

# Génération de milieux aléatoires continus périodiques et calculs mécaniques par FFT

A. el Abdi<sup>a</sup>, É. Castelier<sup>b</sup>, A. Bouloré<sup>c</sup>, J.-C. Michel<sup>d</sup>,  
C. Lantuéjoul<sup>e</sup>, R. Largenton<sup>f</sup>, P. Mailhé<sup>g</sup>

a. CEA, DEN, DEC, SESC, akram.elabdi@cea.fr

b. CEA, DEN, DEC, SESC, etienne.castelier@cea.fr

c. CEA, DEN, DEC, SESC, Antoine.boulore@cea.fr

d. Aix Marseille Univ, CNRS, Centrale Marseille, LMA UMR 7031, michel@lma.cnrs-mrs.fr

e. ENSMP CG, Christian.Lantuejoul@ensmp.fr

f. EDF-R&D, MMC, rodrigue.largenton@edf.fr

g. Framatome, pierre.mailhe@framatome.com

## Résumé :

*Le matériau étudié est un combustible nucléaire à base de plutonium (Pu) et d'uranium, sa microstructure est caractérisée par la répartition spatiale de la teneur en Pu. L'objectif de ce travail est de générer un milieu représentatif de sa microstructure (VER), et d'effectuer les premiers calculs nécessaires à la détermination de son comportement mécanique effectif.*

*La texture du matériau est connue par des cartographies de teneur en Pu, obtenues par microsonde électronique. Le formalisme des fonctions aléatoires, et les outils associés, permettent de caractériser statistiquement cette texture (histogramme, covariance spatiale), de s'affranchir du bruit de mesure, et enfin de générer des microstructures 3D périodiques, représentatives du combustible.*

*Du point de vue mécanique, le combustible est un matériau à comportement viscoélastique vieillissant avec des gonflements libres, qui dépend de la teneur locale en plutonium. Les calculs sur la microstructure périodique sont effectués en utilisant une méthode de résolution par transformée de Fourier rapide (FFT).*

## Abstract :

*The studied material is a nuclear fuel made up of plutonium (Pu) and uranium, the spatial distribution of the Pu content characterizes its microstructure. The objective of this work is to generate a representative medium of its microstructure (REV), and to carry out the first calculations necessary for the determination of its effective mechanical behavior.*

*The texture of the material is known by maps of Pu content, obtained by microprobe. Random functions formalism, and the associated tools, make possible a statistical characterization of this texture (histogram, spatial covariance), to resolve measurement noise problem, and finally, to generate periodic 3D microstructures, representative of the fuel.*

*From a mechanical point of view, fuel is a material with ageing viscoelastic behaviour and free swelling, which depends on the local plutonium content. The calculations on the microstructure are performed using a fast Fourier transform resolution method (FFT).*

**Mots clés : Microstructures, Filtrage, Fonctions aléatoires, Calcul mécanique par FFT.**

## 1 Introduction

Le matériau étudié est un combustible nucléaire composé de plutonium, d'uranium et d'oxygène et fabriqué par un mélange de poudres d' $\text{UO}_2$  et de  $\text{PuO}_2$ . Ce type de combustible a déjà fait l'objet de travaux d'homogénéisation mécanique, tous s'appuyant sur une répartition du plutonium en deux [1] ou trois phases [2, 3] homogènes. Les techniques d'homogénéisation employées ont été une homogénéisation de type Mori-Tanaka incrémental [2], ou l'approche NTFA (Nonuniform Transformation Field Analysis) [4, 3].

Le travail présenté ici veut tenir compte de la répartition continue de la teneur en plutonium dans ce matériau. L'objectif est de générer des microstructures périodiques 3D à teneur continue, représentatives du combustible, pour y réaliser les calculs nécessaires à une homogénéisation mécanique par l'approche NTFA [5].

La texture du matériau est connue sur des cartographies 2D réalisées à la microsonde électronique. Pour caractériser la texture, des techniques de géostatistique [6] (statistiques spatiales) seront utilisées. Il faudra prendre en compte le bruit de mesure [7]. D'autres outils de géostatistique [8] permettront ensuite de générer des microstructure 3D périodiques, représentatives du combustible nucléaire.

Enfin, les premiers calculs nécessaires à l'homogénéisation mécanique par l'approche NTFA (qui sera réalisée plus tard) seront effectués en utilisant une méthode de résolution par transformée de Fourier rapide (FFT).

## 2 Caractérisation probabiliste de la microstructure

La microstructure du combustible nucléaire, connue par cartographie microsonde, est d'abord caractérisée d'un point de vue probabiliste.

### 2.1 Approche probabiliste

**Image microsonde** La microstructure du combustible nucléaire est caractérisée par la répartition spatiale de sa teneur en plutonium, qui peut être cartographiée par microsonde électronique. Une telle cartographie est présentée en figure 1, mesurée sur une grille carrée régulière de  $1024 \times 1024$  pixels, avec un pas d'acquisition de  $1 \mu\text{m}$  suivant les deux axes. La taille du pixel ( $1 \times 1 \mu\text{m}^2$ ) correspond à la résolution de la microsonde. Sur la figure, la teneur est représentée par le niveau de gris : les taches sombres correspondent aux zones riches en uranium et les taches claires les zones riches en plutonium.

**Modélisation probabiliste** Pour générer des microstructures 3D représentatives de la microstructure du combustible, il est classique d'adopter une approche probabiliste [8]. La teneur en plutonium mesurée sur la cartographie est alors considérée comme la réalisation d'une fonction aléatoire  $\Theta(\mathbf{x})$ . Cette fonction aléatoire sera supposée **stationnaire**, ce qui est adapté à la texture de la cartographie qui semble être partout la même. La stationnarité portera sur les caractéristiques suivantes :

- l'espérance de la teneur  $\Theta(\mathbf{x})$  ne dépend pas de sa position  $\mathbf{x}$  :

$$E[\Theta(\mathbf{x})] = \theta_m.$$

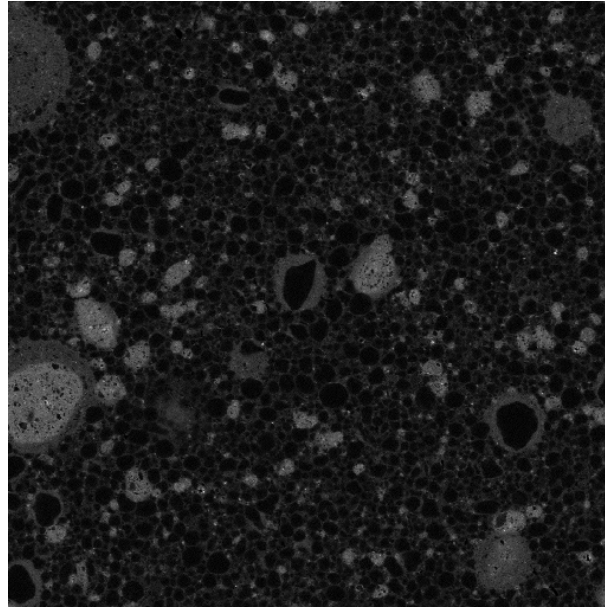


FIGURE 1 – Cartographie microsonde [9]. Les niveaux de gris correspondent aux teneurs en plutonium : les taches sombres correspondent aux zones riches en uranium et les taches claires les zones riches en plutonium

- La fonction de covariance spatiale dépend uniquement de l'écart  $\mathbf{h} = \mathbf{x} - \mathbf{y}$  entre les points  $\mathbf{x}$  et  $\mathbf{y}$  :

$$\text{cov}[\Theta(\mathbf{x}), \Theta(\mathbf{y})] = C_{\Theta}(\mathbf{h}).$$

- La densité marginale  $f_{\Theta}$  de la variable aléatoire  $\Theta(\mathbf{x})$  est indépendante de la position  $\mathbf{x}$ .  
La génération de microstructures, développée plus loin en section 3, doit retrouver ces caractéristiques à partir de la cartographie :

- l'espérance  $\theta_m$  peut être estimée par la moyenne sur la cartographie.
- La fonction de covariance spatiale  $C_{\Theta}(\mathbf{h})$  peut être calculée expérimentalement sur le nombre  $N_{\mathbf{h}}$  des couples de points séparés d'une même distance  $\mathbf{h}$  :

$$C_{\Theta}(\mathbf{h}) = \frac{1}{N_{\mathbf{h}}} \sum_{i=1}^{N_{\mathbf{h}}} [\theta(\mathbf{x}_i) - \theta_m][\theta(\mathbf{x}_i + \mathbf{h}) - \theta_m]. \quad (1)$$

- La densité marginale  $f_{\Theta}$  de la variable aléatoire  $\Theta(\mathbf{x})$  peut être estimée à partir de l'histogramme des teneurs de la cartographie.

**Bruit de mesure** La mesure par microsonde électronique consiste à exciter un petit volume de matière et à mesurer l'intensité du rayonnement qui en résulte pour une fréquence caractéristique du plutonium. Pour un pixel de teneur  $\theta$ , le nombre moyen  $n$  de photons émis dépend de manière affine de la teneur :

$$n = a\theta + b.$$

Les coefficients  $a$  et  $b$ , proportionnels au temps d'acquisition, sont obtenus par des mesures de calibration. Le coefficient  $b$  rend compte d'un bruit de fond ambiant.

Cette mesure peut être très précise, à condition d'avoir des temps d'acquisition suffisamment longs

(plusieurs secondes). Pour réaliser la cartographie en figure 1, avec ses 1024x1024 pixels, le temps d'acquisition n'est que de 20 ms. La mesure est donc bruitée : la mesure  $n$  est la réalisation d'une variable aléatoire  $N$ , qui suit une loi de Poisson [10] :

$$N \sim \mathcal{P}(a\theta + b),$$

de loi de probabilité

$$P(N = n) = e^{-(a\theta+b)} \frac{(a\theta + b)^n}{n!},$$

dont l'espérance et la variance valent :

$$E[N] = \text{Var}[N] = a\theta + b.$$

La teneur  $\theta$  n'est pas mesurée directement, mais estimée à partir du nombre de photons  $N$ . La mesure correspondante :

$$\hat{\Theta} = \frac{N - b}{a}, \quad (2)$$

hérite de ce caractère aléatoire et vérifie :

$$E[\hat{\Theta}] = \theta, \quad \text{Var}[\hat{\Theta}] = \frac{a\theta + b}{a^2}. \quad (3)$$

**Caractère doublement aléatoire** En supposant que la teneur est une fonction aléatoire  $\Theta(\mathbf{x})$ , sa mesure  $\hat{\Theta}(\mathbf{x})$ , estimée par la relation (3), possède donc un double caractère aléatoire, combinant ceux de la teneur et de la mesure :

$$\hat{\Theta}(\mathbf{x}) = \frac{N(\mathbf{x}) - b}{a}, \quad \text{avec} \quad N(\mathbf{x}) \sim \mathcal{P}(a\Theta(\mathbf{x}) + b).$$

D'un point de vue probabiliste, le nombre aléatoire de photons  $N$  est conditionnellement indépendant de la teneur  $\Theta(\mathbf{x})$ .

Le bruit mesure ne permet plus de retrouver directement les caractéristiques statistiques de la teneur : la covariance spatiale et la densité de probabilité. Celle-ci doivent être estimées à partir de celles de la mesure  $\hat{\Theta}(\mathbf{x})$ .

## 2.2 Covariance spatiale

Il existe des formules [7] qui utilisent les propriétés de la loi de Poisson pour relier les espérances et covariances spatiales de la teneur  $\Theta(\mathbf{x})$  et de sa mesure bruitée  $\hat{\Theta}(\mathbf{x})$ .

Les espérances d'une variable aléatoire et de sa mesure bruitée sont égales :

$$E(\Theta) = E(\hat{\Theta}) = \theta_m. \quad (4)$$

La moyenne  $\theta_m$  des mesures de la cartographies permet donc d'estimer l'espérance  $E(\Theta)$ .

Les fonctions de covariance spatiale sont liées par la relation :

$$C(\Theta(\mathbf{x}), \Theta(\mathbf{y})) = C(\hat{\Theta}(\mathbf{x}), \hat{\Theta}(\mathbf{y})) - \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \sigma^2, \quad (5)$$

avec :

$$\sigma^2 = \frac{a\theta_m + b}{a^2} \quad \text{et} \quad \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = \begin{cases} 1 & \text{si } \mathbf{x} = \mathbf{y}, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

Les covariances spatiales de la teneur et de sa mesure sont égales dans le cas où  $\mathbf{x} \neq \mathbf{y}$ , ceci vient du fait que le bruit de mesure est indépendant d'un pixel à un autre pixel différent. Dans le cas où  $\mathbf{x} = \mathbf{y}$ , les covariances diffèrent d'un écart  $\sigma^2$  appelé effet de pépite [6], et qui représente l'erreur de mesure (3) moyennée sur la cartographie. Il est ainsi facile de déduire la covariance spatiale de la teneur  $\Theta(\mathbf{x})$  de celle de sa mesure  $\hat{\Theta}(\mathbf{x})$ , comme cela est illustré en figure 2.

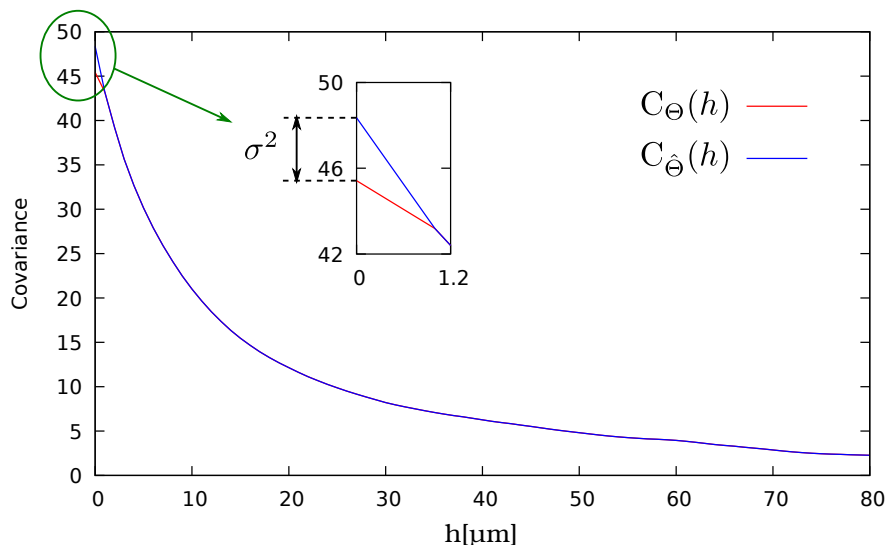


FIGURE 2 – Fonctions de covariance spatiales de la teneur bruitée  $C_{\hat{\Theta}}(\mathbf{h})$  et non-bruitée  $C_{\Theta}(\mathbf{h})$  sur la cartographie.

## 2.3 Histogramme

La mesure  $\hat{\Theta}$  est une variable aléatoire discrète. Sa loi de probabilité dépend de la densité marginale  $f_{\Theta}$  de la teneur  $\Theta$  :

$$P\left(\hat{\Theta} = \frac{n-b}{a}\right) = \int_{\mathbf{R}_+^*} p(n, a\theta + b) f_{\Theta}(\theta) d\theta, \quad \text{avec} \quad p(n, y) = e^{-y} \frac{y^n}{n!}. \quad (6)$$

La figure 3 compare la loi de la teneur  $f_{\Theta}$  (histogramme sous-jacent) avec celle de sa mesure calculée par la formule (6) (histogramme poissonisé). Le bruit de mesure déforme l'histogramme en le rendant plus diffus, et fait même apparaître des teneurs négatives.

La figure 3 présente également l'histogramme mesuré sur la cartographie (histogramme expérimental). Il faut pouvoir inverser la relation (6) pour retrouver la densité  $f_{\Theta}$  à partir de l'histogramme expérimental. Cette inversion est connue [7], pour avoir une solution unique, mais être un problème mathématiquement mal posé, qui induit numériquement des problèmes de convergence. Il faut pouvoir le régulariser.

**Approche par phases** La régularisation proposée consiste à distinguer plusieurs phases dans le matériau et à résoudre le problème inverse dans chaque phase séparément. Cette opération remplace un problème global très mal posé en des sous-problèmes plus réguliers.

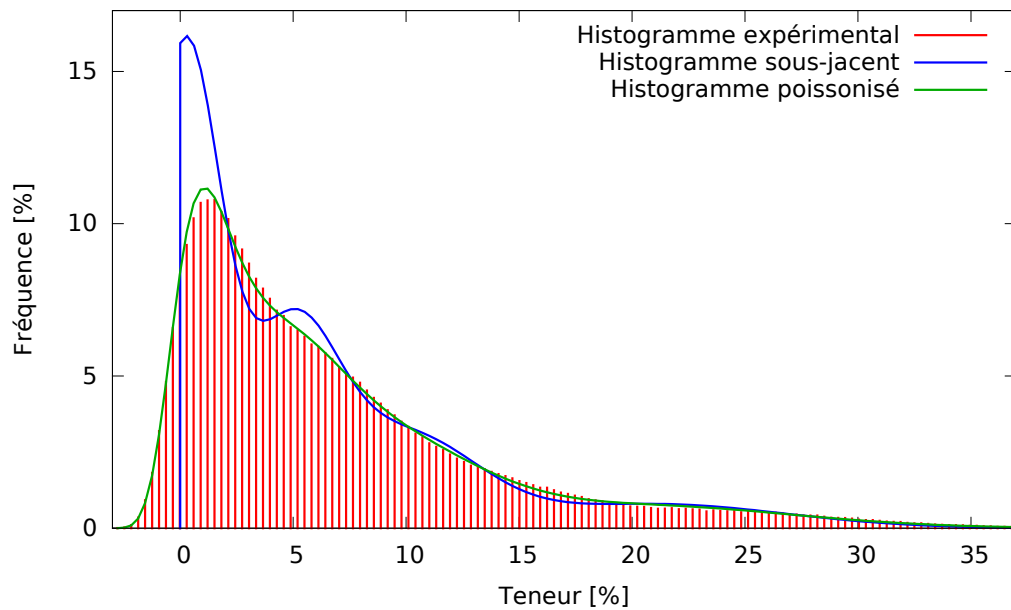


FIGURE 3 – Histogramme expérimental, sous-jacent et modèle de la teneur pour toute la cartographie.

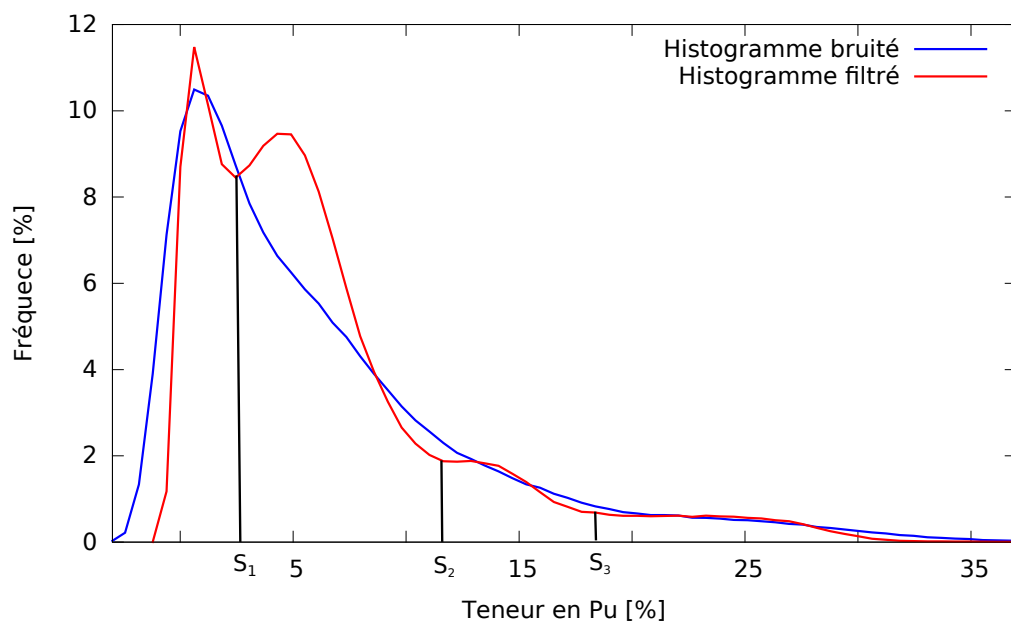


FIGURE 4 – Histogrammes mesurés sur la cartographie brute (bruité) et sur la cartographie après filtrage (filtré). Le filtrage fait apparaître des seuils, qui permettent de distinguer quatre phases dans le matériau.

Il est difficile de distinguer des phases sur l'histogramme expérimental (bruité) de la figure 4 car il est très diffus. Il est possible de filtrer partiellement le bruit de mesure, ainsi qu'une variabilité à courte distance de la teneur, en appliquant une moyenne mobile, c'est-à-dire en déplaçant un carré de 5x5 pixels sur la cartographie. L'histogramme qui en résulte, présenté en figure 4, fait apparaître quatre phases, séparées par trois seuils  $s_1$ ,  $s_2$  et  $s_3$ .

Il est possible de recalculer l'histogramme des mesures dans chaque phase, ce qui permet de décomposer l'histogramme de départ en quatre histogrammes, représentés en figure 5.

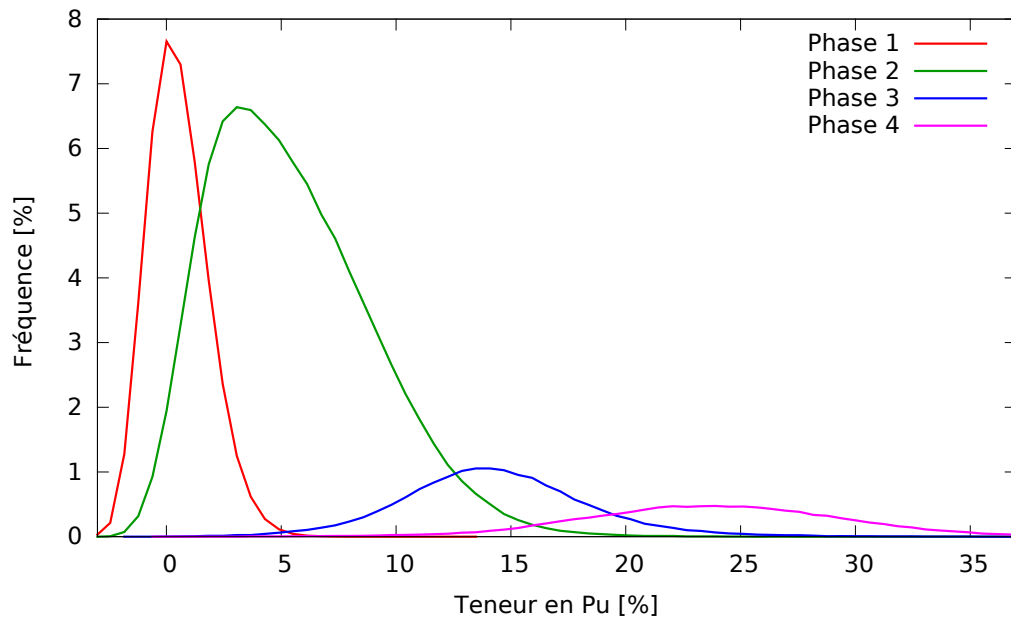


FIGURE 5 – Histogrammes de chacune des quatre phases

**Modèle sous-jacent** La deuxième étape de la régularisation consiste à imposer un modèle de fonction aléatoire  $f_{\Theta}^i$  dans chaque phase  $i$ . La densité globale  $f_{\Theta}$  sera ainsi la somme des quatre modèles, pondérée par les proportions  $w_i$  des quatre phases :

$$f_{\Theta}(x) = \sum_{i=1}^4 w_i f_{\Theta}^i(x). \quad (7)$$

Les quatre morceaux d'histogramme présentent une forme qui ressemble à une densité gaussienne. Les densités  $f_{\Theta}^i$  de chaque phase seront supposées gaussiennes. Elles représentent toutefois des teneurs positives. Ainsi, le modèle choisi est une distribution de loi gaussienne, tronquée à gauche en 0 :

$$f_{\Theta}^i(x) = \frac{A}{\sigma_i \sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-\mu_i)^2}{2\sigma_i^2}} 1_{x \geq 0}, \quad \text{avec} \quad A = \frac{2}{\operatorname{erf}\left(\frac{\mu_i}{\sqrt{2}\sigma_i}\right) + 1},$$

caractérisée par deux paramètres  $\mu_i$  et  $\sigma_i$ .

**Ajustement des paramètres** Dans chaque phase  $i$ , la mesure  $\hat{\Theta}$  ajoute un bruit poissonien à la teneur  $\Theta$ . Il est ainsi possible d'appliquer les relations (4) et (5) pour déduire les espérance et variance de la

teneur à partir de celles des mesures :

$$E_i[\Theta] = E_i[\hat{\Theta}] \quad \text{et} \quad \text{Var}_i[\Theta] = \text{Var}_i[\hat{\Theta}] - \frac{a E_i[\hat{\Theta}] + b}{a^2}.$$

Les paramètres  $\mu_i$  et  $\sigma_i$  des gaussiennes tronquées sont ainsi déterminés pour retrouver les moments [11] :

$$\begin{aligned} E_i[\Theta] &= \mu_i + \sigma_i^2 f_{\Theta}^i(0), \\ E_i[\Theta^2] &= \mu_i^2 + \sigma_i^2 + \sigma_i^2 \mu_i f_{\Theta}^i(0), \\ \text{Var}_i(\Theta) &= E_i[\Theta^2] - E_i[\Theta]^2. \end{aligned}$$

Ce système non-linéaire d'inconnues  $\mu_i$  et  $\sigma_i$  est résolu par une méthode de Newton. Le résultat de l'identification de l'histogramme sous-jacent est présenté en figure 3 : l'histogramme sous-jacent, bruité par poissonisation (6), reproduit très bien l'histogramme expérimental.

### 3 Génération du milieu aléatoire

La microstructure sera générée comme un champ gaussien anamorphosé. Ce modèle est très souple d'utilisation car il permet d'obtenir des microstructures avec toutes les fonctions de covariance spatiale et toutes les lois de probabilités souhaitées [8]. La génération de la microstructure passe par deux étapes principales :

- la génération d'une fonction aléatoire multi-gaussienne périodique. La fonction aléatoire ainsi générée aura la fonction de covariance spatiale souhaitée, mais sa loi marginale est une gaussienne centrée normée.
- Il faut ensuite transformer la fonction aléatoire multi-gaussienne pour obtenir une fonction aléatoire dont la loi marginale correspond à la densité de probabilité souhaitée.

Ces deux étapes sont maintenant décrites en détails.

#### 3.1 Génération de gaussienne périodique

Les fonctions aléatoires multi-gaussiennes se construisent facilement par combinaisons linéaires de variables gaussiennes indépendantes.

**Théorème de Bochner** La génération d'une fonction aléatoire multi-gaussienne  $G(\mathbf{x})$  qui respecte une fonction de covariance  $C(\mathbf{h})$  s'appuie sur l'analyse spectrale des fonctions aléatoires [12, 13, 14]. D'après le théorème de Bochner, la fonction de covariance  $C(\mathbf{h})$  d'une fonction aléatoire stationnaire  $Z(\mathbf{x})$  est la transformée de Fourier d'une mesure positive  $\chi$  :

$$C(\mathbf{h}) = \int e^{2i\pi \mathbf{h}\mathbf{u}} \chi(d\mathbf{u}). \quad (8)$$

En dimension  $d = 1, 2$  ou  $3$ , sur une grille régulière périodique de taille  $L_1 \times \dots \times L_d$ , discrétisée par  $N_1, \dots, N_d$ , cette écriture devient :

$$C_{n_1, \dots, n_d} = \sum_{k_1=0}^{N_1-1} \dots \sum_{k_d=0}^{N_d-1} e^{2i\pi \left( \frac{k_1 n_1}{N_1} + \dots + \frac{k_d n_d}{N_d} \right)} \chi_{\mathbf{k}} \quad \text{avec} \quad \mathbf{k} = (k_1, \dots, k_d) \quad \text{et} \quad \chi_{\mathbf{k}} > 0.$$



**Fonction aléatoire** La construction d'une fonction aléatoire  $G$  de covariance  $C(\mathbf{h})$ , nécessite le tirage de variables gaussiennes indépendantes pour chaque fréquence  $\mathbf{k}$  :

- dans le cas général où  $\mathbf{k} \neq \mathbf{0}$ , deux variables  $R_{\mathbf{k}}$  et  $I_{\mathbf{k}}$  indépendantes de norme :

$$\|R_{\mathbf{k}}\|^2 = \|I_{\mathbf{k}}\|^2 = \frac{1}{2} \chi_{\mathbf{k}}, \quad \text{et} \quad \zeta_{\mathbf{k}} = R_{\mathbf{k}} + i I_{\mathbf{k}}, \quad \zeta_{-\mathbf{k}} = R_{\mathbf{k}} - i I_{\mathbf{k}}; \quad (9a)$$

- sinon :

$$\zeta_{\mathbf{0}} = R_{\mathbf{0}}, \quad \text{avec} \quad \|R_{\mathbf{0}}\|^2 = \chi_{\mathbf{0}}. \quad (9b)$$

La fonction de covariance ainsi construite sur la grille :

$$G_{n_1, \dots, n_d} = \sum_{k_1=0}^{N_1-1} \dots \sum_{k_d=0}^{N_d-1} e^{2i\pi \left( \frac{k_1 n_1}{N_1} + \dots + \frac{k_d n_d}{N_d} \right)} \zeta_{\mathbf{k}}, \quad (10)$$

à la covariance souhaitée. De plus, par construction, chaque terme est combinaison linéaire de variables aléatoires gaussiennes : la fonction  $G$  est bien la réalisation d'une fonction aléatoire multi-gaussienne.

**Génération** Dans la pratique, les étapes de la génération d'une fonction aléatoire multi-gaussienne, de fonction de covariance  $C_G(\mathbf{h})$ , sur une grille périodique sont les suivantes :

- Afin de s'affranchir de fluctuations statistiques, la fonction de covariance  $C_G$ , calculée expérimentalement, est modélisée comme la combinaison de fonctions de covariance connues.
- Le modèle est ensuite discrétisé sur la grille régulière, pour en calculer sa transformée de Fourier, par utilisation de transformées de Fourier rapides (FFT en anglais). Les termes  $\chi_{\mathbf{k}}$  ainsi obtenus sont presque réels positifs, mais les approximations liées à la périodisation et à la discrétisation créent des termes parasites qu'il faut supprimer.
- La mesure aléatoire  $\zeta_{\mathbf{k}}$  est construite (9) avec des tirages aléatoires de variables aléatoires gaussiennes. Sa transformée de Fourier inverse (10) permet d'obtenir la fonction aléatoire de covariance  $C_G(\mathbf{h})$ .

## 3.2 Anamorphose

Il est possible de transformer la fonction aléatoire multi-gaussienne  $G(\mathbf{x})$  en une fonction aléatoire  $\Theta(\mathbf{x})$  de densité marginale  $f_{\Theta}$ , en lui appliquant une fonction croissante  $\mathcal{A}$  :

$$\Theta(\mathbf{x}) = \mathcal{A}(G(\mathbf{x})), \quad \text{avec} \quad \mathcal{A} = F_{\Theta}^{-1} \circ F_G, \quad (11)$$

où  $F_{\Theta}$  et  $F_G$  sont respectivement les fonctions de répartition marginales des fonctions aléatoires  $\Theta(\mathbf{x})$  et  $G(\mathbf{x})$ . La fonction  $F_{\Theta}$  est obtenue par intégration de la densité  $f_{\Theta}$  identifiée (7).

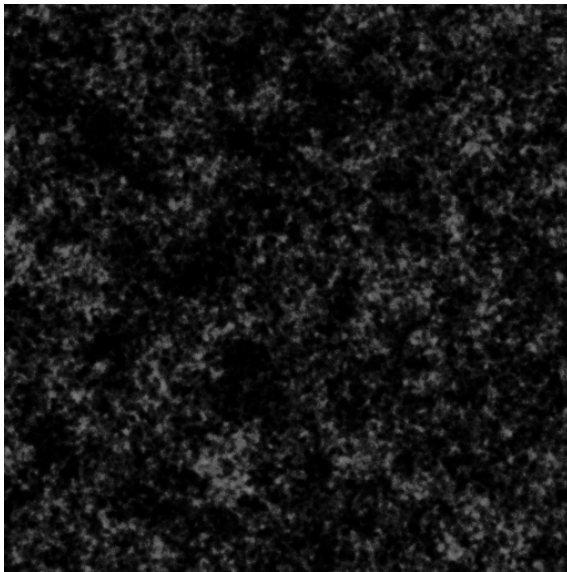
La fonction de covariance  $C_G(\mathbf{h})$ , nécessaire pour générer la fonction aléatoire multi-gaussienne  $G(\mathbf{x})$ , est différente de celle de la teneur  $C_{\Theta}(\mathbf{h})$ , mesurée expérimentalement. Il existe une transformation [15] pour la calculer à partir de  $C_{\Theta}(\mathbf{h})$ . Il faut pour cela décomposer la fonction d'anamorphose  $\mathcal{A}$  en polynômes de Hermite. Nous avons préféré utiliser l'approximation suivante :

$$C_G(\mathbf{h}) \simeq \frac{C_{\Theta}(\mathbf{h})}{\text{Var}[\Theta]}, \quad (12)$$

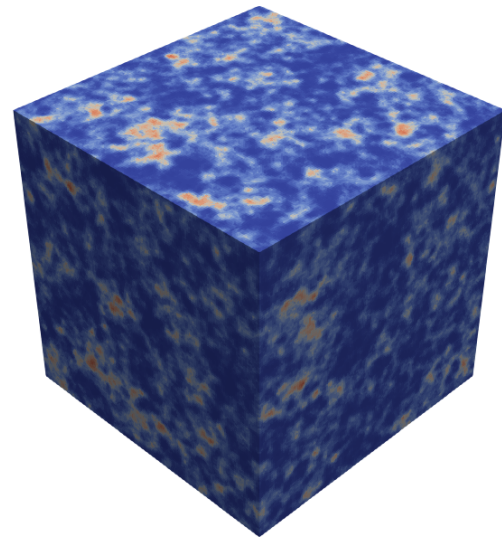
qui est souvent très suffisante.

**Milieu généré** Il est possible de générer des microstructures 2D ou 3D :

- La microstructure 2D, en figure 6(a) permet la comparaison avec le milieu de référence en figure 1 : les tailles et la distribution des agrégats pauvres et riches en plutonium sont bien respectées. La forme des particules a disparu. Une amélioration possible de la méthode de génération de microstructure proposée serait de combiner les ensembles aléatoires, pour tenir compte de la forme des particules avec les fonctions aléatoires pour tenir compte de la répartition continue de teneur.
- La figure 6(b) représente le milieu généré pour les calculs mécaniques : un cube de coté 300  $\mu\text{m}$ , discrétisé en  $150 \times 150 \times 150$  voxels de taille 2  $\mu\text{m}$ .



(a) Generation 2D



(b) Generation 3D

FIGURE 6 – Générations du milieu aléatoire.

La figure (7) montre que l'histogramme est identique à celui de la vraie teneur, tandis que la fonction de covariance est proche de celle visée.

## 4 Calculs mécaniques

Le milieu 3D généré est un volume élémentaire représentatif (VER) du combustible nucléaire. Il doit servir à établir un modèle de comportement mécanique homogénéisé. Les premiers calculs mécaniques sur ce VER sont maintenant présentés.

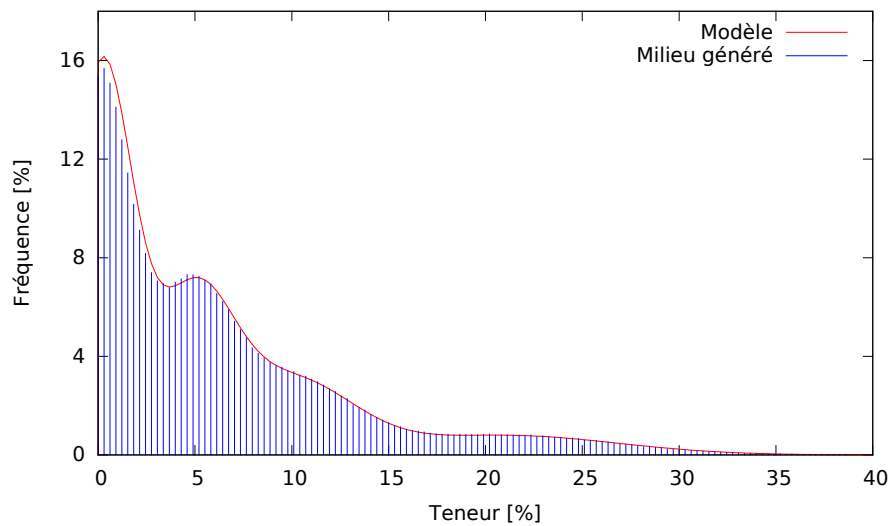
### 4.1 Comportement local

Le comportement mécanique local est le suivant [3] : la déformation totale  $\varepsilon$  est la combinaison :

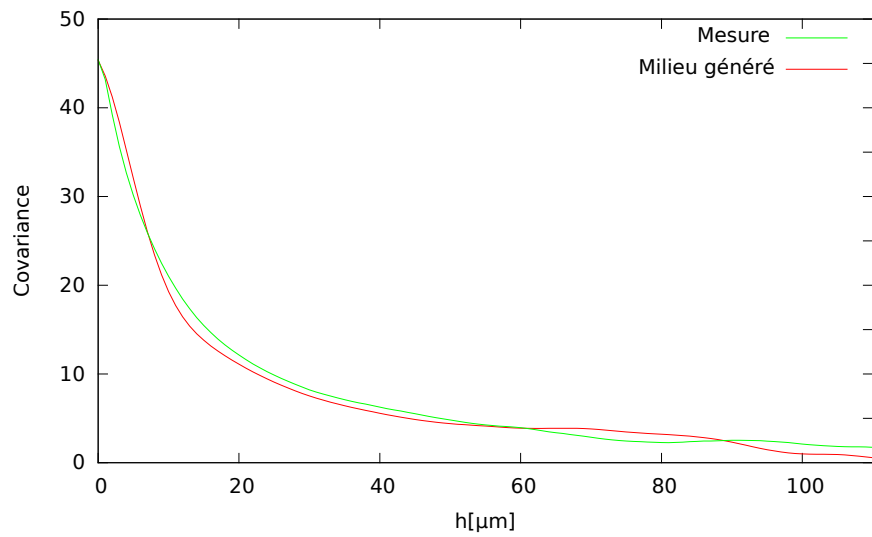
$$\varepsilon = \varepsilon^e + \varepsilon^v + \varepsilon^g,$$

des déformations élastique  $\varepsilon^e$  et visqueuse  $\varepsilon^v$ , et d'un gonflement  $\varepsilon^g$ .

- La contrainte et la déformation élastique sont liées par un tenseur de rigidité  $\mathbf{L}$  supposé isotrope et homogène partout dans le VER.



(a) Histogrammes



(b) Fonctions de covariance

FIGURE 7 – Comparaison des histogrammes et fonctions de covariance expérimentaux et du milieu généré.

- La déformation visqueuse est purement déviatorique, sa vitesse dérive d'un potentiel de dissipation  $\psi(\boldsymbol{\sigma})$  :

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^v = \frac{\partial \psi(\boldsymbol{\sigma})}{\partial \boldsymbol{\sigma}} \quad \text{avec} \quad \psi(\boldsymbol{\sigma}) = \frac{1}{6G_{v1}} \sigma_{eq}^2 + \frac{1}{3(n+1)G_{vn}} \sigma_{eq}^{n+1} \quad (13)$$

Cette déformation est la superposition de deux termes : un fluage dû à l'irradiation, de vitesse proportionnelle à la contrainte, et un fluage thermique, dont la vitesse dépend de manière non-linéaire de la contrainte.

- Le gonflement  $\varepsilon^g$  est induit par irradiation. Il est calculé à l'extérieur de la loi de comportement mécanique à l'aide de lois physico-chimiques d'un matériau évoluant sous irradiation.

La loi de comportement mécanique locale dépend de la teneur en plutonium à travers deux termes : le module de cisaillement visqueux  $G_{v1}$  du fluage d'irradiation et le gonflement d'irradiation  $\varepsilon^g$ .  $G_{v1}$  est donné en fonction de la teneur en plutonium  $\theta$  par la relation :

$$G_{v1} = \frac{1}{\alpha \theta + \beta} G_{v1}^*$$

L'ensemble des valeurs des paramètres de comportement sont données au tableau 1.

Paramètre	Nom	Valeur	Unité
$E$	Module de Young	200	GPa
$\nu$	Coefficient de poisson	0.3	-
$G_{v1}^*$	Module de cisaillement visqueux de fluage irradiation	9.52e+16	s.Pa
$\alpha$	-	12.01	-
$\beta$	-	0.22	-
$G_{vn}$	Module de cisaillement visqueux de fluage thermique	3.68e+43	s.Pa <sup>n</sup>
$n$		3.67	-

TABLE 1 – Paramètres de la loi de comportement.

## 4.2 Calcul mécanique par FFT

Le VER généré est soumis à un premier essai mécanique. Les calculs mécaniques sont réalisés par une méthode FFT [16], qui permet d'effectuer des calculs rapides sur des grandes grilles périodiques.

**Problème à résoudre** Le problème mécanique local est le suivant :

$$\begin{cases} \operatorname{div}(\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t)) = 0, & \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) \text{ anti-périodique,} \\ \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{L} : (\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}, t) - \boldsymbol{\varepsilon}^v(\mathbf{x}, t) - \boldsymbol{\varepsilon}^g(\mathbf{x}, t)), \\ \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}, t) = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}(t) \cdot \mathbf{x} + \mathbf{u}^*(\mathbf{x}, t), & \mathbf{u}^*(\mathbf{x}, t) \text{ périodique.} \end{cases} \quad (14)$$

couplé à l'équation différentielle (13) qui gouverne l'évolution des déformations viscoplastiques. C'est un problème avec conditions aux limites de périodicité, dont le chargement consiste à imposer un historique de déformations macroscopiques  $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}(t)$  et de gonflement  $\boldsymbol{\varepsilon}^g(\mathbf{x}, t)$ .

Dans le calcul présenté ici, le gonflement est nul et la déformation macroscopique est purement dévia-

torique, de vitesse constante :

$$\bar{\varepsilon}(t) = \begin{pmatrix} \bar{\varepsilon}(t) & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{\bar{\varepsilon}(t)}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{\bar{\varepsilon}(t)}{2} \end{pmatrix}, \quad \text{avec } \bar{\varepsilon}(t) = \dot{\varepsilon} \cdot t \quad \text{et } \dot{\varepsilon} = 5 \times 10^{-10} \text{ s}^{-1}$$

Les calculs montrent que la contrainte macroscopique est approximativement de la forme :

$$\bar{\sigma}(t) = \begin{pmatrix} \bar{\sigma}(t) & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{\bar{\sigma}(t)}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{\bar{\sigma}(t)}{2} \end{pmatrix}. \quad (15)$$

Ce résultat s'explique

- d'une part parce que le chargement mécanique est sans augmentation de volume : macroscopiquement déviatorique et sans gonflement ;
- et d'autre part parce que la microstructure générée est presque isotrope. L'écart entre la contrainte macroscopique calculée et la contrainte de la forme (15), d'environ 0.1 %, traduit un défaut d'isotropie.

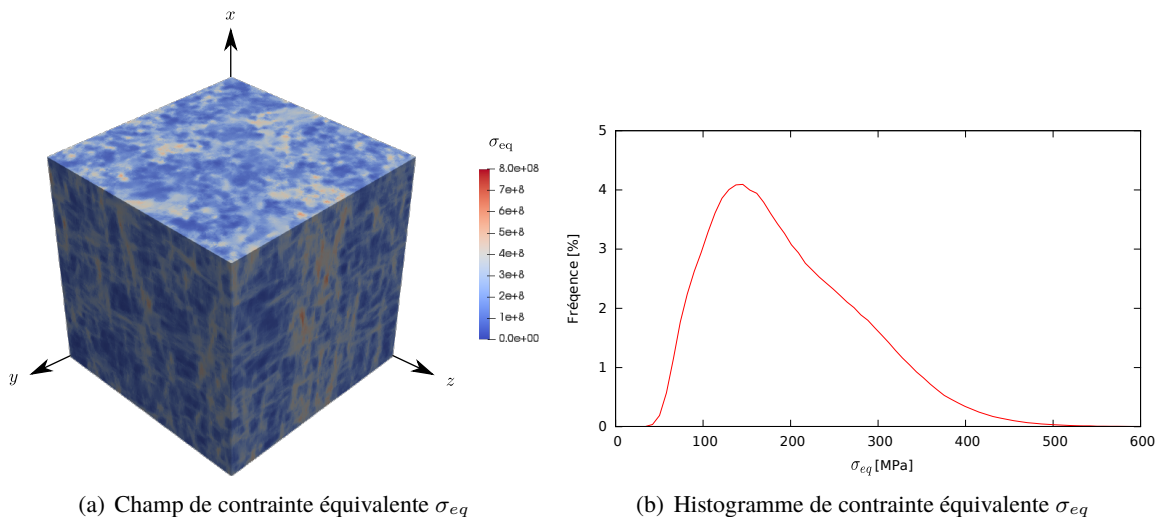


FIGURE 8 – Champ et histogramme de la contrainte équivalente de von-Mises en fin de chargement.

La figure 8 montre le champ et l'historgramme de la contrainte équivalente de von-Mises  $\bar{\sigma}_{eq}$  en fin de chargement. La figure 9 compare l'évolution de la contrainte macroscopique  $\bar{\sigma}$  à celle d'un milieu homogène en plutonium, de module de cisaillement visqueux  $\langle G_{v1} \rangle$  moyen. Trois méthodes ont été considérées pour réaliser cette moyenne : les moyennes arithmétique, harmonique et géométrique, définies respectivement par :

$$\begin{aligned} \langle G_{v1} \rangle_{\text{ari}} &= E[G_{v1}] = 1.67 G_{v1}^*, \\ \langle G_{v1} \rangle_{\text{har}} &= \frac{1}{E[1/G_{v1}]} = G_{v1}^*, \\ \text{et } \langle G_{v1} \rangle_{\text{géom}} &= \exp(E[\ln(G_{v1})]) = 1.31 G_{v1}^*. \end{aligned}$$

Les moyennes arithmétique et harmonique fournissent des bornes supérieure et inférieure du comportement effectif asymptotique limite, et la moyenne géométrique, une bonne approximation du comporte-

ment moyen.

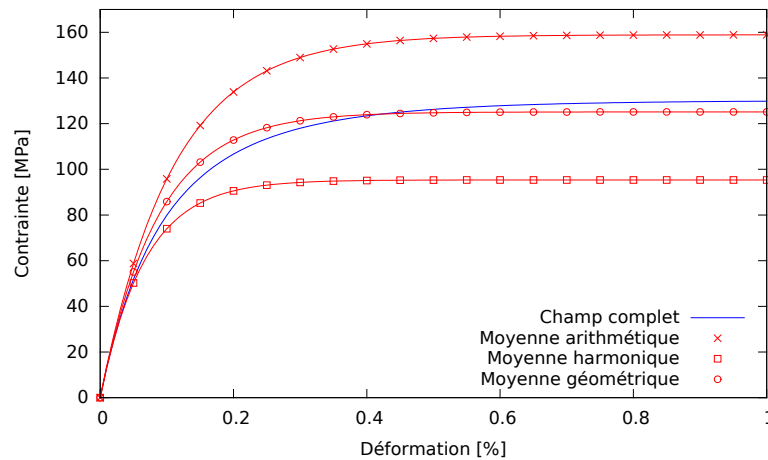


FIGURE 9 – Évolution de la contrainte  $\bar{\sigma}$  en fonction de la déformation  $\bar{\varepsilon}$ .

## 5 Conclusion

Générer des microstructures 3D à partir de cartographies 2D nécessite de caractériser une texture pour la reproduire. Les techniques de géostatistique ont permis une première caractérisation statistique de la texture d'un combustible nucléaire : la loi marginale, la fonction de covariance spatiale de la teneur en plutonium. Les cartographies de départ, obtenues par microsonde électronique, sont bruitées ce qui complique l'analyse. Le calcul de la densité de probabilité, notamment, a demandé la régularisation d'un problème mathématiquement mal posé.

L'utilisation de fonctions aléatoires gaussiennes anamorphosées ont permis de générer des microstructures périodiques 3D qui respectent la loi marginale et la fonction de covariance spatiale extraites expérimentalement. Les microstructures générées respectent les tailles et la distribution des agrégats pauvres et riches en plutonium, mais la forme des particules a disparu. Elles respectent la répartition continue de la teneur en plutonium. La méthode de génération de microstructure proposée sera améliorée à l'avenir en utilisant les ensembles aléatoires pour respecter la forme des particules.

Les premiers calculs ont été effectués sur la microstructure périodique en utilisant une méthode de résolution par transformées de Fourier rapides (FFT) avec des temps de calcul raisonnables. La suite du travail consiste à homogénéiser le matériau par une approche NTFA (Nonuniform Transformation Field Analysis) [5]. La prise en compte de la partie non-linéaire de la déformation viscoplastique sera assurée en utilisant l'approximation TSO (tangent second order) [17].

## Références

- [1] S. Roussette, J.C. Michel, and P. Suquet. Nonuniform transformation field analysis of elastic-viscoplastic composites. *Composites Science and Technology*, 69 :22–27, 2009.
- [2] J.-M. Ricaud and R. Masson. Effective properties of linear viscoelastic heterogeneous media : Internal variables formulation and extension to ageing behaviours. *International Journal of Solids and Structures*, 46 :1599–1606, 2009.

- [3] R. Largeton, J.-C. Michel, and P. Suquet. Extension of the Nonuniform Transformation Field Analysis to linear viscoelastic composites in the presence of aging and swelling. *Mechanics of Materials*, 73 :76–100, 2014.
- [4] S Roussette. *Analyse par champs de transformation de matériaux élastoviscoplastiques multiphases – Application aux combustibles MOX*. PhD thesis, Université de la Méditerranée, 2005.
- [5] J.-C. Michel and P. Suquet. Nonuniform transformation field analysis. *International Journal of Solids and Structures*, 40 :6937–6955, 2003.
- [6] G. Matheron. *La théorie des variables régionalisées et ses applications*. Fasc.5, Cahiers du Centre de Morphologie Mathématique. ENSMP, Paris, 1970.
- [7] C. Daly. *Applications de la géostatistique à quelques problèmes de filtrage*. PhD thesis, École Nationale Supérieure des Mines de Paris, 1991.
- [8] C. Lantuéjoul. *Geostatistical simulation. Models and algorithms*. Springer Verlag, Berlin, 2002.
- [9] G. Oudinet, I. Munoz-Viallard, L. Aufore, M.-J. Gotta, J.M. Becker, G. Chiarelli, and R. Castelli. Characterization of plutonium distribution in MIMAS MOX by image analysis. *Journal of Nuclear Materials*, 375 :86–94, 2008.
- [10] F. Maurice, L. Meny, and R. Tixier, editors. *Microanalyse et microscopie électronique à balayage*. Les éditions de physique, 1978.
- [11] J.W. Jawitz. Moments of truncated continuous univariate distributions. *Advances in Water Resources*, 27 :269–281, 2004.
- [12] G. Matheron. *Leçon sur les fonctions aléatoires d'ordre 2*. École des Mines de Paris, 1972.
- [13] F. Ruan and D. McLaughlin. An efficient multivariate random field generator using the fast fourier transform. *Advances in Water Resources*, 21(5) :385–399, 1998.
- [14] A. Lang and J. Potthoff. Fast simulation of gaussian random fields. *Monte Carlo Methods and Applications*, 17(3) :195–214, 2011.
- [15] C. Lantuéjoul. *Cours de sélectivité*. C-140. Centre de géostatistique, ENSMP, 1990.
- [16] H. Moulinec and 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.
- [17] J.-C. Michel and P. Suquet. A model-reduction approach in micromechanics of materials preserving the variational structure of the constitutive relations. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 90 :254–285, 2016.