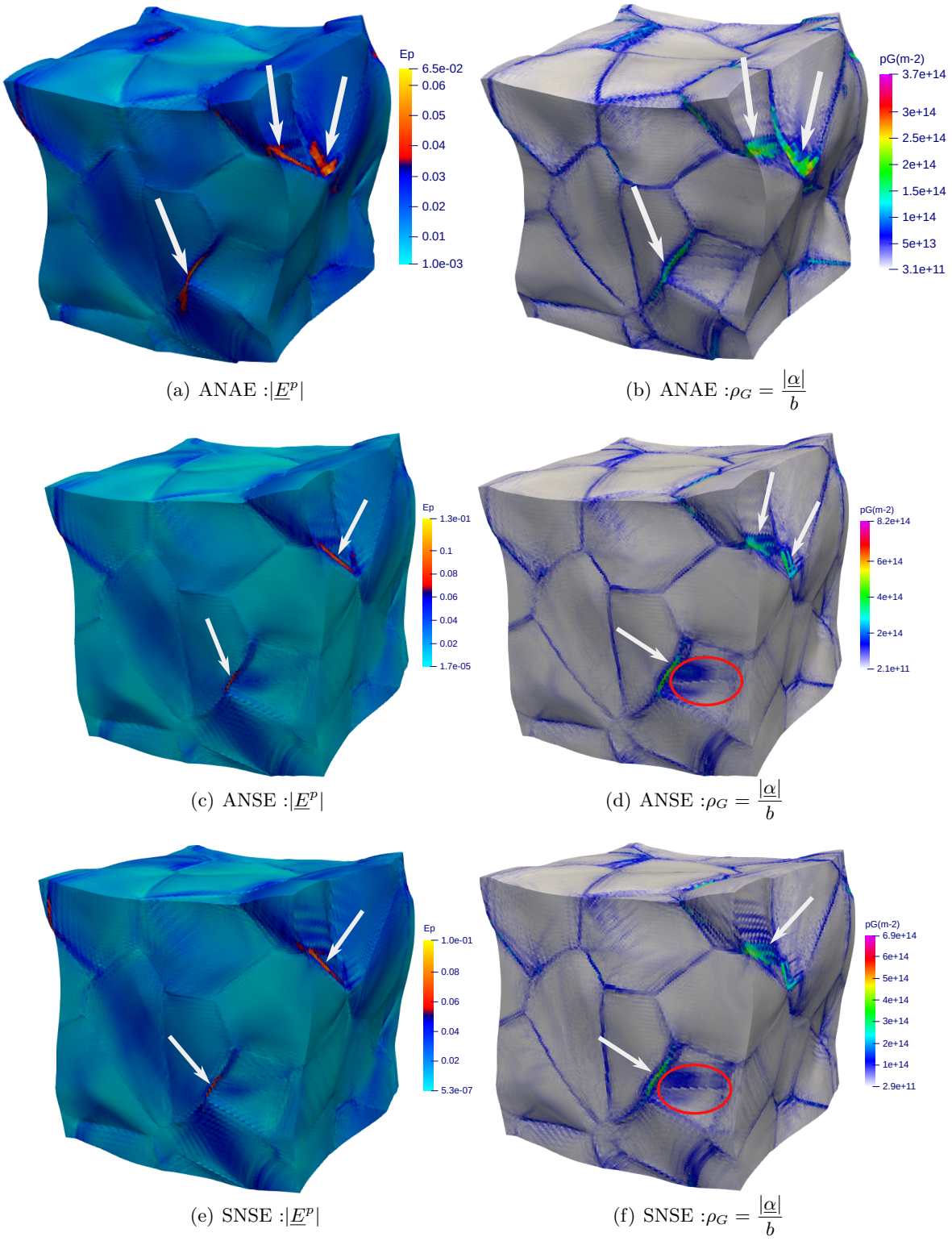
Distorsion $\underline{E}^p$ Le champ de distorsion $\underline{E}^p$ est évalué localement en chaque point de la discrétisation par intégration du modèle de comportement mécanique sur MFront. Les figures 4.14(a), 4.14(c) et 4.14(e) montrent les champs de distorsion plastique $|\underline{E}^p|$ à 1% de la déformation macroscopique obtenus avec les trois modèles : ANAE, ANSE et SNSE, respectivement. Ces figures présentent également le champ de déplacement qui déforme le polycristal. Dans les trois cas, la distorsion plastique forme des bandes, qui viennent cisailler le polycristal avec une direction de 45 ° par rapport à la direction de compression. La progression de la bande de cisaillement peut se faire de deux manières, suivant la forme et l'orientation des grains :

- soit elle se concentre sur les joints de grains, provoquant une rotation des grains voisins ;
- soit elle traverse le grain, de manière beaucoup plus diffuse. Le grain traversé est alors tordu par cette bande plastique.

Ces effets sont plus prononcés avec le modèle ANAE complet. On remarque aussi qu'avec le modèle ANAE la localisation des distorsions aux joints de grains est accentuée par rapport aux résultats avec les deux modèles ANSE et SNSE. Ceci traduit l'effet de transport des GNDs à travers les grains.

GNDs Les trois figures 4.14(b), 4.14(d) et 4.14(f) illustrent les distributions des GNDs après 1% de la déformation macroscopique, obtenues avec les trois modèles ANAE, ANSE et SNSE, respectivement. Sur les figures, les GNDs apparaissent aux joints de grains, où l'incompatibilité des distorsions plastiques entre grains différents créent de fortes contraintes, activant le glissement des SSDs. Les GNDs s'écoulent ensuite à travers les grains. Cet écoulement sera étudié davantage dans les comparaisons avec l'expérience dans sous-section 4.8.3.

Les GNDs sont créées pour assurer la continuité du polycristal pendant la déformation, ainsi leur écoulement suivra des chemins particuliers pour remplir les vides et les chevauchements créés par la rotation des grains les uns par rapport aux autres. C'est d'ailleurs le concept d'Ashby [8], rappelé ci-dessous, que l'on retrouve dans les résultats des simulations.



(a) ANAE :$|\underline{\underline{E}}^p|$ (b) ANAE :$\rho_G = \dfrac{|\underline{\alpha}|}{b}$

(c) ANSE :$|\underline{\underline{E}}^p|$ (d) ANSE :$\rho_G = \dfrac{|\underline{\alpha}|}{b}$

(e) SNSE :$|\underline{\underline{E}}^p|$ (f) SNSE :$\rho_G = \dfrac{|\underline{\alpha}|}{b}$

FIGURE 4.14 – Champs de distorsion plastique et distribution des GNDs obtenus avec les trois modèles : ANAE, ANSE et SNSE à 1% de la déformation macroscopique pour $\rho_m = 10^{12}\,\mathrm{m}^{-2}$

Ashby Ashby [8] a introduit la notion des GNDs en référence à Cottrell [28]. Dans des alliages biphasés, un gradient de déformation se produit du fait de la non-homogénéité de la plasticité entre les différentes phases. Ashby appelle les GNDs, des dislocations stockées pour compenser ces gradients de déformation. Elles sont donc Nécessaires pour permettre une déformation compatible des deux phases. Ce concept est généralisé pour tous les matériaux non-homogènes, notamment les polycristaux.

La figure 4.15, explique le processus de formation des GNDs, les $\perp$ noires, dans le cas du chargement d'un polycristal :

- sous l'action de la contrainte appliquée, les dislocations glissent sur des systèmes de glissement. Ainsi, le polycristal se déforme, les grains pivotent jusqu'à générer des discontinuités (vides et recouvrements) ;
- les GNDs sont ensuite créées pour rétablir la continuité du polycristal.

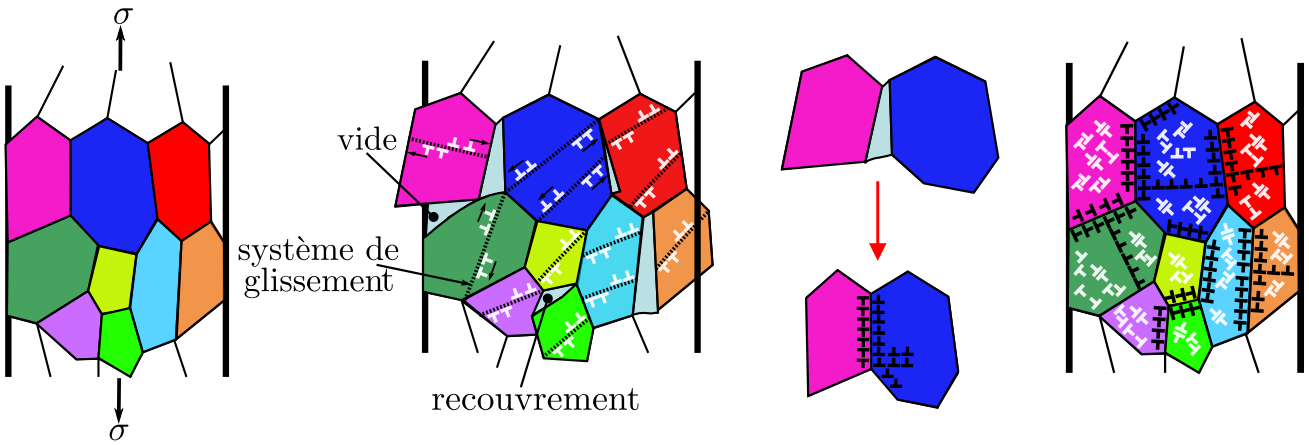
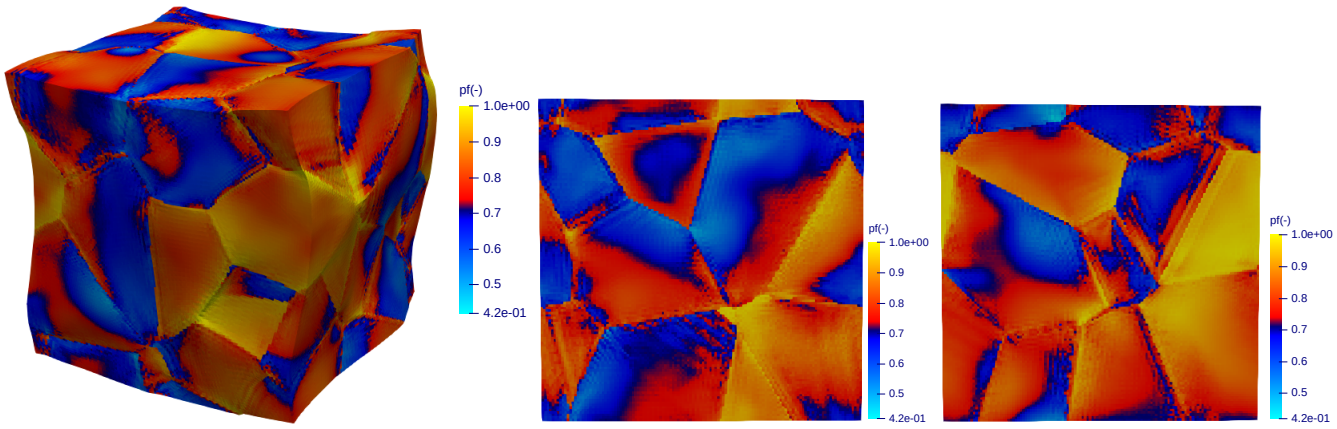


FIGURE 4.15 – Incompatibilité à l'échelle du polycristal : modèle d'Ashby [8]. Les dislocations $\perp$ noires représentent les GNDs, et les blanches les SSDs

Degré d'écrouissage Le modèle de comportement ANAE nous permet de suivre le degré de durcissement du matériau ϱ_f, pendant la déformation. La figure 4.16 montre le champ ϱ_f après 1% de la déformation macroscopique. Le matériau est durci de manière hétérogène. Le durcissement est réparti dans les grains, ou parfois accumulé sur les joints de grains mais avec une épaisseur importante.

4.8 Comparaison avec l'expérience

Dans les sections précédentes, nous avons effectué des simulations pour étudier l'effet de plusieurs paramètres sur les résultats. Nous avons également confirmé la prédiction de notre modèle à plusieurs phénomènes, notamment le durcissement par écrouissage, phénomène observé expérimentalement sur l'UO_2 monocristallin et polycistallin. Nous simulons ici des tests de compression réalisés sur des polycristaux d'UO_2 afin de montrer la capacité de notre modèle, à l'échelle du polycristal, à prédire le comportement mécanique de l'UO_2. L'ensemble des simulations est effectué avec le modèle complet ANAE, avec le filtre centré et pour une densité de dislocations mobiles fixe $\rho_m = 10^{12}\,\mathrm{m}^{-2}$. Le VER est composé de 100 grains avec une taille moyenne des grains de 14 µm calculée à partir des cartes EBSD données dans les travaux de Ben Saada [14] a été utilisé. D'ailleurs, les tests simulés dans cette section proviennent des mêmes travaux.



(a) 3D (b) Coupe $\boldsymbol{x}$ (c) Coupe $\boldsymbol{x}$

FIGURE 4.16 – Degré d'écrouissage ϱ_f obtenu avec le modèle ANAE à 1% de la déformation macroscopique pour $\rho_m = 10^{12}\,\mathrm{m}^{-2}$

4.8.1 Données expérimentales et simulations

Les résultats expérimentaux acquis dans le travail de thèse de Ben Saada [14] sont utilisés. Elle a réalisé des essais de fluage et de DVC à 1500°C pour des vitesses entre 10^{-6} et $10^{-4}\,\mathrm{s}^{-1}$. Le tableau ci-dessous, résume la référence de la pastille, le type d'essai, la vitesse de déformation ainsi que la déformation maximale des essais simulés.

N° de pastille	Essai	$\dot{\varepsilon}\,(10^{-5}\,\mathrm{s}^{-1})$	$\varepsilon_{\max}(\%)$
P30	DVC	$6,39$	11
P23	DVC	$8,33$	11
P34	DVC	$44,4$	$11,2$
P3	DVC	$1,84$	$5,1$
P11	DVC	$1,98$	11
P13	DVC	$7,31$	11

TABLE 4.1 – Caractéristiques des essais de Ben Saada [14] simulés

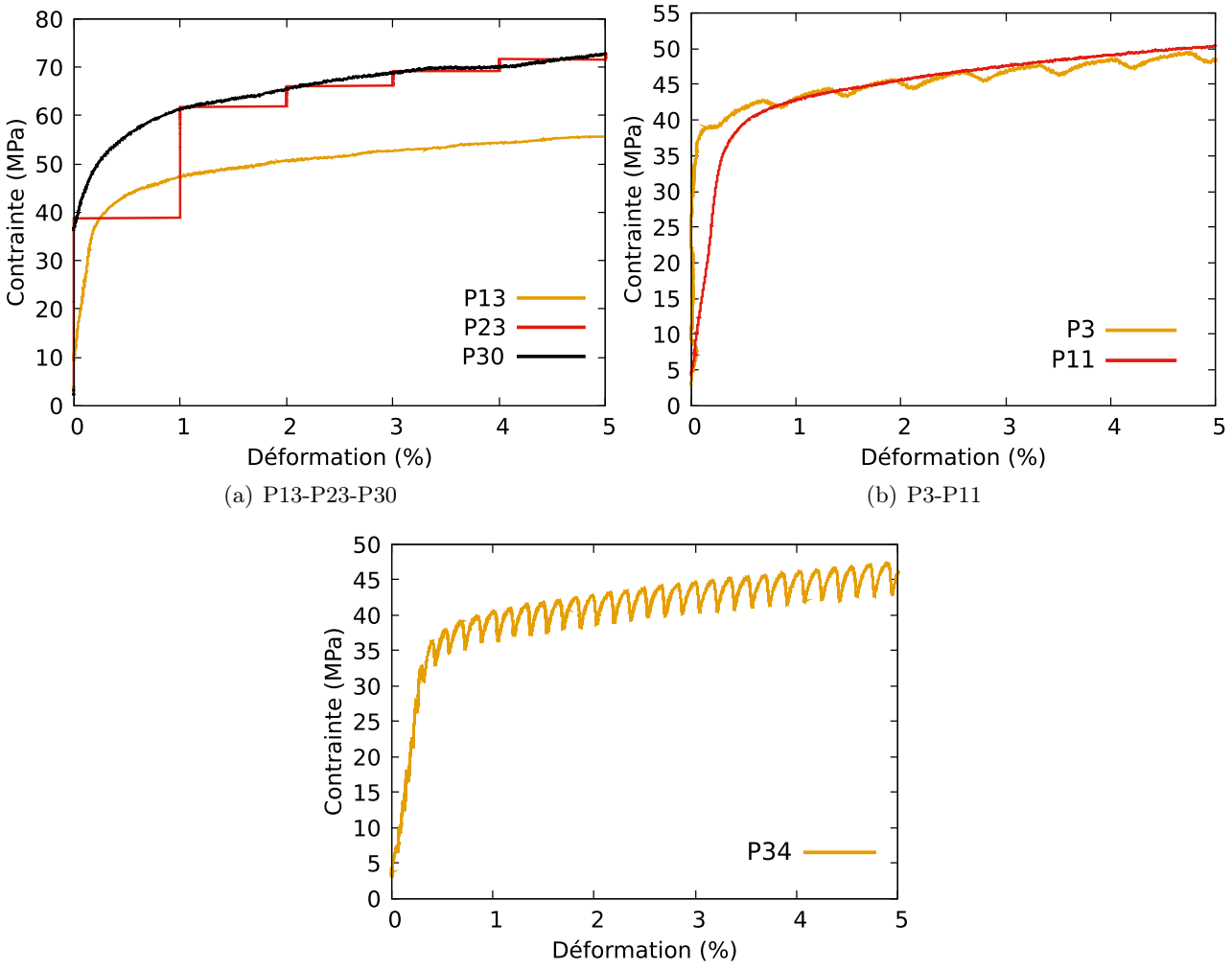
Courbes expérimentales Les courbes contrainte-déformation correspondant aux essais résumés dans le tableau 4.1 sont présentées dans la figure 4.17. Les essais réalisés à des vitesses imposées voisines sont regroupés : la figure 4.17(a) pour les échantillons P13, P23 et P30 à une vitesse $\dot{\varepsilon} \approx 7 \times 10^{-5}\,\mathrm{s}^{-1}$; la figure 4.17(b) pour les échantillons P3 et P11 à une vitesse $\dot{\varepsilon} \approx 2 \times 10^{-5}\,\mathrm{s}^{-1}$, et la figure 4.17(c) pour l'échantillon P34.

On constate que les résultats des tests effectués à une même vitesse peuvent différer :

- Les essais P23 et P30 de la figure 4.17(a) sont comparables. L'essai P3 présente une courbe très différente, avec une plastification très rapide, et des contraintes plus faibles.
- les essais P3 et P11 de la figure 4.17(b) sont très comparables, avec toutefois une plastification plus rapide pour l'essai P11.

Ces différences peuvent provenir d'une porosité ou d'une taille de grains différentes. Il faudra tenir compte de ces différences possibles pour comparer les résultats expérimentaux au modèle.

Résultats simulations Étant limité par le temps de calcul, les simulations effectuées sont arrêtées à une déformation de 5%. La figure 4.18 montre les courbes contrainte-déformation pour les essais simulés regroupés dans le tableau 4.1. On constate que le modèle surestime la contrainte, pour tous les essais, mais en produisant la même tendance expérimentale. Cet écart peut être attribué à la variabilité des données expérimentales, ainsi qu'à des phénomènes non pris en compte dans le modèle, notamment les interactions des dislocations avec les joints de grains, la montée des dislocations, ou la porosité des échantillons.

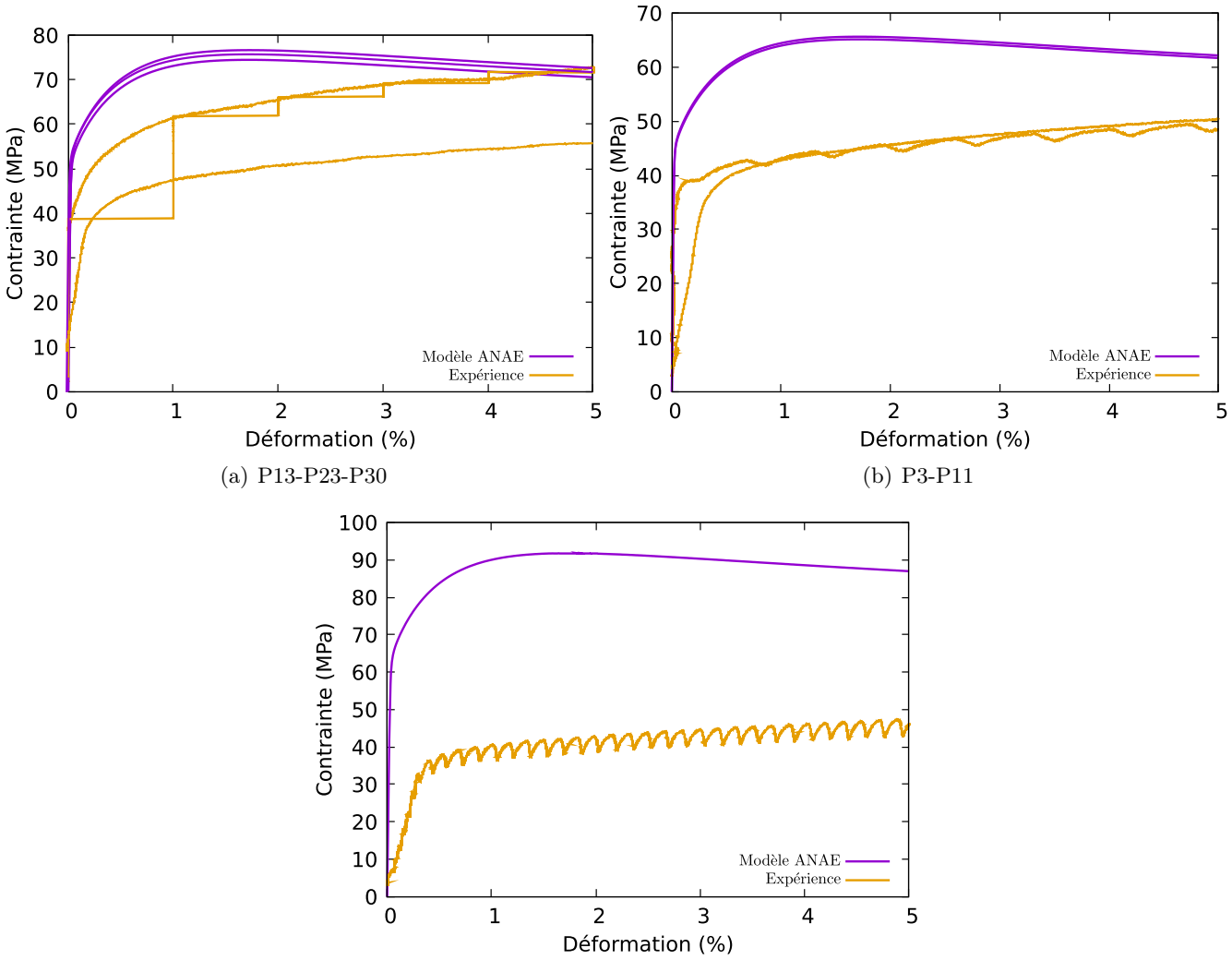


(a) P13-P23-P30

(b) P3-P11

(c) P34

FIGURE 4.17 – Courbes contrainte-déformation expérimentales données par vitesses égales



(a) P13-P23-P30

(b) P3-P11

(c) P34

FIGURE 4.18 – Courbes contrainte-déformation : modèle ANAE à 5% de la déformation macroscopique vs l'expérience de Ben Saada [14]. Calcul avec 64^3 voxels et $\rho_m = 10^{12}\,\mathrm{m}^{-2}$ avec 100 grains

4.8.2 Nye et courbure du réseau cristallin

Les GNDs sont les dislocations responsables de la subdivision des grains en sous-grains. Elles sont liées à la courbure du réseau cristallin par la relation suivante, d'après [111] :

$$\underline{\alpha} = \underline{\mathrm{rot}}\,(\underline{\varepsilon}^e) + \mathrm{tr}\left(\overline{\overline{\kappa}}\right)\,\underline{I} - \overline{\overline{\kappa}}^T, \tag{4.8}$$

avec : $\underline{\varepsilon}^e$ et $\overline{\overline{\kappa}}$, le tenseur des déformations élastiques et le tenseur des désorientations, respectivement. La densité des GNDs induite par la déformation peut être évaluée à partir des désorientations intragranulaires mesurables par EBSD avec la relation 4.8, comme dans Pantleon [111]. En effet, le tenseur $\overline{\overline{\kappa}}$ peut être calculé à l'aide de la relation suivante :

$$\kappa_{ij} = \frac{\Delta\theta_i}{\Delta x_j} \quad \forall\, i \in (1,2,3) \quad \text{et} \quad \forall\, j \in (1,2),$$

$\Delta\theta_i$ sont les composantes du vecteur de désorientation entre les pixels voisins séparés par la distance Δx_j. Cette méthode d'évaluation des densités de GNDs ne permet de calculer qu'une partie des GNDs. En effet, à partir d'une carte EBSD 2D, seules six composantes du tenseur de courbure élastique peuvent être déterminées (j = 1, 2) (la désorientation selon la troisième direction, perpendiculaire à la carte EBSD, n'étant pas accessible). Ainsi, le tenseur qui peut être évalué à partir des cartes EBSD est :

$$\underline{\alpha} = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & ? \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & ? \\ \alpha_{31} & \alpha_{32} & ? \end{pmatrix}.$$

Ensuite, la densité scalaire des GNDs est obtenue par la norme du tenseur de Nye :

$$\rho_G = \frac{|\underline{\alpha}|}{b}.$$

En plus de l'absence d'information suivant l'axe $\boldsymbol{x}_3$, il est important de souligner que, la précision de la mesure Δx_j d'une désorientation et la résolution spatiale d'une carte EBSD, ont une influence directe sur l'évaluation de la densité de GNDs et la discrimination entre les GNDs et les SSDs. Ainsi, les valeurs des densités de GNDs évaluées à partir des cartes EBSD sont conditionnées par le pas Δx_j choisi. Ceci ne permet pas de dresser des conclusions fermes en comparant avec les résultats des simulations.

Subdivision dans l'UO_2 La méthode expliquée ci-dessus est utilisée dans le travail de thèse de Ben Saada [14] pour établir des cartes de distribution des GNDs après déformation des pastilles. L'angle limite choisi pour traduire une désorientation en GNDs est 5°. Les lignes blanches sur la figure 4.19 représentent les joints de grains initiaux qui ont une désorientation supérieure à 5°. La comparaison avec l'échantillon non déformé montre la présence d'un réseau de sous-joints au sein des grains. Ils sont colorés en fonction de la valeur de la norme du tenseur de Nye qui traduit la densité de GNDs produite dans le matériau. Ces densités de GNDs traversent les grains et construisent des murs de dislocations qui subdivisent les grains en sous-grains.

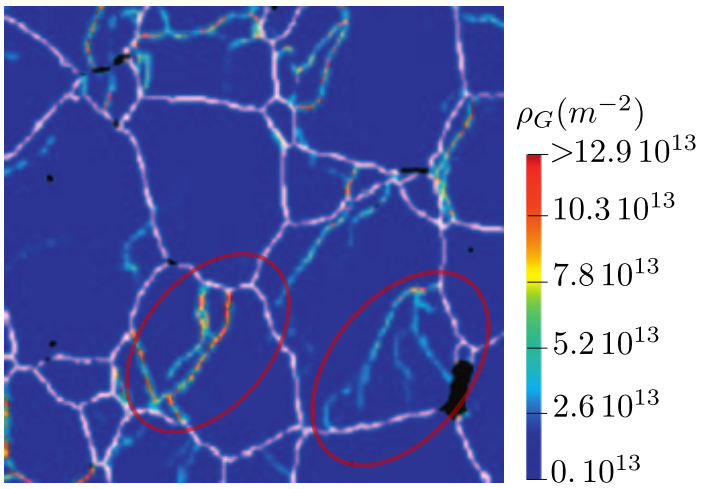


FIGURE 4.19 – Carte de distribution des GNDs après déformation de l'échantillion

Dans ce qui suit, les cartes de distribution des GNDs obtenues par les simulations, avec les différents modèles développés seront comparées à l'expérience. La comparaison ne peut être que qualitative, pour plusieurs raisons :

- les calculs n'ont pas été réalisés sur les mêmes microstructures de départ que celles de l'expérience.
- L'exploitation des résultats expérimentaux nous permet d'avoir accès uniquement à six composantes du tenseur de Nye, et les résultats sont influencés par la précision de mesures.

L'objectif est de vérifier si le modèle parvient à reproduire, qualitativement, le flux des GNDs dans les grains, ainsi que d'étudier l'influence de différents phénomènes sur la distribution des GNDs.

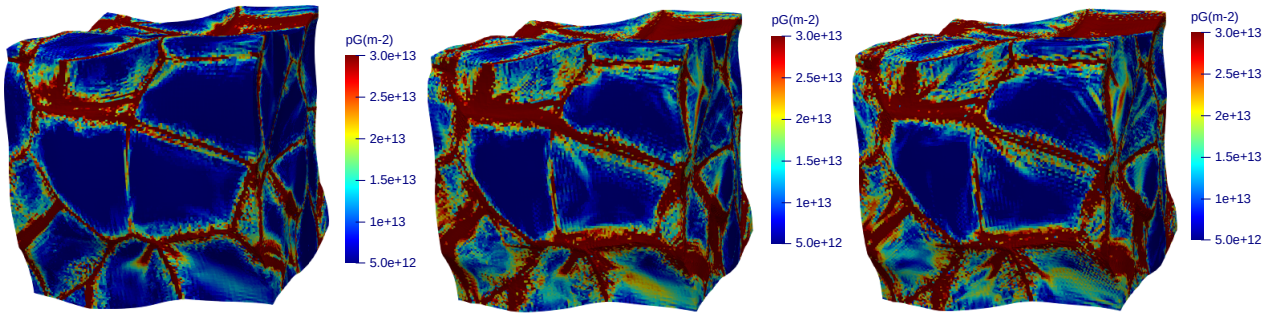
4.8.3 Subdivision des grains

Dans cette section, nous allons analyser les résultats des simulations en vue de mieux comprendre la subdivision des grains au cours de la déformation, et l'influence de plusieurs phénomènes.

Écoulement vs post-traitement des GNDs

Les résultats obtenus avec les différents modèles : ANAE, ANSE ainsi que SNSE avec post-traitement des GNDs, sont présentés et discutés.

Distributions 3D Les figures 4.20(a), 4.20(b) et 4.20(c) montrent les distributions des GNDs obtenues, respectivement, avec les modèles ANAE, ANSE et SNSE avec post-traitement de Nye. On note un flux de GNDs dans les grains. Des murs de densité des GNDs apparaissent traverser les grains pour les diviser dans certains cas en sous-grains. Ce fait diffère selon le modèle utilisé pour le même niveau de déformation macroscopique atteint qui est de 1%. Pour les trois modèles, les GNDs tracent les mêmes trajectoires dans les grains ; la différence se situe au niveau de l'intensité qui est plus importante avec le modèle ANSE et moins avec le modèle ANAE complet. Les résultats obtenus avec SNSE sont intermédiaires. Cette différence sera expliquée par la suite.



(a) ANAE (b) ANSE (c) SNSE

FIGURE 4.20 – Distributions 3D des champs de GNDs à 1% de la déformation macroscopique

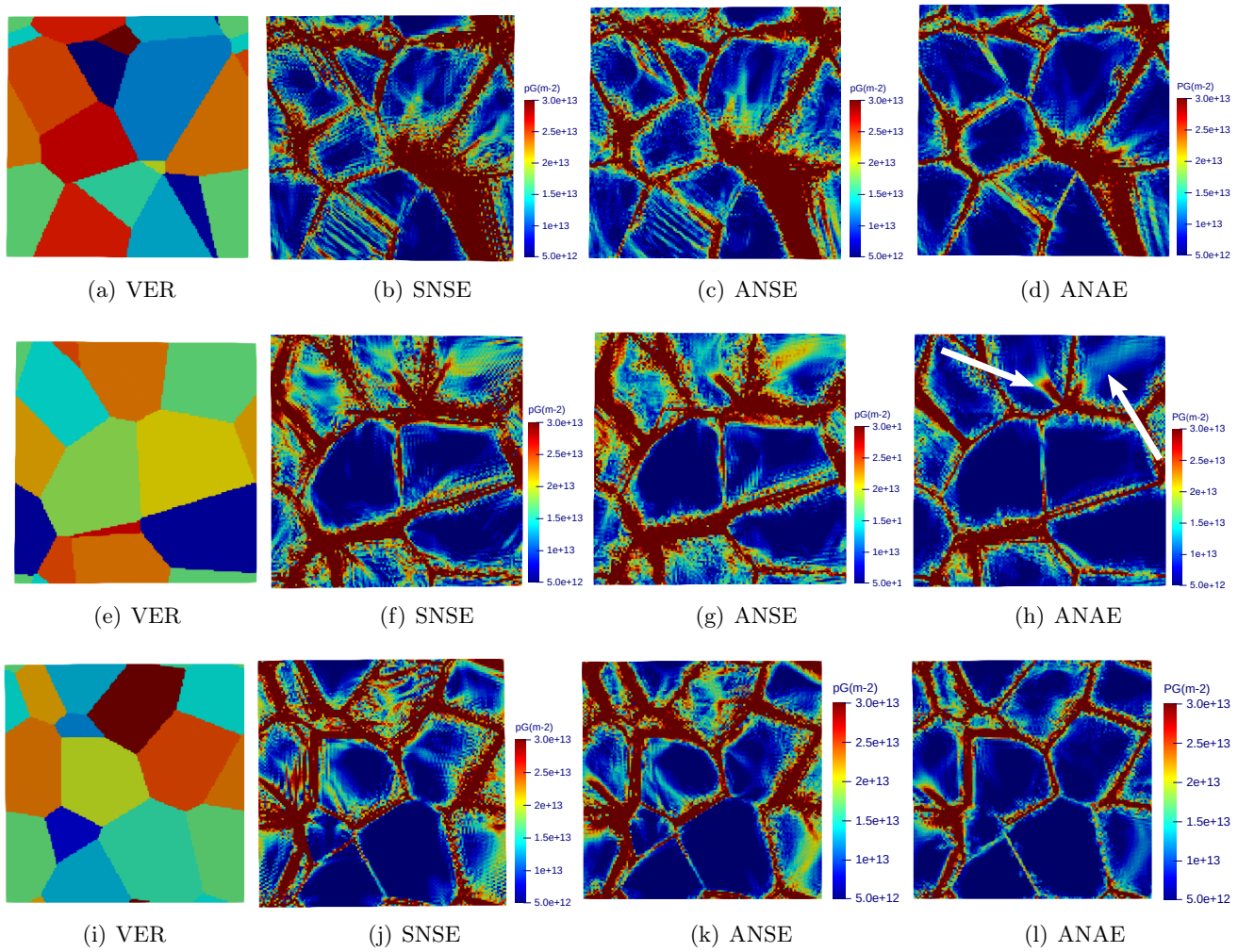
Distributions 2D La figure 4.21 montre des coupes transversales 2D des distributions des GNDs pour les différents modèles avec la section de microstructure correspondante. La différence entre les résultats donnés par les deux modèles ANAE et ANSE est liée au niveau de déformation atteint. Avec l'évolution des dislocations de la forêt, donc le modèle ANAE, les simulations ont besoin de tirer plus loin pour atteindre le même état de distribution des GNDs.

Cette voie a été étudiée, le résultat de la simulation avec ANAE à 2% de la déformation macroscopique est présenté sur la figure 4.22. Ce résultat est comparé aux distributions obtenues avec ANAE à 1% de la déformation macroscopique et ANSE à 1% de la déformation macroscopique. En effet, à 2% de la déformation, le modèle ANAE donne une distribution plus forte des GNDs, dans les grains et sur les joints de grains mais suivant les mêmes chemins.

Influence de la vitesse

Les simulations réalisées avec différentes vitesses, qui correspondent aux essais de Ben Saada [14], sont examinées ici pour visualiser l'effet de la vitesse de déformation sur la distribution des GNDs dans les grains. La figure 4.23 montre les cartes des GNDs obtenues à 5% de la déformation macroscopique pour les trois échantillons P30, P13 et P23. Les vitesses de compression des trois tests sont classées par ordre croissant : P30<P13<P23.

On remarque que plus la vitesse est élevée, plus la distribution des GNDs est forte dans les grains. Ce résultat est en bon accord avec l'expérience menée par Ben Saada [14].

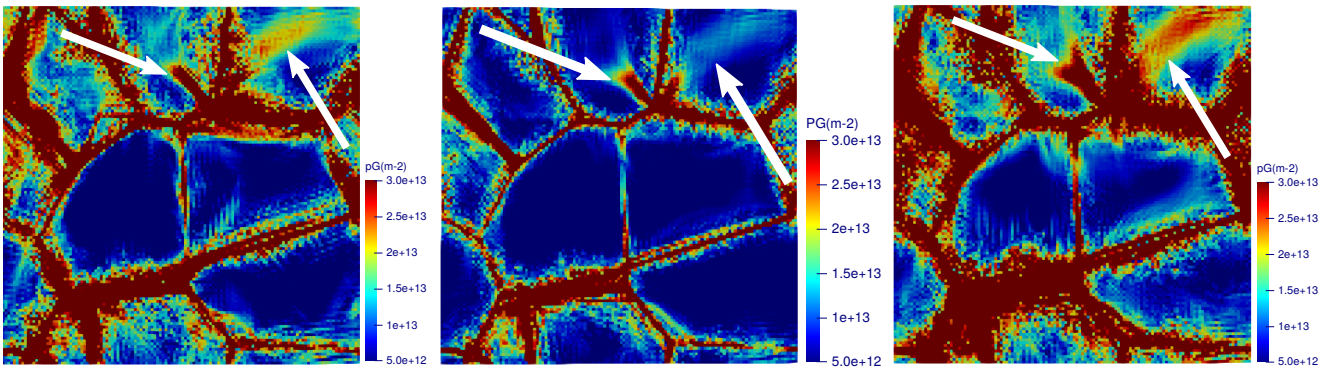


(a) VER (b) SNSE (c) ANSE (d) ANAE

(e) VER (f) SNSE (g) ANSE (h) ANAE

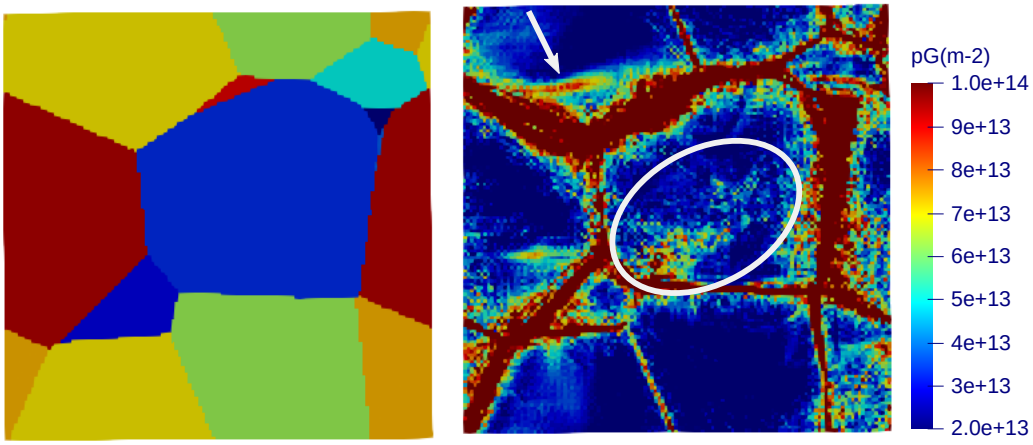
(i) VER (j) SNSE (k) ANSE (l) ANAE

FIGURE 4.21 – Distribution 2D à 1% de la déformation macroscopique

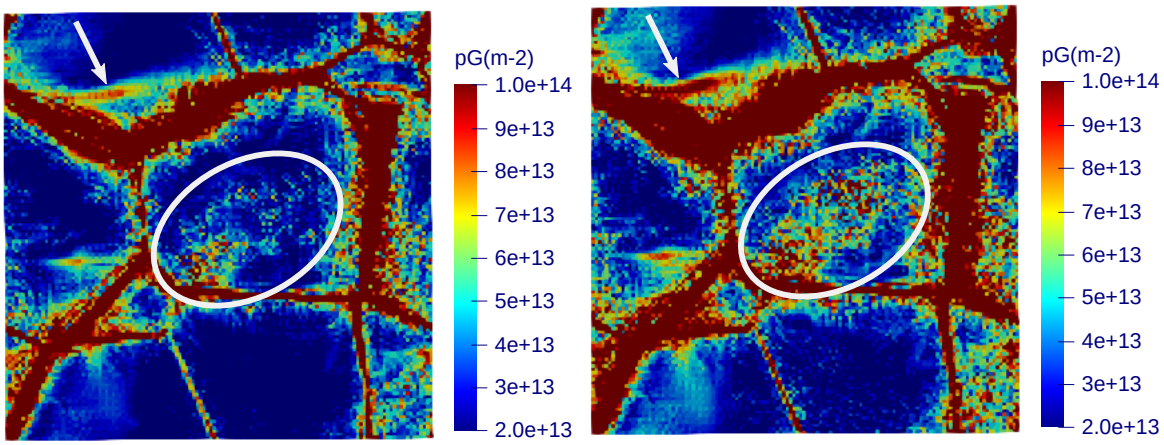


(a) ANSE (1%) (b) ANAE (1%) (c) ANAE (2%)

FIGURE 4.22 – Comparaison entre ANAE à 2% de la déformation et ANSE à 1% de la déformation



(a) VER (b) P30



(c) P13 (d) P23

FIGURE 4.23 – Distribution des GNDs pour trois essais P30, P13 et P23, réalisés dans la thèse de Ben Saada [14]

4.9 Bilan du chapitre

Dans ce chapitre, nous avons étudié le comportement du polycristal d'UO_2. Les modèles identifiés dans le chapitre 3, sur du monocristal, sont appliqués à un agrégat polycristallin d'UO_2, pour étudier l'influence de différents phénomènes.

- Un schéma de calcul a été proposé. La résolution FFT a été décrite ainsi que l'intégration implicite, sur MFront, de tous les modèles de comportement mécanique appliqués. L'un des problèmes numériques soulevés est le pas de temps, qui est limité par la vitesse de glissement des dislocations, ce qui génère de longs temps de calcul.
- Une taille moyenne de grains a été calculée à partir des données expérimentales : cartes EBSD réalisées sur des pastilles UO_2. Cette taille est retenue pour générer le Volume Élémentaire Représentatif (VER), utilisé dans les calculs. Une étude de la représentativité de ce VER a été réalisée afin de déterminer le nombre de grains et l'effet du tirage aléatoire sur les résultats. Un nombre de grains de 100 a été montré comme suffisant pour donner des résultats précis.
- L'effet des filtres spectraux sur la résolution numérique a été étudié. Un filtre a ensuite été choisi.
- Des simulations ont montré que le modèle est capable de prédire le durcissement, par écrouissage, de l'UO_2 polycristallin. Un effet adoucissant des GNDs sur le comportement mécanique du matériau a été noté. En effet, plus la densité des GNDs est importante, plus la contrainte d'écoulement calculée est faible.
- Les simulations réalisées avec différentes tailles moyennes de grains ont montré que le modèle ne permet pas de reproduire le durcissement du matériau par les joints de grains. Ceci donne une perspective pour étudier les phénomènes qui se produisent entre les dislocations et les joints de grains, qui ne sont pas intégrés dans le modèle.
- Le modèle est capable de reproduire l'effet de la température et de la vitesse de déformation sur le comportement mécanique du matériau. Les résultats sont cohérents avec l'expérience.
- Les essais simulés et leur comparaison avec les expériences ont montré que le modèle surestime pour la plupart des essais la contrainte d'écoulement. Cette surestimation peut être due à plusieurs phénomènes importants, notamment la montée des dislocations et les interactions entre les joints de grains et les dislocations, qui ne sont pas pris en compte dans les modèles appliqués.
- La distribution des GNDs, dans l'UO_2 déformé, a été étudiée. Une comparaison qualitative avec les données expérimentales a été effectuée. Le modèle permet d'observer la circulation des GNDs à l'intérieur des grains sur des chemins préférentiels. Cette répartition dans les grains est accentuée par le phénomène d'écrouissage. Elle est également influencée par la vitesse de déformation, en effet, plus la vitesse est grande, plus les GNDs ont tendance à s'accumuler.

Conclusions et perspectives

La motivation principale de ce travail était de construire un modèle de Mécanique des Champs de Dislocations (FDM), permettant d'étudier le comportement viscoplastique de l'UO_2, à l'échelle des grains, lors du régime incidentel des réacteurs.

Sous l'action d'un champ de contraintes, les dislocations, initialement présentes dans le matériau, et Statistiquement Stockées (SSDs) se mettent en mouvement et créent de la déformation plastique. Le mouvement des dislocations déséquilibre la répartition des dislocations, des SSDs deviennent alors des Dislocations Géométriquement Nécessaires (GNDs), qui déforment le réseau cristallin. Dans leur écoulement, elles peuvent s'organiser pour former des murs de dislocations, qui divisent les grains en sous-grains.

La plasticité cristalline classique ne considère que les populations de SSDs. Pour modéliser l'écoulement des GNDs, il faut utiliser la théorie de la Mécanique des Champs de Dislocation (FDM). Les premiers modèles de FDM, en s'appuyant sur une hypothèse constitutive, modélisent l'écoulement des GNDs en leur attribuant une vitesse moyenne macroscopique. L'écoulement des SSDs et des GNDs est alors traité de manière différente, malgré leur identité de nature.

Pour traiter de manière identique l'écoulement des populations de SSDs et de GNDs, nous avons entrepris de construire par homogénéisation un modèle de FDM, à partir des équations fondamentales vérifiée à l'échelle microscopique par une dislocation.

Microscopique Kosevitch montre que les propriétés physique des dislocations sont portées par le tenseur de Nye. Pour qu'une telle description s'applique à dislocation unique, il faut utiliser la théorie des distributions. Le tenseur de Nye permet de formuler les lois élémentaires vérifiées par une dislocation :

- Il est associé à une distorsion plastique, qui déforme le réseau cristallin et crée des contraintes.
- Un champ de contraintes exerce des forces sur la dislocation, qui la mettent en mouvement en créant de la plasticité.
- Le mouvement d'une dislocation peut être du glissement, du glissement dévié ou de la montée. La montée est pilotée par la diffusion des lacunes, ce qui permet de calculer sa vitesse par des équations de diffusion.

Homogénéisation Les équations microscopiques ont été homogénéisées. Ce processus sépare les dislocations, toutes identiques au départ, en SSDs et GNDs. La répartition des dislocations dans ces deux populations est dû au signe des dislocations, qui fait circuler en sens inverse des dislocations de signes opposés. La présence des dislocations se manifeste de deux manières :

- Les deux populations créent de la plasticité lors de leur déplacement. Cette création, est décrite par la loi d'Orowan, qui a été redémontrée par l'homogénéisation.

- La déformation du réseau s'explique par les seules GNDs. Les SSDs y contribuent également, mais leurs effets s'annulent.

L'homogénéisation tient compte de la cristallographie de l'UO_2 et décompose les populations de dislocations sur plusieurs systèmes de glissement. Elle fait apparaître des équations de transport des dislocations qui modélisent, sur chaque système, la transformation de SSDs en GNDs, et inversement.

Le modèle obtenu par homogénéisation est complexe. Il a été simplifié pour les applications. La prise en compte des GNDs dans la création de plasticité est réalisée grâce à une projection du tenseur de Nye sur les différents systèmes de glissement.

Vitesse Si la vitesse de montée peut être calculée avec des équations de diffusion, la vitesse de glissement doit être identifiée sur des essais.

Un modèle semi-empirique de vitesse de glissement a été proposé. Il s'appuie sur des considérations thermodynamiques pour l'activation thermique, et sur des résultats d'essais pour l'influence de la contrainte. Pour prendre en compte l'écrouissage isotrope dû aux interactions entre dislocations, il utilise le modèle de Taylor et une équation différentielle de Kocks-Mecking pour l'évolution du degré d'écrouissage.

Pour identifier ses paramètres, des essais mécaniques disponibles dans la littérature ont été utilisés. Il s'agit de vieux essais des années 1960-70. Les résultats des essais sont dispersés. Cette variabilité semble provenir du contrôle de la stœchiométrie des échantillons : à l'époque, les essais étaient réalisées en atmosphère inerte, ce qui est insuffisant. Le modèle ajusté fait apparaître deux familles de glissement. Le modèle reproduit correctement les essais utilisés : l'activation de chaque famille de glissement, l'écrouissage du matériau.

Application Le modèle développé par homogénéisation, avec la vitesse de glissement identifiée sur des essais, est utilisé pour de simuler le comportement mécanique d'un polycristal d'UO_2 à haute température.

Le milieu polycristallin est modélisé par un pavage de Voronoï. Pour en déterminer les caractéristiques, des cartographies EBSD de pastilles UO_2 ont été utilisées, ainsi que des formules de stéréologie, pour estimer la taille de grain en 3D à partir de la taille des grains mesurée en 2D.

L'implantation numérique du modèle fait appel à deux logiciels de la plateforme de simulation du combustible PLEIADES.

- Le code de structure TMFFT, pour la résolution d'équations mécaniques par la méthode de la Transformée de Fourier Rapide (en anglais Fast Fourier Transform ou FFT). Ce logiciel a été modifié pour calculer le tenseur de Nye ;
- MFront pour générer les différentes lois de comportement étudiées, ainsi que pour projeter le tenseur de Nye reçu par TMFFT.

Les résultats de simulations ont été comparés aux mesures expérimentales. Les résultats prédisent l'écrouissage du polycristal, la sensibilité du comportement à la température et à la vitesse de déformation. Le modèle permet également d'observer la circulation des GNDs à l'intérieur des grains sur des chemins préférentiels, ce qui est comparable qualitativement aux observations expérimentales. Ce résultat est une première reproduction par simulation des phénomènes observés expérimentalement dans l'UO_2 déformé.

Perspectives

Les études réalisées dans le cadre de cette thèse ouvrent la voie aux perspectives suivantes.

- Le modèle de montée des dislocations, est décrit le deuxième chapitre. Il est prêt à être implanté numériquement, pour étudier l'influence de ce phénomène sur le comportement de l'UO_2.
- Dans les calculs, nous sommes limités par la vitesse de glissement des dislocations en raison du schéma de résolution explicite adopté. Un schéma implicite permettrait des calculs beaucoup plus rapides.
- Le modèle construit au chapitre 2 a été simplifié pour les applications. Il ne tient pas compte des équations de transport qui gèrent l'échange entre les GNDs et les SSDs. Sa mise en œuvre demande de nombreux changements.
- Le modèle de cette thèse a été formulé avec l'hypothèse des petites déformations. Il faudrait l'étendre en transformations finies, pour atteindre des niveaux de déformation de l'ordre de 10%. De plus, l'hypothèse des transformations finies gère naturellement la rotation des grains, qui est importante sur un polycristal.
- Les données expérimentales disponibles sont peu nombreuses et remontent aux années 1960-70. À cette époque, les équipements ne permettaient pas de contrôler la stœchiométrie correctement. De nouvelles expériences avec une meilleure maîtrise de la stœchiométrie, en contrôlant la pression partielle d'oxygène, conduirait à des résultats moins dispersés.
- Un des défauts du modèle proposé est la non prise en compte des joints de grains. Des pistes existent dans la littérature pour corriger ce défaut.

Annexe A

Définitions mathématiques et démonstrations

Ce chapitre d'annexe contient des compléments mathématiques utiles au chapitre 2.

A.1 Définitions et formules utiles de l'analyse vectorielle

Les définitions et formules d'analyse vectorielle utilisées dans ce manuscrit sont rappelées dans cette annexe.

A.1.1 Produits tensoriel et vectoriel

Ce paragraphe contient quelques définitions et opérateurs relatifs aux vecteurs et tenseurs.

Produit tensoriel Le produit tensoriel des vecteurs $\boldsymbol{u}$ et $\boldsymbol{v}$ est un tenseur d'ordre 2 de composantes

$$(\boldsymbol{u} \otimes \boldsymbol{v})_{ij} = u_i \, v_j. \tag{A.1}$$

La trace du produit tensoriel des vecteurs $\boldsymbol{u}$ et $\boldsymbol{v}$ correspond à leur produit scalaire :

$$\mathrm{tr}(\boldsymbol{u} \otimes \boldsymbol{v}) = \sum_i u_i \, v_i = \boldsymbol{u}^\intercal . \boldsymbol{v}. \tag{A.2}$$

Produit vectoriel Le produit vectoriel de deux vecteurs $\boldsymbol{u}$ et $\boldsymbol{v}$ est défini par :

$$\boldsymbol{u} \wedge \boldsymbol{v} = \begin{pmatrix} u_y \, v_z - u_z \, v_y \\ u_z \, v_x - u_x \, v_z \\ u_x \, v_y - u_y \, v_x \end{pmatrix}.$$

Le produit vectoriel d'un tenseur $\underline{T}$ et d'un vecteur $\boldsymbol{v}$ est un tenseur défini par :

$$\underline{T} \wedge \boldsymbol{v} = \begin{pmatrix} T_{xy} \, v_z - T_{xz} \, v_y & T_{xz} \, v_x - T_{xx} \, v_z & T_{xx} \, v_y - T_{xy} \, v_x \\ T_{yy} \, v_z - T_{yz} \, v_y & T_{yz} \, v_x - T_{yx} \, v_z & T_{yx} \, v_y - T_{yy} \, v_x \\ T_{zy} \, v_z - T_{zz} \, v_y & T_{zz} \, v_x - T_{zx} \, v_z & T_{zx} \, v_y - T_{zy} \, v_x \end{pmatrix}. \tag{A.3}$$

Double produit vectoriel Pour trois vecteurs $\boldsymbol{u}$, $\boldsymbol{v}$ et $\boldsymbol{w}$, le double produit vectoriel conduit aux relations suivantes :

$$\boldsymbol{u} \wedge (\boldsymbol{v} \wedge \boldsymbol{w}) = (\boldsymbol{u}^{\intercal}.\boldsymbol{w})\,\boldsymbol{v} - (\boldsymbol{u}^{\intercal}.\boldsymbol{v})\,\boldsymbol{w} \quad \text{et} \quad (\boldsymbol{u} \wedge \boldsymbol{v}) \wedge \boldsymbol{w} = (\boldsymbol{u}^{\intercal}.\boldsymbol{w})\,\boldsymbol{v} - (\boldsymbol{v}^{\intercal}.\boldsymbol{w})\,\boldsymbol{u} \tag{A.4}$$

Produit mixte Le produit mixte de trois vecteurs $\boldsymbol{u}$, $\boldsymbol{v}$ et $\boldsymbol{w}$ est défini par :

$$(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}, \boldsymbol{w}) = (\boldsymbol{u} \wedge \boldsymbol{v})^{\intercal}.\boldsymbol{w} = \boldsymbol{u}^{\intercal}.(\boldsymbol{v} \wedge \boldsymbol{w}) \tag{A.5}$$

Avec un tenseur $\underline{T}$ les propriétés du produit mixte sont conservées :

$$(\underline{T} \wedge \boldsymbol{u}).\boldsymbol{v} = \underline{T}.(\boldsymbol{u} \wedge \boldsymbol{v}). \tag{A.6}$$

A.1.2 Opérateurs différentiels

Les principaux opérateurs différentiels sont décrits dans ce paragraphe.

Gradient Le gradient d'un champ de scalaires ϕ est un champ de vecteurs qui vaut :

$$\mathbf{grad}(\phi) = \begin{pmatrix} \frac{\partial \phi}{\partial x} \\ \frac{\partial \phi}{\partial y} \\ \frac{\partial \phi}{\partial z} \end{pmatrix}$$

Le gradient d'un champ de vecteurs $\boldsymbol{\phi}$ est un champ de tenseurs qui vaut :

$$\underline{\mathrm{grad}}(\boldsymbol{\phi}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial \phi_x}{\partial x} & \frac{\partial \phi_x}{\partial y} & \frac{\partial \phi_x}{\partial z} \\ \frac{\partial \phi_y}{\partial x} & \frac{\partial \phi_y}{\partial y} & \frac{\partial \phi_y}{\partial z} \\ \frac{\partial \phi_z}{\partial x} & \frac{\partial \phi_z}{\partial y} & \frac{\partial \phi_z}{\partial z} \end{pmatrix}$$

Pour un vecteur $\boldsymbol{b}$ constant, et un champ scalaire ϕ

$$\underline{\mathrm{grad}}(\boldsymbol{b}\,\phi) = \boldsymbol{b} \otimes \mathbf{grad}(\phi).$$

Divergence La divergence d'un champ de vecteurs $\boldsymbol{u}$ est un champ de scalaires, qui vaut :

$$\mathrm{div}(\boldsymbol{u}) = \frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z}.$$

La divergence à droite d'un champ de tenseurs $\underline{T}$ est un champ de vecteurs, qui vaut :

$$\mathbf{div}(\underline{T}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial T_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial T_{xy}}{\partial y} + \frac{\partial T_{xz}}{\partial z} \\ \frac{\partial T_{yx}}{\partial x} + \frac{\partial T_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial T_{yz}}{\partial z} \\ \frac{\partial T_{zx}}{\partial x} + \frac{\partial T_{zy}}{\partial y} + \frac{\partial T_{zz}}{\partial z} \end{pmatrix}.$$

Pour un vecteur $\boldsymbol{b}$ constant, et un champ de vecteurs $\boldsymbol{u}$

$$\mathbf{div}(\boldsymbol{b} \otimes \boldsymbol{u}) = \boldsymbol{b}\ \mathrm{div}(\boldsymbol{u}).$$

Rotationnel Le rotationnel d'un champ de vecteur $\boldsymbol{u}$ est un vecteur qui vaut :

$$\underline{\mathrm{rot}}(\boldsymbol{u}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial u_z}{\partial y} - \frac{\partial u_y}{\partial z} \\ \frac{\partial u_x}{\partial z} - \frac{\partial u_z}{\partial x} \\ \frac{\partial u_y}{\partial x} - \frac{\partial u_x}{\partial y} \end{pmatrix}. \tag{A.7}$$

Pour un tenseur $\underline{T}$, le rotationnel à droite, est un tenseur :

$$\underline{\mathrm{rot}}(\underline{T}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial T_{xz}}{\partial y} - \frac{\partial T_{xy}}{\partial z} & \frac{\partial T_{xx}}{\partial z} - \frac{\partial T_{xz}}{\partial x} & \frac{\partial T_{xy}}{\partial x} - \frac{\partial T_{xx}}{\partial y} \\ \frac{\partial T_{yz}}{\partial y} - \frac{\partial T_{yy}}{\partial z} & \frac{\partial T_{yx}}{\partial z} - \frac{\partial T_{yz}}{\partial x} & \frac{\partial T_{yy}}{\partial x} - \frac{\partial T_{yx}}{\partial y} \\ \frac{\partial T_{zz}}{\partial y} - \frac{\partial T_{zy}}{\partial z} & \frac{\partial T_{zx}}{\partial z} - \frac{\partial T_{zz}}{\partial x} & \frac{\partial T_{zy}}{\partial x} - \frac{\partial T_{zx}}{\partial y} \end{pmatrix}. \tag{A.8}$$

Pour un vecteur $\boldsymbol{b}$ constant, et un champ de vecteurs $\boldsymbol{u}$:

$$\underline{\mathrm{rot}}(\boldsymbol{b} \otimes \boldsymbol{u}) = \boldsymbol{b} \otimes \mathbf{rot}(\boldsymbol{u}) \tag{A.9}$$

Coordonnées cylindriques En coordonnées cylindriques, le gradient d'un champ de scalaires ϕ vaut :

$$\mathbf{grad}(\phi) = \begin{pmatrix} \frac{\partial \phi}{\partial r} \\ \frac{1}{r}\frac{\partial \phi}{\partial \theta} \\ \frac{\partial \phi}{\partial z} \end{pmatrix} \tag{A.10a}$$

La divergence et le rotationnel d'un champ de vecteur $\boldsymbol{\phi}$ valent :

$$\mathrm{div}(\boldsymbol{\phi}) = \frac{1}{r}\frac{\partial (r\,\phi_r)}{\partial r} + \frac{1}{r}\frac{\partial \phi_\theta}{\partial \theta} + \frac{\partial \phi_z}{\partial z}, \tag{A.10b}$$

$$\mathbf{rot}(\boldsymbol{\phi}) = \begin{pmatrix} \frac{1}{r}\frac{\partial \phi_z}{\partial \theta} - \frac{\partial \phi_\theta}{\partial z} \\ \frac{\partial \phi_r}{\partial z} - \frac{\partial \phi_z}{\partial r} \\ \frac{1}{r}\left(\frac{\partial (r\,\phi_\theta)}{\partial r} - \frac{\partial \phi_r}{\partial \theta}\right) \end{pmatrix}. \tag{A.10c}$$

A.1.3 Formules

Les formules d'analyse vectorielle suivantes sont utilisées dans le corps du texte.

Composition Pour deux champs vectoriels $\boldsymbol{u}$ et $\boldsymbol{v}$:

$$\mathbf{rot}(\boldsymbol{u} \wedge \boldsymbol{v}) = \boldsymbol{v}.\mathbf{grad}(\boldsymbol{u}) - \boldsymbol{v}\ \mathrm{div}(\boldsymbol{u}) + \boldsymbol{u}\ \mathrm{div}(\boldsymbol{v}) - \boldsymbol{u}.\mathbf{grad}(\boldsymbol{v}), \tag{A.11a}$$

$$= \boldsymbol{v}.\mathbf{grad}(\boldsymbol{u}) - \boldsymbol{v}\ \mathrm{div}(\boldsymbol{u}) + \boldsymbol{u}.\Big(\mathrm{div}(\boldsymbol{v})\, I - \mathbf{grad}(\boldsymbol{v})\Big) \tag{A.11b}$$

Pour un champ scalaire u et un champ vectoriel $\boldsymbol{v}$:

$$\mathrm{div}(u\,\boldsymbol{v}) = u\ \mathrm{div}(\boldsymbol{v}) + \mathbf{grad}(u)^{\intercal}.\boldsymbol{v}, \tag{A.12}$$

$$\mathbf{rot}(u\,\boldsymbol{v}) = u\,\mathbf{rot}(\boldsymbol{v}) + \mathbf{grad}(u) \wedge \boldsymbol{v} \tag{A.13}$$

Pour un champ vectoriel $\boldsymbol{u}$:

$$\mathbf{rot}(\mathbf{rot}(\boldsymbol{u})) = \mathbf{grad}(\mathrm{div}(\boldsymbol{u})) - \boldsymbol{\Delta}(\boldsymbol{u}) \tag{A.14}$$

et pour un tenseur d'ordre 2, avec le rotationnel à droite

$$\underline{\mathrm{rot}}(\underline{\mathrm{rot}}(\underline{T})) = \underline{\mathrm{grad}}(\mathbf{div}(\underline{T})) - \underline{\Delta}(\underline{T}) \tag{A.15}$$

Les laplaciens $\boldsymbol{\Delta}$ et $\underline{\Delta}$ sont définis respectivement pour les vecteurs et tenseurs.

Formule de Green Ostrogradski Pour tout champ vectoriel $\boldsymbol{\phi}$ et tout domaine Ω, de surface $\partial\Omega$ et de normale externe $\boldsymbol{n}$:

$$\int_{\Omega} \mathrm{div}(\boldsymbol{\phi})\,\mathrm{d}\boldsymbol{x} = \int_{\partial\Omega} \boldsymbol{\phi}^{\intercal}.\boldsymbol{n}\,\mathrm{d}S \tag{A.16}$$

Formule de Stokes Tout champ vectoriel $\boldsymbol{\phi}$ qui traverse une surface S, de contour ∂S vérifie :

$$\int_{S} \mathbf{rot}(\boldsymbol{\phi})^{\intercal}.\boldsymbol{n}\,\mathrm{d}S = \oint_{\partial S} \boldsymbol{\phi}^{\intercal}.\boldsymbol{l}\,\mathrm{d}s, \tag{A.17}$$

où les vecteurs $\boldsymbol{n}$ et $\boldsymbol{l}$ désignent respectivement la normale à la surface S et la tangente au contour ∂S. Ces vecteurs sont orientés pour vérifier la règle du tire bouchon de Maxwell, comme l'illustre la figure A.1.

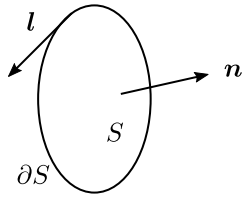


FIGURE A.1 – Les vecteurs normal $\boldsymbol{n}$ à la surface S et tangent $\boldsymbol{l}$ au contour ∂S sont orientés pour vérifier la règle du tire bouchon de Maxwell

Dans le cas d'un champ tensoriel $\underline{T}$, la formule de Stokes s'écrit :

$$\oint_{\partial S} \underline{T}.\boldsymbol{l}\,\mathrm{d}s = \int_{S} \underline{\mathrm{rot}}(\underline{T}).\boldsymbol{n}\,\mathrm{d}S = \boldsymbol{b},$$

avec le rotationnel à droite $\underline{\mathrm{rot}}(\underline{T})$ du tenseur $\underline{T}$.

A.2 Propriétés élémentaires d'une boucle de dislocation

Kossévitch [76, 78] propose une description très efficace des propriétés élémentaires d'une boucle de dislocation en utilisant les distributions. Des résultats mathématiques préliminaires de théorie des distributions et de géométrie différentielle peuvent faciliter cette description.

A.2.1 Dislocations de surface

La théorie des distributions [47, 131] permet de généraliser la notion de fonction.

Distributions Avec une fonction F, il est possible de construire une application linéaire continue, qui agit sur des fonctions ϕ, à travers l'intégrale suivante :

$$I_F(\phi) = \int_{\mathbb{R}^3} \phi(\boldsymbol{x})\,F(\boldsymbol{x})\,\mathrm{d}\boldsymbol{x}.$$

Pour toute application linéaire continue I_F, même si elle n'est pas construite avec une fonction, on gardera la notation intégrale, et F désignera alors une fonction généralisée ou distribution. La notion de distribution permet donc d'étendre la notion de fonction.

Les fonctions test ϕ sur lesquelles s'applique une distribution sont très régulières : elles sont indéfiniment dérivables à support compact, c'est-à-dire que pour toute fonction test ϕ, il existe un domaine borné Ω sur la surface $\partial\Omega$ duquel elle s'annule.

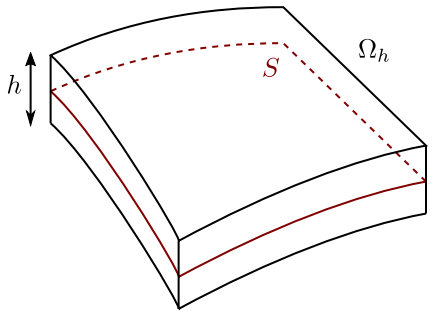


FIGURE A.2 – Le domaine Ω_h correspond à la surface S épaissie d'une épaisseur h

Distribution de surface Pour définir une distribution de charges uniforme δ_S sur une surface S, une approche intuitive consiste à épaissir la surface, pour la transformer en un domaine Ω_h d'épaisseur h, de fonction indicatrice 1_{Ω_h}, comme sur la figure A.2 La distribution de surface sera définie comme la limite de ces fonctions lorsque l'épaisseur s'annule :

$$\delta_S(\boldsymbol{x}) = \lim_{h\to 0} 1_{\Omega_h}(\boldsymbol{x})\,\frac{|S|}{|\Omega_h|}.$$

Diviser par le rapport entre l'aire $|S|$ de la surface et le volume $|\Omega_h|$ du domaine permet de conserver constant la charge. Lorsque l'épaisseur h devient petite,

$$|\Omega_h| \approx h\,|S|,$$

et la distribution δ_S devient la limite de :

$$\delta_S(\boldsymbol{x}) = \lim_{h\to 0} \frac{1_{\Omega_h}(\boldsymbol{x})}{h}. \tag{A.18a}$$

Autre définition Pour une fonction ϕ continue, lorsque l'épaisseur h devient petite :

$$\int_{\mathbb{R}^3} \phi(\boldsymbol{x})\,1_{\Omega_h}(\boldsymbol{x})\,\mathrm{d}\boldsymbol{x} = \int_{\Omega_h} \phi(\boldsymbol{x})\,\mathrm{d}\boldsymbol{x} \approx h\int_S \phi(\boldsymbol{x})\,\mathrm{d}S$$

de sorte que par passage à la limite :

$$\int_{\mathbb{R}^3} \phi(\boldsymbol{x})\,\delta_S(\boldsymbol{x})\,\mathrm{d}\boldsymbol{x} = \lim_{h\to 0}\int_{\mathbb{R}^3} \phi(\boldsymbol{x})\,\frac{1_{\Omega_h}(\boldsymbol{x})}{h}\,\phi(\boldsymbol{x})\,\mathrm{d}\boldsymbol{x} = \int_S \phi(\boldsymbol{x})\,\mathrm{d}S. \tag{A.18b}$$

La distribution δ_S peut être définie de deux manières :

- comme la limite (A.18a) d'une suite de fonctions,
- ou par son intégrale (A.18b) sur la surface S, avec une fonction test ϕ.

Intégrale de surface Pour que la définition (A.18b) de la distribution δ_S soit opérationnelle, il faut pouvoir calculer l'intégrale d'une fonction ϕ sur la surface S. Pour cela, la surface S peut être paramétrée par un couple de paramètres (s,u), appartenant à un domaine D_s, c'est-à-dire que tout point $\boldsymbol{x}$ de la surface s'écrit :

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}_S(s,u), \quad \text{avec} \quad (s,u) \in D_S.$$

L'intégrale d'une fonction ϕ sur la surface s'écrit alors :

$$\int_S \phi(\boldsymbol{x})\,\mathrm{d}S = \iint_{D_S} \phi\Big(\boldsymbol{x}_S(s,u)\Big)\,\mathrm{d}S, \quad \text{avec} \quad \mathrm{d}S = \left|\frac{\partial \boldsymbol{x}_S}{\partial s} \wedge \frac{\partial \boldsymbol{x}_S}{\partial u}\right| \mathrm{d}s\,\mathrm{d}u. \tag{A.19a}$$

D'après les définitions (A.18) de la distribution de surface δ_S, cette intégrale de surface peut aussi s'écrire :

$$\int_S \phi(\boldsymbol{x})\,\mathrm{d}S = \lim_{h\to 0} \frac{1}{h} \int_{\Omega_h} \phi(\boldsymbol{x})\,\mathrm{d}\boldsymbol{x}. \tag{A.19b}$$

A.2.2 Distributions sur une courbe

Une distribution sur une courbe se traite comme sur une surface.

Boucle de dislocation Une distribution uniforme δ_C de charges sur une courbe C peut être définie par l'intégrale d'une fonction continue ϕ sur la courbe :

$$\int_{\mathbb{R}^3} \phi(\boldsymbol{x})\,\delta_C(\boldsymbol{x})\,\mathrm{d}\boldsymbol{x} = \oint_C \phi(\boldsymbol{x})\,\mathrm{d}s.$$

Pour calculer l'intégrale curviligne, il faut décrire la courbe : c'est une fonction $\boldsymbol{x}_C(s)$ d'abscisse curviligne s, comprise dans un domaine D_C, dont la dérivée correspond au vecteur tangent :

$$\boldsymbol{t} = \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{x}_C}{\mathrm{d}s}. \tag{A.20}$$

L'intégrale se calcule ainsi :

$$\oint_C \phi(\boldsymbol{x})\,\mathrm{d}s = \int_{D_C} \phi\Big(\boldsymbol{x}_C(s)\Big)\,\mathrm{d}s.$$

Intersection par une surface Lorsqu'une surface S intersecte la courbe C en un point $\boldsymbol{x}_i$, alors d'après la relation (A.19b), pour toute fonction continue ϕ :

$$\int_S \phi(\boldsymbol{x})\,\delta_C(\boldsymbol{x})\,\mathrm{d}S = \lim_{h\to 0} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\phi(\boldsymbol{x})\,1_{\Omega_h}(\boldsymbol{x})}{h}\,\delta_C(\boldsymbol{x})\,\mathrm{d}\boldsymbol{x} = \lim_{h\to 0} \int_{L_h} \frac{\phi(\boldsymbol{x})}{h}\,\mathrm{d}l.$$

Dans le membre de droite, l'intégrale porte sur le segment L_h, schématisé en figure A.3, qui est l'intersection de la courbe C avec le domaine Ω_h d'épaisseur h autour de la surface S.

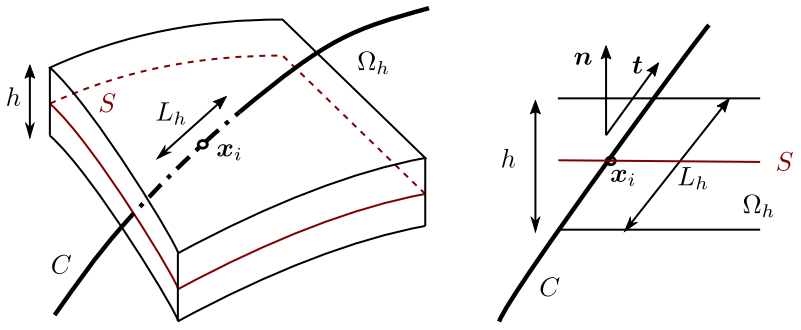


FIGURE A.3 – La courbe C coupe la surface en un point $\boldsymbol{x}_i$ et traverse le domaine Ω_h d'épaisseur h sur une longueur L_h

Comme la fonction ϕ est continue, lorsque l'épaisseur h est petite :

$$\phi(\boldsymbol{x}) \approx \phi(\boldsymbol{x}_i) \quad \text{donc} \quad \int_{L_h} \frac{\phi(\boldsymbol{x})}{h}\,\mathrm{d}l \approx \frac{|L_h|}{h}\,\phi(\boldsymbol{x}_i) = \frac{\phi(\boldsymbol{x}_i)}{\boldsymbol{t}^T.\boldsymbol{n}},$$

où les vecteurs $\boldsymbol{t}$ et $\boldsymbol{n}$ sont respectivement la tangente à C et la normale à S au point d'intersection $\boldsymbol{x}_i$. Finalement, pour toute fonction test ϕ :

$$\int_S \phi(\boldsymbol{x})\,\delta_C(\boldsymbol{x})\,\boldsymbol{t}^T.\boldsymbol{n}\,\mathrm{d}S = \phi(\boldsymbol{x}_i).$$

Produit direct La relation fait apparaître le produit direct des distributions δ_S et δ_C, qui vaut :

$$\delta_S(\boldsymbol{x})\,\delta_C(\boldsymbol{x}) = \frac{\delta_{\boldsymbol{x}_i}(\boldsymbol{x})}{\boldsymbol{t}^T.\boldsymbol{n}}$$

ce, qui s'écrit de manière symétrique pour les distributions δ_S et δ_C :

$$\int_S \phi(\boldsymbol{x})\,\delta_C(\boldsymbol{x})\,\boldsymbol{t}^T.\boldsymbol{n}\,\mathrm{d}S = \phi(\boldsymbol{x}_i) = \int_C \phi(\boldsymbol{x})\,\delta_S(\boldsymbol{x})\,\boldsymbol{t}^T.\boldsymbol{n}\,\mathrm{d}s.$$

Lorsque la fonction ϕ est un vecteur $\boldsymbol{b}$, cette formule devient :

$$\int_S \delta_C(\boldsymbol{x})\,\boldsymbol{b}\otimes\boldsymbol{t}.\boldsymbol{n}\,\mathrm{d}S = \boldsymbol{b} = \int_C \delta_S(\boldsymbol{x})\,\boldsymbol{b}\otimes\boldsymbol{t}.\boldsymbol{n}\,\mathrm{d}s. \tag{A.21}$$

A.2.3 Dérivées

Les distributions permettent de dériver des fonctions non suffisamment régulières.

Gradient Pour une fonction f dérivable, et pour une fonction test vectorielle $\boldsymbol{\phi}$, l'intégration sur son support compact Ω de la relation :

$$\mathrm{div}(f\,\boldsymbol{\phi}) = f\ \mathrm{div}(\boldsymbol{\phi}) + \mathbf{grad}(f)^T.\boldsymbol{\phi}$$

se calcule avec la formule d'Ostrogradski (A.16) :

$$\int_{\partial\Omega} f\,\boldsymbol{\phi}^T.\boldsymbol{n}\,\mathrm{d}S = \int_\Omega f\ \mathrm{div}(\boldsymbol{\phi})\,\mathrm{d}\boldsymbol{x} + \int_\Omega \mathbf{grad}(f)^T.\boldsymbol{\phi}\,\mathrm{d}\boldsymbol{x} \tag{A.22}$$

Par définition, la fonction $\boldsymbol{\phi}$ s'annule sur la frontière $\partial\Omega$, ce qui conduit à :

$$\int_\Omega \mathbf{grad}(f)^T.\boldsymbol{\phi}\,\mathrm{d}\boldsymbol{x} = -\int_\Omega f\ \mathrm{div}(\boldsymbol{\phi})\,\mathrm{d}\boldsymbol{x}. \tag{A.23}$$

Cette relation, valable pour toute fonction f dérivable, permet de généraliser le gradient à des fonctions non dérivables.

Discontinuité surfacique La formule (A.23) permet de calculer le gradient d'une fonction ayant une discontinuité de surface. Soit une fonction f définie et dérivable sur deux domaines D^- et D^+, séparés par une surface S. La fonction f est discontinue sur la surface S. La surface est orientée par une normale $\boldsymbol{n}$ dirigée du domaine D^- vers le domaine D^+, comme sur la figure A.4.

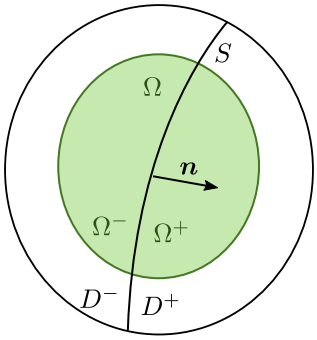


FIGURE A.4 – La surface S de normale $\boldsymbol{n}$ sépare les domaines D^- et D^+ sur lesquels la fonction f est dérivable. Le domaine d'intégration Ω est inclus dans le domaine de définition $D^- \cup D^+$ de f

Pour calculer le gradient (A.23) de f, une fonction $\boldsymbol{\phi}$ est choisie, dont le support compact Ω, inclus dans le domaine de définition $D^- \cup D^+$ de f, est divisé en deux domaines $\Omega^- = \Omega \cap D^-$ et $\Omega^+ = \Omega \cap D^+$ par la surface de discontinuité S. L'intégrale (A.23) peut se calculer indépendamment sur les deux domaines Ω^- et Ω^+, où la fonction f est dérivable, ce qui permet d'utiliser la formule d'Ostrogradski (A.22) :

$$\begin{aligned}\int_\Omega \mathbf{grad}(f)^T.\boldsymbol{\phi}\,\mathrm{d}\boldsymbol{x} &= -\int_{\Omega^-} f\ \mathrm{div}(\boldsymbol{\phi})\,\mathrm{d}\boldsymbol{x} - \int_{\Omega^+} f\ \mathrm{div}(\boldsymbol{\phi})\,\mathrm{d}\boldsymbol{x},\\ &= \int_{\Omega^-} \mathbf{grad}(f)^T.\boldsymbol{\phi}\,\mathrm{d}\boldsymbol{x} + \int_{\Omega^+} \mathbf{grad}(f)^T.\boldsymbol{\phi}\,\mathrm{d}\boldsymbol{x} + \int_S (f^+ - f^-)\,\boldsymbol{\phi}^T.\boldsymbol{n}\,\mathrm{d}S.\end{aligned}$$

Ces intégrations font apparaître deux intégrales, sur les domaines Ω^- et Ω^+, qui représentent la partie régulière du gradient. Lors de l'emploi de la formule d'Ostrogradski (A.22), les termes de bord s'annulent, sauf sur la surface S, ce qui fait apparaître un terme supplémentaire, dû à la discontinuité $\Delta f = f^+ - f^-$ sur la surface S :

$$\int_S \Delta f\,\boldsymbol{\phi}^T.\boldsymbol{n}\,\mathrm{d}S = \int_\Omega \Delta f\,\delta_S(\boldsymbol{x})\,\boldsymbol{\phi}^T.\boldsymbol{n}\,\mathrm{d}\boldsymbol{x}.$$

Ce terme peut s'écrire avec la distribution de surface δ_S. Ainsi, la distribution au sens des distributions d'une fonction discontinue f vaut sur sa surface de discontinuité S :

$$\mathbf{grad}(f) = \Delta f\,\delta_S(\boldsymbol{x})\,\boldsymbol{n}.$$

Fonction vectorielle Lorsque la fonction f est remplacée par une fonction vectorielle $\boldsymbol{u}$ qui vérifie sur la surface S la discontinuité :

$$\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}^+) = \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}^-) - \boldsymbol{b},$$

cette formule devient :

$$\underline{\mathrm{grad}}(\boldsymbol{u}) = -\boldsymbol{b} \otimes \boldsymbol{n}\,\delta_S(\boldsymbol{x}). \tag{A.24}$$

Elle fait apparaître le tenseur $\boldsymbol{b} \otimes \boldsymbol{n}_S$, produit tensoriel (A.1) des vecteurs $\boldsymbol{b}$ et $\boldsymbol{n}_S$.

A.2.4 Champs mécaniques sur la surface de discontinuité

Une dislocation est a priori définie par une surface de discontinuité S_D et une ligne D. En fait, la position de la surface S_D n'influe pas sur les champs mécaniques produits par la dislocation.

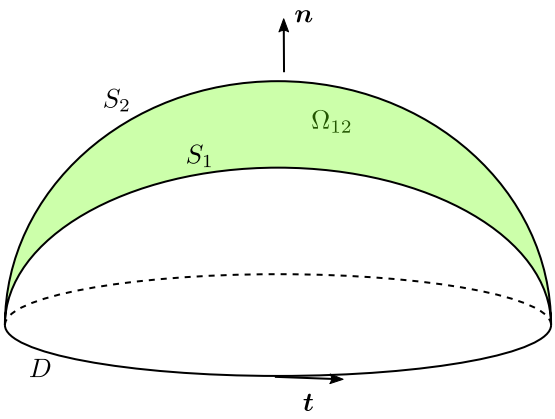


FIGURE A.5 – Deux surfaces de discontinuité qui s'appuient sur une même ligne de dislocation

Position Pour montrer ce résultat, il suffit de considérer deux surfaces de dislocation S_1 et S_2, qui s'appuient sur une même ligne D, comme sur la figure A.5. À chaque surface dislocation S_i correspond un champ de déplacement $\boldsymbol{u}_i$, qui vérifie les discontinuités suivantes :

$$\boldsymbol{u}_i(\boldsymbol{x}^+) - \boldsymbol{u}_i(\boldsymbol{x}^-) = -\boldsymbol{b} \quad \text{sur la surface } S_i. \tag{A.25}$$

Pour simplifier le raisonnement, les surfaces S_1 et S_2 sont supposées ne pas se croiser, et être positionnées comme sur la figure A.5, la surface S_2 au dessus de la surface S_1. Elles entourent un domaine Ω_{12}.

Déplacement Lorsque le champ déplacement $\boldsymbol{u}_1$ correspond à un équilibre mécanique, un champ de déplacement $\boldsymbol{u}_2$, construit de la façon suivante :

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{u}_2(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{u}_1(\boldsymbol{x}) + \boldsymbol{b} \quad \text{si} \quad \boldsymbol{x} \in \Omega_{12}, \\ &\boldsymbol{u}_2(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{u}_1(\boldsymbol{x}) \quad \text{sinon}, \end{aligned}$$

vérifie les conditions de discontinuité (A.25). Sur les domaines complémentaires Ω_{12} et $\mathbb{R}^3 \setminus \Omega_{12}$, les deux champs de déplacements diffèrent d'un déplacement uniforme ($\boldsymbol{b}$ ou $\boldsymbol{0}$), donc conduisent aux mêmes champs de contraintes. Le champ de déplacement $\boldsymbol{u}_2$ ainsi construit conduit aux mêmes contraintes que $\boldsymbol{u}_1$, avec des discontinuités localisées sur la surface S_2 au lieu de S_1.

Ainsi, la position de la surface de discontinuité S_D n'a aucun effet sur le champ de contraintes, pourvu qu'elle s'appuie sur la ligne de dislocation D.

Continuité du champ de contraintes Le côté arbitraire de la position de la surface de discontinuité S_D entraîne la régularité du tenseur de distorsion $\underline{\underline{E}}^e$ élastique au passage de cette surface. Pour le montrer il suffit de considérer à nouveau les surfaces de discontinuité S_1 et S_2 appuyées sur la ligne de dislocations D.

En dehors des surfaces S_1 et S_2, le champ de distorsion élastique de distorsion élastique $\underline{\underline{E}}^e$ peut être calculé indifféremment par les déplacements $\boldsymbol{u}_1$ ou $\boldsymbol{u}_2$:

$$\underline{\underline{E}}^e = \underline{\underline{\text{grad}}}(\boldsymbol{u}_1) = \underline{\underline{\text{grad}}}(\boldsymbol{u}_2).$$

Comme la surface S_1 ne constitue pas une discontinuité pour le champ $\boldsymbol{u}_2$, son gradient reste régulier, donc le champ de distorsion élastique de distorsion élastique $\underline{\underline{E}}^e$ également.

Rotationnel De même, au passage de la surface S_1 :

$$\underline{\mathrm{rot}}(\underline{E}^e) = \underline{\mathrm{rot}}(\underline{\mathrm{grad}}(\boldsymbol{u}_2)) = \underline{0}.$$

Dans cette équation, l'opérateur $\underline{\mathrm{rot}}$ désigne le rotationnel à droite (A.8) d'un champ de tenseurs d'ordre deux. Comme la surface de discontinuité S_1 est arbitraire, cela signifie qu'en dehors de la ligne de dislocation D :

$$\underline{\mathrm{rot}}(\underline{E}^e) = \underline{0} \quad \text{si} \quad \boldsymbol{x} \notin D. \tag{A.26}$$

A.2.5 Équation de Kröner

L'équation de Kröner (2.12) montre comment le tenseur de Nye (2.10) déforme le réseau cristallin, en modifiant notamment la distorsion élastique $\underline{E}^e$:

$$\underline{\mathrm{rot}}(\underline{E}^e) = \underline{\alpha}, \quad \text{avec} \quad \underline{\alpha} = \delta_D(\boldsymbol{x})\, \boldsymbol{b} \otimes \boldsymbol{t}.$$

Cette équation montre que le champ de distorsion élastique $\underline{E}^e$ est singulier sur la ligne dislocation D. Le rotationnel doit donc être pris au sens des distributions.

Ainsi, pour démontrer cette équation, il faut d'abord définir le rotationnel au sens des distributions, puis le calculer pour le champ de distorsion élastique $\underline{E}^e$.

Rotationnel Le rotationnel au sens des distributions se définit de manière analogue au gradient. Pour une fonction vectorielle $\boldsymbol{f}$ dérivable, et pour une fonction test vectorielle $\boldsymbol{\phi}$, l'intégration sur son support compact Ω de la relation :

$$\mathrm{div}(\boldsymbol{f} \wedge \boldsymbol{\phi}) = -\boldsymbol{f}^T.\mathbf{rot}(\boldsymbol{\phi}) + \mathbf{rot}(\boldsymbol{f})^T.\boldsymbol{\phi}$$

se calcule avec la formule d'Ostrogradski (A.16) :

$$\int_{\partial\Omega} (\boldsymbol{f} \wedge \boldsymbol{\phi})^T.\boldsymbol{n}\, \mathrm{d}S = -\int_\Omega \boldsymbol{f}^T.\mathbf{rot}(\boldsymbol{\phi})\, \mathrm{d}\boldsymbol{x} + \int_\Omega \mathbf{rot}(\boldsymbol{f})^T.\boldsymbol{\phi}\, \mathrm{d}\boldsymbol{x} \tag{A.27}$$

Par définition, la fonction $\boldsymbol{\phi}$ s'annule sur la frontière $\partial\Omega$, ce qui conduit à :

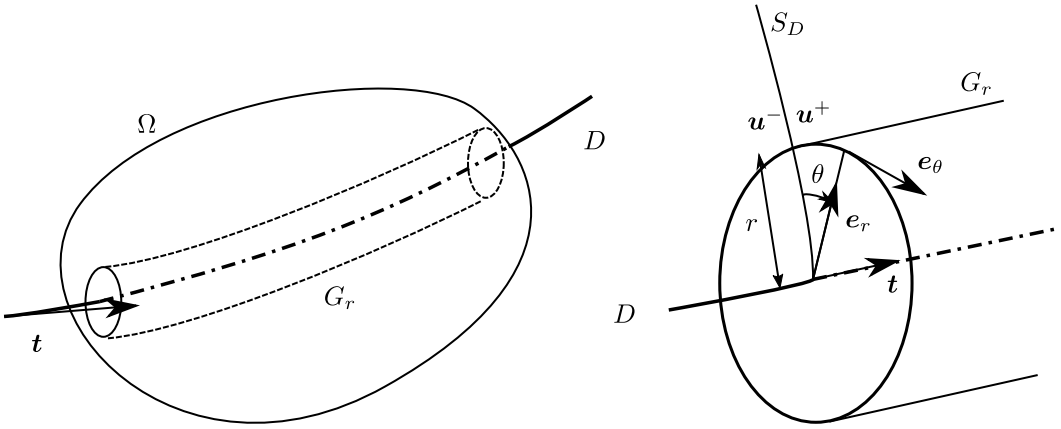
$$\int_\Omega \mathbf{rot}(\boldsymbol{f})^T.\boldsymbol{\phi}\, \mathrm{d}\boldsymbol{x} = \int_\Omega \boldsymbol{f}^T.\mathbf{rot}(\boldsymbol{\phi})\, \mathrm{d}\boldsymbol{x}. \tag{A.28}$$

Cette relation, valable pour toute fonction $\boldsymbol{f}$ dérivable, permet de généraliser le rotationnel à des fonctions non dérivables.

Tenseur Le champ de distorsion élastique $\underline{E}^e$ est un champ de tenseurs d'ordre deux. Les formules (A.27) et (A.28) s'écrivent alors :

$$\int_{\partial\Omega} (\underline{E}^e \wedge \boldsymbol{\phi})^T.\boldsymbol{n}\, \mathrm{d}S = -\int_\Omega \underline{E}^e.\mathbf{rot}(\boldsymbol{\phi})\, \mathrm{d}\boldsymbol{x} + \int_\Omega \underline{\mathrm{rot}}(\underline{E}^e).\boldsymbol{\phi}\, \mathrm{d}\boldsymbol{x}, \tag{A.29a}$$

$$\int_\Omega \underline{\mathrm{rot}}(\underline{E}^e).\boldsymbol{\phi}\, \mathrm{d}\boldsymbol{x} = \int_\Omega \underline{E}^e.\mathbf{rot}(\boldsymbol{\phi})\, \mathrm{d}\boldsymbol{x}. \tag{A.29b}$$



(a) Domaine Ω (b) Gaine G_r

FIGURE A.6 – Le support compact Ω entoure une partie de la ligne de dislocation D. La ligne D est protégée par une gaine G_r de rayon r.

Intégrale Pour calculer le rotationnel $\underline{\mathrm{rot}}(\underline{E}^e)$ du champ de distorsion $\underline{E}^e$, il faut calculer l'intégrale pour une fonction test $\boldsymbol{\phi}$ à support compact Ω :

$$I_0 = \int_\Omega \underline{E}^e . \mathbf{rot}(\boldsymbol{\phi}) \, \mathrm{d}\boldsymbol{x}.$$

Le support compact Ω sera choisi pour entourer une partie de la ligne D comme sur la figure A.6. Pour protéger le champ $\underline{E}^e$ de sa singularité, la ligne de dislocation sera entourée d'une gaine G_r de rayon r, l'intégrale ne portera que sur le domaine $\Omega_r = \Omega \setminus G_r$:

$$I_r = \int_{\Omega_r} \underline{E}^e . \mathbf{rot}(\boldsymbol{\phi}) \, \mathrm{d}\boldsymbol{x}.$$

et l'intégrale I_0 sera obtenue comme limite, lorsque le rayon de protection r tend vers 0 :

$$I_0 = \lim_{r \to 0} I_r.$$

Pour la fonction test $\boldsymbol{\phi}$, la formule d'Ostrogradski (A.29a), et la propriété (A.26) permettent d'écrire l'intégrale :

$$I_r = \int_{\Omega_r} \underline{E}^e . \mathbf{rot}(\boldsymbol{\phi}) \, \mathrm{d}\boldsymbol{x} = - \int_{\partial\Omega_r} (\underline{E}^e \wedge \boldsymbol{\phi})^T . \boldsymbol{n} \, \mathrm{d}S = - \int_{\partial G_r} (\underline{E}^e \wedge \boldsymbol{\phi})^T . \boldsymbol{n} \, \mathrm{d}S. \tag{A.30}$$

L'intégrale de surface s'annule sur la surface $\partial\Omega$, il ne reste que la partie sur la surface ∂G_r de la gaine G_r.

Gaine Pour calculer cette intégrale, il faut paramétrer la surface ∂G_r de la gaine. La ligne de dislocation D sera paramétrée par une courbe $\boldsymbol{x}_D(s)$, d'abscisse curviligne s. Un point de la surface ∂G_r appartient à un cercle de rayon r, orthogonal au vecteur tangent $\boldsymbol{t}$ de la ligne de dislocation D, comme sur la figure A.6. Il s'écrit ainsi :

$$\boldsymbol{x}_G(s,\theta) = \boldsymbol{x}_D(s) + r \, \boldsymbol{e}_r(s,\theta), \quad \text{avec} \quad \boldsymbol{t} = \frac{\partial \boldsymbol{x}_D}{\partial s}, \quad \boldsymbol{e}_\theta = \frac{\partial \boldsymbol{e}_r}{\partial \theta}.$$

Les trois vecteurs $\boldsymbol{e}_r$, $\boldsymbol{e}_\theta$ et $\boldsymbol{t}$ forment un trièdre direct, pour que le parcours du cercle respecte la règle du tire-bouchon de Maxwell. Le paramétrage naturel comprend donc l'abscisse s sur la ligne de dislocation

D, et l'angle θ qui décrit le cercle. L'intégrale (A.30) s'écrit donc, avec la relation (A.19a) :

$$I_r = -\int_D \int_0^{2\pi} (\underline{E}^e \wedge \boldsymbol{\phi})^T . \boldsymbol{n} \, \mathrm{d}S, \quad \text{avec} \quad \mathrm{d}S = \left| \left(\boldsymbol{t} + r \, \frac{\partial \boldsymbol{e}_r}{\partial s} \right) \wedge \boldsymbol{e}_\theta \right| r \, \mathrm{d}s \, \mathrm{d}\theta.$$

La normale $\boldsymbol{n}$, externe à Ω_r, correspond à :

$$\boldsymbol{n} = -\boldsymbol{e}_r = \boldsymbol{t} \wedge \boldsymbol{e}_\theta.$$

Compte tenu des propriétés du produit mixte (A.5), et de la relation (A.4), l'intégrale s'écrit ainsi :

$$I_r = \int_D \int_0^{2\pi} (\underline{E}^e \wedge (\boldsymbol{t} \wedge \boldsymbol{e}_\theta))^T . \boldsymbol{\phi} \, \mathrm{d}S = \int_D \int_0^{2\pi} \Big((\underline{E}^e . \boldsymbol{e}_\theta) \otimes \boldsymbol{t} - (\underline{E}^e . \boldsymbol{t}) \otimes \boldsymbol{e}_\theta \Big) . \boldsymbol{\phi} \, \mathrm{d}S$$

Approximation Lorsque le rayon r diminue,

- l'élément de surface se simplifie :
$$\mathrm{d}S \approx r \, \mathrm{d}s \, \mathrm{d}\theta,$$
- la valeur de la fonction test sur la surface s'approche de celle sur la ligne de dislocation :
$$\boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{x}_G) \approx \boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{x}_D).$$
- La quantité $\underline{E}^e . \boldsymbol{t} = \underline{\mathrm{grad}}(\boldsymbol{u}) . \boldsymbol{t}$ représente la dérivée du champ de déplacement $\boldsymbol{u}$ le long de la ligne de dislocation. C'est une propriété régulière, même à proximité de la dislocation. Lorsque le rayon r diminue, sa valeur ne dépend que de l'abscisse de la ligne de dislocation :
$$(\underline{E}^e . \boldsymbol{t})(\boldsymbol{x}_G) \approx (\underline{E}^e . \boldsymbol{t})(\boldsymbol{x}_D)$$

Ces remarques permettent de factoriser l'intégrale I_r :

$$I_r \approx \int_D \left[\left(\int_0^{2\pi} \underline{E}^e . \boldsymbol{e}_\theta \, r \, \mathrm{d}\theta \right) \otimes \boldsymbol{t} - (\underline{E}^e . \boldsymbol{t}) \otimes \left(\int_0^{2\pi} \boldsymbol{e}_\theta \, r \, \mathrm{d}\theta \right) \right] . \boldsymbol{\phi} \, \mathrm{d}s. \tag{A.31}$$

Limite Pour terminer le calcul (A.31) de l'intégrale I_r, il faut noter les points suivants :

- Comme la surface de discontinuité S_D est arbitraire, il est possible de supposer qu'elle correspond à l'angle $\theta = 0$. L'intégrale sur le cercle, vaut alors :
$$\int_0^{2\pi} \underline{E}^e . \boldsymbol{e}_\theta \, r \, \mathrm{d}\theta = \int_0^{2\pi} \underline{\mathrm{grad}}(\boldsymbol{u}) . \boldsymbol{e}_\theta \, r \, \mathrm{d}\theta = \boldsymbol{u}^- - \boldsymbol{u}^+ = \boldsymbol{b}.$$
- L'intégrale du vecteur tangent $\boldsymbol{e}_\theta$ sur le cercle s'annule :
$$\int_0^{2\pi} \boldsymbol{e}_\theta \, r \, \mathrm{d}\theta = \boldsymbol{0}.$$

Ainsi, l'équation (A.31) se simplifie :

$$I_r \approx \int_D \boldsymbol{b} \otimes \boldsymbol{t} . \boldsymbol{\phi} \, \mathrm{d}s.$$

Finalement, la définition (A.29b) du rotationnel, et les différentes opérations du calcul d'intégrale montrent que :

$$\begin{aligned}\int_\Omega \underline{\mathrm{rot}}(\underline{E}^e).\boldsymbol{\phi}\,\mathrm{d}\boldsymbol{x} &= \int_\Omega \underline{E}^e.\mathbf{rot}(\boldsymbol{\phi})\,\mathrm{d}\boldsymbol{x} = \lim_{r\to 0} I_r = \int_D \boldsymbol{b}\otimes\boldsymbol{t}.\boldsymbol{\phi}\,\mathrm{d}s,\\ &= \int_\Omega \boldsymbol{b}\otimes\boldsymbol{t}.\boldsymbol{\phi}\,\delta_D(\boldsymbol{x})\,\mathrm{d}\boldsymbol{x},\end{aligned}$$

ce qui démontre l'équation de Kröner (2.12), au sens des distributions :

$$\underline{\mathrm{rot}}(\underline{E}^e) = \underline{\alpha}, \quad \text{avec} \quad \underline{\alpha} = \delta_D(\boldsymbol{x})\,\boldsymbol{b}\otimes\boldsymbol{t}.$$

Bilan La démonstration de l'équation de Kröner (2.12) par la théorie des distributions nécessite le calcul d'une intégrale compliquée. Kosevitch propose une démonstration plus élégante, présentée au paragraphe A.2.6 suivant, mais qui soulève quelques problèmes. Pour préparer leur résolution, notons les caractéristiques suivantes de la démonstration par la théorie des distributions. Celle-ci est construite en trois étapes :

1. définition (A.29b) du rotationnel au sens des distributions :
$$\int_\Omega \underline{\mathrm{rot}}(\underline{E}^e).\boldsymbol{\phi}\,\mathrm{d}\boldsymbol{x} = \int_\Omega \underline{E}^e.\mathbf{rot}(\boldsymbol{\phi})\,\mathrm{d}\boldsymbol{x}, \tag{A.32a}$$
2. calcul de l'intégrale :
$$\int_\Omega \underline{E}^e.\mathbf{rot}(\boldsymbol{\phi})\,\mathrm{d}\boldsymbol{x} = \int_\Omega \boldsymbol{b}\otimes\boldsymbol{t}.\boldsymbol{\phi}\,\delta_D(\boldsymbol{x})\,\mathrm{d}\boldsymbol{x},$$
3. identification à une distribution connue :
$$\int_\Omega \underline{\mathrm{rot}}(\underline{E}^e).\boldsymbol{\phi}\,\mathrm{d}\boldsymbol{x} = \int_\Omega \boldsymbol{b}\otimes\boldsymbol{t}.\boldsymbol{\phi}\,\delta_D(\boldsymbol{x})\,\mathrm{d}\boldsymbol{x}. \tag{A.32b}$$

Ces trois étapes s'appuient sur les fonctions test $\boldsymbol{\phi}$. Elles se retrouvent dans la démonstration de Kosevitch sous une forme déguisée.

A.2.6 Démonstration de Kosevitch

La démonstration de Kosevitch pour l'équation de Kröner (2.12) est élégante. Elle est présentée dans ce paragraphe.

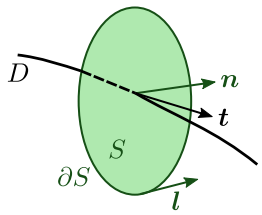


FIGURE A.7 – La surface S, de contour ∂S, est traversée par la ligne de dislocation D

Contour Une surface S, de bord ∂S, est traversée par la ligne de dislocation, comme sur la figure A.7. La surface de dislocation S_D coupe le contour ∂S, avec de part et d'autre des points $\boldsymbol{x}^+$ et $\boldsymbol{x}^-$. L'intégrale

sur contour ∂S de la distorsion plastique peut être réalisée du point $\boldsymbol{x}^+$ au point $\boldsymbol{x}^-$ sans rencontrer la surface de dislocation S_D, de sorte que l'égalité (2.9) permet d'écrire :

$$\oint_{\partial S} \underline{E}^e.\boldsymbol{l}\,\mathrm{d}s = \oint_{\partial S} \underline{\mathrm{grad}}(\boldsymbol{u}).\boldsymbol{l}\,\mathrm{d}s = \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}^-) - \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}^+) = \boldsymbol{b}.$$

Dans cette intégrale, le vecteur $\boldsymbol{l}$ désigne le vecteur tangent au contour ∂S.

Formule de Stokes La formule de Stokes (A.1.3) permet alors d'écrire :

$$\oint_{\partial S} \underline{E}^e.\boldsymbol{l}\,\mathrm{d}s = \int_S \underline{\mathrm{rot}}(\underline{E}^e).\boldsymbol{n}\,\mathrm{d}S = \boldsymbol{b},$$

où le vecteur $\boldsymbol{n}$ désigne la normale à la surface S. Par ailleurs, la relation (A.21), montre que pour toute surface S qui intersecte la ligne de dislocation D :

$$\boldsymbol{b} = \int_S \delta_D(\boldsymbol{x})\,\boldsymbol{b}\otimes\boldsymbol{t}.\boldsymbol{n}\,\mathrm{d}S.$$

Ainsi, pour toute surface S de normale $\boldsymbol{n}$, l'égalité suivante est vérifiée :

$$\int_S \underline{\mathrm{rot}}(\underline{E}^e).\boldsymbol{n}\,\mathrm{d}S = \int_S \delta_D(\boldsymbol{x})\,\boldsymbol{b}\otimes\boldsymbol{t}.\boldsymbol{n}\,\mathrm{d}S,$$

ce qui démontre l'équation de Kröner (2.12) :

$$\underline{\mathrm{rot}}(\underline{E}^e) = \delta_D(\boldsymbol{x})\,\boldsymbol{b}\otimes\boldsymbol{t}.$$

Problèmes Cette démonstration soulève les problèmes suivants :

- Elle utilise la formule de Stokes, en l'appliquant au tenseur de distorsion $\underline{E}^e$:

$$\oint_{\partial S} \underline{E}^e.\boldsymbol{l}\,\mathrm{d}s = \int_S \underline{\mathrm{rot}}(\underline{E}^e).\boldsymbol{n}\,\mathrm{d}S. \tag{A.33a}$$

  Dans quelle mesure cette formule reste valable alors que le rotationnel $\underline{\mathrm{rot}}(\underline{E}^e)$ n'est pas défini sur toute la surface S ?

- La fin de la démonstration consiste à identifier les deux termes de l'équation de Kröner, parce qu'ils vérifient pour toute surface S.

$$\int_S \underline{\mathrm{rot}}(\underline{E}^e).\boldsymbol{n}\,\mathrm{d}S = \int_S \delta_D(\boldsymbol{x})\,\boldsymbol{b}\otimes\boldsymbol{t}.\boldsymbol{n}\,\mathrm{d}S. \tag{A.33b}$$

  Cette équation permet-elle en effet d'identifier les deux termes intégrés ?

Ces questions mettent en cause la validité de la démonstration de Kosevitch.

Distributions test Les deux équations (A.33) ressemblent aux deux équations (A.32) de la démonstration précédente, en remplaçant les fonctions test $\boldsymbol{\phi}$ par des distributions :

$$\boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{n}\,\delta_S(\boldsymbol{x}), \tag{A.34}$$

où S est une surface de normale $\boldsymbol{n}$. Pour le montrer, il faut auparavant calculer le rotationnel de ces distributions.

Pour une fonction test ϕ, la définition (A.28) du rotationnel, ainsi que la formule de Stokes (A.17) permettent d'écrire :

$$\begin{aligned}\int_{\mathbb{R}^3} \mathbf{rot}(\boldsymbol{n}\,\delta_S(\boldsymbol{x}))^T.\boldsymbol{\phi}\,\mathrm{d}\boldsymbol{x} &= \int_{\mathbb{R}^3} \delta_S(\boldsymbol{x})\,\boldsymbol{n}^T.\mathbf{rot}(\boldsymbol{\phi})\,\mathrm{d}\boldsymbol{x} = \int_S \mathbf{rot}(\boldsymbol{\phi})^T.\boldsymbol{n}\,\mathrm{d}S = \oint_{\partial S} \boldsymbol{\phi}^T.\boldsymbol{l}\,\mathrm{d}s,\\ &= \int_{\mathbb{R}^3} \delta_{\partial S}(\boldsymbol{x})\,\boldsymbol{l}^T.\boldsymbol{\phi}.\mathrm{d}\boldsymbol{x}\end{aligned}$$

c'est-à-dire d'identifier le rotationnel :

$$\mathbf{rot}(\boldsymbol{n}\,\delta_S(\boldsymbol{x})) = \delta_{\partial S}(\boldsymbol{x})\,\boldsymbol{l}.$$

Comparaison Il est possible maintenant de montrer l'identité des équations (A.32) et (A.33) en remplaçant les fonctions test $\boldsymbol{\phi}$ par des distributions de la forme (A.34).

- Ainsi, la définition (A.32a) devient l'équation (A.33a) :

  $$\oint_{\partial S} \underline{E}^e.\boldsymbol{l}\,\mathrm{d}s = \int_S \underline{\mathrm{rot}}(\underline{E}^e).\boldsymbol{n}\,\mathrm{d}S,$$

  qui peut donc être interprétée comme une définition du rotationnel pour des fonctions non dérivables.

- De même, l'équation d'identification (A.32b) devient l'équation (A.33b) :

  $$\int_S \underline{\mathrm{rot}}(\underline{E}^e).\boldsymbol{n}\,\mathrm{d}S = \int_\Omega \boldsymbol{b}\otimes\boldsymbol{t}.\boldsymbol{n}\,\delta_S(\boldsymbol{x})\,\delta_D(\boldsymbol{x})\,\mathrm{d}\boldsymbol{x} = \int_S \delta_D(\boldsymbol{x})\,\boldsymbol{b}\otimes\boldsymbol{t}.\boldsymbol{n}\,\mathrm{d}S.$$

Les égalités (A.33) restent-elles vraies en utilisant des fonctions $\boldsymbol{\phi}$ indéfiniment dérivables à support compact au lieu de distributions de la forme (A.34) ?

Équivalence Il est possible de construire des fonctions test $\boldsymbol{\phi}$ indéfiniment dérivables à support compact à partir de distributions de la forme (A.34). Ceci peut se démontrer en trois étapes :

- En fixant une direction $\boldsymbol{n}$, il est possible de découper tout support compact $\Omega \in \mathbb{R}^3$ en tranches S_u orthogonales à $\boldsymbol{n}$ et d'écrire la fonction indicatrice du compact sous la forme :

  $$1_\Omega(\boldsymbol{x}) = \int \delta_{S_u}(\boldsymbol{x})\,\mathrm{d}u$$

  Les égalités (A.33) de la démonstration de Kosevitch peuvent donc s'écrire avec des fonctions de la forme :

  $$1_\Omega(\boldsymbol{x})\,\boldsymbol{n}$$

- Toute fonction scalaire ϕ indéfiniment dérivable à support compact est la limite de fonctions en escalier de la forme :

  $$\phi(\boldsymbol{x}) = \lim \sum_i \phi_i\, 1_{\Omega_i}(\boldsymbol{x})$$

  Les égalités (A.33) peuvent donc s'écrire avec des fonctions indéfiniment dérivables à support compact de la forme :

  $$\phi(\boldsymbol{x})\,\boldsymbol{n}$$

- Enfin, en prenant pour $\boldsymbol{n}$ les trois directions $\boldsymbol{e}_x$, $\boldsymbol{e}_y$ et $\boldsymbol{e}_z$ il est possible de construire tout fonction vectorielle $\boldsymbol{\phi}$ indéfiniment dérivable à support compact :

  $$\boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{x}) = \phi_x(\boldsymbol{x})\,\boldsymbol{e}_x + \phi_y(\boldsymbol{x})\,\boldsymbol{e}_y + \phi_z(\boldsymbol{x})\,\boldsymbol{e}_z.$$

Ainsi, les différentes étapes de la démonstration de Kosevitch sont valables au sens des distributions.

A.2.7 Dérivée plastique

Lorsqu'une boucle de dislocation D est déplacée avec une vitesse $\boldsymbol{v}$, sur une durée Δt, cela étend sa surface de dislocation S_D d'une surface additionnelle ΔS, comme illustré en figure 2.11. D'après ce qui précède, ceci s'accompagne d'une création de distorsion plastique (2.8) :

$$\Delta \underline{E}^p = -\boldsymbol{b} \otimes \boldsymbol{n}_S \, \delta_{\Delta S}(\boldsymbol{x}).$$

Dans cette expression, la distorsion plastique est localisée sur la surface crée ΔS, dont la normale externe vaut :

$$\boldsymbol{n}_S = -\frac{\boldsymbol{t} \wedge \boldsymbol{v}}{|\boldsymbol{t} \wedge \boldsymbol{v}|}$$

La dérivée de la distorsion plastique vaut :

$$\dot{\underline{E}}^p = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{\Delta \underline{E}^p}{\Delta t}.$$

Intégrale Pour une fonction test ϕ, le calcul de l'intégrale :

$$I_\phi = \int_{\mathbb{R}^3} \phi(\boldsymbol{x}) \, \Delta \underline{E}^p(\boldsymbol{x}) \, \mathrm{d}\boldsymbol{x} = -\int_{\mathbb{R}^3} \phi(\boldsymbol{x}) \, \boldsymbol{b} \otimes \boldsymbol{n}_S \, \delta_{\Delta S}(\boldsymbol{x}) \, \mathrm{d}\boldsymbol{x} = -\int_{\Delta S} \phi(\boldsymbol{x}) \, \boldsymbol{b} \otimes \boldsymbol{n}_S \, \mathrm{d}S, \tag{A.35}$$

nécessite de paramétrer la surface ΔS. Elle est produite par le déplacement de la dislocation D, décrite par une fonction $\boldsymbol{x}_D(s)$ d'abscisse curviligne s, par le champ de vitesse $\boldsymbol{v}$. Ainsi, tout point $\boldsymbol{x}_S(s,u)$ de la surface s'obtient par intégration au cours du temps u de :

$$\frac{\partial \boldsymbol{x}_S}{\partial u} = \boldsymbol{v}(\boldsymbol{x}_S, u) \quad \text{en partant de la courbe} \quad \boldsymbol{x}_S(s,0) = \boldsymbol{x}_D(s).$$

L'abscisse curviligne s et le temps u permettent de paramétrer la surface, dont l'élément de surface vaut :

$$\mathrm{d}S = \left| \frac{\partial \boldsymbol{x}_S}{\partial s} \wedge \frac{\partial \boldsymbol{x}_S}{\partial u} \right| \mathrm{d}s \, \mathrm{d}u.$$

L'intégrale (A.35) s'écrit ainsi :

$$I_\phi = \oint_D \int_0^{\Delta t} \phi\Big(\boldsymbol{x}_S(s,u)\Big) \, \boldsymbol{b} \otimes \frac{\boldsymbol{t} \wedge \boldsymbol{v}}{|\boldsymbol{t} \wedge \boldsymbol{v}|} \left| \frac{\partial \boldsymbol{x}_S}{\partial s} \wedge \frac{\partial \boldsymbol{x}_S}{\partial u} \right| \mathrm{d}s \, \mathrm{d}u. \tag{A.36}$$

Limite Pour une durée Δt très petite,

- la valeur de la fonction ϕ diffère peu de celle sur la boucle de dislocation D :

$$\phi\Big(\boldsymbol{x}_S(s,u)\Big) \approx \phi\Big(\boldsymbol{x}_D(s)\Big),$$

- les dérivées partielles se ramènent à la courbe de dislocation :

$$\frac{\partial \boldsymbol{x}_S}{\partial s} \approx \frac{\partial \boldsymbol{x}_D}{\partial s} = \boldsymbol{t}(s) \quad \text{et} \quad \frac{\partial \boldsymbol{x}_S}{\partial u} \approx \boldsymbol{v}(\boldsymbol{x}_S(s,0),0) = \boldsymbol{v}(s).$$

Ainsi, l'intégrale (A.36) peut être approchée par :

$$I_\phi \approx \Delta t \oint_D \phi\Big(\boldsymbol{x}_D(s)\Big) \, \boldsymbol{b} \otimes (\boldsymbol{t} \wedge \boldsymbol{v}) \, \mathrm{d}s = \Delta t \int_{\mathbb{R}^3} \phi(\boldsymbol{x}) \, \boldsymbol{b} \otimes (\boldsymbol{t} \wedge \boldsymbol{v}) \, \delta_D(\boldsymbol{x}) \, \mathrm{d}\boldsymbol{x},$$

ce qui signifie que, pour toute fonction test ϕ :

$$\int_{\mathbb{R}^3} \phi(\boldsymbol{x}) \lim_{\Delta t \to 0} \frac{\Delta \underline{E}^p}{\Delta t}(\boldsymbol{x})\, \mathrm{d}\boldsymbol{x} = \int_{\mathbb{R}^3} \phi(\boldsymbol{x})\, \boldsymbol{b} \otimes (\boldsymbol{t} \wedge \boldsymbol{v})\, \delta_D(\boldsymbol{x})\, \mathrm{d}\boldsymbol{x},$$

ce qui permet de démontrer la formule (2.19) sur la dérivée de la distorsion plastique :

$$\dot{\underline{E}}^p = \delta_D(\boldsymbol{x})\, \boldsymbol{b} \otimes (\boldsymbol{t} \wedge \boldsymbol{v}).$$

Avec l'expression (2.10) du tenseur de Nye, cette relation s'écrit également :

$$\dot{\underline{E}}^p = \delta_D(\boldsymbol{x})\, \boldsymbol{b} \otimes (\boldsymbol{t} \wedge \boldsymbol{v}) = \underline{\alpha} \wedge \boldsymbol{v}.$$

A.2.8 Moyenne mobile et convolution

Pour une fonction f, la moyenne mobile définie sur un volume V par :

$$\langle f \rangle (\boldsymbol{x}) = \frac{1}{V} \int_V f(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y})\, \mathrm{d}\boldsymbol{y},$$

commute avec les opérateurs différentiels. Ce résultat peut se montrer facilement par la théorie des distributions.

Convolution La moyenne mobile peut être vue comme la convolution de la fonction f avec une fonction p_v définie à partir de l'indicatrice 1_V du volume V :

$$\langle f \rangle (\boldsymbol{x}) = (f * p_v)(\boldsymbol{x}) \quad \text{avec} \quad p_v(\boldsymbol{x}) = \frac{1_V(-\boldsymbol{x})}{V}.$$

Opérateurs et convolution Le livre de Gelfand et Shilov sur les distributions [47] donne les propriétés suivantes concernant les convolutions de distributions et les opérateurs différentiels :

1. Si deux distributions f et g ont un support borné, alors leur convolution permet de définir une autre distribution à support bornée :

$$(f * g)(\boldsymbol{x}) = \int f(\boldsymbol{y})\, g(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y})\, \mathrm{d}\boldsymbol{y}.$$

2. Le produit de convolution est associatif, c'est-à-dire que pour trois distributions f, g et h, l'ordre des convolutions est indifférent :

$$(f * g) * h = f * (g * h).$$

3. Pour tout opérateur différentiel D, la distribution $D\delta$ désigne la distribution qui résulte de l'application de l'opérateur D à la distribution de Dirac δ. C'est une distribution à support borné, qui vérifie, pour toute distribution f :

$$D\delta * f = Df.$$

Commutativité Comme le support $\check{V}$ de la fonction fonction p_v qui réalise la prise de moyenne est borné, toute les opérations à suivre sont licites. Ainsi, la suite d'égalités :

$$D \langle f \rangle = D\delta * \langle f \rangle = D\delta * (f * p_v) = (D\delta * f) * p_v = Df * p_v = \langle Df \rangle$$

montre que l'opérateur D commute avec la prise de moyenne.

A.3 Projection du tenseur de Nye

Le modèle proposé projette le tenseur de Nye sur les tenseurs d'orientation des différents systèmes. Les formules de projection dont explicitées dans cette annexe.

Projection Le tenseurs de Nye se décompose sur les différents systèmes de glissement, avec les densités de dislocations coin ρ_c^s et vis ρ_v^s :

$$\underline{\alpha} = b \sum_s \Big(- \rho_c^s \, \underline{\eta}^s + \rho_v^s \, \underline{\gamma}^s \Big).$$

En ne considérant que les densités de dislocations coin ρ_c^s cette décomposition se simplifie en :

$$\underline{\alpha} = -b \sum_s \rho_c^s \, \underline{\eta}^s. \tag{A.37}$$

Inverser cette relation permettrait de récupérer les densités de dislocations coin ρ_c^s des différents systèmes à partir du tenseur de Nye. Il s'agit d'un problème doublement mal posé (au sens des problèmes mathématiquement mal posés [143]) :

- Comme les tenseurs $\underline{\eta}^s$ sont de trace nulle, il peut n'y avoir pas de solution.
- L'équation à résoudre (A.37) est linéaire, mais le nombre d'inconnues est bien supérieur à la dimension du tenseur de Nye.

Pour ces deux raisons il faudra écrire l'inversion comme une projection régularisée.

A.3.1 Projection régularisée

La méthode de résolution pour inverser l'équation (A.37) est exposée dans ce paragraphe.

Système à résoudre L'équation (A.37) est un système linéaire :

$$M.\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y}, \tag{A.38}$$

où la matrice M n'est pas inversible. Elle s'annule sur un noyau à gauche K :

$$\boldsymbol{n}^\intercal.M = \boldsymbol{0} \quad \text{pour tout} \quad \boldsymbol{n} \in K.$$

Solution possible Une méthode pour résoudre l'équation consiste à construire une matrice de rotation Q

$$Q = \begin{pmatrix} Q_\perp \\ Q_K \end{pmatrix}$$

où les sous matrices Q_K et $Q_\perp$ contiennent respectivement (sous forme de lignes) des bases orthonormées du noyau et de son orthogonal $K^\perp$.

Le système initial (A.38) peut alors s'écrire :

$$M_\perp.\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y}_\perp \quad \text{avec} \quad M_\perp = Q_\perp.M \quad \text{et} \quad \boldsymbol{y}_\perp = Q_\perp.\boldsymbol{y}, \tag{A.39a}$$

$$\boldsymbol{0} = Q_K.\boldsymbol{y}. \tag{A.39b}$$

Le système n'a de solution que sur l'orthogonal du noyau $Q_K.\boldsymbol{y} = \mathbf{0}$. L'équation (A.39a) peut s'écrire :

$$M.\boldsymbol{x} = \mathit{\Pi}_\perp.\boldsymbol{y} \quad \text{avec} \quad \mathit{\Pi}_\perp = Q_\perp^\intercal.Q_\perp.$$

Cette écriture fait apparaître le projecteur $\mathit{\Pi}_\perp$ sur l'orthogonal du noyau. Ainsi, pour assurer l'existence d'une solution, il suffit de projeter le second membre $\boldsymbol{y}$.

Pseudo inverse Il peut avoir une infinité de solutions. Pour assurer l'unicité des solutions, il suffit de chercher la solution de norme minimale, qui vérifie :

$$\boldsymbol{x} = \operatorname{argmin} \|\boldsymbol{x}\|^2 \quad \text{sachant} \quad M_\perp.\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y}_\perp.$$

C'est le point selle du Lagrangien :

$$L(\boldsymbol{x}, \lambda) = \frac{\|\boldsymbol{x}\|^2}{2} + \lambda^\intercal.(M_\perp.\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}_\perp),$$

qui s'obtient par résolution du système :

$$\begin{aligned} \boldsymbol{x} + M_\perp^\intercal.\lambda &= 0 \\ M_\perp.\boldsymbol{x} &= \boldsymbol{y}_\perp, \end{aligned}$$

de solution :

$$\boldsymbol{x} = M_\perp^\intercal.(M_\perp.M_\perp^\intercal)^{-1}.\boldsymbol{y}_\perp.$$

Finalement, le système (A.38) a pour solution :

$$\boldsymbol{x} = M_P^{-1}.\boldsymbol{y} \quad \text{avec} \quad M_P^{-1} = M_\perp^\intercal.(M_\perp.M_\perp^\intercal)^{-1}.Q_\perp = M^\intercal.Q_\perp^\intercal.(Q_\perp.M.M^\intercal.Q_\perp^\intercal)^{-1}.Q_\perp. \tag{A.40}$$

Dans cette écriture, la matrice M_P^{-1} est le pseudo-inverse de la matrice M_P.

Matrice 3×3 Lorsque l'espace de l'image $\boldsymbol{y}$ est de dimension 3, et que la M possède une seule valeur propre nulle, de vecteur propre à gauche $\boldsymbol{n}$:

$$\boldsymbol{n}^\intercal.M = \mathbf{0}^\intercal, \quad \text{avec} \quad \boldsymbol{n}^\intercal = \begin{pmatrix} n_x & n_y & n_z \end{pmatrix},$$

La matrice de rotation Q peut être construite à partir des coordonnées du vecteur $\boldsymbol{n}$:

$$Q = \begin{pmatrix} -\frac{n_y^2+n_z\,n_x^2}{1-n_z^2} & \frac{n_x\,n_y\,(1-n_z)}{1-n_z^2} & n_x \\ \frac{n_x\,n_y\,(1-n_z)}{1-n_z^2} & -\frac{n_x^2+n_y^2\,n_z}{1-n_z^2} & n_y \\ n_x & n_y & n_z \end{pmatrix}, \quad \text{c'est-à-dire} \quad Q_\perp = \begin{pmatrix} -\frac{n_y^2+n_z\,n_x^2}{1-n_z^2} & \frac{n_x\,n_y\,(1-n_z)}{1-n_z^2} & n_x \\ \frac{n_x\,n_y\,(1-n_z)}{1-n_z^2} & -\frac{n_x^2+n_y^2\,n_z}{1-n_z^2} & n_y \end{pmatrix}. \tag{A.41}$$

La matrice du projecteur vaut :

$$\mathit{\Pi}_\perp = Q_\perp^\intercal.Q_\perp = I - \boldsymbol{n}.\boldsymbol{n}^\intercal.$$

A.3.2 Application à la projection

Le pseudo-inverse (A.40) peut être utilisé pour inverser l'équation (A.37).

Tenseurs de trace nulle Les tenseurs du deuxième ordre peuvent s'écrire comme des vecteurs à neuf composantes :

$$T_I = T_{ij}, \quad \text{avec} \quad I = 3\,(i-1) + j.$$

La matrice M sera écrite pour l'ensemble des équations indicées par s :

$$M_{I,s} = M_{ij,s}, \quad \text{avec} \quad I = 3\,(i-1) + j.$$

Les tenseurs de trace nulle vérifient :

$$\boldsymbol{n}^\intercal.T = 0, \quad \text{avec} \quad \boldsymbol{n}^\intercal = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Matrice de rotation tronquée En ne considérant que les lignes 1, 5, et 9, il est possible d'appliquer le résultat précédent pour les matrices 3×3 et d'avoir une matrice de rotation (A.41) :

$$Q_\perp = \begin{pmatrix} -\frac{\sqrt{3}+1}{2\sqrt{3}} & \frac{\sqrt{3}-1}{2\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{\sqrt{3}-1}{2\sqrt{3}} & -\frac{\sqrt{3}+1}{2\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}, \quad \text{pour} \quad n_x = n_y = n_z = \frac{1}{\sqrt{3}}.$$

En considérant l'ensemble des lignes, cela donne la matrice de rotation tronquée :

$$Q_\perp = \begin{pmatrix} -\frac{\sqrt{3}+1}{2\sqrt{3}} & 0 & 0 & 0 & \frac{\sqrt{3}-1}{2\sqrt{3}} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\sqrt{3}-1}{2\sqrt{3}} & 0 & 0 & 0 & -\frac{\sqrt{3}+1}{2\sqrt{3}} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{A.42}$$

Deux familles Dans le cas à deux familles, avec une matrice $M_\perp$ définie par l'équation (A.39a) :

$$M_\perp = Q_\perp.M,$$

celle-ci vérifie :

$$M_{\perp}.M_{\perp}^{\intercal} = \begin{pmatrix} 3/2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 3/2 & 0 & -1/2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3/2 & 0 & 0 & 0 & -1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 & 0 & 3/2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 3/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3/2 & 0 & -1/2 \\ 0 & 0 & -1/2 & 0 & 0 & 0 & 3/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1/2 & 0 & 3/2 \end{pmatrix}$$

$$(M_{\perp}.M_{\perp}^{\intercal})^{-1} = \begin{pmatrix} 2/3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 3/4 & 0 & 1/4 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3/4 & 0 & 0 & 0 & 1/4 & 0 \\ 0 & 1/4 & 0 & 3/4 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2/3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3/4 & 0 & 1/4 \\ 0 & 0 & 1/4 & 0 & 0 & 0 & 3/4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/4 & 0 & 3/4 \end{pmatrix}$$

et la matrice pseudo inverse vaut :

$$M_P^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & -1/3 & 1/4 & 0 & -1/4 & 1/3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1/3 & 1/4 & 0 & -1/4 & -1/3 \\ 1/3 & 0 & -1/4 & 0 & 0 & 0 & 1/4 & 0 & -1/3 \\ -1/3 & 0 & -1/4 & 0 & 0 & 0 & 1/4 & 0 & 1/3 \\ 1/3 & 1/4 & 0 & -1/4 & -1/3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1/3 & 1/4 & 0 & -1/4 & 1/3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{4\sqrt{2}} & \frac{1}{4\sqrt{2}} & \frac{3}{4\sqrt{2}} & 0 & 0 & \frac{3}{4\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{4\sqrt{2}} & \frac{1}{4\sqrt{2}} & -\frac{3}{4\sqrt{2}} & 0 & 0 & \frac{3}{4\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{3}{4\sqrt{2}} & 0 & -\frac{1}{4\sqrt{2}} & 0 & -\frac{1}{4\sqrt{2}} & 0 & -\frac{3}{4\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & \frac{3}{4\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{4\sqrt{2}} & 0 & -\frac{1}{4\sqrt{2}} & 0 & -\frac{3}{4\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{3}{4\sqrt{2}} & 0 & 0 & \frac{3}{4\sqrt{2}} & -\frac{1}{4\sqrt{2}} & \frac{1}{4\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{3}{4\sqrt{2}} & 0 & 0 & \frac{3}{4\sqrt{2}} & \frac{1}{4\sqrt{2}} & \frac{1}{4\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix}$$

Trois familles Dans le cas à trois familles, la matrice $M_\perp$ vérifie :

$$M_\perp.M_\perp^\intercal = \begin{pmatrix} 5/2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 19/6 & 0 & -5/6 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 19/6 & 0 & 0 & 0 & -5/6 & 0 \\ 0 & -5/6 & 0 & 19/6 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 5/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 19/6 & 0 & -5/6 \\ 0 & 0 & -5/6 & 0 & 0 & 0 & 19/6 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -5/6 & 0 & 19/6 \end{pmatrix}$$

$$(M_\perp.M_\perp^\intercal)^{-1} = \begin{pmatrix} 2/5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 19/56 & 0 & 5/56 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 19/56 & 0 & 0 & 0 & 5/56 & 0 \\ 0 & 5/56 & 0 & 19/56 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2/5 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 19/56 & 0 & 5/56 \\ 0 & 0 & 5/56 & 0 & 0 & 0 & 19/56 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 5/56 & 0 & 19/56 \end{pmatrix}$$

et la matrice pseudo inverse vaut :

$$M_P^{-1} = \begin{pmatrix}
0 & 0 & 0 & 0 & -1/5 & 1/8 & 0 & -1/8 & 1/5 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 1/5 & 1/8 & 0 & -1/8 & -1/5 \\
1/5 & 0 & -1/8 & 0 & 0 & 0 & 1/8 & 0 & -1/5 \\
-1/5 & 0 & -1/8 & 0 & 0 & 0 & 1/8 & 0 & 1/5 \\
1/5 & 1/8 & 0 & -1/8 & -1/5 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
-1/5 & 1/8 & 0 & -1/8 & 1/5 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & m_{7,2} & m_{7,2} & m_{7,4} & 0 & 0 & m_{7,4} & 0 & 0 \\
0 & -m_{7,2} & m_{7,2} & -m_{7,4} & 0 & 0 & m_{7,4} & 0 & 0 \\
0 & -m_{7,4} & 0 & -m_{7,2} & 0 & -m_{7,2} & 0 & -m_{7,4} & 0 \\
0 & m_{7,4} & 0 & m_{7,2} & 0 & -m_{7,2} & 0 & -m_{7,4} & 0 \\
0 & 0 & -m_{7,4} & 0 & 0 & m_{7,4} & -m_{7,2} & m_{7,2} & 0 \\
0 & 0 & m_{7,4} & 0 & 0 & m_{7,4} & m_{7,2} & m_{7,2} & 0 \\
0 & m_{13,2} & m_{13,2} & m_{13,4} & -m_{13,9} & m_{13,6} & m_{13,4} & -m_{13,6} & m_{13,9} \\
0 & -m_{13,2} & -m_{13,2} & -m_{13,4} & -m_{13,9} & m_{13,6} & -m_{13,4} & -m_{13,6} & m_{13,9} \\
0 & m_{13,2} & -m_{13,2} & m_{13,4} & m_{13,9} & m_{13,6} & -m_{13,4} & -m_{13,6} & -m_{13,9} \\
0 & -m_{13,2} & m_{13,2} & -m_{13,4} & m_{13,9} & m_{13,6} & m_{13,4} & -m_{13,6} & -m_{13,9} \\
-m_{13,9} & -m_{13,4} & m_{13,6} & -m_{13,2} & 0 & -m_{13,2} & -m_{13,6} & -m_{13,4} & m_{13,9} \\
m_{13,9} & -m_{13,4} & -m_{13,6} & -m_{13,2} & 0 & -m_{13,2} & m_{13,6} & -m_{13,4} & -m_{13,9} \\
-m_{13,9} & m_{13,4} & -m_{13,6} & m_{13,2} & 0 & -m_{13,2} & m_{13,6} & -m_{13,4} & m_{13,9} \\
m_{13,9} & m_{13,4} & m_{13,6} & m_{13,2} & 0 & -m_{13,2} & -m_{13,6} & -m_{13,4} & -m_{13,9} \\
m_{13,9} & m_{13,6} & -m_{13,4} & -m_{13,6} & -m_{13,9} & m_{13,4} & -m_{13,2} & m_{13,2} & 0 \\
-m_{13,9} & -m_{13,6} & -m_{13,4} & m_{13,6} & m_{13,9} & m_{13,4} & -m_{13,2} & m_{13,2} & 0 \\
m_{13,9} & -m_{13,6} & m_{13,4} & m_{13,6} & -m_{13,9} & m_{13,4} & m_{13,2} & m_{13,2} & 0 \\
-m_{13,9} & m_{13,6} & m_{13,4} & -m_{13,6} & m_{13,9} & m_{13,4} & m_{13,2} & m_{13,2} & 0
\end{pmatrix}$$

$$m_{7,2} = \frac{5}{56\sqrt{2}}, \quad m_{7,4} = \frac{19}{56\sqrt{2}}, \quad m_{13,2} = \frac{5}{56\sqrt{3}}, \quad m_{13,4} = \frac{19}{56\sqrt{3}}, \quad m_{13,6} = \frac{1}{8\sqrt{3}}, \quad m_{13,9} = \frac{1}{5\sqrt{3}}$$

$$\boldsymbol{x} = M_P^{-1}.\boldsymbol{y} \quad \text{avec} \quad M_P^{-1} = M_\perp^\intercal.(M_\perp.M_\perp^\intercal)^{-1}.Q_\perp = M^\intercal.Q_\perp^\intercal.(Q_\perp.M.M^\intercal.Q_\perp^\intercal)^{-1}.Q_\perp.$$

Annexe B

Éléments de cristallographie

Cette annexe regroupe quelques de rappels de cristallographie, ainsi que quelques démonstrations.

B.1 Changement de repère

Les matrices de passage entre les repères : laboratoire et cristaux d'UO_2 sont rappelées dans cette annexe.

Matrice élémentaire En algèbre, le changement de base s'effectue au moyen de **matrices de passage**. La matrice de passage $\boldsymbol{a}$ entre une ancienne base $(\boldsymbol{e}_1^o, \boldsymbol{e}_2^o, \boldsymbol{e}_3^o)$ et une nouvelle base $(\boldsymbol{e}_1^n, \boldsymbol{e}_2^n, \boldsymbol{e}_3^n)$ est définie par l'expression des vecteurs de la nouvelle base dans l'ancienne base :

$$\boldsymbol{e}_i^n = \sum_{j=1}^{3} a_{ji}\, \boldsymbol{e}_j^o.$$

Dans cette écriture, les vecteurs $\boldsymbol{e}_i^n$ de la nouvelle base correspondent aux colonnes de la matrice $\boldsymbol{a}$.

Transformation des vecteurs Les coordonnées d'un vecteur $\boldsymbol{v}$ peuvent se décomposer dans les deux bases :

$$\boldsymbol{v} = \sum_{i=1}^{3} v_i^o\, \boldsymbol{e}_i^o = \sum_{i=1}^{3} v_i^n\, \boldsymbol{e}_i^n,$$

avec pour coordonnées respectives (v_i^o) et (v_i^n) dans l'ancienne et la nouvelle base. Ces coordonnées sont reliées par :

$$v_i^o = \sum_{j=1}^{3} a_{ij}\, v_j^n, \tag{B.1a}$$

c'est-à-dire sous forme matricielle :

$$\boldsymbol{v}^o = a.\boldsymbol{v}^n. \tag{B.1b}$$

Matrice de rotation Dans le cas où les deux bases sont orthonormées directes, la matrice de passage a est une matrice de rotation, qui vérifie :

$$\boldsymbol{a}^{-1} = \boldsymbol{a}^T, \quad \text{d'où} \quad \boldsymbol{v}^n = \boldsymbol{a}^T.\boldsymbol{v}^o. \tag{B.1c}$$

L'utilisation de matrices de rotation peut porter à confusion. De façon classique, les rotations sont utilisées pour faire tourner l'espace alors que le référentiel reste fixe. Dans le changement de base, c'est l'inverse : l'espace reste fixe alors que le référentiel a tourné. Les expressions (B.1) liant les nouvelles coordonnées $\boldsymbol{v}^n$ aux anciennes $\boldsymbol{v}^o$ sont relatives aux changement de base et non pas aux rotations.

B.2 Angles d'Euler

Dans un espace à trois dimensions, toute rotation peut s'exprimer comme une combinaison de 3 rotations élémentaires, exprimées dans les axes principaux. Les 3 angles décrivant les 3 rotations élémentaires sont appelés **angles d'Euler**. La décomposition n'est pas unique : il en existe *a priori* 24 possibles, dont certaines sont plus classiques.

Rotations élémentaires Les rotations élémentaires d'angle α autour des axes x, y et z possèdent les matrices de passage suivantes :

$$R_x(\alpha) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\alpha) & -\sin(\alpha) \\ 0 & \sin(\alpha) & \cos(\alpha) \end{bmatrix}, \qquad R_y(\alpha) = \begin{bmatrix} \cos(\alpha) & 0 & \sin(\alpha) \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin(\alpha) & 0 & \cos(\alpha) \end{bmatrix}, \tag{B.2a}$$

$$\text{et} \quad R_z(\alpha) = \begin{bmatrix} \cos(\alpha) & -\sin(\alpha) & 0 \\ \sin(\alpha) & \cos(\alpha) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \tag{B.2b}$$

L'angle α est compté positivement avec la convention suivante :

- La rotation R_x tourne l'axe y vers l'axe z ;
- La rotation R_y tourne l'axe z vers l'axe x ;
- La rotation R_z tourne l'axe x vers l'axe y.

La rotation R_z d'angle α est représentée dans le plan (x, y) sur la figure B.1.

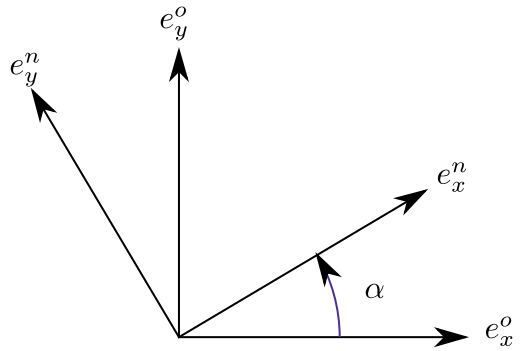


FIGURE B.1 – Rotation d'un angle α entre l'ancienne et la nouvelle base

Mécanique du solide La convention en mécanique solide pour les angles d'Euler est la suivante : le repère d'origine est d'abord tourné avec un angle de **précession** ψ autour de l'axe z, puis d'un angle de

nutation θ autour de l'axe x, enfin d'un angle de **rotation propre** φ autour de l'axe z. La matrice de passage $\boldsymbol{a}$ de cette combinaison se décompose donc en :

$$\boldsymbol{a} = R_3(\psi).R_1(\theta).R_3(\varphi),$$

et d'après les expressions (B.2) des matrices élémentaires s'écrit :

$$\boldsymbol{a} = \begin{bmatrix} \cos(\psi)\,\cos(\varphi) - \cos(\theta)\,\sin(\psi)\,\sin(\varphi) & -\cos(\psi)\,\sin(\varphi) - \cos(\theta)\,\cos(\varphi)\,\sin(\psi) & \sin(\psi)\,\sin(\theta) \\ \cos(\psi)\,\cos(\theta)\,\sin(\varphi) + \cos(\varphi)\,\sin(\psi) & \cos(\psi)\,\cos(\theta)\,\cos(\varphi) - \sin(\psi)\,\sin(\varphi) & -\cos(\psi)\,\sin(\theta) \\ \sin(\theta)\,\sin(\varphi) & \cos(\varphi)\,\sin(\theta) & \cos(\theta) \end{bmatrix}.$$

Notations de Bunge En cristallographie, les notations de Bunge sont souvent utilisées pour orienter un cristal dans un échantillon. Le repère d'origine est celui du laboratoire (indice L) et le repère d'arrivée, celui du cristal (indice c). Il s'appuie sur la combinaison ci-dessus avec les angles :

$$\varphi_1 = \psi, \quad \phi = \theta, \quad \varphi_2 = \varphi.$$

Le passage des coordonnées matériau en celles de l'échantillon sont donc définies par les formules :

$$\boldsymbol{x}^L = a.\boldsymbol{x}^c, \quad \text{et} \quad \boldsymbol{x}^c = a^T.\boldsymbol{x}^L, \quad \text{avec} \quad \boldsymbol{a} = R_3(\varphi_1).R_1(\phi).R_3(\varphi_2). \tag{B.3a}$$

La matrice de Bunge correspond à la matrice :

$$\boldsymbol{a}^T = \begin{bmatrix} \cos(\varphi_1)\,\cos(\varphi_2) - \cos(\phi)\,\sin(\varphi_1)\,\sin(\varphi_2) & \cos(\varphi_1)\,\cos(\phi)\,\sin(\varphi_2) + \cos(\varphi_2)\,\sin(\varphi_1) & \sin(\phi)\,\sin(\varphi_2) \\ -\cos(\varphi_1)\,\sin(\varphi_2) - \cos(\phi)\,\cos(\varphi_2)\,\sin(\varphi_1) & \cos(\varphi_1)\,\cos(\phi)\,\cos(\varphi_2) - \sin(\varphi_1)\,\sin(\varphi_2) & \cos(\varphi_2)\,\sin(\phi) \\ \sin(\varphi_1)\,\sin(\phi) & -\cos(\varphi_1)\,\sin(\phi) & \cos(\phi) \end{bmatrix}. \tag{B.3b}$$

Sphère unité Dans la décomposition de Bunge (B.3), la dernière ligne de la matrice, représente l'axe de départ z, tourné par les angles ϕ et φ_2. C'est un vecteur $\boldsymbol{u}$ sur la sphère unité :

$$u_x = a_{3,1} = \sin(\phi)\,\sin(\varphi_2), \tag{B.4a}$$
$$u_y = a_{3,2} = \sin(\phi)\,\cos(\varphi_2), \tag{B.4b}$$
$$u_z = a_{3,3} = \cos(\phi), \tag{B.4c}$$

avec le paramétrage polaire classique :

$$\phi \in [0, \pi], \quad \text{et} \quad \varphi_2 \in [0, 2\,\pi].$$

Le troisième angle, φ_1, fixe le repère autour du vecteur $\boldsymbol{u}$:

$$\varphi_1 \in [0, 2\,\pi].$$

Ainsi, une matrice de rotation peut être considérée comme la combinaison d'un point sur la sphère unité, et d'une rotation d'angle φ_1.

B.3 Projection stéréographique

Les directions cristallines sont souvent présentées en projection stéréographique.

Définition La direction d'un plan cristallin peut être représentée par un point M sur la surface d'une sphère unité B.2. Elle peut également être projetée sur le plan qui sépare la sphère en deux hémisphères grâce à la **projection stéréographique**, illustrée en figure B.2 : le pôle inférieur P est le centre de la projection, et le point M est transformé en un point M'. Les angles φ et θ relatifs à cette opération s'appellent respectivement l'azimut et l'inclinaison. Lors de cette opération, l'hémisphère supérieure de la sphère est projetée sur le disque intérieur.

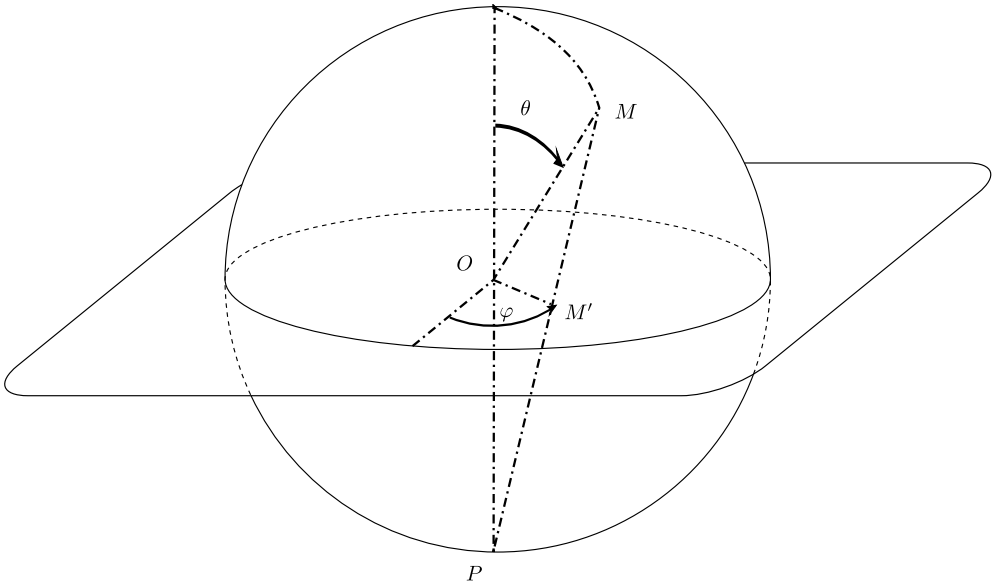


FIGURE B.2 – Projection stéréographique

Opération d'inversion La projection stéréoscopique, pour une sphère de rayon R, peut être décrite par une opération mathématique : l'**inversion** de centre P et de rapport $2R^2$, qui transforme un point M en M' avec la formule :

$$\overline{PM'} = 2R^2 \frac{\overline{PM}}{||\overline{PM}||^2}.$$

Dans le cas du cercle unité, le rayon R de la sphère vaut 1. Le point M de coordonnées (x, y, z) devient :

$$x' = \frac{R\,x}{z+R}, \quad y' = \frac{R\,y}{z+R}, \quad z' = 0.$$

Inversement :

$$x = \frac{2\,R^2\,x'}{x'^2 + y'^2 + R^2}, \quad y = \frac{2\,R^2\,y'}{x'^2 + y'^2 + R^2}, \quad z = R\left(\frac{2\,R^2}{x'^2 + y'^2 + R^2} - 1\right). \tag{B.5}$$

Les propriétés de l'inversion sont les suivantes :

- elle est auto inverse ;
- elle transforme une sphère en une autre sphère, lorsque le point P n'appartient pas à la sphère de départ ;
- elle transforme une sphère contenant P en plan.

Méridiens Compte tenu des propriétés énoncées, l'inversion transforme les méridiens de la sphère unité en cercles ou en droite. Il est classique de représenter quelques uns, ceux qui correspondent aux équations $x = 0$, $y = 0$, $x = \pm y$, $x = \pm z$ et $y = \pm z$. Leur équation sur la projection s'obtient facilement avec les relations (B.5) Ils sont représentés sur la figure B.3.

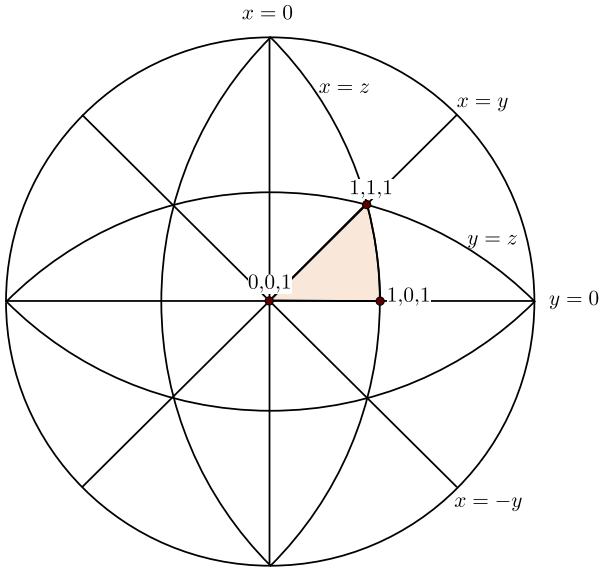


FIGURE B.3 – Méridiens principaux sur la projection stéréographique

Si un cristal cubique est orienté de tel sorte que ses axes principaux correspondent aux axes x, y et z de la sphère unité, alors les principaux plans h, k, l se trouvent aux intersections de ces méridiens. Trois directions importantes sont rapportées sur la figure B.3 : $(0, 0, 1)$, $(1, 0, 1)$ et $(1, 1, 1)$.

Orientation des cristaux D'après l'annexe B, l'orientation d'un cristal dépend de trois paramètres indépendants, les trois angles d'Euler. Les deux premiers angles ϕ et φ_2 représentent une direction $\boldsymbol{u}$ sur la sphère unité, donnée par l'expression :

$$\begin{aligned} u_x &= a_{3,1} = \sin(\phi)\ \sin(\varphi_2), \\ u_y &= a_{3,2} = \sin(\phi)\ \cos(\varphi_2), \\ u_z &= a_{3,3} = \cos(\phi), \end{aligned}$$

et peuvent donc être représentés en projection stéréographique. Les angles d'Euler ϕ et φ_2 correspondent respectivement à l'inclinaison et à l'azimut de la projection.

Symétrie cubique Le cristal d'UO_2 possède une symétrie cubique. Il conserve ses propriétés physiques pour tout changement d'orientation qui permute ses axes x, y, z, ou change leur signe. Ces opérations se traduisent sur le point $\boldsymbol{u}$ de la sphère unité par une permutation ou un changement de signe des coordonnées u_x, u_y, u_z. Pour toute orientation, il est ainsi possible par permutation et changement de signe de lui faire correspondre une autre orientation, dont l'image $\boldsymbol{u}$ appartienne à une partie de la sphère unité, caractérisée par l'équation :

$$0 \leq u_y \leq u_x \leq u_z.$$

Sur la projection stéréographique, les points qui vérifient cette relation sont localisés dans le triangle de couleur sur la figure B.3, dont les sommets correspondent aux directions cristallographiques $(0, 0, 1)$, $(1, 0, 1)$, $(1, 1, 1)$.

B.4 Module de Young à l'échelle du grain

Pour un matériau anisotrope, ses propriétés dépendent de la direction, notamment son module de Young, qui relie la contrainte à la déformation dans le domaine élastique.

Module de Young La loi de Hooke (1.3) dans le repère du cristal s'écrit :

$$\overline{\sigma}^c = \overline{\overline{C}} : \underline{\varepsilon}^{ec}. \tag{B.6}$$

En remplaçant le tenseur des contraintes dans l'équation (B.6) par son expression dans le repère du cristal donnée par l'équation (3.19), et en inversant le système on trouve les expressions suivantes des déformations élastiques uniaxiales dans le repère du cristal :

$$\begin{aligned}
\varepsilon^{ec}_{xx} &= \sigma^L_{zz}\,\frac{(1+\nu)\,n_x^2-\nu}{E}, & \varepsilon^{ec}_{yz} &= \sigma^L_{zz}\,\frac{n_y\,n_z}{2\,G},\\
\varepsilon^{ec}_{yy} &= \sigma^L_{zz}\,\frac{(1+\nu)\,n_y^2-\nu}{E}, & \varepsilon^{ec}_{xz} &= \sigma^L_{zz}\,\frac{n_x\,n_z}{2\,G},\\
\varepsilon^{ec}_{zz} &= \sigma^L_{zz}\,\frac{(1+\nu)\,n_z^2-\nu}{E}, & \varepsilon^{ec}_{xy} &= \sigma^L_{zz}\,\frac{n_x\,n_y}{2\,G},
\end{aligned}$$

où : G, E et ν sont, respectivement, le module de cisaillement, le module de Young et de coefficient de Poisson. (n_x, n_y, n_z) sont les composantes du vecteur d'orientation du monocristal obtenues par l'équation (3.11). En format tensoriel :

$$\underline{\varepsilon}^{ec} = \sigma^L_{zz}\left(\left(\frac{1+\nu}{E}-\frac{1}{2\,G}\right)\begin{pmatrix} n_x^2 & 0 & 0\\ 0 & n_y^2 & 0\\ 0 & 0 & n_z^2\end{pmatrix} - \frac{\nu}{E}\,I + \frac{1}{2\,G}\,\boldsymbol{n}_{hkl}\otimes\boldsymbol{n}_{hkl}\right). \tag{B.7}$$

La transformation de la déformation suit celle de la contrainte (cf. équation (3.16)) :

$$\underline{\varepsilon}^{eL} = a.\,\underline{\varepsilon}^{ec}.a^T. \tag{B.8}$$

En utilisant l'équation (B.8) ci-dessus et la relation (3.12), on déduit l'expression de la déformation axiale suivant $\boldsymbol{e}_z$:

$$\varepsilon^{eL}_{zz} = \boldsymbol{e}_z^T.\underline{\varepsilon}^{eL}.\boldsymbol{e}_z = \boldsymbol{n}_{hkl}^T.\underline{\varepsilon}^{ec}.\boldsymbol{n}_{hkl}. \tag{B.9}$$

Si on substitue l'équation (B.7) dans le second terme de la relation (B.9), on obtient :

$$\varepsilon^{eL}_{zz} = \sigma^L_{zz}\left(\left(\frac{1+\nu}{E}-\frac{1}{2\,G}\right)(n_x^4+n_y^4+n_z^4) - \frac{\nu}{E}+\frac{1}{2\,G}\right).. \tag{B.10}$$

En utilisant l'équation (3.11), on a :

$$n_x^4+n_y^4+n_z^4 = \frac{h^4+k^4+l^4}{(h^2+k^2+l^2)^2}. \tag{B.11}$$

Alors, la pente dans le régime élastique linéaire (cf. figure 3.4), ou le module de Young, ou encore le rapport entre la contrainte et la déformation suivant l'axe de traction, est donnée par la relation suivante :

$$E_{hkl} = \frac{\sigma^L_{zz}}{\varepsilon^{eL}_{zz}}. \tag{B.12}$$

Ainsi, les trois équations (B.10), (B.11) et (B.12) donnent :

$$E_{hkl} = \left(\left(\frac{1+\nu}{E}-\frac{1}{2\,G}\right)\frac{h^4+k^4+l^4}{(h^2+k^2+l^2)^2} - \frac{\nu}{E}+\frac{1}{2\,G}\right)^{-1}. \tag{B.13}$$

C'est l'expression du module de Young en fonction de la direction cristalline $\boldsymbol{n}_{hkl}$.

B.5 Orientations monocristallines de Sawbridge et Skyes

Sawbridge et Skyes [129] ont effectué des essais de compression uniaxiale sur des monocristaux d'UO_2 à température et vitesse de déformation constantes (cf. tableau 3.1), pour différentes orientations cristallines. Ils proposent des chemins entre deux directions cristallines $\boldsymbol{n}_1$ et $\boldsymbol{n}_2$, paramétrées par un angle α. Une direction cristalline $\boldsymbol{n}_\alpha$ correspondant à l'angle α est décrite par :

$$\boldsymbol{n}_\alpha = \cos(\alpha)\,\boldsymbol{n}_1 + \sin(\alpha)\,\frac{\boldsymbol{n}_2 - (\boldsymbol{n}_1.\boldsymbol{n}_2)\,\boldsymbol{n}_1}{\sqrt{1-(\boldsymbol{n}_1.\boldsymbol{n}_2)^2}}. \tag{B.14}$$

Elle vaut $\boldsymbol{n}_1$ pour $\alpha = 0$ et $\boldsymbol{n}_2$ lorsque :

$$\cos(\alpha) = \boldsymbol{n}_1.\boldsymbol{n}_2 \quad \text{et} \quad \sin(\alpha) = \sqrt{1-(\boldsymbol{n}_1.\boldsymbol{n}_2)^2}.$$

Les directions cristallines étudiées sont présentées par les deux angles : Ω et ϕ, montrés dans la figure 3.6(b).

- La première direction cristalline est définie par un angle ϕ, dans le plan porté par les directions [001] et [111]. Ces deux dernières directions correspondent à des valeurs de ϕ égales : 0 et $54,7°$, respectivement. La direction correspondant à ϕ, est donnée à partir de l'équation (B.14) par :

$$n_x = \frac{\sin(\phi)}{\sqrt{2}}, \quad n_y = \frac{\sin(\phi)}{\sqrt{2}}, \quad n_z = \cos(\phi).$$

- Afin de balayer le centre de la figure de pôle inverse, une seconde direction cristalline est définie par un angle Ω dans le plan porté par les directions [101] et direction correspondant à $\phi = 16°$. Elle vaut ainsi, d'après l'équation (B.14) :

$$\begin{aligned}
n_x &= \frac{\cos(\Omega)}{\sqrt{2}} + \frac{\sin(\Omega)}{\sqrt{1-(\boldsymbol{n}_1.\boldsymbol{n}_2)^2}}\,\frac{\sin(\phi) - \boldsymbol{n}_1.\boldsymbol{n}_2}{\sqrt{2}},\\
n_y &= \frac{\sin(\Omega)}{\sqrt{1-(\boldsymbol{n}_1.\boldsymbol{n}_2)^2}}\,\frac{\sin(\phi)}{\sqrt{2}},\\
n_z &= \frac{\cos(\Omega)}{\sqrt{2}} + \frac{\sin(\Omega)}{\sqrt{1-(\boldsymbol{n}_1.\boldsymbol{n}_2)^2}}\left(\cos(\phi) - \frac{\boldsymbol{n}_1.\boldsymbol{n}_2}{\sqrt{2}}\right).
\end{aligned}$$

avec :

$$\boldsymbol{n}_1.\boldsymbol{n}_2 = \frac{\sin(\phi)}{2} + \frac{\cos(\phi)}{\sqrt{2}}$$

Annexe C

Matrice d'interaction entre les systèmes de glissement

	<110>{100}						<110>{110}						<110>{111}											
<110>{100}	a_0	a_1	a_2	a_2	a_2	a_2	a_5	a_6	a_7	a_7	a_7	a_7	a_{13}	a_{13}	a_{14}	a_{14}	a_{15}	a_{16}	a_{15}	a_{16}	a_{16}	a_{15}	a_{15}	a_{16}
	a_1	a_0	a_2	a_2	a_2	a_2	a_6	a_5	a_7	a_7	a_7	a_7	a_{14}	a_{14}	a_{13}	a_{13}	a_{16}	a_{15}	a_{16}	a_{15}	a_{15}	a_{16}	a_{16}	a_{15}
	a_2	a_2	a_0	a_1	a_2	a_2	a_7	a_7	a_5	a_6	a_7	a_7	a_{16}	a_{15}	a_{15}	a_{16}	a_{13}	a_{13}	a_{14}	a_{14}	a_{15}	a_{16}	a_{15}	a_{16}
	a_2	a_2	a_1	a_0	a_2	a_2	a_7	a_7	a_6	a_5	a_7	a_7	a_{15}	a_{16}	a_{16}	a_{15}	a_{14}	a_{14}	a_{13}	a_{13}	a_{16}	a_{15}	a_{16}	a_{15}
	a_2	a_2	a_2	a_2	a_0	a_1	a_7	a_7	a_7	a_7	a_5	a_6	a_{15}	a_{16}	a_{15}	a_{16}	a_{16}	a_{15}	a_{15}	a_{16}	a_{13}	a_{13}	a_{14}	a_{14}
	a_2	a_2	a_2	a_2	a_1	a_0	a_7	a_7	a_7	a_7	a_6	a_5	a_{16}	a_{15}	a_{16}	a_{15}	a_{15}	a_{16}	a_{16}	a_{15}	a_{14}	a_{14}	a_{13}	a_{13}
<110>{110}	$a_5^\star$	$a_6^\star$	$a_7^\star$	$a_7^\star$	$a_7^\star$	$a_7^\star$	a_0'	a_3	a_4	a_4	a_4	a_4	a_{17}	a_{17}	a_{18}	a_{18}	a_{19}	a_{20}	a_{19}	a_{20}	a_{20}	a_{19}	a_{19}	a_{20}
	$a_6^\star$	$a_5^\star$	$a_7^\star$	$a_7^\star$	$a_7^\star$	$a_7^\star$	a_3	a_0'	a_4	a_4	a_4	a_4	a_{18}	a_{18}	a_{17}	a_{17}	a_{20}	a_{19}	a_{20}	a_{19}	a_{19}	a_{20}	a_{20}	a_{19}
	$a_7^\star$	$a_7^\star$	$a_5^\star$	$a_6^\star$	$a_7^\star$	$a_7^\star$	a_4	a_4	a_0'	a_3	a_4	a_4	a_{20}	a_{19}	a_{19}	a_{20}	a_{17}	a_{17}	a_{18}	a_{18}	a_{19}	a_{20}	a_{19}	a_{20}
	$a_7^\star$	$a_7^\star$	$a_6^\star$	$a_5^\star$	$a_7^\star$	$a_7^\star$	a_4	a_4	a_3	a_0'	a_4	a_4	a_{19}	a_{20}	a_{20}	a_{19}	a_{18}	a_{18}	a_{17}	a_{17}	a_{20}	a_{19}	a_{20}	a_{19}
	$a_7^\star$	$a_7^\star$	$a_7^\star$	$a_7^\star$	$a_5^\star$	$a_6^\star$	a_4	a_4	a_4	a_4	a_0'	a_3	a_{19}	a_{20}	a_{19}	a_{20}	a_{20}	a_{19}	a_{19}	a_{20}	a_{17}	a_{17}	a_{18}	a_{18}
	$a_5^\star$	$a_7^\star$	$a_7^\star$	$a_7^\star$	$a_6^\star$	$a_5^\star$	a_4	a_4	a_4	a_4	a_3	a_0'	a_{20}	a_{19}	a_{20}	a_{19}	a_{19}	a_{20}	a_{20}	a_{19}	a_{18}	a_{18}	a_{17}	a_{17}
<110>{111}	$a_{13}^\star$	$a_{14}^\star$	$a_{15}^\star$	$a_{16}^\star$	$a_{16}^\star$	$a_{15}^\star$	$a_{17}^\star$	$a_{18}^\star$	$a_{11}^\star$	$a_{12}^\star$	$a_{12}^\star$	$a_{11}^\star$	a_0''	a_8	a_9	a_9	a_{10}	a_{11}	a_{12}	$a_{10}^\star$	$a_{10}^\star$	a_{12}	a_{10}	a_{11}
	$a_{13}^\star$	$a_{14}^\star$	$a_{16}^\star$	$a_{15}^\star$	$a_{15}^\star$	$a_{16}^\star$	$a_{17}^\star$	$a_{18}^\star$	$a_{12}^\star$	$a_{11}^\star$	$a_{11}^\star$	$a_{12}^\star$	a_8	a_0''	a_9	a_9	a_{12}	$a_{10}^\star$	a_{10}	a_{11}	a_{11}	a_{10}	a_{12}	$a_{10}^\star$
	$a_{14}^\star$	$a_{13}^\star$	$a_{16}^\star$	$a_{15}^\star$	$a_{16}^\star$	$a_{15}^\star$	$a_{18}^\star$	$a_{17}^\star$	$a_{12}^\star$	$a_{11}^\star$	$a_{12}^\star$	$a_{11}^\star$	a_9	a_9	a_0''	a_8	$a_{10}^\star$	a_{12}	a_{11}	a_{10}	a_{12}	$a_{10}^\star$	a_{11}	a_{10}
	$a_{14}^\star$	$a_{13}^\star$	$a_{15}^\star$	$a_{16}^\star$	$a_{15}^\star$	$a_{16}^\star$	$a_{18}^\star$	$a_{17}^\star$	$a_{11}^\star$	$a_{12}^\star$	$a_{11}^\star$	$a_{12}^\star$	a_9	a_9	a_8	a_0''	a_{11}	a_{10}	$a_{10}^\star$	a_{12}	a_{10}	a_{11}	$a_{10}^\star$	a_{12}
	$a_{16}^\star$	$a_{15}^\star$	$a_{13}^\star$	$a_{14}^\star$	$a_{15}^\star$	$a_{16}^\star$	$a_{12}^\star$	$a_{11}^\star$	$a_{17}^\star$	$a_{18}^\star$	$a_{11}^\star$	$a_{12}^\star$	$a_{10}^\star$	a_{12}	a_{10}	a_{11}	a_0''	a_8	a_9	a_9	a_{10}	a_{11}	a_{12}	$a_{10}^\star$
	$a_{15}^\star$	$a_{16}^\star$	$a_{13}^\star$	$a_{14}^\star$	$a_{16}^\star$	$a_{15}^\star$	$a_{11}^\star$	$a_{12}^\star$	$a_{17}^\star$	$a_{18}^\star$	$a_{12}^\star$	$a_{11}^\star$	a_{11}	a_{10}	a_{12}	$a_{10}^\star$	a_8	a_0''	a_9	a_9	a_{12}	$a_{10}^\star$	a_{10}	a_{11}
	$a_{16}^\star$	$a_{15}^\star$	$a_{14}^\star$	$a_{13}^\star$	$a_{16}^\star$	$a_{15}^\star$	$a_{12}^\star$	$a_{11}^\star$	$a_{18}^\star$	$a_{17}^\star$	$a_{12}^\star$	$a_{11}^\star$	a_{12}	$a_{10}^\star$	a_{11}	a_{10}	a_9	a_9	a_0''	a_8	$a_{10}^\star$	a_{12}	a_{11}	a_{10}
	$a_{15}^\star$	$a_{16}^\star$	$a_{14}^\star$	$a_{13}^\star$	$a_{15}^\star$	$a_{16}^\star$	$a_{11}^\star$	$a_{12}^\star$	$a_{18}^\star$	$a_{17}^\star$	$a_{11}^\star$	$a_{12}^\star$	a_{10}	a_{11}	$a_{10}^\star$	a_{12}	a_9	a_9	a_8	a_0''	a_{11}	a_{10}	$a_{10}^\star$	a_{12}
	$a_{15}^\star$	$a_{16}^\star$	$a_{16}^\star$	$a_{15}^\star$	$a_{13}^\star$	$a_{14}^\star$	$a_{11}^\star$	$a_{12}^\star$	$a_{12}^\star$	$a_{11}^\star$	$a_{17}^\star$	$a_{18}^\star$	a_{10}	a_{11}	a_{12}	$a_{10}^\star$	$a_{10}^\star$	a_{12}	a_{10}	a_{11}	a_0''	a_8	a_9	a_9
	$a_{16}^\star$	$a_{15}^\star$	$a_{15}^\star$	$a_{16}^\star$	$a_{13}^\star$	$a_{14}^\star$	$a_{12}^\star$	$a_{11}^\star$	$a_{11}^\star$	$a_{12}^\star$	$a_{17}^\star$	$a_{18}^\star$	a_{12}	$a_{10}^\star$	a_{10}	a_{11}	a_{11}	a_{10}	a_{12}	$a_{10}^\star$	a_8	a_0''	a_9	a_9
	$a_{16}^\star$	$a_{15}^\star$	$a_{16}^\star$	$a_{15}^\star$	$a_{14}^\star$	$a_{13}^\star$	$a_{12}^\star$	$a_{11}^\star$	$a_{12}^\star$	$a_{11}^\star$	$a_{18}^\star$	$a_{17}^\star$	$a_{10}^\star$	a_{12}	a_{11}	a_{10}	a_{12}	$a_{10}^\star$	a_{11}	a_{10}	a_9	a_9	a_0''	a_8
	$a_{15}^\star$	$a_{16}^\star$	$a_{15}^\star$	$a_{16}^\star$	$a_{14}^\star$	$a_{13}^\star$	$a_{11}^\star$	$a_{12}^\star$	$a_{11}^\star$	$a_{12}^\star$	$a_{18}^\star$	$a_{17}^\star$	a_{11}	a_{10}	$a_{10}^\star$	a_{12}	a_{10}	a_{11}	$a_{10}^\star$	a_{12}	a_9	a_9	a_0''	a_8''

TABLE C.1 – Matrice d'interaction entre les familles de systèmes de glissement dans l'UO_2 (Portelette et al. [118])

Familles en interaction	**Type d'interaction**	**Coefficient a_{ij}**	$\sqrt{a_{ij}}$
I/I	Auto écrouissage	$a_0 = a'_0 = a''_0$	$0,29$
	Dipolaire	a_1	0
	Glissile	a_2	$0,34$
II/II	Hirth	a_3	$0,15$
	Sessile	a_4	$0,25$
I/II	Colinéaire	a_5	$0,81$
	Colinéaire	$a_5^\star$	$0,86$
	Hirth	a_6	$0,09$
	Hirth	$a_6^\star$	$0,15$
	Glissile	a_7	$0,43$
	Glissile	$a_7^\star$	$0,40$
III/III	Colinéaire	a_8	$0,79$
	Hirth	a_9	$0,16$
	Glissile	a_{10}	$0,30$
	Glissile	$a_{10}^\star$	$0,32$
	Dipolaire	a_{11}	0
	Glissile	a_{12}	$0,39$
I/III	Colinéaire	a_{13}	$0,77$
	Colinéaire	$a_{13}^\star$	$0,75$
	Hirth	a_{14}	$0,10$
	Hirth	$a_{14}^\star$	$0,12$
	Glissile	a_{15}	$0,41$
	Glissile	$a_{15}^\star$	$0,37$
	Glissile	a_{16}	$0,34$
	Glissile	$a_{16}^\star$	$0,26$
II/III	Colinéaire	a_{17}	$0,64$
	Colinéaire	$a_{17}^\star$	$0,62$
	Hirth	a_{18}	$0,15$
	Hirth	$a_{18}^\star$	$0,14$
	Sessile	a_{19}	$0,31$
	Sessile	$a_{19}^\star$	$0,31$
	Glissile	a_{20}	$0,33$
	Glissile	$a_{20}^\star$	$0,27$

TABLE C.2 – Les coefficients d'interaction à 1973 K calculés dans les travaux de Portelette et al. [118]

Annexe D

Intégration sur MFront : schéma implicite de Newton Raphson

Pour chaque système de glissement s, le tenseur d'orientation :

$$\underline{\beta}^s = \boldsymbol{m}^s \otimes \boldsymbol{n}^s$$

D.1 Sans Nye avec écrouissage immédiat (SNSE)

D.1.1 Équations du modèle

Lorsque le tenseur de Nye $\underline{\alpha}$ est nul, et avec le modèle de comportement identifié sur le matériau déjà écroui, le système d'équations (4.1) devient :

$$\begin{aligned}
\tau^s &= \overline{\sigma} : \underline{\beta}^s, \\
\dot{\gamma}^s &= \exp\left(-\frac{T_A^s}{T}\right) \left(\frac{|\tau^s|}{a_A^s}\right)^n \operatorname{sgn}(\tau^s), \\
\underline{\dot{E}}^p &= \sum_s \dot{\gamma}^s \, \underline{\beta}^s, \\
\underline{\varepsilon}^p &= \frac{1}{2}\left(\underline{E}^p + \underline{E}^{pT}\right).
\end{aligned}$$

D.1.2 Discrétisation

La déformation totale s'écrit :

$$\underline{\varepsilon} = \underline{\varepsilon}^e + \underline{\varepsilon}^p.$$

Pour un incrément de déformation $\Delta\underline{\varepsilon}$, on cherche l'équilibre :

$$f^{el} = \Delta\underline{\varepsilon}^e - \Delta\underline{\varepsilon}^t + \Delta\underline{\varepsilon}^p = 0.$$

Le systèm est implicite par rapport à $\Delta\underline{\varepsilon}^e$. Pour intégrer sur MFront, on utilise un schéma implicite de Newton Raphson. On calcule donc la matrice Jacobienne J_F de la fonction F telle que :

$$F(\Delta\underline{\varepsilon}^{el}) = f^{el} \quad \text{avec} \quad J_F = \left(\frac{\partial f^{el}}{\partial \Delta\underline{\varepsilon}^{el}}\right).$$

Calculer pour cela les termes du jacobien :

$$\frac{\partial f^{el}}{\partial \Delta \underline{\varepsilon}^{el}} = I + \frac{\partial \Delta \underline{\varepsilon}^{p}}{\partial \Delta \underline{\varepsilon}^{el}}.$$

Utilisation des contraintes $\overline{\sigma}$ au lieu de l'incrément de déformations élastiques :

$$\overline{\sigma} = D : (\underline{\varepsilon}_0^{el} + \theta\, \Delta \underline{\varepsilon}^{el}) \quad \text{d'où} \quad \frac{\partial}{\partial \Delta \underline{\varepsilon}^{el}} = \frac{\partial \overline{\sigma}}{\partial \Delta \underline{\varepsilon}^{el}} : \frac{\partial}{\partial \overline{\sigma}} = \theta\, D : \frac{\partial}{\partial \overline{\sigma}}.$$

On a donc :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \Delta \underline{\varepsilon}^{p}}{\partial \overline{\sigma}} &= \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \overline{\sigma}} \left(\Delta \underline{E}^{p} + \Delta \underline{E}^{pT} \right), \\
\frac{\partial \Delta \underline{E}^{p}}{\partial \overline{\sigma}} &= \Delta t \sum_s \frac{\partial \dot{\gamma}^s}{\partial \overline{\sigma}}\, \underline{\beta}^s, \\
\frac{\partial \dot{\gamma}^s}{\partial \overline{\sigma}} &= \frac{\partial \dot{\gamma}^s}{\partial \tau^s}\, \underline{\beta}^s = \frac{n}{a_A^s} \exp\left(-\frac{T_A^s}{T}\right) \left(\frac{|\tau^s|}{a_A^s}\right)^{n-1} \underline{\beta}^s, \quad \text{car} \quad \frac{\partial |\tau^s|}{\partial \tau^s} = \operatorname{sgn}(\tau^s).
\end{aligned}$$

D.2 Avec Nye avec écrouissage immédiat (ANSE)

D.2.1 Équation du modèle

La densité scalaire des GNDs est calculée sur TMFFT par projection du tenseur de Nye sur les systèmes de glissement :

$$\begin{aligned}
\underline{\alpha} &= -\mathbf{rot}(\underline{E}^p), \\
\rho_G^s &= \mathit{\Pi}^s(\underline{\alpha}) \quad \text{avec} \quad \underline{\alpha} = b \sum_s \rho_c^s\, \boldsymbol{m}^s \otimes (\boldsymbol{n}^s \wedge \boldsymbol{m}^s).
\end{aligned}$$

Pour prendre en compte la présence de GNDs dans le modèle, il suffit de modifier $\underline{E}^p$ dans le modèle SNSE ainsi :

$$\dot{\underline{E}}^p = \sum_s \left(1 + \frac{|\rho_G^s|}{\rho_m^s}\right) \dot{\gamma}^s\, \underline{\beta}^s. \tag{D.1}$$

D.2.2 Discrétisation

La même discrétisation dans le modèle SNSE avec la correction prise en compte dans l'équation (D.1).

D.3 Sans Nye + Écrouissage (SNAE)

D.3.1 Équations du modèle

En considérant l'écrouissage, le système d'équations est le suivant :

$$
\begin{aligned}
&\tau^s = \underline{\beta}^s : \overline{\sigma},\\
&\dot{\gamma}^s = \exp\left(-\frac{T_A}{T}\right)\,\left(\frac{|\tau^s|}{\tau_h^F}\right)^n\,\mathrm{sgn}(\tau^s),\\
&\tau_h^F = a_F\,\sqrt{\varrho_f},\\
&\underline{\dot{E}}^p = \sum_s \dot{\gamma}^s\,\underline{\beta}^s,\\
&\underline{\varepsilon}^p = \frac{1}{2}\,\left(\underline{E}^p + \underline{E}^{pT}\right),\\
&\varrho_f = (\varrho_{f_0} - 1)\,X + 1 \quad \text{avec} \quad X = \exp\left(-\left(C_1 \sum_{s\in\mathcal{F}_1} |\gamma^s| + C_2 \sum_{s\in\mathcal{F}_2} |\gamma^s|\right)\right)
\end{aligned}
$$

D.3.2 Discrétisation

Pour un incrément de déformation $\Delta\,\underline{\varepsilon}$, on cherche à annuler le système d'équations suivant :

$$
\begin{aligned}
f^{el} &= \Delta\underline{\varepsilon}^e - \Delta\underline{\varepsilon}^t + \Delta\underline{\varepsilon}^p = 0,\\
f^{\varrho} &= \Delta\varrho_f - (\varrho_f(t) - 1)\,\Gamma(\varrho_f + \theta\,\Delta\varrho_f) = 0.
\end{aligned}
$$

Le systèm est implicite par rapport aux inconnues $\Delta\underline{\varepsilon}^e$ et $\Delta\varrho_f$. Pour intégrer le système avec un schéma implicite de Newton Raphson, on a besoin de calculer la matrice jacobienne de la fonction :

$$
F(\Delta\underline{\varepsilon}^e, \Delta\varrho_f) = (f^{el}, f^{\varrho}).
$$

La matrice jacobienne est :

$$
J_F = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial f^{el}}{\partial \Delta\underline{\varepsilon}^{el}} & \dfrac{\partial f^{el}}{\partial \Delta\varrho_f} \\ \\ \dfrac{\partial f^{\varrho}}{\partial \Delta\underline{\varepsilon}^{el}} & \dfrac{\partial f^{\varrho}}{\partial \Delta\varrho_f} \end{pmatrix}.
$$

On a :

$$
\frac{\partial f^{el}}{\partial \Delta\underline{\varepsilon}^{el}} = I + \frac{\partial \Delta\underline{\varepsilon}^p}{\partial \Delta\underline{\varepsilon}^{el}}.
$$

Utilisation des contraintes $\overline{\sigma}$ au lieu de l'incrément de déformations élastiques :

$$
\overline{\sigma} = D : (\underline{\varepsilon}_0^{el} + \theta\,\Delta\underline{\varepsilon}^{el}) \quad \text{d'où} \quad \frac{\partial}{\partial \Delta\underline{\varepsilon}^{el}} = \frac{\partial \overline{\sigma}}{\partial \Delta\underline{\varepsilon}^{el}} : \frac{\partial}{\partial \overline{\sigma}} = \theta\,D : \frac{\partial}{\partial \overline{\sigma}}.
$$

Dérivées On a :

$$
\varrho_f(t + \theta\Delta\,t) = \varrho_f(t) + \theta\,\Delta\varrho_f
$$

Les dérivées de f^{el} sont :

$$\left\{\begin{array}{l} \dfrac{\partial \Delta \underline{\underline{\varepsilon}}^p}{\partial \overline{\sigma}} = \dfrac{\partial}{\partial \overline{\sigma}} \left[\dfrac{1}{2}\left(\Delta \underline{\underline{E}}^p + \Delta \underline{\underline{E}}^{pT}\right)\right], \\ \dfrac{\partial \Delta \underline{\underline{E}}^p}{\partial \overline{\sigma}} = \Delta t \sum\limits_s \dfrac{\partial \dot{\gamma}^s}{\partial \overline{\sigma}} \underline{\beta}^s, \\ \dfrac{\partial \dot{\gamma}^s}{\partial \overline{\sigma}} = \dfrac{\partial \dot{\gamma}^s}{\partial \tau^s} \underline{\beta}^s = n \exp\left(-\dfrac{T_A}{T}\right) \dfrac{1}{\tau_h^F} \left[\dfrac{|\tau^s|}{\tau_h^F}\right]^{n-1} \underline{\beta}^s, \quad \text{car} \quad \dfrac{\partial |\tau^s|}{\partial \tau^s} = \operatorname{sgn}(\tau^s) \end{array}\right.$$

$$\left\{\begin{array}{l} \dfrac{\partial \Delta \underline{\underline{E}}^p}{\partial \Delta \varrho_f} = \Delta t \sum\limits_s \dfrac{\partial \dot{\gamma}^s}{\partial \Delta \varrho_f} \underline{\beta}^s, \\ \dfrac{\partial \dot{\gamma}^s}{\partial \Delta \varrho_f} = \dfrac{\partial \dot{\gamma}^s}{\partial \varrho_f^{t+\theta\,\Delta t}} \dfrac{\partial \varrho_f^{t+\theta\,\Delta t}}{\partial \Delta \varrho_f} = \theta \dfrac{\partial \dot{\gamma}^s}{\partial \varrho_f^{t+\theta\,\Delta t}}, \\ \dfrac{\partial \dot{\gamma}^s}{\partial \varrho_f^{t+\theta\,\Delta t}} = \dfrac{\partial \dot{\gamma}^s}{\partial \tau_h^F} \dfrac{\partial \tau_h^F}{\partial \varrho_f^{t+\theta\,\Delta t}}, \\ \dfrac{\partial \dot{\gamma}^s}{\partial \tau_h^F} = -n \exp\left(-\dfrac{T_A}{T}\right) \dfrac{\tau^s}{{\tau_h^F}^2} \left(\dfrac{|\tau^s|}{\tau_h^F}\right)^{n-1}, \\ \dfrac{\partial \tau_h^F}{\partial \varrho_f^{t+\theta\,\Delta t}} = a_F \dfrac{1}{2} \dfrac{1}{\sqrt{\varrho_f}} \end{array}\right.$$

On écrit :

$$\left\{\begin{array}{l} \varrho_f = (\varrho_{f_0} - 1)\, X + 1 \quad \text{avec} \quad X = \exp\left(-\left(C_1 \sum\limits_{s\in\mathcal{F}_1} |\gamma^s| + C_2 \sum\limits_{s\in\mathcal{F}_2} |\gamma^s|\right)\right), \\ \Delta X = X\left(\exp\left(-\left(C_1 \sum\limits_{s\in\mathcal{F}_1} \Delta|\gamma^s| + C_2 \sum\limits_{s\in\mathcal{F}_2} \Delta|\gamma^s|\right)\right) - 1\right) \quad \text{avec} \quad X = \dfrac{\varrho_f - 1}{\varrho_{f0} - 1}, \\ \Gamma = \exp\left(-\left(C_1 \sum\limits_{s\in\mathcal{F}_1} \Delta|\gamma^s| + C_2 \sum\limits_{s\in\mathcal{F}_2} \Delta|\gamma^s|\right)\right) - 1 \end{array}\right.$$

Les dérivées de f^{ϱ} sont :

$$\left\{\begin{array}{l} \dfrac{\partial f^{\varrho}}{\partial \overline{\sigma}} = -(\varrho_f - 1) \dfrac{\partial \Gamma}{\partial \overline{\sigma}}, \\ \dfrac{\partial \Gamma}{\partial \overline{\sigma}} = -\Delta t \left(C_1 \sum\limits_{s\in\mathcal{F}_1} \dfrac{\partial |\dot{\gamma}^s|}{\partial \overline{\sigma}} + C_2 \sum\limits_{s\in\mathcal{F}_2} \dfrac{\partial |\dot{\gamma}^s|}{\partial \overline{\sigma}}\right)(\Gamma + 1), \\ \dfrac{\partial |\dot{\gamma}^s|}{\partial \overline{\sigma}} = \dfrac{\partial |\dot{\gamma}^s|}{\partial \dot{\gamma}^s} \dfrac{\partial \dot{\gamma}^s}{\partial \overline{\sigma}} = \operatorname{sgn}(\dot{\gamma}^s) \dfrac{\partial \dot{\gamma}^s}{\partial \overline{\sigma}} \end{array}\right.$$

$$\left\{\begin{array}{l} \dfrac{\partial f^{\varrho}}{\partial \Delta \varrho_f} = 1 - (\varrho_f - 1) \dfrac{\partial \Gamma}{\partial \Delta \varrho_f}, \\ \dfrac{\partial \Gamma}{\partial \Delta \varrho_f} = \theta \dfrac{\partial \Gamma}{\partial \varrho_f}, \\ \dfrac{\partial \Gamma}{\partial \varrho_f} = -\Delta t \left(C_1 \sum\limits_{s\in\mathcal{F}_1} \dfrac{\partial |\dot{\gamma}^s|}{\partial \varrho_f} + C_2 \sum\limits_{s\in\mathcal{F}_2} \dfrac{\partial |\dot{\gamma}^s|}{\partial \varrho_f}\right)(\Gamma + 1) \end{array}\right.$$

D.4 Nye + Écrouissage (ANAE)

D.4.1 Modèle

La densité scalaire des GNDs est calculée sur TMFFT par projection du tenseur de Nye sur les systèmes de glissement :

$$\begin{aligned}\underline{\alpha} &= -\mathbf{rot}(\underline{E}^p),\\ \rho_G^s &= \Pi^s(\underline{\alpha}) \quad \text{avec} \quad \underline{\alpha} = b\sum_s \rho_c^s\, \boldsymbol{m}^s \otimes (\boldsymbol{n}^s \wedge \boldsymbol{m}^s).\end{aligned}$$

Pour prendre en compte la présence de GNDs dans le modèle, il suffit de modifier $\underline{E}^p$ dans le modèle SNAE ainsi :

$$\dot{\underline{E}}^p = \sum_s \left(1 + \frac{|\rho_G^s|}{\rho_m^s}\right) \dot{\gamma}^s\, \underline{\beta}^s. \tag{D.2}$$

D.4.2 Discrétisation

La même discrétisation dans le modèle SNSE avec la correction prise en compte dans l'équation (D.2).

Bibliographie

[1] A. Acharya. A model of crystal plasticity based on the theory of continuously distributed dislocations. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 49(4) :761–784, 2001.

[2] A. Acharya. Driving forces and boundary conditions in continuum dislocation mechanics. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 459(2034) :1343–1363, 2003.

[3] A. Acharya et J. Bassani. Lattice incompatibility and a gradient theory of crystal plasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 48 :1565–1595, 2000.

[4] A. Acharya et A. Roy. Size effects and idealized dislocation microstructure at small scales : Predictions of a Phenomenological model of Mesoscopic Field Dislocation Mechanics : Part I. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 54 :1687–1710, 2006.

[5] A. Alamo, J. M. Lefebvre, et J. Soullard. Deformation plastique du bioxyde d'uranium : Observation des sous-structures de dislocations. *Journal of Nuclear Materials*, 75(1) :145–153, 1978.

[6] P. M. Anderson, J. P. Hirth, et J. Lothe. *Theory of dislocations*. Cambridge University Press, Cambridge, 3rd édition, 2017.

[7] K. H. G. Ashbee. Stacking faults in uranium dioxide. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, 1964.

[8] M. F. Ashby. The deformation of plastically non-homogeneous materials. *The Philosophical Magazine : A Journal of Theoretical Experimental and Applied Physics*, 21(170) :399–424, 1970.

[9] M. F. Ashby. A first report on deformation-mechanism maps. *Acta Metallurgica*, 20(7) :887–897, 1972.

[10] H. Bailly, D. Ménessier, et C. Prunier. *Le combustible nucléaire des réacteurs à eau sous pression et des réacteurs à neutrons rapides : conception et comportement*. Eyrolles, Paris, 1996.

[11] J. Bardeen et C. Herring. Diffusion in Alloys and the Kirkendall Effect. In W. Shockley, J. H. Hollomon, R. Maurer, et F. Seitz, éditeurs, *Imperfections in Nearly Perfect Crystals*, pages 261–288, Pocono Manor, 1952. Wiley and Sons.

[12] D. Baron, M. Kinoshita, P. Thevenin, et R. Largenton. Discussion about HBS transformation in high burn-up fuels. *Nuclear Engineering and technology*, 41(2) :199–214, 2009.

[13] M. Ben Saada, N. Gey, B. Beausir, X. Iltis, H. Mansour, et N. Maloufi. Sub-boundaries induced by dislocational creep in uranium dioxide analyzed by advanced diffraction and channeling electron microscopy. *Materials Characterization*, 133 :112–121, 2017.

[14] M. ben Saada. *Étude du comportement visco-plastique du dioxyde d'uranium : quantification par analyse EBSD et ECCI des effets liés aux conditions de sollicitation et à la microstructure initiale.* Thèse, Université de Lorraine, 2017.

[15] B. A. Bilby, R. Bullough, et E. Smith. Continuous Distributions of Dislocations : A New Application of the Methods of Non-Riemannian Geometry. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, 231(1185) :263–263–273, 1955.

[16] H. Blank et S. Amelinckx. Some Preliminary Results on Defects in Irradiated UO $_2$ Single Crystals as Revealed by Transmission Electron Microscopy. *Journal of Applied Physics*, 34(8) :2200–2209, 1963.

[17] P. E. Bohaboy, R. R. Asamoto, et A. E. Conti. Compressive creep characteristics of stoichiometric uranium dioxide. Technical report, General Electric Co., Sunnyvale, Calif. Breeder Reactor Development Operation, 1969.

[18] M. Bornert, T. Bretheau, et P. Gilormini, éditeurs. *Homogénéisation en mécanique des matériaux*, volume 1. HERMES Science Publications, 2001.

[19] O. G. Brandt et C. T. Walker. Ultrasonic Attenuation and Elastic Constants for Uranium Dioxide. *Physical Review*, 170(2) :528–541, 1968.

[20] J. M. Burgers. Some considerations on the fields of stress connected with dislocations in a regular crystal lattice. I. *Proceedings KNAW*, 42(4) :293–325, 1939.

[21] J. M. Burgers. Some considerations on the fields of stress connected with dislocations in a regular crystal lattice. II. *Proceedings KNAW*, 42(5) :378–399, 1939.

[22] J. F. Byron. Yield and flow of polycrystalline uranium dioxide. *Journal of Nuclear Materials*, 27(1) :48–53, 1968.

[23] J. F. Byron. The yield and flow of single crystals of uranium dioxide. *Journal of Nuclear Materials*, 28(1) :110–114, 1968.

[24] É. Castelier. Comparaison des solveurs AMITEX_fftp et TMFFT et expression de besoin pour la plateforme combustible PLEIADES. Note Technique DEC/SESC/LM2C 18-012, CEA, 2018.

[25] É. Castelier, T. Helfer, et J. Pacull. Spécifications d'un code de thermomécanique avec résolution par transformées de Fourier rapides. Note Technique DEC/SESC/LSC 09-045, CEA, 2009.

[26] K. Clausen, W. Hayes, M. T. Hutchings, J. E. Macdonald, R. Osborn, et P. Schnabel. Investigation of oxygen disorder, thermal parameters, lattice vibrations and elastic constants of UO2 and ThO2 at temperatures up to 2 930 K. *Revue de Physique Appliquée*, 19(9) :719–722, 1984.

[27] R. L. Coble. A model for boundary diffusion controlled creep in polycrystalline materials. *Journal of applied physics*, 34(6) :1679–1682, 1963.

[28] A. Cottrell. *The mechanical properties of matter.* Wiley, London ; New York, 1964.

[29] G. Daveau. *Interaction dislocations - joints de grains en déformation plastique monotone : étude expérimentale et modélisations numériques.* Theses, Ecole Centrale Paris, 2012.

[30] C. Decolon. *Structures composites.* Hermes, Paris, 2000.

[31] R. deWit. The direction of the force on a dislocation and the sign of the Burgers vector. *Acta Metallurgica*, 13(11) :1210–1211, 1965.

[32] K. S. Djaka. *Développement et applications d'une technique de modélisation micromécanique de type "FFT" couplée à la mécanique des champs de dislocations*. Thèse, Lorraine, Metz, 2016.

[33] E. Eser, H. Koc, M. Gokbulut, et G. Gursoy. Estimations of heat capacities for actinide dioxide : UO2, NpO2, ThO2, AND PuO2. *Nuclear Engineering and Technology*, 46(6) :863–868, 2014.

[34] Y. Estrin et L. P. Kubin. Local strain hardening and nonuniformity of plastic deformation. *Acta Metallurgica*, 34(12) :2455–2464, 1986.

[35] A. G. Evans et R. W. Davidge. The strength and fracture of stoichiometric polycrystalline UO2. *Journal of Nuclear Materials*, 33(3) :249–260, 1969.

[36] D. Eyre et G. Milton. A fast numerical scheme for computing the response of composites using grid refinement. *The European Physical Journal of Applied Physics*, 6 :41–47, 1999.

[37] P. Franciosi, M. Berveiller, et A. Zaoui. Latent hardening in copper and aluminium single crystals. *Acta Metallurgica*, 28(3) :273–283, 1980.

[38] F. C. Frank et W. T. Read. Multiplication Processes for Slow Moving Dislocations. *Physical Review*, 79(4) :722–723, 1950.

[39] C. Fressengeas. *Mécanique des champs de dislocations*. Lavoisier, 2010.

[40] C. Fressengeas. *Mechanics of Dislocation Fields*. Wiley, 2017.

[41] I. J. Fritz. Elastic properties of UO2 at high pressure. *Journal of Applied Physics*, 47(10) :4353–4358, 1976.

[42] H. J. Frost et M. F. Ashby. *Deformation mechanism maps : the plasticity and creep of metals and ceramics*. Pergamon press, 1982.

[43] Y. Gao et A. C. F. Cocks. Thermodynamic variational approach for climb of an edge dislocation. *Acta Mechanica Solida Sinica*, 22(5) :426–435, 2009.

[44] J.-M. Gatt. Comportement thermomécanique du combustible sous irradiation. Note Technique DEC/SESC/LLCC 04-005 - indice 0, CEA, 2004.

[45] K. Gbemou. *Modélisation de l'interaction des coeurs de dislocations et des joints de grains*. PhD Thesis, Université de Lorraine, 2017.

[46] M. G. D. Geers, M. Cottura, B. Appolaire, E. P. Busso, S. Forest, et A. Villani. Coupled glide-climb diffusion-enhanced crystal plasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 70 :136–153, 2014.

[47] I. M. Gelfand et G. E. Shilov. *Generalized Functions : Properties And Operations*, volume 1. Academic Press, New York and London, 1964.

[48] Y. Guerin. Etude par compression a hautes temperatures de la deformation plastique du bioxyde d'uranium polycristallin. *Journal of Nuclear Materials*, 56(1) :61–75, 1975.

[49] P. Guyot et J. E. Dorn. A critical review of the peierls mechanism. *Canadian Journal of Physics*, 45(2) :983–1016, 1967.

[50] E. O. Hall. The Deformation and Ageing of Mild Steel : III Discussion of Results. *Proceedings of the Physical Society. Section B*, 64(9) :747–753, 1951.

[51] L. F. He, J. Pakarinen, M. A. Kirk, J. Gan, A. T. Nelson, X.-M. Bai, A. El-Azab, et T. R. Allen. Microstructure evolution in Xe-irradiated UO2 at room temperature. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B : Beam Interactions with Materials and Atoms*, 330 :55–60, 2014.

[52] L.-F. He, M. Gupta, C. A. Yablinsky, J. Gan, M. A. Kirk, X.-M. Bai, J. Pakarinen, et T. R. Allen. In situ TEM observation of dislocation evolution in Kr-irradiated UO2 single crystal. *Journal of Nuclear Materials*, 443(1) :71–77, 2013.

[53] T. Helfer. MFront, a code generation tool dedicated to material knowledge.

[54] T. Helfer, B. Michel, J.-M. Proix, M. Salvo, J. Sercombe, et M. Casella. Introducing the open-source mfront code generator : Application to mechanical behaviours and material knowledge management within the PLEIADES fuel element modelling platform. *Computers & Mathematics with Applications*, 70(5) :994–1023, 2015.

[55] J. Henney et J. W. S. Jones. Surface-diffusion studies on UO 2 and MgO. *Journal of Materials Science*, 3(2) :158–164, 1968.

[56] J. E. Hilliard, J. M. Lommel, J. B. Hudson, D. F. Stein, et J. D. Livingston. Effect of annealing under high pressures on dislocations in lithium fluoride, aluminum, copper and iron. *Acta Metallurgica*, 9(8) :787–794, 1961.

[57] P. B. Hirsch, R. W. Horne, et M. J. Whelan. LXVIII. Direct observations of the arrangement and motion of dislocations in aluminium. *The Philosophical Magazine : A Journal of Theoretical Experimental and Applied Physics*, 1(7) :677–684, 1956.

[58] D. Hull et D. Bacon. *Introduction to Dislocations*. Elsevier, fifth édition, 2011.

[59] M. T. Hutchings. High-temperature studies of UO2 and ThO2 using neutron scattering techniques. *Journal of the Chemical Society, Faraday Transactions 2*, 83(7) :1083, 1987.

[60] N. Igata et K. Domoto. Fracture stress and elastic modulus of uranium dioxide including excess oxygen. *Journal of Nuclear Materials*, 45(4) :317–322, 1973.

[61] J. J. Jonas, C. M. Sellars, et W. J. M. Tegart. Strength and structure under hot-working conditions. *Metallurgical Reviews*, 14(1) :1–24, 1969.

[62] J. Jonnet. *A contribution to the understanding of the high burn-up structure formation in nuclear fuels*. PhD Thesis, Institut National Polytechnique de Lorraine, 2007.

[63] D. Jädernäs et P. Tejland. Electron Backscatter Diffraction of Nuclear Materials. *Microscopy and Microanalysis*, 20(S3) :1804–1805, 2014.

[64] R. Keller, T. Mitchell, et A. H. Heuer. Plastic deformation in nonstoichiometric UO2 + x single crystals—II. Deformation at high temperatures. *Acta Metallurgica*, 36(4) :1073–1083, 1988.

[65] D. B. Knorr, R. M. Cannon, et R. L. Coble. Overview no. 84 : An analysis of diffusion and diffusional creep in stoichiometric and hyperstoichiometric uranium dioxide. *Acta Metallurgica*, 37(8) :2103–2123, 1989.

[66] U. F. Kocks. Laws for Work-Hardening and Low-Temperature Creep. *Journal of Engineering Materials and Technology*, 98(1) :76–85, 1976.

[67] U. F. Kocks, K. UF, A. AS, et A. MF. Thermodynamics and kinetics of slip. *Materials Science*, 1975.

[68] A. Kosevitch. Crystal Dislocations and the Theory of Elasticity. In *Dislocations in Solids*, volume 1, pages 33–141. North-Holland, Amsterdam, 1979.

[69] E. Kröner. Allgemeine Kontinuumstheorie der Versetzungen und Eigenspannungen. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 4(1) :273–334, 1959.

[70] E. Kröner. Elastic moduli of perfectly disordered composite materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 15(5) :319–329, 1967.

[71] E. Kröner. Self-consistent scheme and graded disorder in polycrystal elasticity. *Journal of Physics F : Metal Physics*, 8(11) :2261–2267, 1978.

[72] E. Kröner. Continuum theory of defects. In R. Balian, M. Kléman, et J. P. Poirier, éditeurs, *Physics of defects*, pages 215–315, Les Houches, session XXXV, 1981. North-Holland.

[73] E. Kröner et G. Rieder. Kontinuumstheorie der Versetzungen. *Zeitschrift für Physik*, 145(4) :424–429, 1956.

[74] L. Kubin, B. Devincre, et T. Hoc. Modeling dislocation storage rates and mean free paths in face-centered cubic crystals. *Acta Materialia*, 56(20) :6040–6049, 2008.

[75] L. P. Kubin, C. Fressengeas, et G. Ananthakrishna. Chapter 57 Collective behaviour of dislocations in plasticity. In F. R. N. Nabarro et M. S. Duesbery, éditeurs, *Dislocations in Solids*, volume 11, pages 101–192. Elsevier, 2002.

[76] L. Landau, E. Lifchitz, et A. Kossévitch. *Théorie de l'élasticité*. Numéro 7 in Physique théorique. Editions Mir, Moscou, 2ème édition, 1990.

[77] J. Lefebvre. *Contribution à l'étude de la déformation plastique d'une céramique de structure fluorite : le bioxyde d'uranium*. Thèse, Faculté des sciences de Poitiers, 1976.

[78] E. M. Lifshitz, A. M. Kosevich, et L. P. Pitaevskii. *Theory of Elasticity*. Numéro 7 in Course of theoretical Physics. Butterworth-Heinemann, Oxford, third édition, 1986.

[79] J. Lothe et J. P. Hirth. Dislocation Climb Forces. *Journal of Applied Physics*, 38(2) :845–848, 1967.

[80] A. E. H. Love. *A treatise on the mathematical theory of elasticity*. Cambridge University Press, Cambridge, 3rd édition, 1920.

[81] R. Madec, B. Devincre, et L. P. Kubin. From Dislocation Junctions to Forest Hardening. *Physical Review Letters*, 89(25) :255508, 2002.

[82] P. S. Maiya. Surface diffusion, surface free energy, and grain-boundary free energy of uranium dioxide. *Journal of Nuclear Materials*, 40(1) :57–65, 1971.

[83] M. O. Marlowe et A. I. Kaznoff. Tracer study of the surface diffusivity of UO2. *Journal of Nuclear Materials*, 25(3) :328–333, 1968.

[84] D. Martin. The elastic constants of polycrystalline U02 and (U, Pu) mixed oxides : a review and recommendations. *High Temperatures-High Pressures*, 21(1) :13–24, 1989.

[85] H. Matzke. Atomic transport properties in UO 2 and mixed oxides (U, Pu) O 2. *Journal of the Chemical Society, Faraday Transactions 2 : Molecular and Chemical Physics*, 83(7) :1121–1142, 1987.

[86] H. Mecking et U. F. Kocks. Kinetics of flow and strain-hardening. *Acta Metallurgica*, 29(11) :1865–1875, 1981.

[87] H. Mehrer. *Diffusion in Solids*. Springer, Berlin, Heidelberg, 2007.

[88] J. W. Menter et F. P. Bowden. The direct study by electron microscopy of crystal lattices and their imperfections. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, 236(1204) :119–135, 1956.

[89] J.-C. Michel, H. Moulinec, et P. Suquet. Effective properties of composite materials with periodic microstructure : a computational approach. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 172 :109–143, 1999.

[90] J.-C. Michel, H. Moulinec, et P. Suquet. A computational method based on augmented Lagrangians and Fast Fourier Transforms for composites with high contrast. *Comput. Model. Eng. Sci.*, 1(2) :79–88, 2000.

[91] F. A. Mohamed et M. S. Soliman. On the creep behavior of uranium dioxide. *Materials Science and Engineering*, 53(2) :185–190, 1982.

[92] V. Monchiet et G. Bonnet. A polarization based FFT iterative scheme for computing the effective properties of elastic composites with arbitrary contrast. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 89(11) :1419–1436, 2012.

[93] Y. Monerie et J.-M. Gatt. Overall viscoplastic behavior of non-irradiated porous nuclear ceramics. *Mechanics of materials*, 38(7) :608–619, 2006.

[94] G. L. Montet. Integral Methods in the Calculation of Correlation Factors in Diffusion. *Physical Review B*, 7(2) :650–662, 1973.

[95] D. Mordehai, E. Clouet, M. Fivel, et M. Verdier. Introducing dislocation climb by bulk diffusion in discrete dislocation dynamics. *Philosophical Magazine*, 88(6) :899–925, 2008.

[96] N. F. Mott. The Mechanical Properties of Metals. *Proceedings of the Physical Society. Section B*, 64(9) :729, 1951.

[97] H. Moulinec et F. Silva. Comparison of three accelerated FFT-based schemes for computing the mechanical response of composite materials. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 97(13) :960–985, 2014.

[98] H. Moulinec et P. Suquet. A fast numerical method for computing the linear and nonlinear mechanical properties of composites. *C. R. Acad. Sci. Série II*, 318 :1417–1423, 1994.

[99] H. Moulinec et P. Suquet. A numerical method for computing the overall response of nonlinear composites with complex microstructure. *Computer Methods in applied Mechanics and Engineering*, 157 :69–94, 1998.

[100] S. Murphy, E. Jay, et R. Grimes. Pipe diffusion at dislocations in UO2. *Journal of Nuclear Materials*, 447 :143–149, 2014.

[101] J. Møller. *Lectures on random Voronoi tessellations*. Numéro 87 in Lecture notes in statistics. Springer-Verlag, New York, 1994.

[102] F. R. N. Nabarro. Report of a Conference on the Strength of Solids. *The Physical Society, London*, 75, 1948.

[103] F. R. N. Nabarro. *Theory of crystal dislocations / by F.R.N. Nabarro*. Clarendon P.. Oxford, 1967.

[104] J. S. Nadeau. Dependence of Flow Stress on Nonstoichiometry in Oxygen-Rich Uranium Dioxide at High Temperatures. *Journal of the American Ceramic Society*, 52(1) :1–7, 1969.

[105] K. Nogita et K. Une. Irradiation-induced recrystallization in high burnup UO2 fuel. *Journal of Nuclear Materials*, 226(3) :302–310, 1995.

[106] J. Nye. Some geometrical relations in dislocated crystals. *Acta Metallurgica*, 1(2) :153–162, 1953.

[107] C. Onofri. *Etude des défauts étendus induits par irradiation dans UO2 par microscopie électronique en transmission*. Thèse, Université Paul Sabatier, Toulouse, 2016.

[108] E. Orowan. Zur Kristallplastizität. II : Die dynamische Auffassung der Kristallplastizität. *Zeitschrift für Physik*, 89(9-10) :614–614–633, 1934.

[109] C. Otter. fluage de l'oxyde d'uranium en pile et hors pile. Note Technique, CEA/SEAMA, 1975.

[110] J. Pacull. *Modèle numérique micro-mécanique d'agrégat polycristallin pour le comportement des combustibles oxydes*. PhD Thesis, Université de Provence-Aix-Marseille I, 2011.

[111] W. Pantleon. Resolving the geometrically necessary dislocation content by conventional electron backscattering diffraction. *Scripta Materialia*, 58(11) :994–997, 2008.

[112] J.-B. Parise. *Etude des mécanismes de déformation viscoplastiques du dioxyde d'uranium polycristallin au voisinage de la stoechiométrie : influence de l'activité d'oxygène et de la microstructure*. These de doctorat, Limoges, 2021.

[113] M. Peach et J. S. Koehler. The Forces Exerted on Dislocations and the Stress Fields Produced by Them. *Physical Review*, 80(3) :436–439, 1950.

[114] N. J. Petch. The cleavage strength of polycrystals. *Journal of the iron and steel institute*, 174 :25–28, 1953.

[115] J.-P. Poirier. *Plasticité à haute température des solides cristallins*. Eyrolles, Paris, 1976.

[116] M. Polanyi. Über eine Art Gitterstörung, die einen Kristall plastisch machen könnte. *Zeitschrift für Physik*, 89(9) :660–664, 1934.

[117] L. Portelette. *Analyse des mécanismes de glissement des dislocations dans l'UO2 à l'aide de la modélisation multi-échelles comparée à l'expérience*. Theses, Aix Marseille Université (AMU), 2018.

[118] L. Portelette, J. Amodeo, B. Michel, et R. Madec. Athermal dislocation strengthening in UO2. *Journal of Nuclear Materials*, 538 :152157, 2020.

[119] L. Priester. "Dislocation–interface" interaction — stress accommodation processes at interfaces. *Materials Science and Engineering : A*, 309-310 :430–439, 2001.

[120] R. Raj et M. F. Ashby. On grain boundary sliding and diffusional creep. *Metallurgical transactions*, 2(4) :1113–1127, 1971.

[121] I. Ramière et T. Helfer. Iterative residual-based vector methods to accelerate fixed point iterations. *Computers & Mathematics with Applications*, 70(9) :2210–2226, 2015.

[122] E. J. Rapperport et A. M. Huntress. Deformation modes of single crystal uranium dioxide from 700 C to 1900 C. Technical Report NMI-1242, Nuclear Metals, Inc., Concord, Mass., 1960.

[123] I. L. F. Ray, H. Thiele, et H. Matzke. Transmission electron microscopy study of fission product behaviour in high burnup UO2. *Journal of Nuclear Materials*, 188 :90–95, 1992.

[124] T. Richeton, L. Le, T. Chauve, M. Bernacki, S. Berbenni, et M. Montagnat. Modelling the transport of geometrically necessary dislocations on slip systems : application to single- and multi-crystals of ice. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 25(2) :025010, 2017.

[125] T. Richeton, G. F. Wang, et C. Fressengeas. Continuity constraints at interfaces and their consequences on the work hardening of metal–matrix composites. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 59(10) :2023–2043, 2011.

[126] G. Saada et J. Washburn. Interaction between prismatic and glissile dislocations. *Acta Metal*, 1962.

[127] C. Sabathier, L. Vincent, P. Garcia, F. Garrido, G. Carlot, L. Thome, P. Martin, et C. Valot. In situ TEM study of temperature-induced fission product precipitation in UO2. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B : Beam Interactions with Materials and Atoms*, 266(12-13) :3027–3032, 2008.

[128] F. Sauter. *Comportement viscoplastique du dioxyde d'uranium à haute température*. PhD Thesis, Institut National Polytechnique de Lorraine, 2001.

[129] P. Sawbridge et E. Sykes. Dislocation glide in UO 2 single crystals at 1600°K. *Philosophical Magazine : A Journal of Theoretical Experimental and Applied Physics*, 24(187) :33–53, 1971.

[130] G. Schoeck et R. Frydman. The contribution of the dislocation forest to the flow stress. *Physica status solidi (b)*, 53(2) :661–673, 1972.

[131] L. Schwartz. *Théorie des distributions*. Hermann, 1997.

[132] R. Scott, A. R. Hall, et J. Williams. The plastic deformation of uranium oxides above 800° C. *Journal of Nuclear Materials*, 1 :39–48, 1959.

[133] C. M. Sellars et W. J. McTegart. On the mechanism of hot deformation. *Acta Metallurgica*, 14(9) :1136–1138, 1966.

[134] M. S. Seltzer, A. H. Clauer, et B. A. Wilcox. The influence of stoichiometry on compression creep of polycrystalline UO2+x. *Journal of Nuclear Materials*, 44(3) :331–336, 1972.

[135] M. S. Seltzer, A. H. Clauer, et B. A. Wilcox. The influence of stoichiometry on compression creep of uranium dioxide single crystals. *Journal of Nuclear Materials*, 44(1) :43–56, 1972.

[136] J. G. Sevillano. Patterns in heavily deformed metals. *Physica Scripta*, T49B :405–411, 1993.

[137] M. Sladkoff, F. Huet, et A. Mocellin. Recommandation pour la loi de fluage stationnaire de UO2 non dopé : mise à jour de fin 1998 intégrant les études de fluage sur les lots L209609 et L209619. Note Technique, CEA, 1999.

[138] T. Sonoda, M. Kinoshita, I. L. F. Ray, T. Wiss, H. Thiele, D. Pellottiero, V. V. Rondinella, et H. Matzke. Transmission electron microscopy observation on irradiation-induced microstructural evolution in high burn-up UO2 disk fuel. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B : Beam Interactions with Materials and Atoms*, 191(1) :622–628, 2002.

[139] J. Soulacroix. *Approche micromécanique du comportement du combustible dioxyde d'uranium*. Thèse, ParisTech, 2014.

[140] J. Soullard. *Contribution à l'étude des défauts de structure dans le bioxyde d'uranium*. PhD Thesis, CEN Saclay, 1977.

[141] V. Taupin. *Incompatibilité du réseau cristallin et organisation collective des dislocations*. Thèse, Lorraine, Metz, 2007.

[142] G. I. Taylor. The mechanism of plastic deformation of crystals. Part I.—Theoretical. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, 145(855) :362–387, 1934.

[143] A. Tikhonov et V. Arsénine. *Méthodes de résolutions des problèmes mal posés*. Éditions Mir, Moscou, 1976.

[144] S. Varadhan, A. J. Beaudoin, A. Acharya, et C. Fressengeas. Dislocation transport using an explicit Galerkin-Least Squares formulation. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, 14 :1245–1270, 2006.

[145] V. Volterra. Sur l'équilibre des corps élastiques multiplement connexes. *Annales scientifiques de l'École normale supérieure*, 24 :401–517, 1907.

[146] J. B. Wachtman, M. L. Wheat, H. J. Anderson, et J. L. Bates. Elastic constants of single crystal UO2 at 25° C. *Journal of Nuclear Materials*, 16(1) :39–41, 1965.

[147] F. W. Warner. *Foundations of Differentiable Manifolds and Lie Groups*, volume 94 de *Graduate Texts in Mathematics*. Springer New York, New York, 1983.

[148] J. Weertman. Theory of Steady-State Creep Based on Dislocation Climb. *Journal of Applied Physics*, 26(10) :1213–1217, 1955.

[149] J. Weertman. Steady-State Creep through Dislocation Climb. *Journal of Applied Physics*, 28(3) :362, 1957.

[150] J. Weertman. The Peach–Koehler equation for the force on a dislocation modified for hydrostatic pressure. *The Philosophical Magazine*, 11(114) :1217–1223, 1965.

[151] J. Weertman. Discussion of "Dislocation Climb Forces" by Lothe and Hirth. *Journal of Applied Physics*, 38(12) :4916–4916, 1967.

[152] J. Weertman et J. R. Weertman. High temperature creep of rock and mantle viscosity. *Annual Review of Earth and Planetary Sciences*, 3(1) :293–315, 1975.

[153] A. D. Whapham. Electron microscope observation of the fission-gas bubble distribution in UO2. *Nuclear Applications*, 2(2) :123–130, 1966.

[154] A. D. Whapham et B. E. Sheldon. Radiation damage in uranium dioxide. *The Philosophical Magazine : A Journal of Theoretical Experimental and Applied Physics*, 12(120) :1179–1192, 1965.

[155] B. Willis. Neutron diffraction studies of the actinide oxides I. Uranium dioxide and thorium dioxide at room temperature. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, 274(1356) :122–133, 1963.

[156] F. Willot. Fourier-based schemes for computing the mechanical response of composites with accurate local fields. *Comptes Rendus Mécanique*, 343(3) :232–245, 2015.

[157] H. Wolf. Die Aktivierungsenergie für die Quergleitung aufgespaltener Schraubenversetzungen. *Zeitschrift Naturforschung Teil A*, 15 :180–193, 1960.

[158] R. A. Wolfe et S. F. Kaufman. Mechanical properties of oxide fuels (LSBR/LWB development program). Technical Report WAPD-TM-587, Bettis Atomic Power Lab., Pittsburgh, Pa. (US), 1967.

[159] S. Yuan, M. Huang, Y. Zhu, et Z. Li. A dislocation climb/glide coupled crystal plasticity constitutive model and its finite element implementation. *Mechanics of Materials*, 118 :44–61, 2018.

[160] C. S. Yust et C. J. McHargue. Dislocation substructures in deformed uranium dioxide single crystals. *Journal of Nuclear Materials*, 31(2) :121–137, 1969.

[161] C. S. Yust et C. J. McHargue. Deformation of Hyperstoichiometric UO2 Single Crystals. *Journal of the American Ceramic Society*, 54(12) :628–635, 1971.

[162] C. Zener. *Elasticity and anelasticity of metals*. University of Chicago Press, Chicago, Illinois, 1948.

[163] S. Y. Zhou et D. R. Olander. Tracer surface diffusion on uranium dioxide. *Surface Science*, 136(1) :82–102, 1984.