



Analyse de VER : une idée pour s'affranchir des effets de bords

S. Pascal¹, F. Di Paola^{1,2}, C. Berdin^{2,3}

(1) CEA, DEN, DANS/DM2S/SEMT/LM2S

(2) Laboratoire MSS-Mat, Ecole Centrale Paris

(3) Université Paris-Sud 11 : LEMHE, ICMMO

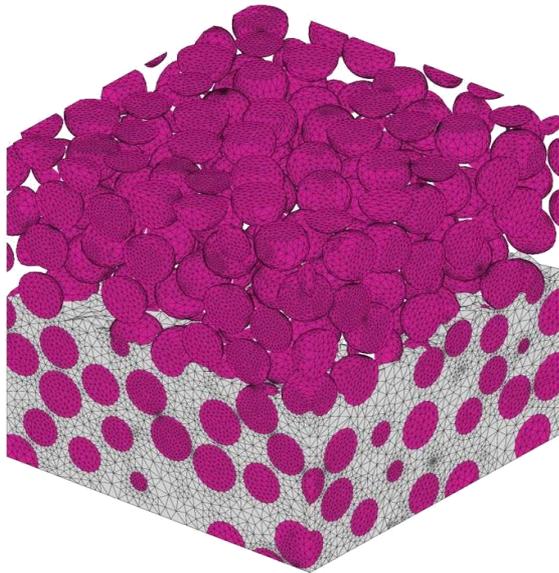
Soutenance : mardi 30 novembre, 14h00, à l'ECP

salle de conférences des laboratoires scientifiques (Porte C - 1er étage)



- **Thèse de F. Di Paola**

« Modélisation multi-échelles du comportement thermo-mécanique d'un combustible à particules »



Échantillon de taille 7D

- **Morphologie combustible**

- inclusions sphériques ($D \sim 1$ mm) / matrice
- distribution spatiale : aléatoire, uniforme
- proportion volumique : 45 %

- **Propriétés thermoélastiques des constituants**

Propriétés	K (GPa)	G (GPa)	λ (W/m/K)	α ($10^{-6}/K$)
Matrice	4,8	4,3	66	5,7
Particules	25,7	14,7	2	8,3

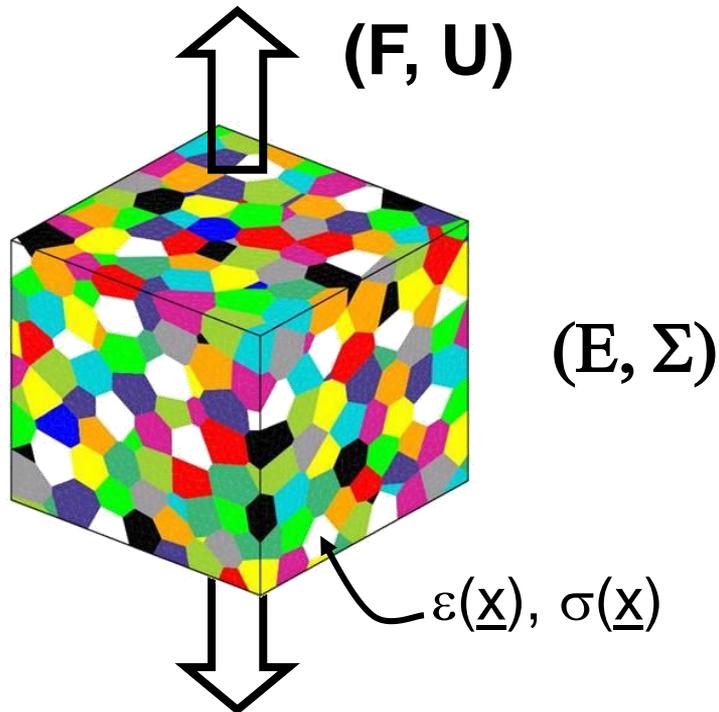
- **Objectif de la thèse**

Caractériser numériquement le comportement thermique et élastique effectif du combustible à particules



- « **Calcul de microstructure** »

Caractériser le **comportement** (thermo)-mécanique **effectif**
d'un **VER** ou d'un **échantillon numérique** de la microstructure d'un matériau



- **Changement d'échelles**

$$\Sigma = f(E) \text{ ou } E = g(\Sigma)$$

avec $E = \langle \varepsilon \rangle_V$, $\Sigma = \langle \sigma \rangle_V$ et $g=f^{-1}$

⇒ quel chargement appliqué ?

- **Essai numérique**

$$F = h(U)$$

⇒ s'affranchir des « effets de bords » ?



- **C.L. « Homogènes au contour »**

$$\underline{u} = \mathbf{E}^0 \cdot \underline{x} \text{ (CLDH)} \quad \text{ou} \quad \underline{t} = \Sigma^0 \cdot \underline{n} \text{ (CLCH)} \quad \text{sur } \partial V$$

⇒ encadrement du comportement effectif mais qui peut être « trop large »

- **C.L. Périodiques**

$$\underline{u} = \mathbf{E}^0 \cdot \underline{x} + \underline{u}^\# \quad \text{avec } \langle \underline{u}^\# \rangle = \underline{0} \quad \text{sur } \partial V$$

⇒ *a priori* la « meilleure » estimation mais CLP pas toujours facile à réaliser

- **C.L. Mixtes Normales⁽¹⁾**

$$u_N = (\mathbf{E}^0 \cdot \underline{x})_N / \underline{t}_T = (\Sigma^0 \cdot \underline{n})_T \quad \text{ou} \quad \underline{u}_T = (\mathbf{E}^0 \cdot \underline{x})_T / t_N = (\Sigma^0 \cdot \underline{n})_N \quad \text{sur } \partial V$$

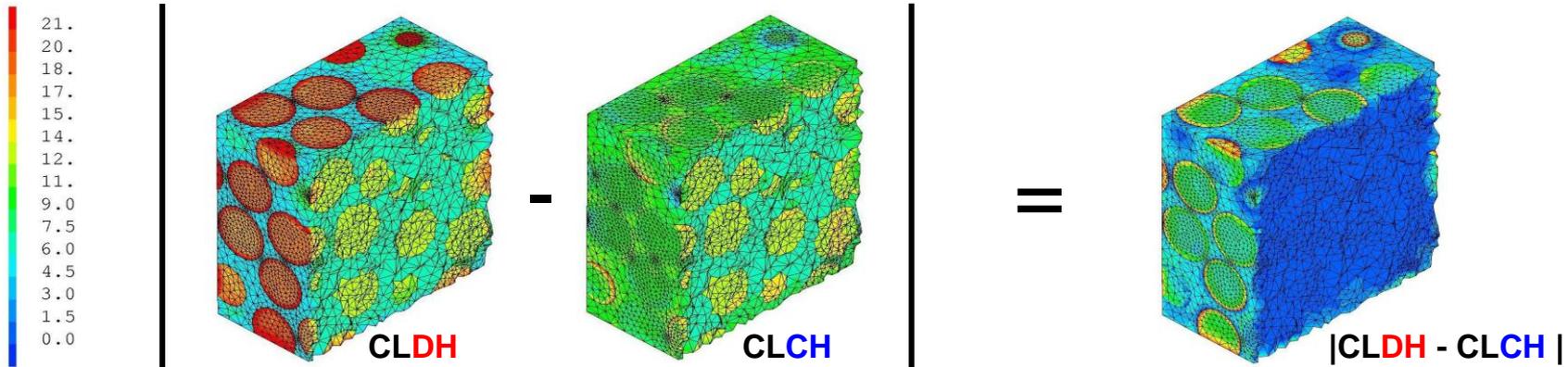
⇒ *a priori* estimation « meilleure » que CLH mais aucune indication sur sa qualité

(1) L. Gélébart, C. Château, M. Bornert, « Conditions aux limites mixtes normales », dans les actes du 19^{ème} Congrès Français de Mécanique, Marseille, août 2009.

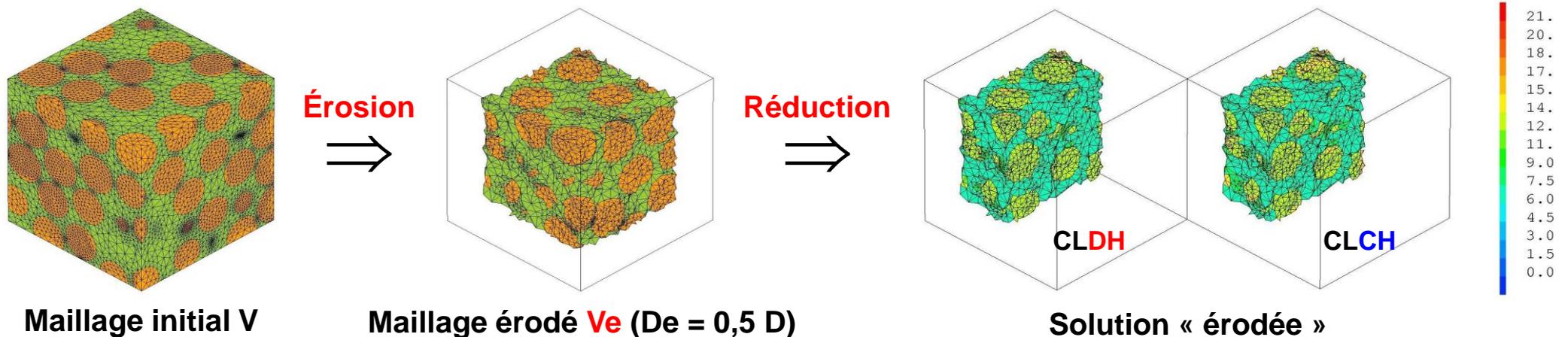


- « Effets de bords »

Exemple : échantillon de taille 4D, chargement hydrostatique ($\langle \sigma^H \rangle_V = 10$ MPa)



- Idée : éroder la solution aux bords ($V_e = V / \{E \in V / \exists P \in E, d(P, \partial V) < D_e\}$)



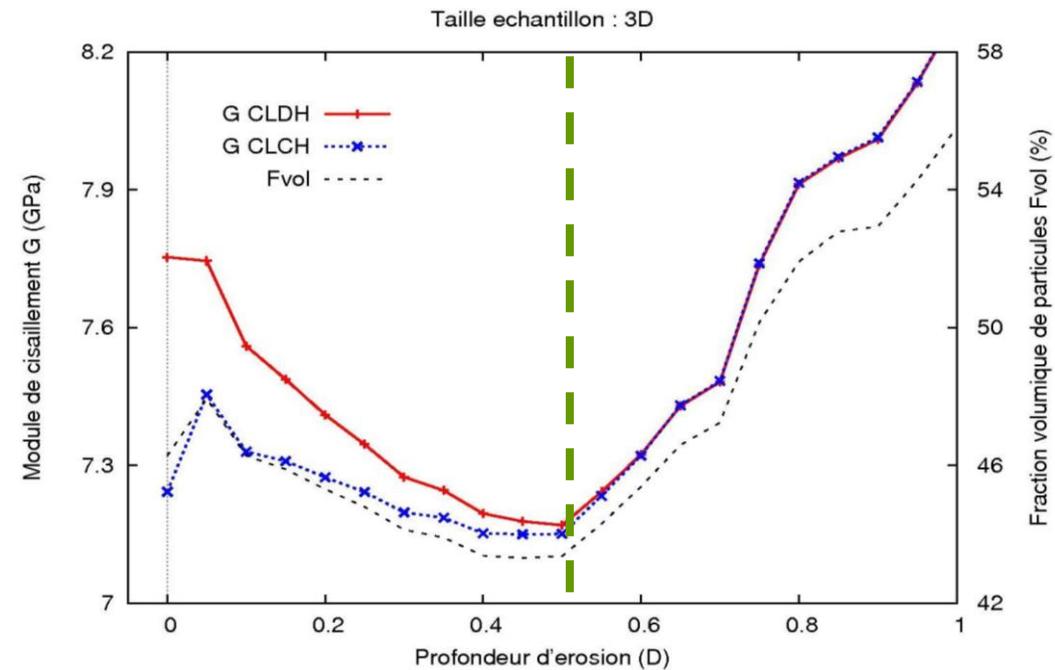
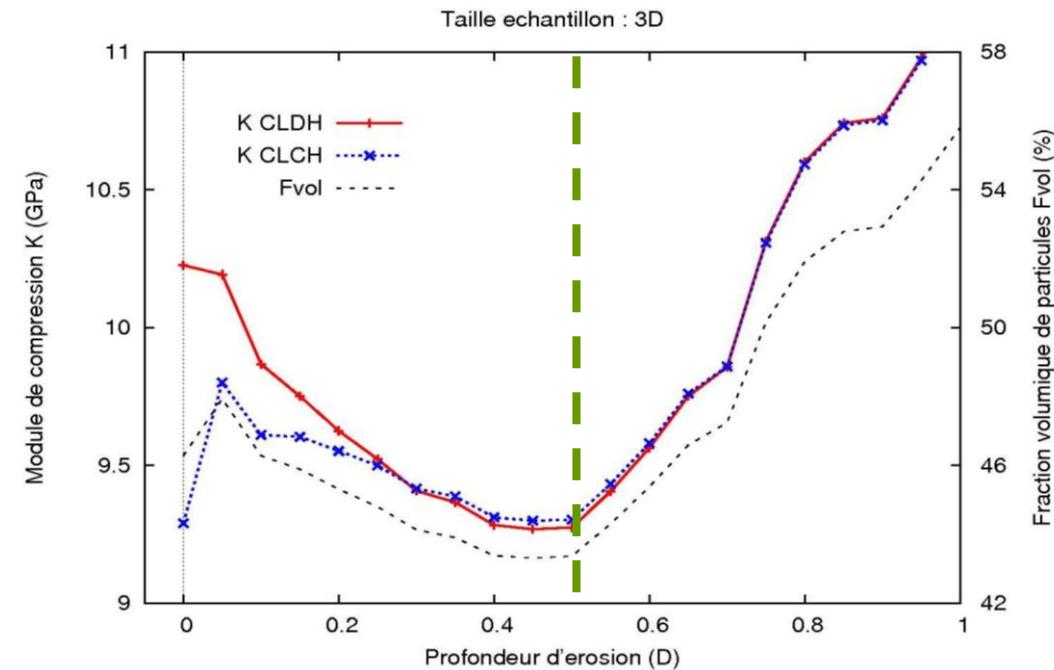


• Rigidités apparentes

$$K^{app} = \frac{1}{3} \frac{tr(\underline{\underline{\Sigma}})}{tr(\underline{\underline{E}})}$$

$$G^{app} = \frac{1}{3} \left(\frac{\Sigma_{xy}}{2E_{xy}} + \frac{\Sigma_{xz}}{2E_{xz}} + \frac{\Sigma_{yz}}{2E_{yz}} \right)$$

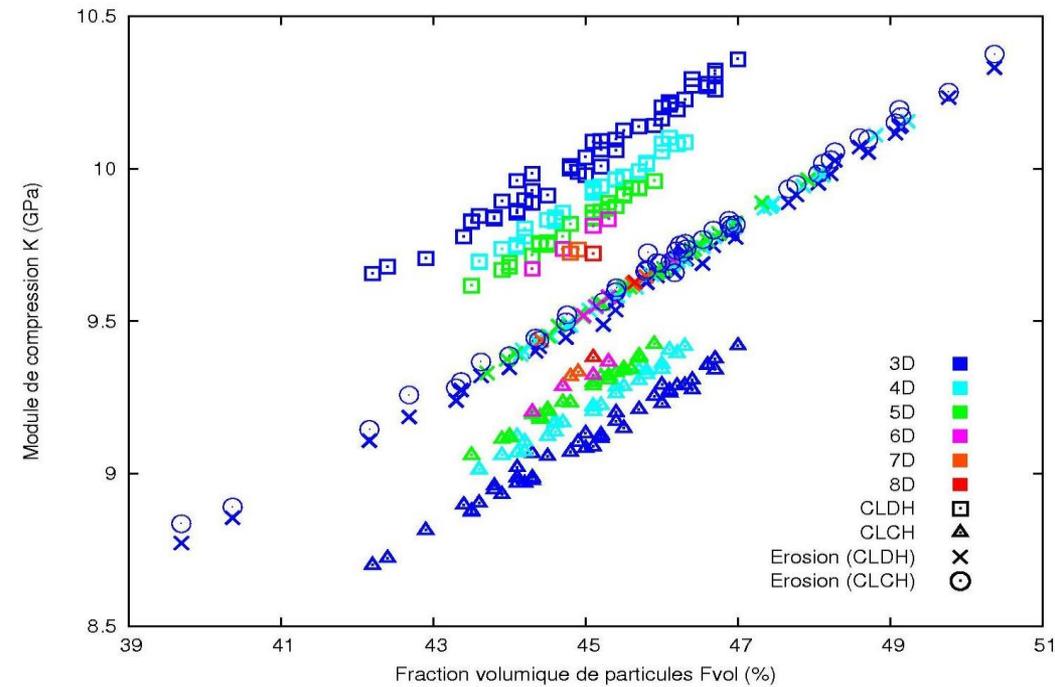
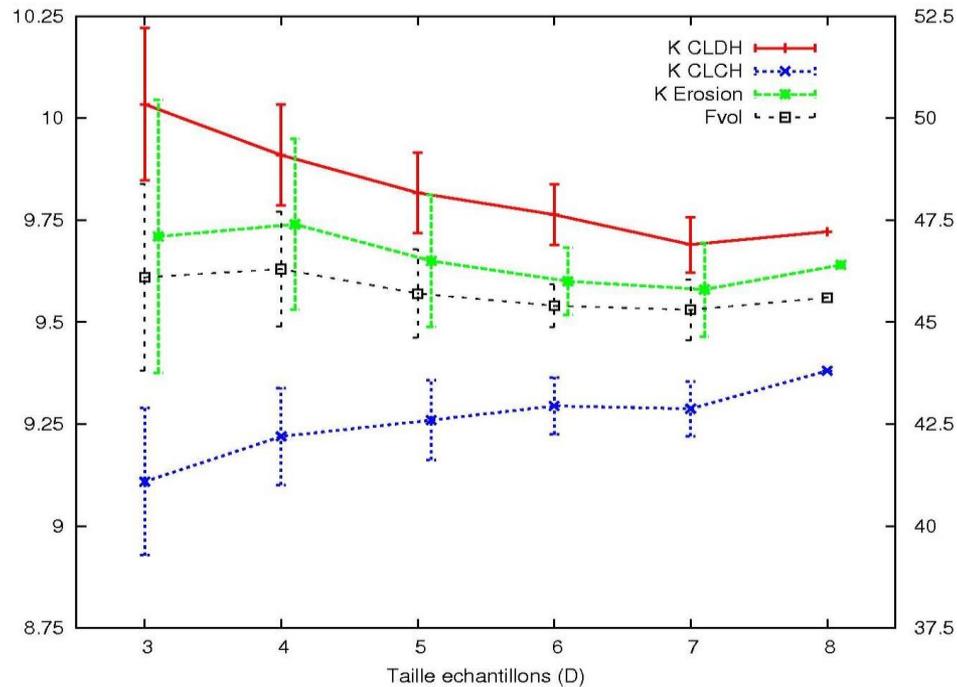
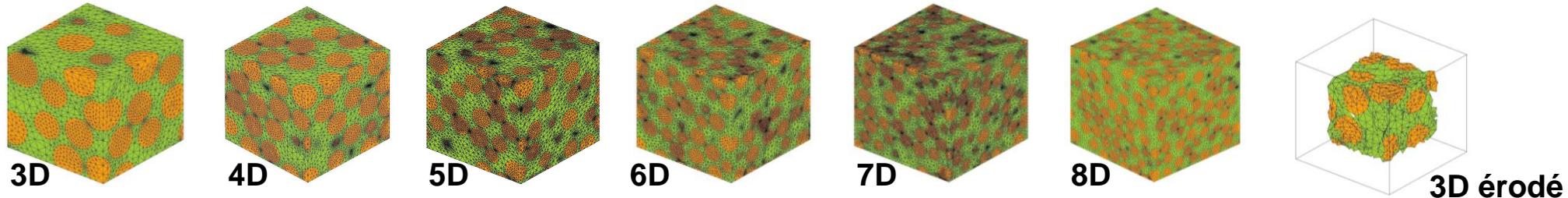
où $\underline{\underline{\Sigma}} = \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_{V'}$, $\underline{\underline{E}} = \langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle_{V'}$ avec $V' = V, V_e \dots$



$$De = 0,5 D$$



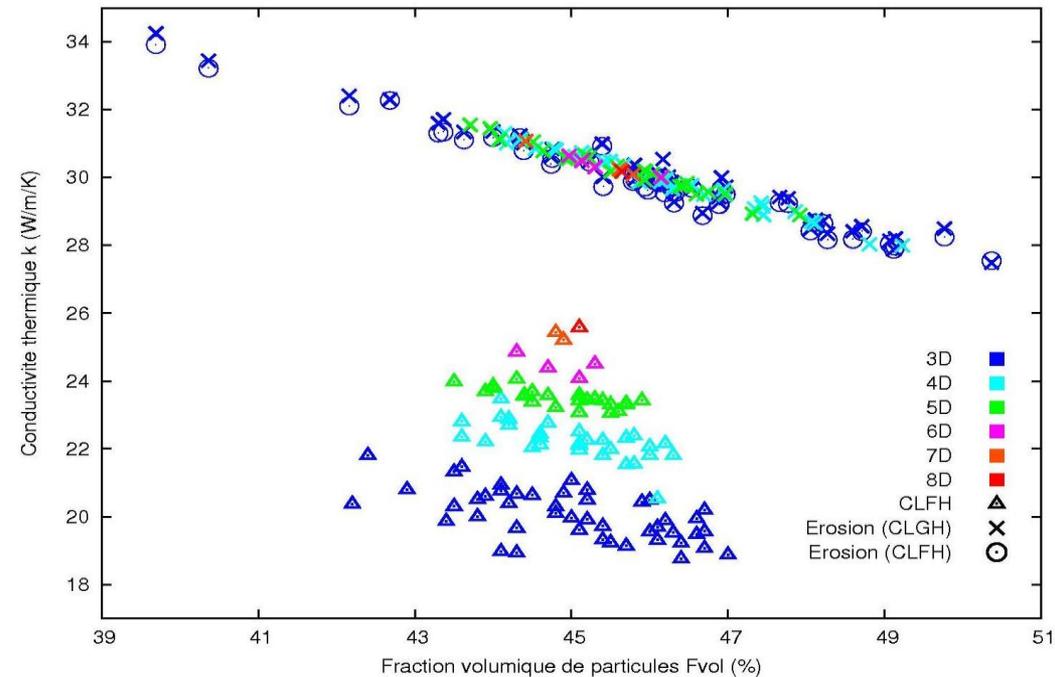
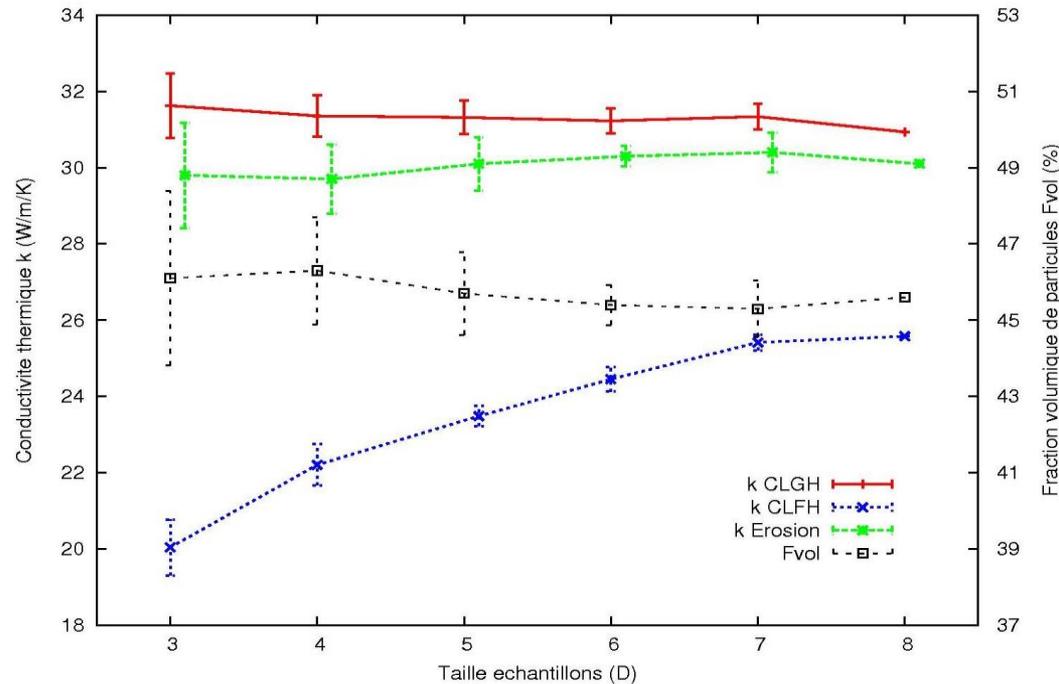
• Rigidités apparentes (suite)



⇒ résultats similaires pour le module de cisaillement (G)



• Conductivité thermique apparente



• Érosion et propriétés apparentes : synthèse

⇒ « indépendance » aux C.L. ⇒ propriétés effectives de l'échantillon

⇒ « indépendance » à la taille des échantillons :

⇒ intégrer les résultats sur tous les échantillons



- **Chargement moyen dans l'échantillon érodé**

En CLCH : $\langle \underline{\sigma} \rangle_V = \underline{\Sigma}$ mais $\langle \underline{\sigma} \rangle_{V_e} \neq \underline{\Sigma}$ en intensité et en **forme** (hydrostatique...)

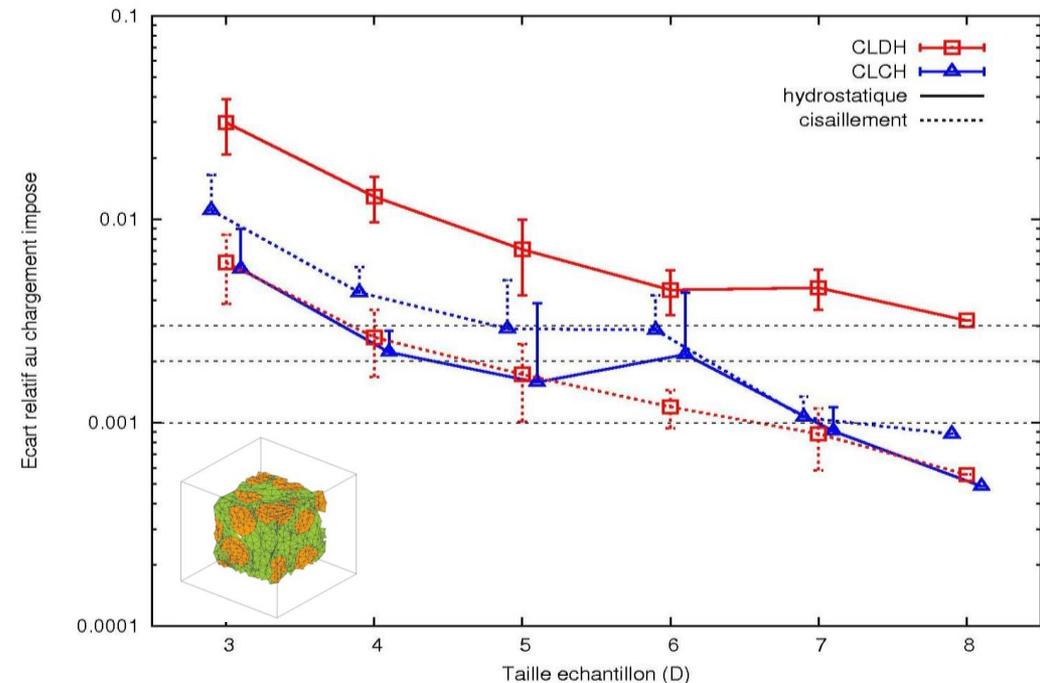
En CLDH : $\langle \underline{\varepsilon} \rangle_V = \underline{E}$ mais $\langle \underline{\varepsilon} \rangle_{V_e} \neq \underline{E}$ *idem*

- **Écart au chargement imposé**

Mesure (δ_e) :

$$\langle \underline{x} \rangle_{V_e} = \underline{X} + \|\underline{X}\| \begin{pmatrix} \delta_{11} & \delta_{12} & \delta_{13} \\ \delta_{12} & \delta_{22} & \delta_{23} \\ \delta_{13} & \delta_{23} & \delta_{33} \end{pmatrix}$$

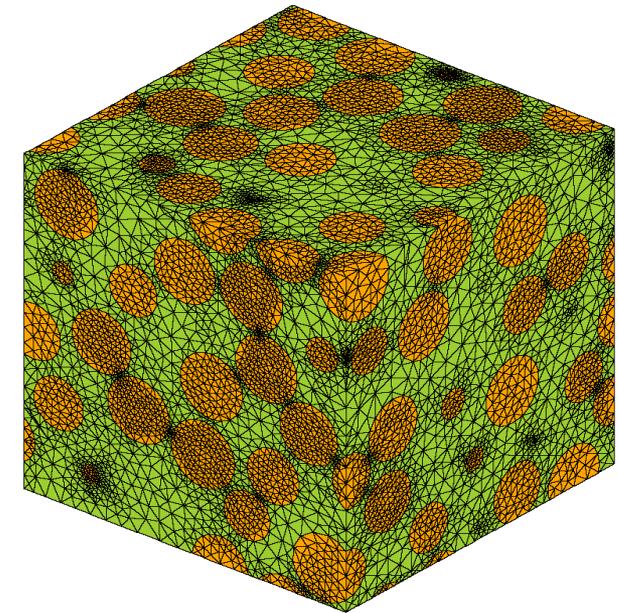
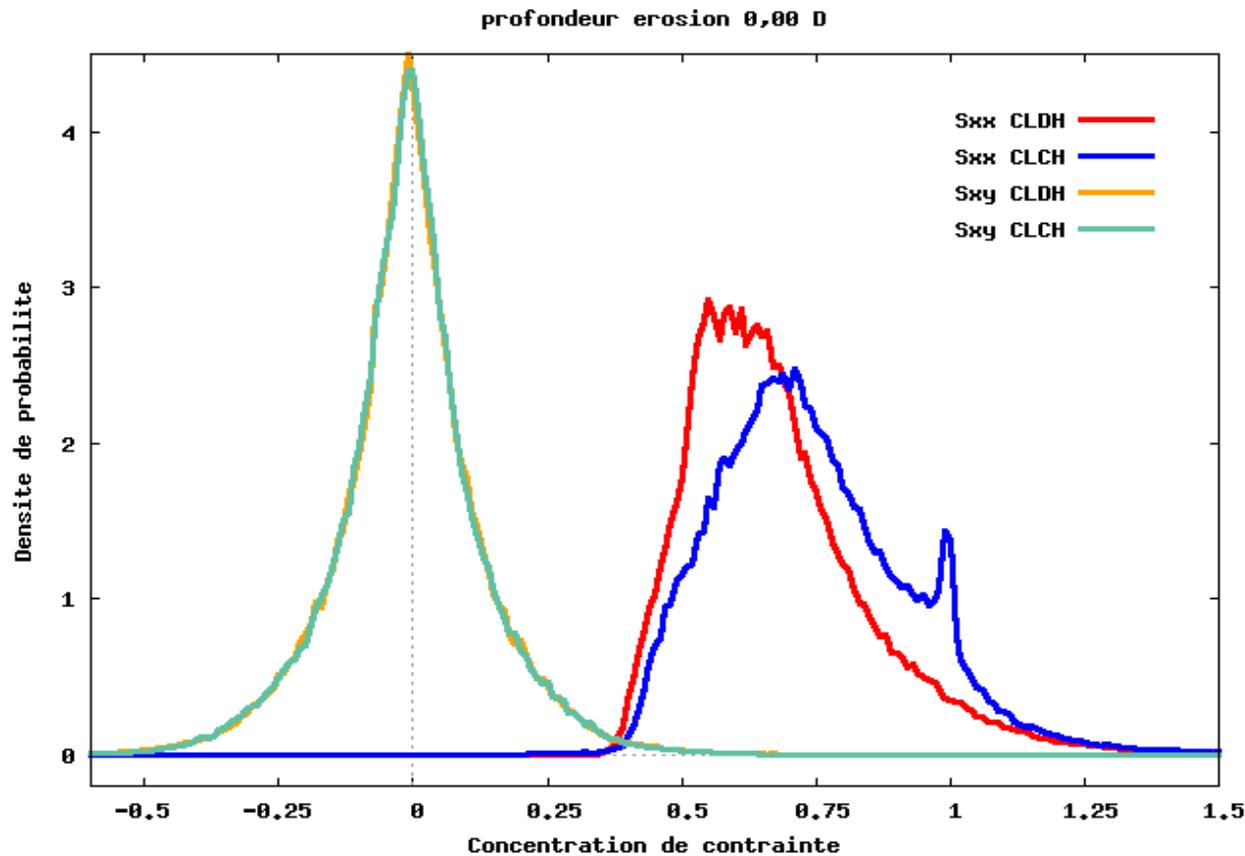
$$\delta_e = \frac{1}{9} \sum_{i,j} |\delta_{ij}|$$





- Évolution avec la profondeur d'érosion

Chargement hydrostatique

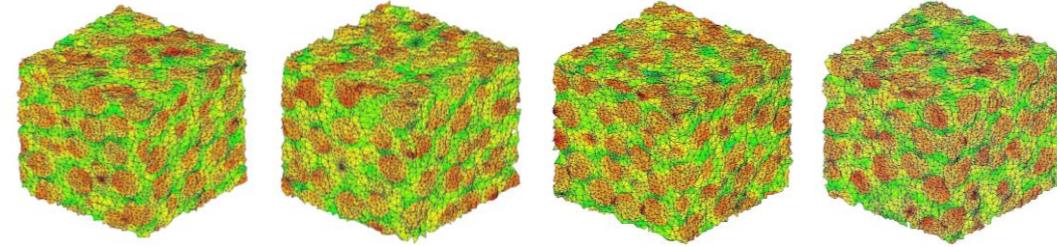


Échantillon de taille 5D



• Mesure sur plusieurs échantillons

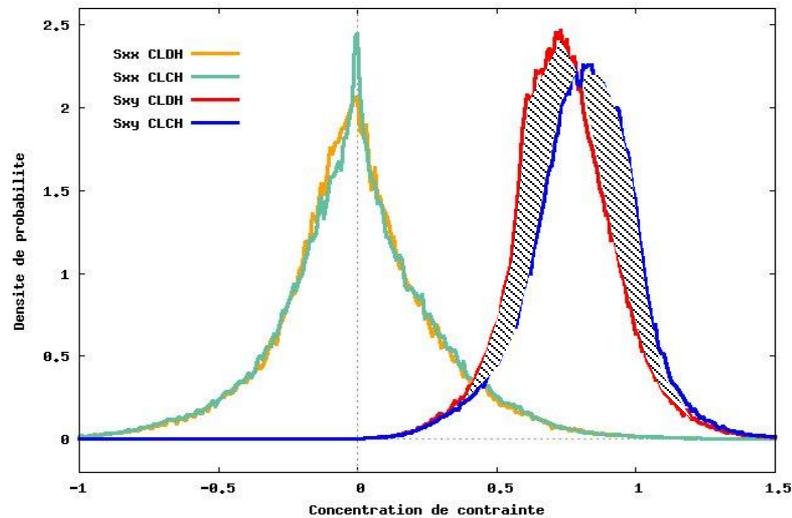
⇒ ↗ représentativité des résultats



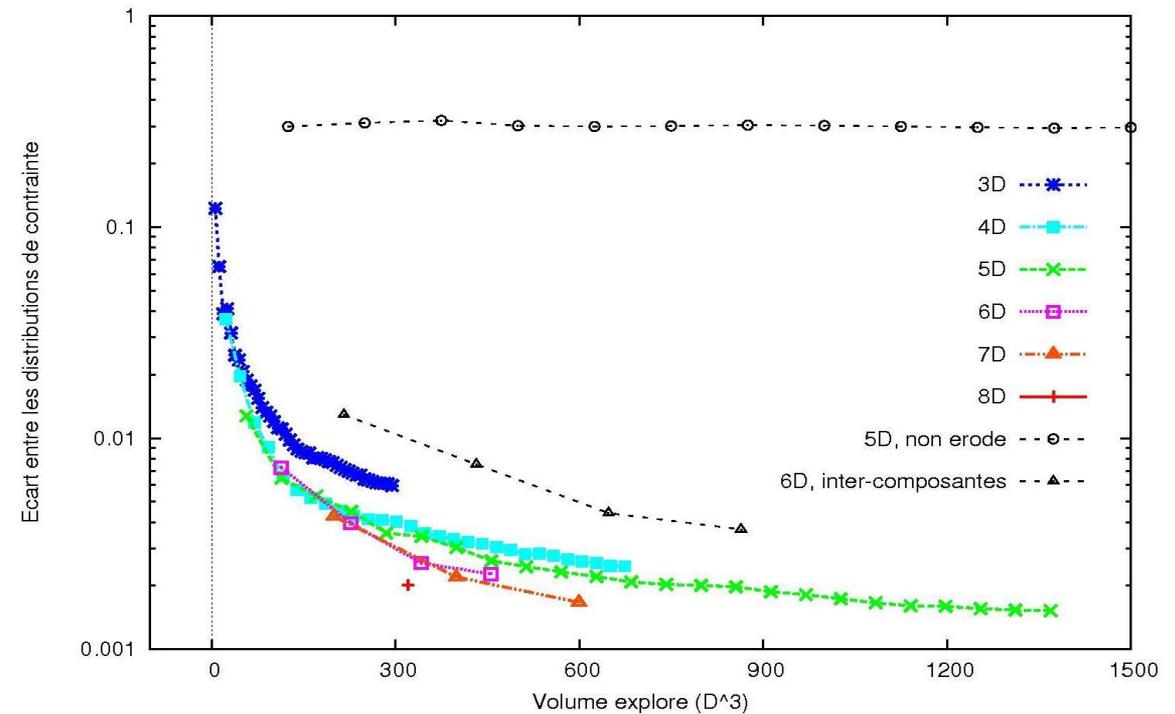
Pb : plusieurs « petits » échantillons ⇔ quelques « grands » échantillons ?

• Écart $D^{DH}(\sigma) / D^{CH}(\sigma)$

$$\delta_D = \sqrt{\frac{1}{6} \sum_{i,j} \left\{ \int [D^{DH}(\sigma_{ij}) - D^{CH}(\sigma_{ij})]^2 d\sigma_{ij} \right\}}$$



Chargement de cisaillement





- **Principe** : sur un échantillon numérique (VER) donné :
 1. Appliquer un **chargement** « équivalent » suivant **deux C.L. différentes**
 2. « **Éroder les solutions** » **aux bords** jusqu'à **convergence**
- **Résultats**
 - ✓ Solution **indépendante des C.L.** \Rightarrow **comportement effectif** de l'échantillon
 - ✓ Intégration des résultats sur **tous les échantillons** \Rightarrow **représentativité**
 - ? **Chargement moyen érodé** \neq **chargement imposé**
 - ? **Macro-homogénéité** $(\frac{1}{2} \langle \underline{\underline{\varepsilon}} : \underline{\underline{\sigma}} \rangle_V = \frac{1}{2} \underline{\underline{E}} : \underline{\underline{\Sigma}}) \Rightarrow$ **écart relatif** ~ 1 % sur EN 5D
- **Conclusion** : **méthode simple** et **objective** pour **s'affranchir des effets de bords**
- **Perspectives**
 - *Quid d'autres C.L.* (périodiques ou **mixtes normales**) ?
 - Généralisation aux **comportements non-linéaires** ?

Thèse F. Di Paola

Modélisation multi-échelles
du comportement thermo-mécanique
d'un combustible à particules

Soutenance : mardi 30 novembre, 14h00, à l'ECP

salle de conférences des laboratoires scientifiques (Porte C - 1er étage)