

**UNIVERSITE MONTPELLIER II
SCIENCES ET TECHNIQUES DU LANGUEDOC**

THESE

pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITE MONTPELLIER II

Discipline : Mécanique, Génie Mécanique et Génie Civil
Formation Doctorale : Mécanique des matériaux et des milieux complexes,
des structures et systèmes
Ecole Doctorale : Informations, Structures, Systèmes

présentée et soutenue publiquement

par

Frédéric PERALES

le 15 décembre 2005

Titre :

**FISSURATION DES MATERIAUX A GRADIENT DE PROPRIETES.
APPLICATION AU ZIRCALOY HYDRURE.**

JURY

MM. T. BRETHERAU	Directeur de recherche CNRS, ENSAM	Rapporteur
N. MOËS	Professeur, ECN	Rapporteur
M. BORNERT	Chercheur, LMS - EP	Examineur
D. DUREISSEIX	Professeur, LMGC - UM II	Examineur
A. CHRYSOCHOOS	Professeur, LMGC - UM II	Directeur de thèse
Y. MONERIE	Ingénieur-Chercheur, IRSN	Encadrant
C. BERNAUDAT	Ingénieur, EdF	Membre invité
S. BOURGEOIS	Maître de conférences, LMA - EGIM	Membre invité
F. DUBOIS	Ingénieur de recherche CNRS, LMGC	Membre invité
L. STAINIER	Maître de conférences, ULg	Membre invité

**UNIVERSITE MONTPELLIER II
SCIENCES ET TECHNIQUES DU LANGUEDOC**

THESE

pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITE MONTPELLIER II

Discipline : Mécanique, Génie Mécanique et Génie Civil
Formation Doctorale : Mécanique des matériaux et des milieux complexes,
des structures et systèmes
Ecole Doctorale : Informations, Structures, Systèmes

présentée et soutenue publiquement

par

Frédéric PERALES

le 15 décembre 2005

Titre :

**FISSURATION DES MATERIAUX A GRADIENT DE PROPRIETES.
APPLICATION AU ZIRCALOY HYDRURE.**

JURY

MM. T. BRETHERAU	Directeur de recherche CNRS, ENSAM	Rapporteur
N. MOËS	Professeur, ECN	Rapporteur
M. BORNERT	Chercheur, LMS - EP	Examineur
D. DUREISSEIX	Professeur, LMGC - UM II	Examineur
A. CHRYSOCHOOS	Professeur, LMGC - UM II	Directeur de thèse
Y. MONERIE	Ingénieur-Chercheur, IRSN	Encadrant
C. BERNAUDAT	Ingénieur, EdF	Membre invité
S. BOURGEOIS	Maître de conférences, LMA - EGIM	Membre invité
F. DUBOIS	Ingénieur de recherche CNRS, LMGC	Membre invité
L. STAINIER	Maître de conférences, ULg	Membre invité

Remerciements

Je remercie en premier lieu Yann Monerie, mon encadrant IRSN, de m'avoir fait confiance en me proposant ce sujet de thèse. Sa constante disponibilité, la qualité de ses conseils dans de nombreux domaines et son soutien moral pendant les moments difficiles de la thèse ont été déterminants dans l'aboutissement de ce travail. Je n'aurais pu imaginer meilleur guide pour accompagner mes premiers pas dans le monde de la recherche scientifique. Qu'il trouve ici le témoignage de ma profonde reconnaissance.

Je tiens à remercier André Chrysochoos, mon directeur de thèse, pour m'avoir soutenu et encadré pendant ces trois années de thèse.

Je tiens à exprimer toute ma gratitude à David Dureisseix pour l'honneur qu'il m'a fait de présider mon jury, ainsi qu'à Thierry Bretheau et Nicolas Moës pour avoir accepté la tâche souvent longue et difficile de rapporteur de ce mémoire de thèse. Je remercie également les membres de ce jury :

- Michel Bornert, pour les suggestions et les remarques judicieuses qu'il m'a indiquées,
- Christian Bernaudat, mon correspondant EdF, pour avoir accepté de suivre la thèse,
- Stéphane Bourgeois, pour ses conseils éclairés sur l'homogénéisation périodique,
- Frédéric Dubois, pour son investissement dans le développement de la plateforme numérique, notamment les couplages avec LMGC90, et ses nombreux conseils,
- Laurent Stainier, pour son aide et les développements spécifiques dans MatLib.

Je souhaite de plus remercier Bruno Piar pour ses conseils et l'intégration des modifications dans PELICANS.

Je remercie également Fabienne Ribeiro d'avoir accepté de relire ce mémoire.

J'ai effectué ma thèse au sein du Laboratoire d'Etude du Combustible. Je remercie chaleureusement les membres de ce laboratoire pour m'avoir accueilli, aidé et soutenu durant la thèse et plus particulièrement le chef du laboratoire, Marc Petit, pour m'avoir donné les moyens de réaliser cette thèse dans les meilleures conditions possibles. Mes remerciements s'adressent également à tous les membres du SEMIC/SEMCA (ex SEMAR) et des sociétés prestataires de service. J'ai eu la chance de bénéficier d'un environnement enrichissant et dynamique.

Je remercie les membres du Laboratoire de Mécanique et Génie Civil de Montpellier pour leur accueil lors de mes nombreux séjours.

Je remercie également les secrétaires, toujours souriantes, sans qui l'administration serait une tâche redoutable.

Je tiens à saluer mes compagnons de thèse : Matthieu (avec 2 t) Jobelin, Patrick Roux et plus récemment Guillaume Ansanay, Vincent Busser, Laura Gastaldo, Céline Lapuerta, Christian Mun,

Pierre Guy Vincent (dit PGV), ... pour les moments passés et les discussion scientifiques et surtout non scientifiques... ; ainsi que les stagiaires qui ont contribué à ce travail : Marc Charnoz et Grégoire Mars.

Je remercie Tux pour avoir ouvert une fenêtre libre sur le monde et m'avoir permis de garder espoir.

Un grand merci à ma famille et plus particulièrement à mes parents qui m'ont soutenu et encouragé tout au long de ces années.

Je ne saurais terminer cette liste sans un merci particulier à Rachelle, qui a eu la lourde tâche de me soutenir durant toutes ces années et de me supporter au quotidien. Sa patience et ses encouragements m'ont largement aidé à mener à bien cette thèse.

Table des matières

I	Position du problème et choix de modélisation	15
1	Etat de l'art sur le problème industriel	17
1.1	Contexte industriel	19
1.2	Matériau d'étude et microstructure	21
1.2.1	Le zirconium	21
1.2.2	Le Zircaloy-4	23
1.2.3	Effets de l'irradiation, de la corrosion et de l'hydruration	24
1.3	Approche globale : mécanique linéaire de la rupture	26
1.3.1	La théorie d'Irwin (1957)	28
1.3.2	L'approche énergétique de Griffith (1920)	28
1.3.3	Equivalence des théories d'Irwin (1957) et Griffith (1920)	29
1.3.4	Intégrale de Rice (1968)	29
1.4	Les limites d'une approche globale	30
1.4.1	Structure mince	30
1.4.2	Matériau à gradient de propriétés	30
1.4.3	Amorçage de fissures sans préfissure	31
1.4.4	Chargement dynamique rapide	31
1.4.5	Bilan	31
1.5	Modèles de fissuration de matériaux hydrurés	31
1.5.1	Le modèle de Wappling et al. (1997)	31
1.5.2	Le modèle de Lufrano et al. (1998)	32
1.5.3	Le modèle de Grange (1998)	32
1.5.4	Le modèle de Kuroda et al. (2001)	34
1.5.5	Le modèle de Pierron (2002)	35
1.5.6	Le modèle de Varias et Massih (2002)	35
1.6	Bilan du chapitre	37
2	Démarche multiéchelle et modélisation multicorps	39
2.1	Approche multicorps et complémentarité volumique/surfacique	41
2.2	Démarche multiéchelle	42
2.2.1	Problématique	42
2.2.2	Echelle microscopique	43
2.2.3	Echelle macroscopique	45
2.2.4	Démarche	46
2.3	Bilan du chapitre	47

3	Modèle de zone cohésive frottante	49
3.1	Approche locale retenue	51
3.2	Les modèles de zone cohésive	53
3.2.1	Introduction	53
3.2.2	Décomposition dans le repère normal/tangent	55
3.2.3	Différents modèles de zone cohésive	55
3.2.4	Les avantages des modèles de zone cohésive	66
3.2.5	Les principales difficultés et solutions associées	67
3.3	Contact unilatéral - frottement	69
3.3.1	Condition de Signorini	69
3.3.2	Frottement de Coulomb	70
3.4	Modèle de zone cohésive frottante	71
3.4.1	Adhésion et contact frottant	72
3.4.2	Loi adhésive	72
3.4.3	Paramètres et interprétation du modèle	73
3.4.4	Energies de décohésion	78
3.5	Bilan du chapitre	80
II	Traitement numérique	81
4	Elements finis périodiques : formulation à deux champs	83
4.1	Motivations	85
4.2	Champs microscopiques périodiques	86
4.3	Problème périodique	87
4.3.1	Position du problème périodique	87
4.3.2	Formulation variationnelle spécifique	91
4.3.3	Approximation variationnelle	94
4.4	Bilan du chapitre	97
5	Traitement dynamique du problème multicorps	99
5.1	Extension de la méthode Non-Smooth Contact Dynamics au cas périodique	101
5.1.1	Ecriture au sens des mesures	101
5.1.2	Intégration temporelle	102
5.1.3	Intégration des non linéarités	103
5.1.4	Changement de variables	106
5.2	Relations entre les variables globales et locales	107
5.2.1	Condensation des variables aux contacts	107
5.2.2	Condensation de la matrice des itérations aux contacts	108
5.3	Résolution à l'échelle du contact	108
5.3.1	Résolution du problème de contact frottant	108
5.3.2	NSCD et CZM	109
5.4	Algorithme de résolution	110
5.4.1	Problème standard	110
5.4.2	Problème périodique	110
5.5	Bilan du chapitre	113

6	Plateforme numérique développée	115
6.1	Présentation des bibliothèques	117
6.1.1	LMGC90	117
6.1.2	PELICANS	117
6.1.3	MATLIB	118
6.2	Architecture logicielle	118
6.2.1	Description	118
6.2.2	Application PELICANS	119
6.2.3	Interface PELICANS/MATLIB	121
6.2.4	Interface LMG90/PELICANS	121
6.3	Le logiciel X-per	121
6.3.1	Fonctionnalités	121
6.3.2	Entrées/Sorties	122
6.3.3	Evolution future	123
6.4	Bilan du chapitre	123
III	Application au Zircaloy hydruré	125
7	Choix et hypothèses de modélisation	127
7.1	Comportements volumiques	129
7.1.1	Zircaloy	129
7.1.2	Hydrures	131
7.1.3	Zircone	131
7.1.4	Bilan sur les comportements volumiques	131
7.2	Comportements surfaciques	132
7.2.1	Détermination de la raideur initiale interfaciale	132
7.2.2	Détermination de la contrainte cohésive maximale	137
7.2.3	Bilan sur les comportements surfaciques	140
7.3	Microstructure	141
7.3.1	Taille de la cellule de base	141
7.3.2	Taille des inclusions d'hydrure	142
7.4	Maillage	142
7.4.1	Géométrie des mailles	142
7.4.2	Taille des mailles	144
7.5	Bilan du chapitre	148
8	Simulations numériques à l'échelle microscopique	149
8.1	Description des essais numériques	151
8.2	Zircaloy vierge	151
8.3	Zircaloy hydruré	152
8.3.1	Cas d'hydrures fragilisants ($\hat{R}^H = 0.45 \hat{R}^{Zr}$)	152
8.3.2	Cas d'hydrures durcissants-fragilisants ($\hat{R}^H = 1.3 \hat{R}^{Zr}$)	155
8.3.3	Conclusion	160
8.4	Bilan du chapitre	161

9	Echelle macroscopique : calculs de structure	163
9.1	Paramètres surfaciques : passage de l'échelle micro à l'échelle macro	165
9.2	Gradient d'hydrogène dans la gaine	165
9.3	Portion de gaine de combustible	168
9.3.1	Description des calculs numériques paramétrés	168
9.3.2	Résultats des essais numériques	168
9.4	Gaine de combustible	171
9.4.1	Description de la simulation numérique	171
9.4.2	Résultats	171
9.5	Bilan du chapitre	176
	Bibliographie	181
IV	Annexes	193
A	Nomenclature	195
B	Microstructures	201
B.1	1.6%	202
B.2	3.2%	203
B.3	4.8%	205
B.4	9.5%	207
B.5	20.7%	208
B.6	30.2%	209
B.7	39.7%	210
B.8	49.3%	211
B.9	60.5%	212
C	Echelle microscopique : résultantes vs déformation	213
C.1	Zircaloy	213
C.2	$\hat{R}^H = 0.45 \hat{R}^{Zr}$	214
C.3	$\hat{R}^H = 1.3 \hat{R}^{Zr}$	219
D	Profils du gradient d'hydrogène	225
E	Echelle macroscopique : résultats	229
E.1	$[\bar{H}] = 100ppm$	229
E.2	$[\bar{H}] = 200ppm$	232
E.3	$[\bar{H}] = 300ppm$	236
E.4	$[\bar{H}] = 500ppm$	239
E.5	$[\bar{H}] = 700ppm$	243
E.6	$[\bar{H}] = 18242ppm$	246
F	Rappels et notations en grandes transformations	247
F.1	Configurations du système et formulations	247
F.2	Cinématique	248
F.2.1	Déplacement, vitesse et accélération	248
F.2.2	Tenseur gradient de la transformation	248

F.2.3	Tenseur de Cauchy-Green	249
F.2.4	Tenseur des déformations	249
F.3	Tenseur des contraintes	250
F.3.1	Contraintes de Cauchy	250
F.3.2	Contraintes de Piola-Kirchhoff de première espèce	250
F.3.3	Contraintes de Piola-Kirchhoff de seconde espèce	251
G	Bilan d'énergie	253
H	Algorithme : passage de déformation plane en contrainte plane	257
I	Contributions élémentaires éléments finis	259
I.1	Problème standard	259
I.2	Problème périodique	260

Introduction

L'Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire (IRSN) réalise des recherches et des expertises scientifiques dans les domaines de la sûreté nucléaire et de la radioprotection. Dans le cadre de la sûreté des installations, le Service d'Etude et de Modélisation du Combustible en situation Accidentelle (SEMCA) de l'IRSN effectue des recherches sur la modélisation du comportement thermomécanique du combustible des réacteurs nucléaires en dehors des conditions nominales de fonctionnement.

Cette thèse, réalisée au sein du SEMCA, s'inscrit dans le cadre du programme de modélisations avancées de l'IRSN et d'Electricité de France (EdF) pour la compréhension et la simulation numérique du comportement des crayons combustibles, gaine et pastilles de combustibles, lors de transitoires accidentels de type RIA dans les Réacteurs à Eau sous Pression (REP).

Durant sa vie en réacteur, la gaine, tube contenant les pastilles de combustible, subit les effets couplés de l'irradiation, l'oxydation et l'hydruration par le fluide caloporteur. Ces effets, dépendant du taux de combustion, ont pour conséquence une modification de la microstructure et des propriétés mécaniques de la gaine en Zircaloy et conduisent à sa fragilisation. L'hydruration correspond à la formation de plaquettes d'hydrures dans l'épaisseur de la gaine. Dans le cas d'un éventuel transitoire accidentel, les hydrures deviennent les lieux privilégiés de l'amorçage de fissures puis de leurs propagations dans la matrice. Ces fissures peuvent conduire à la ruine de la gaine de combustible qui constitue la première des trois barrières de sûreté et ainsi à la dissémination de la matière radioactive.

Les objectifs de l'étude sont la compréhension et la prédiction des phénomènes de fissuration dans les gaines en Zircaloy à fort taux de combustion lors de transitoires accidentels de type RIA. D'un point de vue mécanique, la problématique est la fissuration de matériaux hétérogènes et à gradients de propriétés sous chargement dynamique rapide.

Démarche de l'étude

La gaine de combustible est un tube, mince et élancé, de gainage en Zircaloy. Du fait des processus d'irradiation/hydruration lors de son séjour en réacteur, la microstructure de la gaine correspond à un biphasé constitué d'une matrice métallique de Zircaloy contenant des inclusions d'hydrures dont la teneur varie graduellement dans l'épaisseur. La mécanique de la rupture étant en limite d'application dans la description de la fissuration de ces gainages à gradient de propriétés, l'utilisation d'approches locales, prenant en compte la microstructure, semble plus adaptée.

L'approche locale permet de décrire localement les phénomènes complexes de fissuration. Ces phénomènes incluent le contact et le frottement apparaissant dans les matériaux hétérogènes, notamment à l'interface entre des phases n'ayant pas les mêmes comportements. Par exemple, des coefficients

de Poisson différents peuvent engendrer l'apparition de cisaillement au niveau de l'interface.

Ces approches locales sont mises en œuvre dans une démarche multiéchelle. Cette démarche permet la prise en compte de la microstructure lors du calcul de la résistance de la gaine, en restant raisonnable en termes de temps calcul.

Lors d'un transitoire accidentel, la gaine peut se déformer de quelques dizaines de pourcent, le cadre adopté dans cette étude est donc celui des grandes transformations.

Plus précisément, la mise en œuvre des approches locales, basées sur la notion de zone cohésive, est effectuée à partir de techniques multicorps. Ces techniques consistent à découpler le comportement en une partie volumique, décrivant le comportement de chaque corps, et en une partie surfacique, décrivant la fissuration entre les corps. Chaque interface entre les corps devient alors un trajet de fissuration potentiel, autorisant notamment une multifissuration du matériau. Le comportement de ces frontières est décrit par des relations mixtes, obtenues par l'utilisation de modèles de zone cohésive. Ces modèles peuvent être vu comme la donnée d'une contrainte s'appliquant sur chaque frontière en fonction d'un saut de déplacement entre les corps. Les modèles de zone cohésive considérés ici étendent la notion d'adhésion en incluant le contact unilatéral et le frottement de Coulomb et sont appelés Modèles de Zone Cohésive Frottante (MZCF).

Les conditions de contact et de frottement conduisent à une dynamique non régulière traitée par l'approche Non-Smooth Contact Dynamics (NSCD). Cette approche est dédiée au traitement dynamique des conditions surfaciques non régulières sans régularisation et sans pénalisation.

La mise en œuvre de l'approche multiéchelle est effectuée à l'aide de techniques d'homogénéisation analytique pour les comportements volumiques des corps et numérique périodique pour les comportements surfaciques entre les corps. Dans cette étude, on s'intéresse à l'obtention du comportement effectif surfacique c'est-à-dire d'une loi surfacique homogénéisée dépendant de la microstructure.

Les techniques d'homogénéisation numérique périodique multicorps nécessitent d'étendre le problème périodique "standard", déjà bien établi, au cas multicorps. La formulation Eléments Finis devient ainsi une formulation Eléments Finis périodique à deux champs, un champ homogène et un champ périodique. Le champ périodique prend en compte les hétérogénéités du matériau ; ces hétérogénéités ont pour origine d'une part la microstructure (inclusions) et d'autre part la fissuration. En particulier, l'existence de conditions surfaciques entre chaque maille impose d'enrichir les champs de déplacement périodiques standards par des champs de sauts de déplacements périodiques. La méthode NSCD est alors étendue à cette formulation à deux champs. On montre que cette extension peut se ramener à des étapes de projection-relèvement.

Numériquement, l'approche multicorps périodique dans le cadre de la méthode NSCD étendue est développée, avec une conception globale orientée objet, dans un outil de simulation numérique. Ce logiciel, appelé X-per, est obtenu par le couplage mixte de trois bibliothèques, chaque bibliothèque ayant une fonction mécanique clairement identifiée :

- une bibliothèque Eléments Finis,
- une bibliothèque dédiée au traitement de comportements surfaciques,
- une bibliothèque de comportements volumiques.

Ce logiciel permet des simulations dynamiques, en grandes déformations, de l'amorçage et de la propagation de multifissures dans des matériaux hétérogènes.

Enfin, après avoir présenté les choix de modélisation, l'étude multiéchelle est mise en œuvre :

- à l'échelle microscopique, une étude paramétrique en fonction du taux d'inclusion et de la statistique des tirages des Volumes Elémentaires Représentatifs est conduite. Elle permet d'obtenir le comportement en fissuration homogène équivalent des microstructures étudiées. Il s'agit d'une vaste étude représentant plus de 200 jours CPU. Elle révèle des comportements équivalents originaux et difficilement appréhendables a priori, ainsi que le montre des comparaisons à différents modèles "d'homogénéisation pragmatique" de la littérature,
- à l'échelle macroscopique, des calculs dynamiques de structures sur des portions de gaine en fonction de la concentration d'hydrogène moyenne et de l'intensité du gradient sont effectués. Dans cette étude, les portions de gaines sont soumises à un chargement dynamique rapide représentatif d'une situation accidentelle. Les gradients considérés dépendent de la distribution des hydrures dans la gaine et sont monotones croissants avec un "rim" (zone très dense) d'hydrures dans la périphérie externe. Ici encore cette étude représente plus de 200 jours CPU. Elle montre pour l'essentiel que pour les gaines peu hydrurées la présence d'un gradient s'avère néfaste alors qu'il devient bénéfique au-delà d'un certain niveau d'hydruration. Ce résultat a des conséquences importantes du point de vue de l'analyse conservatrice de sûreté.

Enfin, les potentialités de la démarche et de l'outil de simulation associé en termes de calcul de structure sont illustrées sur la simulation d'une section complète de gaine possédant un "blister" (cloque périphérique composée exclusivement d'hydrures) soumise à un chargement dynamique rapide.

Plan de l'étude

Ce mémoire s'articule autour de trois parties.

La première partie concerne le problème industriel (Chapitre 1) et les grandes lignes de la démarche adoptée pour le traiter (Chapitre 2).

Le problème industriel est celui de la rupture des gainages de combustibles nucléaires à fort taux de combustion. Il s'agit de structures métalliques élancées présentant un gradient d'hydrogène selon l'épaisseur. Le choix motivé d'une approche locale multiéchelle pour l'analyse de leur fissuration est présenté dans ce même Chapitre.

Aux différentes échelles du problème (la microstructure, la structure : la gaine), une décomposition multicorps est retenue. Ce modèle considère chaque maille d'une discrétisation spatiale par la méthode des Eléments Finis comme un corps à part entière et chaque frontière entre les corps comme un trajet de fissuration potentiel. Le comportement de ces frontières est décrit par des modèles de zone cohésive.

Un modèle particulier de zone cohésive couplé à du contact frottant et adapté au problème considéré est détaillé au Chapitre 3.

Différents éléments bibliographiques sont présentés tout au long de cette partie : matériau de l'étude, méthodes globales et locales pour la fissuration, modèles de zone cohésive, modèles de fissuration des matériaux hydrurés et des matériaux à gradient de propriétés.

La seconde partie est consacrée aux développements des méthodes numériques (formulation, mise en œuvre) dédiées au traitement de la modélisation multiéchelle-multicorps proposée.

Pour l'essentiel, ces développements concernent :

- une formulation Eléments Finis périodiques à deux champs (Chapitre 4),

- une extension de la méthode Non-Smooth Contact Dynamics à cette formulation (Chapitre 5).

La formulation Eléments Finis périodiques à deux champs (un champ homogène, un champ périodique) permet le traitement des méthodes d'homogénéisation numérique envisagées dans l'approche multiéchelle de la partie précédente.

La méthode NSCD est alors étendue à cette formulation à deux champs.

Ces développements sont mis en œuvre dans un outil numérique basé sur le couplage de différentes bibliothèques (Chapitre 6). L'architecture logicielle retenue donne à chaque bibliothèque une fonction mécanique clairement identifiée. Les potentialités de l'outil final vont au-delà de la présente étude.

La troisième partie est consacrée aux applications numériques et apporte un certain nombre d'éléments de réponse au problème industriel posé.

Dans un premier temps, les choix de modélisation sont présentés en détail (Chapitre 7) : quels sont les modèles comportementaux et les paramètres matériaux judicieux compte tenu d'une forte dispersion ou d'un manque dans les données expérimentales ? Y a-t-il une dépendance des résultats de fissuration au maillage ? A son orientation ? etc ...

Dans un second temps, une étude paramétrique en fonction de la concentration moyenne d'inclusions et de la statistique des tirages de Volumes Élémentaires Représentatifs est conduite (Chapitre 8).

Dans un troisième temps, des calculs de structure sur des portions de gaine de combustible sont réalisés (Chapitre 9). Ces calculs sont paramétrés en fonction de deux paramètres : concentration moyenne d'hydrogène et intensité du gradient.

Les potentialités de la démarche et de l'outil de simulation associé en termes de calcul de structure sont illustrées sur la simulation d'une section complète de gaine possédant un "blister" d'hydrures.

Première partie

Position du problème et choix de
modélisation

Chapitre 1

Etat de l'art sur le problème industriel

Sommaire

1.1	Contexte industriel	19
1.2	Matériau d'étude et microstructure	21
1.2.1	Le zirconium	21
1.2.2	Le Zircaloy-4	23
1.2.3	Effets de l'irradiation, de la corrosion et de l'hydruration	24
1.3	Approche globale : mécanique linéaire de la rupture	26
1.3.1	La théorie d'Irwin (1957)	28
1.3.2	L'approche énergétique de Griffith (1920)	28
1.3.3	Equivalence des théories d'Irwin (1957) et Griffith (1920)	29
1.3.4	Intégrale de Rice (1968)	29
1.4	Les limites d'une approche globale	30
1.4.1	Structure mince	30
1.4.2	Matériau à gradient de propriétés	30
1.4.3	Amorçage de fissures sans préfissure	31
1.4.4	Chargement dynamique rapide	31
1.4.5	Bilan	31
1.5	Modèles de fissuration de matériaux hydrurés	31
1.5.1	Le modèle de Wappling et al. (1997)	31
1.5.2	Le modèle de Lufrano et al. (1998)	32
1.5.3	Le modèle de Grange (1998)	32
1.5.4	Le modèle de Kuroda et al. (2001)	34
1.5.5	Le modèle de Pierron (2002)	35
1.5.6	Le modèle de Varias et Massih (2002)	35
1.6	Bilan du chapitre	37

1.1 Contexte industriel

Un Réacteur à Eau sous Pression (REP) est constitué d'assemblages combustibles (157 pour un réacteur de puissance 900MWe). Chaque assemblage combustible est composé (FIG.1.1) :

- d'un réseau à pas carré 17x17 contenant 264 crayons combustibles,
- de 24 tubes-guides servant au passage des barres de contrôle ; celles-ci sont constituées d'un matériau qui capture les neutrons.

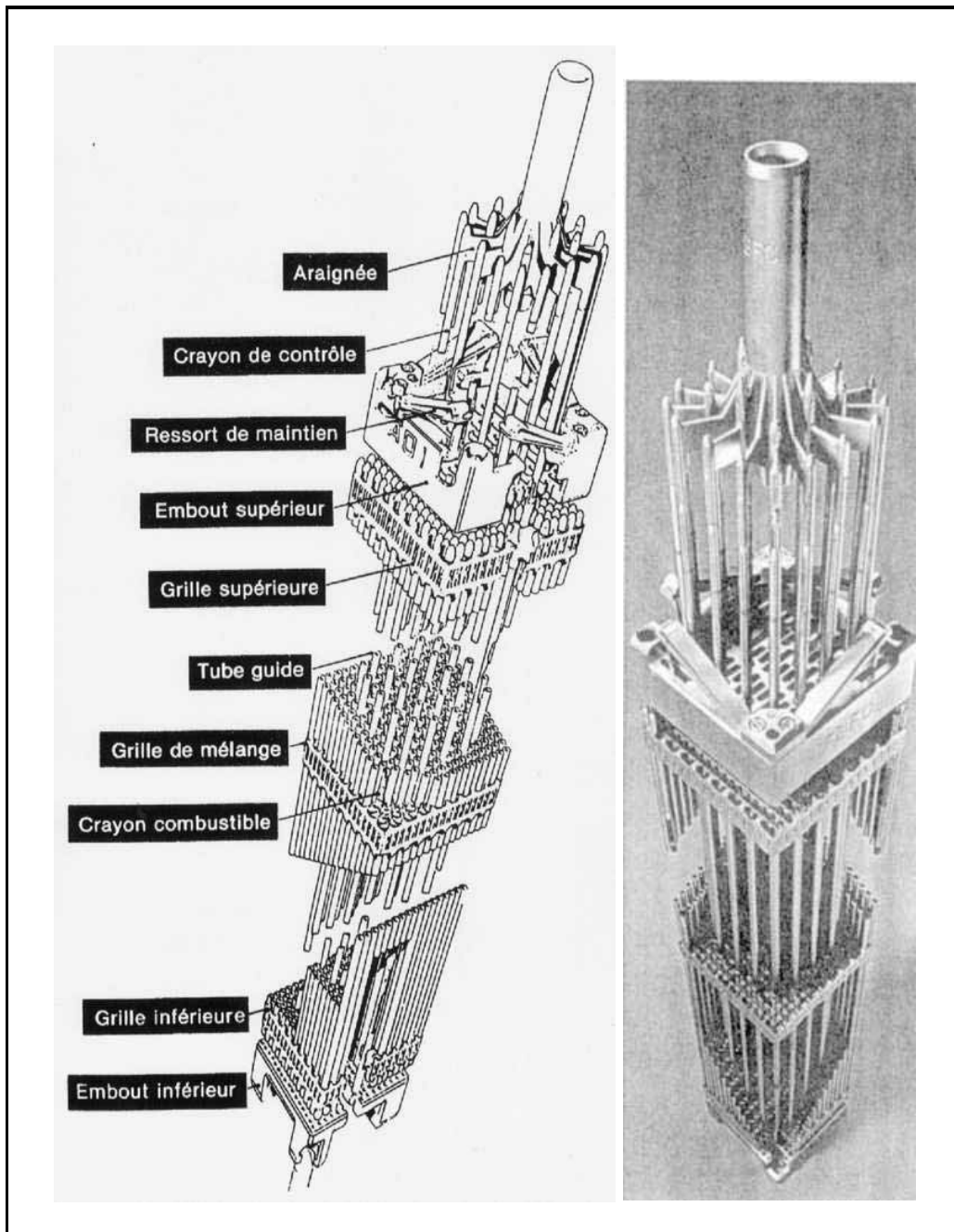


FIG. 1.1 – Assemblage combustible (Baron et Motir, 1992-1993)

Les barres de contrôles permettent de réguler la puissance du réacteur et de l'arrêter en cas d'augmentation brutale de puissance.

Un crayon combustible (FIG. 1.2) est constitué d'une gaine de combustible contenant 256 pastilles de combustible cylindriques (13.5mm de hauteur et 8.19mm de diamètre) d'oxyde d'uranium (UO₂) ou d'oxyde mixte d'uranium et de plutonium (MOX). La gaine de combustible est un tube de gainage en alliage de zirconium, appelé Zircaloy, d'une longueur d'environ 4m, d'un diamètre de 9.50mm et d'épaisseur de 0.57mm. Le choix du matériau de gainage s'est porté sur des alliages de zirconium en raison :

- de leur très bonne transparence aux neutrons thermiques,
- de leur résistance aux effets de l'irradiation,
- de leur bon comportement mécanique dans les plages de température en réacteur,
- de leur bonne résistance à la corrosion par le fluide caloporteur (eau pour les REP).

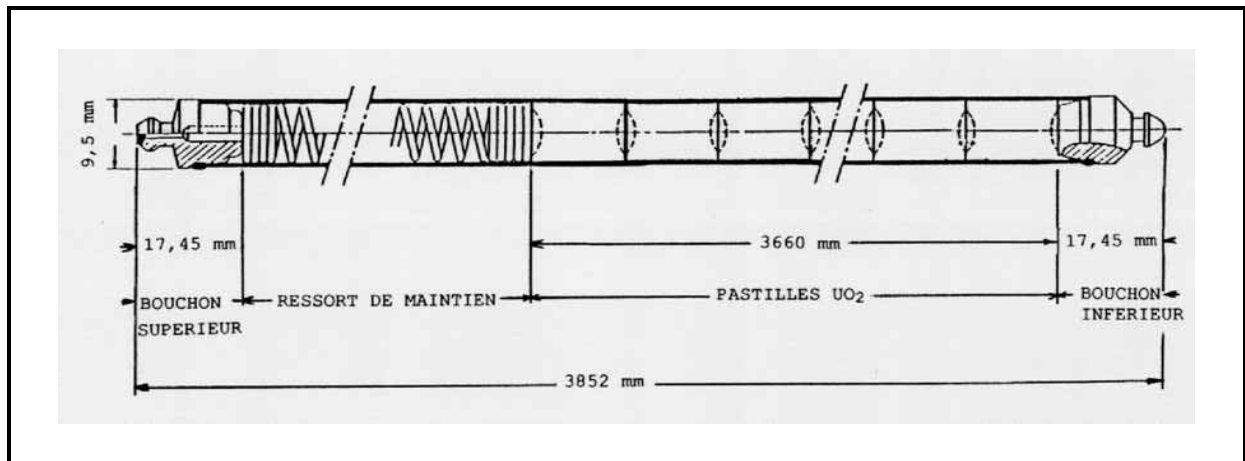


FIG. 1.2 – Crayon combustible de REP (Baron et Motir, 1992-1993)

Un des principaux dispositifs conçus pour garantir la sûreté des réacteurs nucléaires consiste à enfermer dans trois barrières successives de confinement les produits radioactifs présents dans le cœur du réacteur. Ce dispositif est composé de :

- la gaine de combustible qui contient le combustible,
- la cuve en acier qui contient le cœur du réacteur,
- l'enceinte de confinement en béton (simple ou double) qui entoure le réacteur.

La gaine de combustible constitue donc la première barrière contre la dispersion du combustible lors d'une situation accidentelle.

Un accident de réactivité (de type RIA¹) est un accident de dimensionnement résultant de l'éjection brutale de barre de contrôle sous l'effet de la pression du système (155bars) (FIG. 1.3). Cette éjection entraîne un transitoire de puissance (augmentation rapide, environ 50ms, de la puissance locale) dans les assemblages combustibles proches de la barre éjectée. La montée en température, de l'ordre de 10⁴K/s, produit un gonflement brutal du combustible et de fortes déformations, de quelques pourcents, des gaines de combustible.

¹Reactivity Initiated Accident

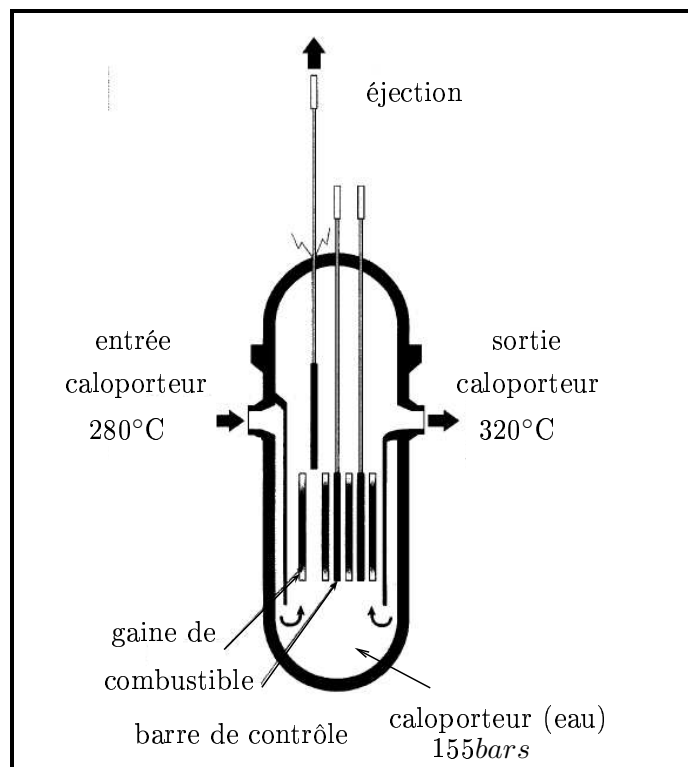


FIG. 1.3 – Accident de type RIA

Durant un accident de réactivité, les gaines subissent de très fortes sollicitations mécaniques dues aux interactions pastille-gaine (FIG. 1.4) et thermiques par dilatation thermique.

Des fissures peuvent alors s'amorcer et se propager dans ces gaines (FIG. 1.5) et éventuellement conduire à leur rupture et à la dispersion du combustible qu'elles contiennent. Ce phénomène pourrait entraîner un dégagement d'énergie par l'interaction entre le combustible et l'eau du circuit primaire et potentiellement conduire à l'extension de l'accident au réacteur.

La compréhension de ces phénomènes de fissuration sous chargement thermomécanique rapide est primordiale pour assurer la sûreté des installations.

1.2 Matériau d'étude et microstructure

Les gaines de combustible sont constituées d'alliages de zirconium dont les propriétés sont remarquables pour une utilisation en réacteur nucléaire. La présente étude porte sur des gaines en Zircaloy-4.

Lors du fonctionnement du réacteur, les propriétés mécaniques évoluent par effets couplés de l'irradiation, de la corrosion et de l'hydruration par le fluide caloporteur. Ces effets, dépendant du taux de combustion², limitent la durée de vie en réacteur des gaines de combustible.

1.2.1 Le zirconium

Le zirconium, de numéro atomique 40, possède deux phases stables. A basse température ($<863^{\circ}\text{C}$), la structure est Hexagonale Compacte (phase α) avec un rapport c/a (a et c étant les paramètres

²Energie totale libérée par unité de masse dans un combustible nucléaire (en mégawatts*jour par tonne (MW*j/t))

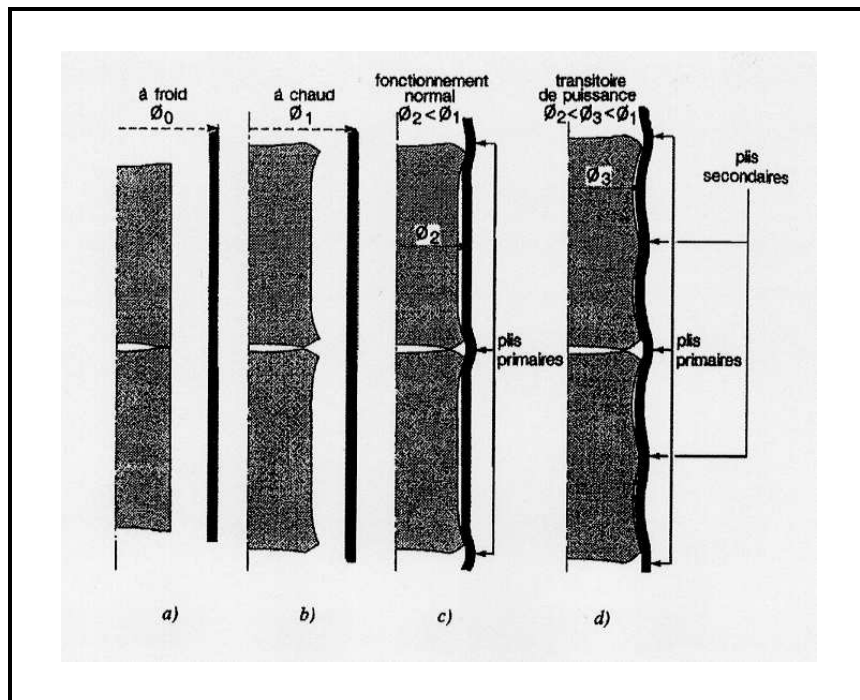


FIG. 1.4 – Interaction pastille gaine (Sauter, 2000)

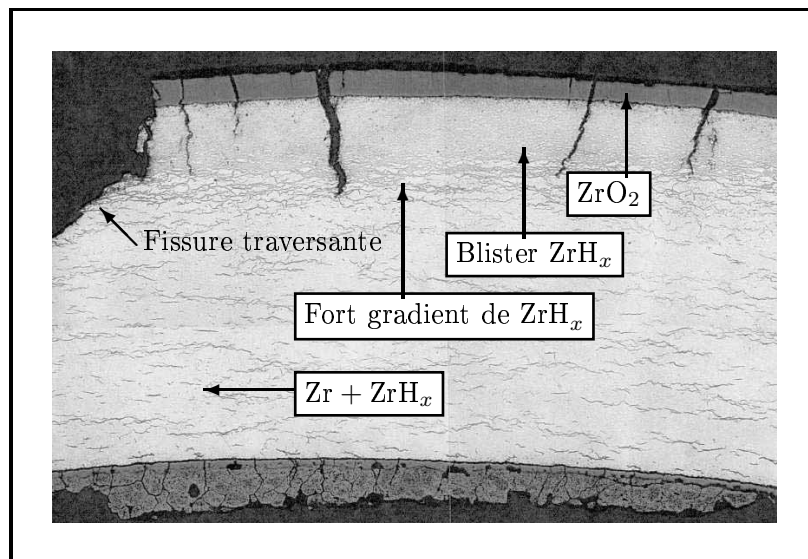


FIG. 1.5 – Microstructure d'une gaine de Zircaloy irradiée fissurée (Papin et al., 1996).

de mailles, $a=0.323nm$) inférieur à 1.63 variant en fonction de la teneur en éléments d'alliage et en impuretés. A haute température ($>863^{\circ}C$), la structure est Cubique Centrée (phase β) avec $a=0.361nm$.

Les principales propriétés physiques du zirconium sont résumées dans le TAB. 1.1.

Numéro atomique	40
Masse atomique	91,22
Masse volumique (g/cm^3)	6.22
Maille cristalline	α Hexagonale Compacte
Température de transformation de phase ($^{\circ}C$)	863
Maille cristalline pour $T > 863^{\circ}C$	β Cubique Centrée
Température de fusion ($^{\circ}C$)	1850
Chaleur spécifique ($J/Kg/^{\circ}C$)	276
Coefficient de dilatation ($10^{-6}/^{\circ}C$)	5.8
Conductivité thermique ($W/m/^{\circ}C$)	21.1
Diffusivité thermique ($10^2 cm^2/s$)	11.8
Résistivité électrique ($\mu\Omega cm$)	44
Section de capture des neutrons ($barn$)	0.2
Module d'élasticité (MPa)	98000
Module de cisaillement (MPa)	36500
Coefficient de poisson	0.35

TAB. 1.1 – Propriétés physiques à $20^{\circ}C$ du zirconium (Grange, 1998; Rupa, 2000).

1.2.2 Le Zircaloy-4

Comme mentionné, le Zircaloy-4 est un alliage de zirconium. Il est utilisé sous deux états : déformé (actuellement en majorité en réacteur) et recristallisé. La recristallisation, obtenue par un traitement thermique à une température de $590^{\circ}C$ pendant 4 à 5 heures, permet l'élimination des défauts ponctuels et le réarrangement de la structure des dislocations.

Le Zircaloy-4 contient de l'étain, du fer, du chrome et de l'oxygène; nous avons reporté la composition chimique dans le TAB.1.2.

L'étain atténue l'effet néfaste de l'azote présent sous forme d'impuretés, il améliore ainsi la résistance à la corrosion. De plus, il stabilise les amas d'oxygène ce qui améliore les caractéristiques mécaniques de l'alliage (Luton et Jonas, 1972).

Le fer et le chrome forment des précipités $Zr(Fe,Cr)_2$ (structure Hexagonale). Ils améliorent la résistance à la corrosion et limitent la croissance des grains lors de la recristallisation.

L'oxygène est présent naturellement dans la matrice sous forme d'interstitiel. Il améliore les propriétés mécaniques sans nuire à la corrosion, en particulier il augmente la limite d'élasticité (Armand et al., 1965).

Le comportement macroscopique des tubes en Zircaloy-4 est anisotrope. L'anisotropie est directement liée au procédé de mise en forme : le laminage à pas de pèlerin (Milot, 1997). Plus précisément, l'anisotropie a pour origines la texture morphologique, la texture cristallographique, les systèmes de glissement et la structure cristallographique (Schaffler, 1997). Les textures cristallographique et morphologiques entraînent un comportement orthotrope des tubes en Zircaloy-4 dont les directions principales sont les directions radiale, circonférentielle et axiale des tubes (Fandeur, 2001).

Sn (%)	Fe (%)	Cr (%)	O (ppm)	Ni (%)	H (ppm)	C (ppm)	Zr
1.1 à 2.7	0.18 à 0.24	0.07 à 0.13	900 à 1600	0.007	<5	110 à 230	complément

TAB. 1.2 – Composition chimique du Zircaloy-4 (Arsène, 1997).

1.2.3 Effets de l'irradiation, de la corrosion et de l'hydruration

Durant le fonctionnement d'un réacteur nucléaire de type REP, les structures des assemblages combustibles subissent les effets de l'irradiation (flux de neutrons) et de l'oxydation par la décomposition de l'eau du circuit primaire en oxygène et en hydrogène ($Zr + 2H_2O \rightarrow ZrO_2 + 4H$); la réaction d'oxydation entraîne la pénétration de l'hydrogène dans la matrice et la précipitation d'hydrures de zirconium (Ells, 1968).

D'autre part, la gaine de combustible est soumise à un gradient thermique radial, imposé par la pastille de combustible sur la peau interne (400°C) et le refroidissement par l'eau sur la peau externe (350°C).

L'irradiation, la corrosion et l'hydruration à la température de fonctionnement ont des effets sur les propriétés mécaniques et de rupture des gaines en Zircaloy-4. Ces effets sont succinctement décrits ci-dessous.

Effets de l'irradiation

Le taux d'irradiation est caractérisé par l'énergie des neutrons et la fluence³ ($90 \times 10^{24} n/m^2$ pour un fonctionnement en REP de 4 cycles⁴).

L'irradiation induit la formation de boucles de dislocations de type "a" (Jostsons et al., 1977; Griffiths, 1988) et, à partir de doses supérieures à $3 \times 10^{25} n/m^2$, des boucles de type "c" (Onimus, 2003). Il est parfois mentionné que l'accumulation de ces défauts dans la gaine fait tendre le comportement du matériau irradié vers celui d'un matériau isotrope (Nakatsuka et Nagai, 1987).

De plus, l'augmentation de la fluence des neutrons entraîne une augmentation de la limite d'élasticité (Arsène, 1997) et une diminution de la ductilité du Zircaloy (Arsène, 1997; Garde et al., 1996).

Effets de la corrosion

Une couche de zircone est formée en surface de la gaine par la corrosion généralisée des surfaces en contact avec l'eau du circuit primaire (Saint-Paul, 1993). La cinétique de formation et de répartition des phases est liée à la microstructure de la gaine, la chimie de l'eau du circuit primaire et la température locale lors de l'irradiation (Bérerd et al., 2002; Lefebvre et Lemaignan, 1997). Ainsi, cette couche d'oxyde peut atteindre jusqu'à $80 \mu m$ après 4 cycles en réacteur (Schaffler, 1997).

La couche d'oxyde a un caractère fragilisant (Grange, 1998) et détériore le transfert thermique (la conductivité thermique de la zircone est environ dix fois plus faible que celle du Zircaloy) (Sauter, 2000; Schaffler, 1997).

Elle peut se desquamer⁵ au niveau de son interface avec la gaine (Grange, 1998) et ainsi diminuer l'épaisseur de la gaine (FIG. 1.6). Afin de garantir la sûreté des installations, un critère de sécurité impose que la couche de zircone n'excède pas $100 \mu m$.

Effets de l'hydruration

L'hydrogène provient de trois origines différentes :

- des réactions d'oxydo-réduction entre le zirconium et l'eau,

³la fluence est le nombre de neutrons reçus par unité de surface

⁴le cycle désigne la durée de séjour d'un assemblage de combustible dans un réacteur avant d'être déchargé (de 12 à 24 mois selon la gestion choisie dans un réacteur à eau légère)

⁵la desquamation est l'élimination des couches superficielles d'oxydes

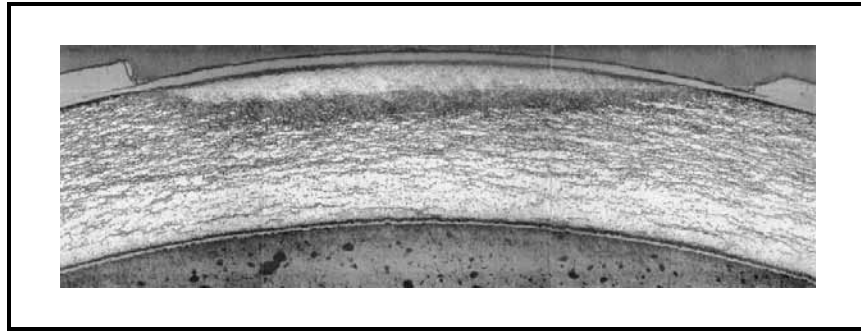


FIG. 1.6 – Microstructure d'une gaine de Zircaloy irradiée et desquamée.

- de l'hydrogène dissout dans l'eau du circuit primaire (sous forme moléculaire H_2) qui limite l'oxydation de la gaine par une limitation de l'oxygène,
- de la radiolyse de l'eau,

le premier de ces phénomènes étant prépondérant (Zhang, 1992).

La diffusion de l'hydrogène dans le matériau s'effectue vers (Northwood et Kosasih, 1983) :

- les zones de faible concentration en hydrogène,
- les zones de forte contrainte,
- les zones les plus froides c'est-à-dire la peau externe de la gaine et les zones desquamées.

Dès que la concentration en hydrogène dans le zirconium ou ses alliages est supérieure à la limite de solubilité, il y a précipitation d'hydrures. Ces hydrures existent sous trois phases :

- hydrure γ : phase métastable de structure quadratique faces centrées (q.f.c. avec $c/a > 1$, $a = 0.4596nm$ et $c = 0.4969nm$), de composition ZrH . Cette phase se forme dans des zones faiblement concentrées en hydrogène et pour des vitesses de refroidissement élevées,
- hydrure δ : phase stable de structure cubique à faces centrées (c.f.c. avec $c/a = 1$ et $a = 0.4773nm$), de composition $ZrH_{1,66}$. Cette phase se forme dans des zones faiblement concentrées en hydrogène et pour des vitesses de refroidissement lentes,
- hydrure ϵ : phase stable de structure quadratique à faces centrées (q.f.c. avec $c/a < 1$, $a = 0.4980nm$ et $c = 0.4445nm$), de composition ZrH_2 . Cette phase se forme dans des zones très concentrées en hydrogène et pour des vitesses de refroidissement lentes, de structure quadratique à faces centrées (q.f.c. avec $c/a < 1$, $a = 0.4980nm$ et $c = 0.4445nm$), de composition ZrH_2 .

Notons que le zirconium a la capacité d'accepter beaucoup plus d'hydrogène que ne le prévoit le diagramme d'équilibre (Hillner et al., 1972-1973). Ce phénomène est appelé "superchargement".

Le gradient thermique durant le fonctionnement d'un réacteur influence la distribution des hydrures (Zhang, 1992). En particulier, ceux-ci s'accumulent dans les zones les plus froides (peau externe de la gaine et zones desquamées). Il existe alors un gradient de concentration d'hydrogène à l'intérieur de la gaine avec la présence d'une couche limite beaucoup plus dense appelée "rim" (épaisseur de 30 à 80 μm et une concentration pouvant atteindre 6000 ppm). De plus, on observe parfois des zones

fragiles composées exclusivement d'hydrures appelées "blister" (Pierron et al., 2003) (FIG. 1.5 et 1.6).

Les hydrures macroscopiques sont formés de plaquettes parallèles entre elles. Les directions de ces plaquettes sont a priori différentes de celles des hydrures (FIG.1.7).

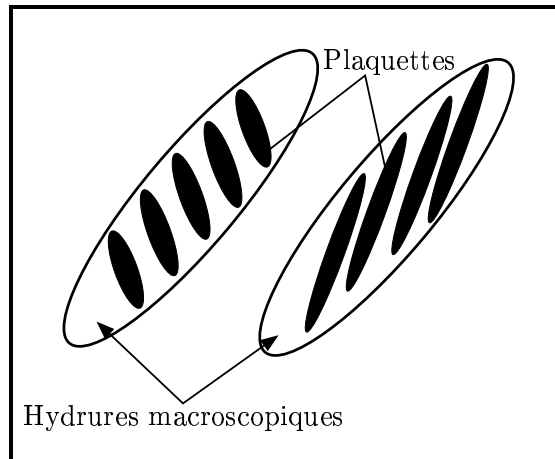


FIG. 1.7 – Hydrures macroscopiques formés de plaquettes parallèles entre elles.

Les hydrures sont orientés préférentiellement dans le plan circonférentiel-axial (FIG.1.8 et 1.9). Dans le matériau recristallisé, Arsène (1997) observe une forme allongée dans toutes les directions avec une direction circonférentielle privilégiée. Dans le matériau détendu, les hydrures sont exclusivement orientées dans la direction circonférentielle pour des teneurs inférieures à 1000ppm. Bien que généralement longs et fins, Arsène (1997) observe, à teneur élevée en hydrogène, des hydrures moins longs et plus larges.

La formation des hydrures entraîne une perte de ductilité (Garde, 1989; Garde et al., 1996; Bai et al., 1994) et de résistance à la traction dans le Zircaloy (Arsène, 1997). La baisse de ductilité dépend de la concentration (Bertolino et al., 2003) mais aussi d'autres facteurs comme la dimension, la morphologie et l'orientation.

Grange (1998) observe une influence de la taille des hydrures sur leur capacité à se déformer, les plus massifs sont plus fragiles. D'après Hong et al. (2002), les hydrures longs sont plus néfastes pour la ductilité du matériau. Ces auteurs ne précisent pas s'il s'agit là de propriétés matériaux liées à la dimension des hydrures ou s'il s'agit d'un effet structural. Enfin, l'influence de l'orientation est très importante. Ceux orientés dans le plan radial sont plus néfastes pour la ténacité du matériau que ceux orientés dans le plan circonférentiel (Arsène, 1997) du fait d'une sollicitation principalement orthoradiale en réacteur.

D'après Arsène (1997) et Grange (1998), la formation des hydrures est le principal facteur à l'origine de la fragilisation des gaines en Zircaloy-4. Ce travail porte ainsi sur la compréhension et la simulation des effets des hydrures sur les phénomènes de fissuration des gaines.

1.3 Approche globale : mécanique linéaire de la rupture

La mécanique de la rupture est utilisée pour l'étude et la prédiction de la propagation de fissures dans les matériaux solides. Les succès de la mécanique linéaire de la rupture, fondée sur la théorie de

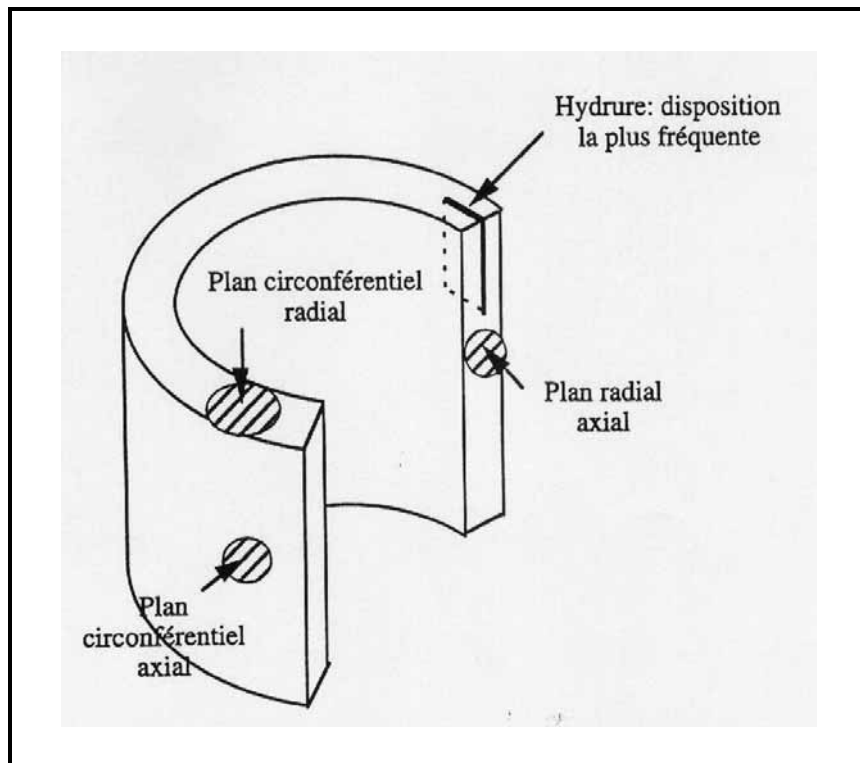


FIG. 1.8 – Plans d’observation des hydrures (Arsène, 1997)

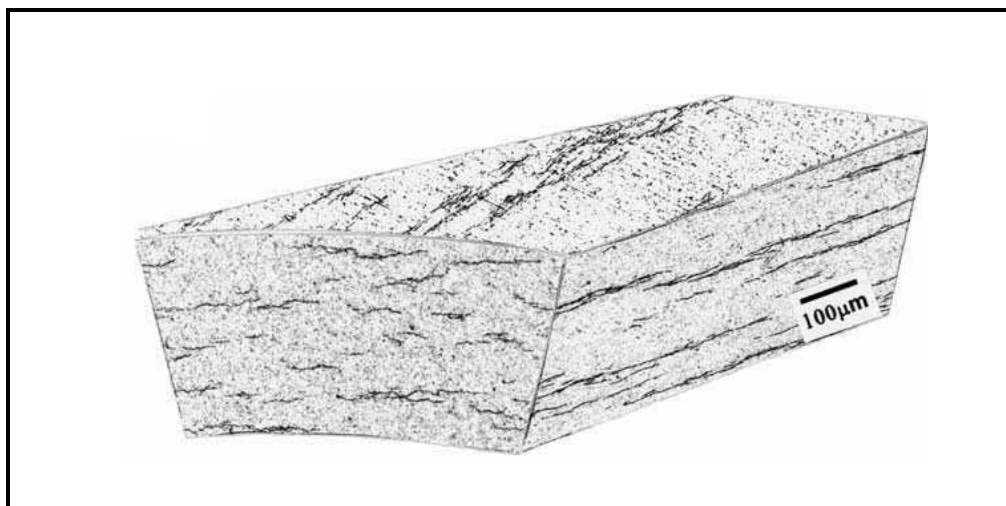


FIG. 1.9 – Exemple de microstructure d’une gaine en Zircaloy hydrurée (Hong et al., 2002)

l’élasticité classique, ont conduit à son utilisation massive dans les codes de calculs industriels. Cette approche, dite globale, repose principalement sur 3 paramètres (K_I , K_{II} , K_{III}) qui caractérisent l’intensité de contrainte et de déformation autour du front de fissure.

Nous allons décrire dans la suite la théorie d’Irwin (1957) puis l’approche énergétique de Griffith (1920) pour un matériau homogène. Une étude détaillée a été effectuée par Monerie (2000).

Pour un bimatériau, nous renvoyons à Martin (1996a).

1.3.1 La théorie d'Irwin (1957)

Williams (1957) a montré que, pour un problème statique de corps élastique fissuré en deux dimensions, sous l'hypothèse des petites perturbations, l'expression asymptotique des contraintes s'écrit sous la forme :

$$\boldsymbol{\sigma}(r, \theta) = \frac{K_\alpha}{\sqrt{r}} \mathbf{g}_\alpha(\theta) + \mathbf{j}_\alpha(r, \theta), \quad (1.3.1)$$

où $\alpha = \text{I, II ou III}$ dépend des modes I (traction normale), II (cisaillement plan) et III (cisaillement antiplan), (r, θ) sont les composantes polaires d'un point du solide dans un repère situé en pointe de fissure et aligné sur la direction de fissuration, $\mathbf{j}_\alpha(r, \theta)$ sont des fonctions bornées et $\mathbf{g}_\alpha(\theta)$ sont des fonctions d'angle.

Ce résultat montre que quels que soient la géométrie et le chargement, l'expression asymptotique des contraintes ne dépend que des variables K_{I} , K_{II} et K_{III} . Ces variables sont appelées facteurs d'intensité de contrainte en mode I, II et III et ont la dimension "contrainte $\times \sqrt{\text{longueur}}$ ". Une analyse complète du problème aux limites permet de déterminer ces paramètres.

Irwin (1957) propose une condition de propagation de fissure, initialement en mode I, portant sur les facteurs d'intensité de contraintes. Il postule donc l'existence d'une valeur critique appelée ténacité et notée K_{Ic} , caractéristique du matériau. Ce critère peut s'écrire pour tous les modes de propagation ($\alpha = \text{I, II ou III}$) :

$$\begin{cases} K_\alpha < K_{\alpha c} & \Rightarrow \dot{l} = 0, \\ K_\alpha = K_{\alpha c} & \Rightarrow \dot{l} > 0, \end{cases} \quad (1.3.2)$$

où l est la longueur de fissure.

Le critère de propagation (1.3.2) donne une importance fondamentale à la singularité des contraintes en pointe de fissure. Ce résultat, bien que cohérent avec la modélisation élastique, n'est pas réaliste : les contraintes doivent rester finies en tout point du solide (écranage des contraintes par plasticité, etc).

1.3.2 L'approche énergétique de Griffith (1920)

L'approche énergétique, bien qu'antérieure aux travaux d'Irwin, permet de s'affranchir des problèmes de singularité de contrainte en pointe de fissure.

Griffith (1920) suppose l'existence d'une énergie de liaison γ créée par une éventuelle avancée de fissure. Il étudie alors les processus de fissuration quasi-statique sous chargement constant dans un matériau élastique et écrit l'énergie totale du système E_{tot} :

$$E_{\text{tot}}(S) = E_{\text{pot}}(S) + 2S\gamma, \quad (1.3.3)$$

où E_{pot} est l'énergie potentielle mécanique, S est la surface de fissure et $2S\gamma$ est l'énergie de liaison relative aux deux lèvres de la fissure.

Le principe du minimum de l'énergie potentielle pour les systèmes conservatifs s'écrit :

$$E_{\text{tot}}(S + dS) \leq E_{\text{tot}}(S) \Leftrightarrow E_{\text{pot}}(S + dS) + 2S\gamma + 2dS\gamma \leq E_{\text{pot}}(S) + 2S\gamma. \quad (1.3.4)$$

En posant :

$$G = -\frac{\partial E_{\text{pot}}}{\partial S}, \quad (1.3.5)$$

la condition de propagation s'écrit :

$$\begin{cases} G < 2\gamma & \Rightarrow \dot{l} = 0, \\ G \geq 2\gamma & \Rightarrow \dot{l} > 0. \end{cases} \quad (1.3.6)$$

Une nouvelle grandeur G appelée taux de restitution d'énergie (interprétable comme l'énergie restituée par le solide pour une avancée infinitésimale de la surface fissurée) est apparue dans l'écriture du critère de propagation (1.3.6). Les faiblesses de cette approche restent l'écriture d'un bilan d'énergie simple (qui constitue l'écriture du premier principe de la thermodynamique) et la réversibilité de la séparation des lèvres de la fissure (qui est en contradiction avec l'expérience).

L'écriture thermodynamique complète prenant en compte le second principe de la thermodynamique c'est-à-dire la notion d'entropie donne (pour plus de détails, voir Monerie (2000)) :

$$\begin{cases} G < G_c & \Rightarrow \dot{l} = 0, \\ G = G_c & \Rightarrow \dot{l} \geq 0, \end{cases} \quad (1.3.7)$$

où G_c est une valeur critique de G appelée taux critique de restitution d'énergie et :

$$G = -\frac{\partial E_{pot}}{\partial l}(l). \quad (1.3.8)$$

En remplaçant dans (1.3.7) 2γ par G_c , on retrouve donc le même type de critère de propagation à l'exception de l'irréversibilité de l'ouverture de fissure.

1.3.3 Equivalence des théories d'Irwin (1957) et Griffith (1920)

Irwin (1960) a relié, pour un solide élastique linéaire isotrope et une évolution quasi-statique de fissure, le taux de restitution d'énergie G aux facteurs d'intensité de contrainte K_I , K_{II} et K_{III} par la formule suivante :

$$G = \frac{k+1}{2\mu}(K_I^2 + K_{II}^2) + \frac{1}{2\mu}K_{III}^2, \quad (1.3.9)$$

où k dépend de l'hypothèse adoptée (déformation plane ou contrainte plane) et μ est le module de cisaillement. Notons que le taux de restitution d'énergie (grandeur globale) a une signification physique indéniable contrairement aux facteurs d'intensité de contrainte (grandeurs locales) et la formule d'Irwin (1.3.9) permet de mieux justifier le critère (1.3.2). Cette formule surprenante qui relie une quantité liée à la singularité des contraintes en pointe de fissure au taux de restitution d'énergie qui ne suppose à aucun moment une telle singularité est éclairée par l'intégrale de Rice (1968).

1.3.4 Intégrale de Rice (1968)

L'intégrale de Rice (1968) s'écrit :

$$J = \int_{\Gamma} \left(\rho w_{ela}(\epsilon) n_1 - \sigma_{ik} n_k \frac{\partial u_i}{\partial x_1} \right) ds, \quad (1.3.10)$$

où $w_{ela}(\epsilon)$ est la densité massique d'énergie élastique, ρ la masse volumique, \mathbf{n} est une normale sortante à Γ et Γ est un contour ouvert orienté entourant la pointe de fissure. La valeur de cette intégrale est indépendante du choix du contour Γ en élasticité linéaire, sans forces volumiques et sans moments volumiques appliqués.

Dans le cas d'une fissure se propageant rectilignement, nous avons une équivalence entre G et l'intégrale de Rice :

$$G = J. \tag{1.3.11}$$

Le critère de propagation de fissure peut ainsi s'écrire sous la forme :

$$\begin{cases} J < J_c & \Rightarrow \dot{l} = 0, \\ J = J_c & \Rightarrow \dot{l} \geq 0, \end{cases} \tag{1.3.12}$$

où J_c est une valeur critique de propagation de fissure.

L'estimation de J est un moyen simple de calculer le taux de restitution d'énergie, ainsi l'équivalence (1.3.11) est très utile en pratique. De plus, l'indépendance au contour de J permet de s'affranchir des erreurs faites lors d'une simulation numérique sur les champs statiques et cinématiques près de la pointe de fissure.

1.4 Les limites d'une approche globale

Notre étude consiste à comprendre et prédire les phénomènes de fissuration des gaines de combustible lors d'un accident de réactivité. Ces phénomènes complexes dépendent de la structure, de l'évolution de la composition des gaines lors de leurs séjours en réacteur et de la sollicitation thermomécanique.

Nous présentons ici les difficultés de cette étude et les limitations d'application des approches globales présentées au § 1.3 pour le problème étudié.

1.4.1 Structure mince

Au § 1.1, nous avons vu que la gaine est très élancée ; l'épaisseur du tube est de l'ordre de $570\mu m$, le diamètre de l'ordre de $9.5mm$ pour une hauteur d'environ $4m$ (FIG.1.2). Ce paramètre est important dans le choix de la modélisation à adopter.

La mécanique de la rupture, fondée sur la définition de critères de rupture (facteur d'intensité de contrainte critique K_c , J critique), est délicate à mettre en œuvre dans les problèmes de fissuration de structure mince ; en particulier, la mise en évidence expérimentale de ces critères dans de telles structures est complexe.

1.4.2 Matériau à gradient de propriétés

Les gaines de combustible contiennent très peu d'hydrogène après fabrication. En réacteur, l'hydrogène, provenant essentiellement du fluide caloporteur, précipite dans le zirconium pour former un matériau hydruré. La concentration d'hydrures varie dans l'épaisseur ce qui change localement les propriétés mécaniques (§ 1.2), la gaine en Zircaloy hydruré est ainsi qualifiée de matériau à gradient de propriétés (FGM⁶).

Dans les matériaux homogènes, le calcul de l'intégrale J est indépendant du contour considéré (Rice, 1968) ce qui permet de choisir un contour "loin" du front de fissure. Il n'est alors pas nécessaire de choisir une discrétisation spatiale très fine lors de la simulation numérique et ainsi les calculs de structures sont effectués en un temps raisonnable.

Dans les matériaux à gradient de propriétés ce n'est plus le cas. Pour effectuer les calculs de l'intégrale J dans ce type de matériau, Gu et al. (1999) choisissent une zone assez proche du front

⁶Functionally Graded Materials

de fissure afin de considérer le matériau homogène dans cette zone et ainsi se ramener à un calcul classique de J . Or, cela nécessite une discrétisation spatiale très fine proche du front de fissure et des calculs très volumineux. Nous perdons ainsi l'avantage de l'approche par intégrale J .

Des méthodes récentes ont été développées pour retrouver l'indépendance au contour de l'intégrale J dans des matériaux à gradient de propriétés, notamment par Chen et al. (2000) qui modifient l'intégrale J en prenant en compte l'énergie élastique stockée dans la surface considérée. Cependant, cette intégrale J modifiée ne permet de considérer qu'un gradient de propriétés élastiques.

1.4.3 Amorçage de fissures sans préfissure

Un objectif de cette étude est de modéliser l'amorçage de fissure sans préfissure et sans critère d'amorçage *ad hoc*.

Ici encore, l'utilisation de la mécanique de la rupture est délicate. En effet, les critères sont des critères de propagation de fissure et ne peuvent pas prédire un amorçage de fissure.

L'approche proposée par Francfort et Marigo (1998), reposant sur une minimisation d'énergie, permet de prédire l'amorçage et la propagation de fissure mais s'avère très coûteuse en temps lors d'un calcul de structure.

Les méthodes reposant sur l'utilisation de la mécanique de la rupture nécessitent, en général, soit un critère d'amorçage pour prédire l'amorçage d'une fissure, soit une préfissure.

1.4.4 Chargement dynamique rapide

Lors d'un accident de réactivité, le temps caractéristique de l'augmentation de la puissance locale est de l'ordre de $50ms$. Le problème est donc traité en dynamique afin de prendre en compte les phénomènes qui apparaissent lors du transitoire de puissance.

1.4.5 Bilan

Nous venons de voir les principales difficultés de l'étude (structure mince, matériau à gradient de propriétés, amorçage sans critère prédéfini, chargement dynamique rapide) et les limitations de la mécanique de la rupture associées ; une approche plus locale prenant en compte la microstructure semble plus adaptée à ce type d'étude. Nous verrons dans la suite (§ 3.2), les principaux avantages de la modélisation locale par zones cohésives.

Le paragraphe suivant décrit quelques modèles de fissuration de matériaux hydrurés présents dans la littérature.

1.5 Modèles de fissuration de matériaux hydrurés

Dans la littérature, nous trouvons peu de modèles concernant la fissuration de matériaux hydrurés. Beaucoup d'auteurs ont adopté la démarche classique de la mécanique de la rupture (Wappling et al., 1997; Grange, 1998; Lufrano et al., 1998; Kuroda et al., 2001; Pierron, 2002).

Varias et Massih (2002) ont adopté une démarche locale en utilisant la notion de modèles de zones cohésives (§ 3.2) pour décrire localement la fissuration du Zircaloy hydruré.

1.5.1 Le modèle de Wappling et al. (1997)

Le but du modèle développé par Wappling et al. (1997) est de définir un critère en contrainte de propagation de fissure dans un hydrure.

Pour cela, Wappling et al. (1997) considèrent un modèle de type Dugdale (1960) dans un corps infini élastique en deux dimensions contenant des plaquettes d'hydrures rectangulaires en pointe d'une préfissure. Dans le modèle de Dugdale (1960), la zone plastique est localisée en pointe de fissure et la contrainte dans cette zone est constante. Ici, la contrainte est égale à la limite élastique. La formation de plusieurs plaquettes d'hydrures en pointe de fissure est prise en compte dans le facteur d'intensité de contrainte critique, K_{Ic} , avec l'expression :

$$K_{Ic} = f^H K_{Ic}^H + (1 - f^H) K_{Ic}^{Zr}, \quad (1.5.1)$$

où f^H est la fraction volumique d'hydrure, K_{Ic}^H le facteur d'intensité de contraintes critique d'une plaquette d'hydrure et K_{Ic}^{Zr} la valeur critique pour l'initiation de la fissure dans un alliage de zirconium ne contenant pas d'hydrure.

La dépendance à la température est prise en compte dans les paramètres matériaux.

L'analyse de la ténacité par rapport à la température a montré que le modèle n'était pas prédictif, avec notamment des résultats incohérents pour certaines plages de température (facteur d'intensité de contrainte critique décroissant lorsque la température croît).

1.5.2 Le modèle de Lufrano et al. (1998)

Lufrano et al. (1996) ont étudié la fissuration d'un matériau élastique isotrope fragilisé par l'hydrogène en utilisant la mécanique linéaire de la rupture. Une spécificité du modèle est la possibilité de prendre en compte le couplage entre les effets mécaniques, la diffusion de l'hydrogène dans le matériau et la formation d'hydrures en fonction de l'état de contrainte en pointe de fissure.

Dans des travaux plus récents, Lufrano et al. (1998) ont généralisé l'approche précédente à une matrice élastoplastique contenant des inclusions d'hydrures élastiques. La fissuration fragile des hydrures a été modélisée par une approche énergétique de type Griffith.

La longueur critique a_c de l'hydrure pour que le clivage apparaisse est reliée à la contrainte normale σ_N par :

$$a_c = \frac{2\gamma^H E}{\pi(1 - \nu^2)\sigma_N^2}, \quad (1.5.2)$$

où γ^H est l'énergie surfacique de la phase hydrure, E le module d'Young et ν le coefficient de Poisson.

Le modèle de diffusion de l'hydrogène et de formation des hydrures prend en compte le comportement élastoplastique de la matrice.

Un critère de rupture, dépendant du chargement appliqué et de la concentration initiale d'hydrure, de la matrice élastoplastique hydrurée pourrait ainsi être obtenu par le couplage des effets de diffusion d'hydrogène (formation des hydrures avec possibilité de relaxation des contraintes, notamment en pointe de fissure) et le critère de rupture des hydrures (1.5.2). Ce couplage n'est cependant pas formalisé par Lufrano et al. (1998).

1.5.3 Le modèle de Grange (1998)

Prat et al. (1998) ont montré que le Zircaloy-4 hydruré suit le schéma classique de la rupture ductile :

- fragmentation des hydrures entraînant la formation de cavités,
- croissance des cavités par déformation plastique de la matrice,

- croissance du vide qui conduit à la rupture du matériau.

Pour prendre en compte ces phénomènes, Grange (1998) a retenu un modèle de type Gurson (Gurson, 1977) modifié par Tvergaard et Needleman (1984) et appelé modèle GTN. Ce modèle permet de relier l'endommagement observable expérimentalement, en particulier la densité volumique de cavités, aux paramètres du modèle. L'adaptation par Grange (1998) de ce modèle GTN au cas du Zircaloy, notamment à son anisotropie plastique, conduit à la définition de la surface seuil de plasticité suivante :

$$\left(\frac{\sigma_H}{\sigma_0}\right)^2 + 2q_1 f_*^P \cosh\left(q_2 \frac{3}{2} \frac{\sigma_m}{\sigma_0}\right) - 1 - \left(q_1 f_*^P\right)^2 = 0, \quad (1.5.3)$$

avec :

- σ_0 limite élastique du matériau sain entourant les cavités,
- σ_H contrainte équivalente au sens de Hill,
- $\sigma_m = \frac{\sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33}}{3}$, moyenne des contraintes principales,
- f_*^P porosité effective,
- q_1 et q_2 coefficients permettant de prendre en compte le phénomène de rupture pour des porosités inférieures à 100%.

L'accélération de la porosité est prise en compte en introduisant la porosité effective f_*^P en fonction de la porosité f^P (Tvergaard et Needleman, 1984) :

$$f_*^P = \begin{cases} f^P & \text{pour } f^P < f_c^P, \\ f_c^P + \delta(f^P - f_c^P) & \text{sinon.} \end{cases} \quad (1.5.4)$$

$\delta > 1$ représente l'accélération de l'endommagement lorsque la coalescence a débuté, f_c^P est une porosité critique correspondant au début de la coalescence.

Le modèle identifié par Grange (1998) est valable pour :

- des sollicitations monotones de traction à température ambiante,
- des sollicitations quasi-statiques,
- du Zircaloy recristallisé,
- des matériaux hydrurés de 200 à 1500ppm,
- des hydrures circonférentiels.

Numériquement, Grange (1998) a observé une forte dépendance des champs vis-à-vis de la taille de maille considérée (FIG.1.10). La diminution de celle-ci permet de faciliter l'amorçage, à partir d'une préffissure, et la propagation de fissures.

Une conséquence importante est que la ténacité ne dépend pas seulement du comportement et de l'endommagement, mais aussi de la taille de maille. Cette dépendance a été observée initialement par Liu et al. (1994).

De plus, sur la FIG.1.10, la taille de maille identifiée est $50\mu m \times 50\mu m$. Cette taille de maille ne permet de considérer que 10 mailles dans l'épaisseur d'une gaine en Zircaloy hydruré ce qui est insuffisant pour une étude fine de la fissuration du matériau.

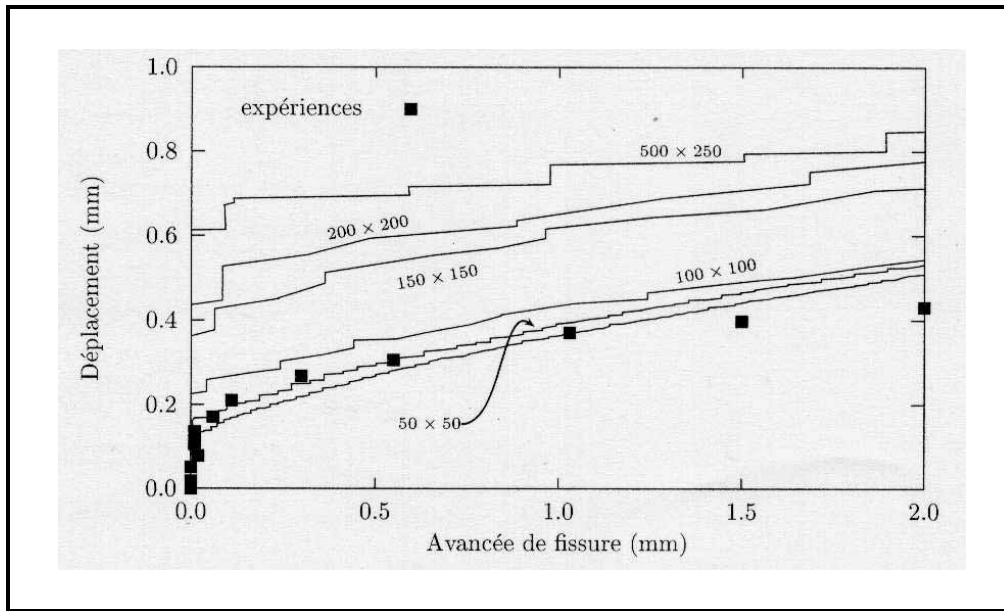


FIG. 1.10 – Avancée de fissure dans des éprouvettes C.C.P. en Zircaloy-4 hydruré. Dépendance de l'amorçage et de la propagation de fissures vis à vis de la taille de maille ($\mu m \times \mu m$) du modèle de Grange et al. (2000).

1.5.4 Le modèle de Kuroda et al. (2001)

Ce modèle, basé sur la mécanique de la rupture, a pour but de déterminer le comportement à rupture des gaines de combustible dans un réacteur LWR⁷ lors d'un accident de réactivité (RIA). Kuroda et al. (2001) déterminent à température ambiante le FAD⁸ (FIG.1.11) à partir du calcul des paramètres de la mécanique de la rupture : facteur d'intensité de contrainte critique, intégrale J et chargement plastique à rupture. Le FAC⁹ est donné par :

$$\begin{cases} K_r = \sqrt{J_r} & \text{pour } L_r \leq L_r^{\max}, \\ K_r = 0 & \text{pour } L_r > L_r^{\max}, \end{cases} \quad (1.5.5)$$

avec :

$$L_r = \frac{\|\mathbf{F}\|}{F_0}, \quad L_r^{\max} = \frac{F_c}{F_0}, \quad K_r = \frac{K_I}{K_{Ic}}, \quad J_r = \frac{J}{J_c}, \quad (1.5.6)$$

où \mathbf{F} est le chargement appliqué, F_0 le chargement limite élastique, F_c le chargement plastique à rupture, K_I le facteur d'intensité de contraintes en mode I, K_{Ic} est le facteur d'intensité de contraintes critique, J l'intégrale de Rice, J_c est la valeur critique de l'intégrale J .

Sur le diagramme FIG.1.11, la rupture apparaît lorsque le point de coordonnées (L_r, K_r) est situé au-dessus de la courbe FAC.

Le but est de déterminer la contrainte à rupture dans un matériau élastoplastique parfait hydruré uniformément dans le sens circonférentiel.

⁷Light Water Reactor (réacteur à eau légère) : le fluide utilisé pour le refroidissement est l'eau. On distingue deux sortes de réacteurs à eau légère : BWR (réacteur à eau bouillante) et PWR (réacteur à eau sous pression).

⁸Failure Assessment Diagram

⁹Failure Assessment Curve

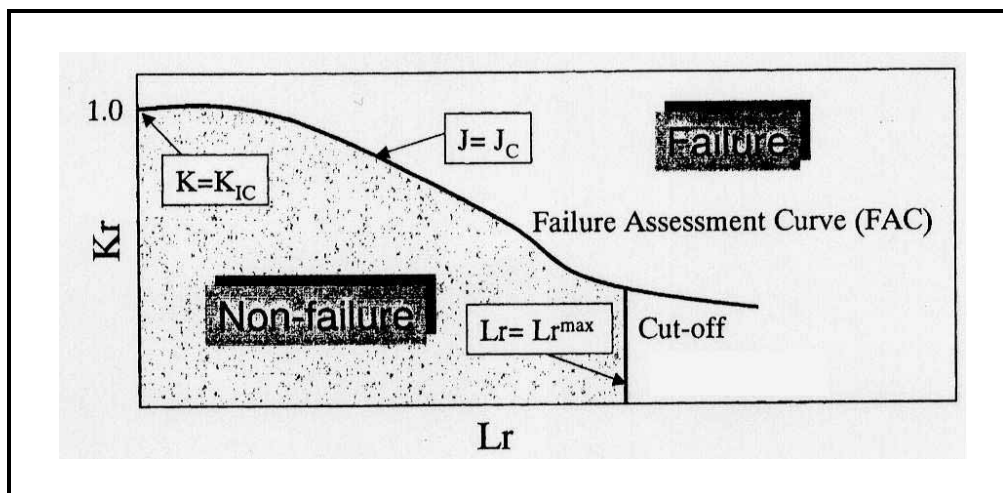


FIG. 1.11 – Diagramme FAD d'après (Kuroda et al., 2001).

Dans une étude plus récente, Yamanaka et al. (2002) effectuent l'analyse précédente à une température de $620K$.

Cette approche prend en compte un matériau hydruré uniformément. La microstructure considérée n'est donc pas représentative des gaines de combustible en réacteur (gradient de propriétés).

1.5.5 Le modèle de Pierron (2002)

Pierron (2002) développe un modèle basé sur la mécanique de la rupture pour déterminer la propagation de fissure dans un blister d'épaisseur fixée à l'intérieur d'un matériau élastoplastique. Il s'intéresse particulièrement à la déformation à rupture. Pour cela, il utilise une approche de type intégrale J (§ 1.3).

A température ambiante ($25^{\circ}C$), la prédiction numérique est en accord avec l'expérience. Cependant, à $300^{\circ}C$, la courbe prédictive ne correspond plus aux valeurs expérimentales (FIG.1.12).

Pierron (2002) développe alors un modèle micromécanique, avec l'étude de la croissance des cavités et une approche de type critère en déformation pour la propagation de fissures, pour modéliser la fissuration à $300^{\circ}C$.

Ce modèle traite de la rupture de blister d'hydrures c'est-à-dire de zones composées exclusivement d'hydrures. Il permet ainsi d'obtenir des informations sur la rupture des inclusions d'hydrure en fonction de leur taille.

1.5.6 Le modèle de Varias et Massih (2002)

Dans ce modèle, Varias et Massih (2002) prennent en compte les couplages entre plusieurs mécanismes complexes de fragilisation par les hydrures :

- la diffusion d'hydrogène,
- la précipitation d'hydrures,
- le flux d'énergie non mécanique,
- la déformation du matériau.

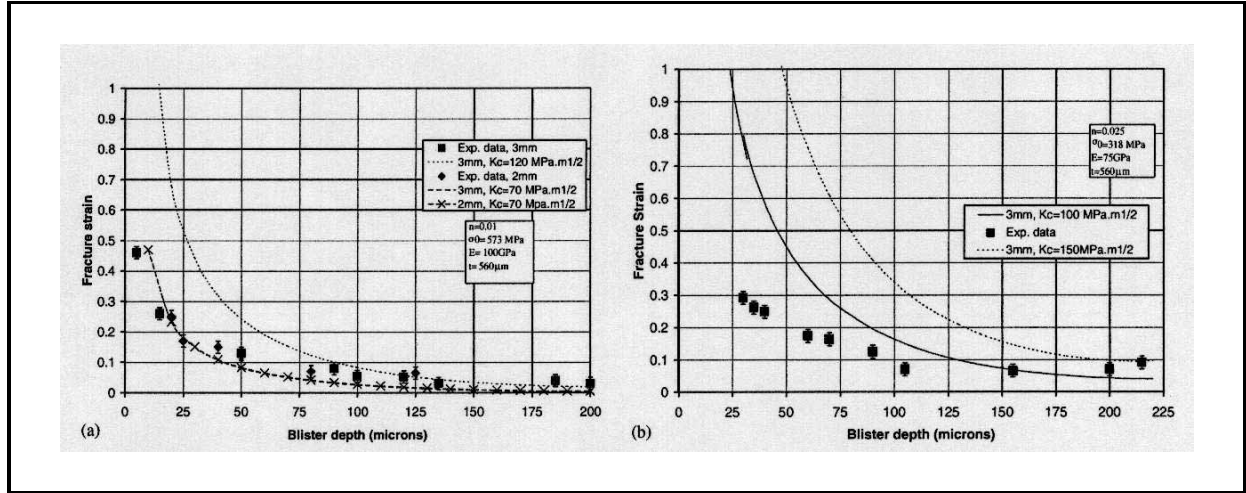


FIG. 1.12 – Comparaison entre mesures expérimentales et résultats numériques obtenus par Pierron et al. (2003) de la déformation à rupture du Zircaloy-4 contenant des blisters à (a) 25°C et (b) 300°C .

La diffusion d'hydrogène et la précipitation d'hydrures couplés à la déformation du matériau ont été étudié par Lufrano et al. (1998). Varias et Massih (2002) considèrent de plus le flux d'énergie non mécanique, par exemple le flux de chaleur et le flux d'hydrogène dans le matériau, et développent un modèle de fissuration basé sur la notion de zones cohésives (§ 3.2).

Dans cette étude, Varias et Massih (2002) supposent que la matrice et les hydrures sont élastiques avec les mêmes propriétés mécaniques.

La relation entre la contrainte normale et la discontinuité du déplacement est basée sur la relation de décohesion de Tvergaard et Hutchinson (1992) (FIG.1.13) :

$$R_N = \begin{cases} -E_1 \frac{u_N}{a} & \text{si } u_N \leq u_1, \\ -\hat{R}_N & \text{si } u_1 \leq u_N \leq u_2, \\ -\hat{R}_N + E_2 \frac{u_N - u_2}{a} & \text{si } u_2 \leq u_N \leq \delta_N, \\ 0 & \text{si } \delta_N \leq u_N, \end{cases} \quad (1.5.7)$$

où R_N est la contrainte normale, u_N le saut de déplacement normal, a une longueur constante de l'ordre de l'épaisseur d'un hydrure ($a \simeq 1\mu\text{m}$), u_1 le saut de déplacement normal à l'initiation de l'endommagement, u_2 le saut de déplacement normal au démarrage du déchargement, δ_N le saut de déplacement à rupture, E_1 et E_2 des modules de décohesion supposés constants.

L'énergie de décohesion du matériau composite, formé par le matériau et les inclusions d'hydrures, est donnée par la loi des mélanges suivante :

$$E_{coh} = f^H E_{coh}^H + (1 - f^H) E_{coh}^M, \quad (1.5.8)$$

où f^H est la fraction volumique d'hydrures, E_{coh}^M est l'énergie de décohesion du matériau sans inclusions d'hydrures ($f^H = 0$), E_{coh}^H est l'énergie de décohesion des hydrures ($f^H = 1$).

La contrainte normale maximale, \hat{R}_N , dépend aussi de la fraction volumique d'hydrures et est donnée par :

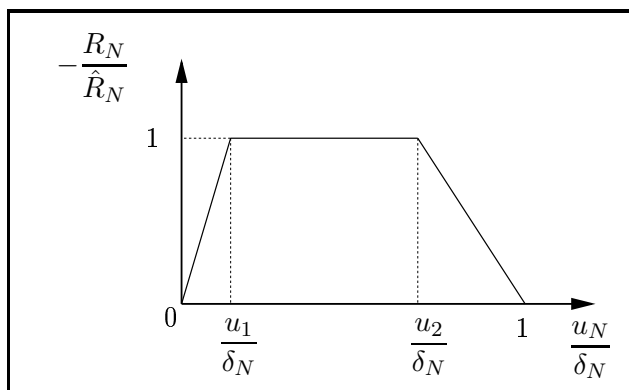


FIG. 1.13 – Variation de la contrainte normale en fonction du déplacement normal dans le modèle de Tvergaard et Hutchinson (1992) utilisé par Varias et Massih (2002).

$$\hat{R}_N = \sqrt{f^H(\hat{R}_N^H)^2 + (1 - f^H)(\hat{R}_N^M)^2}, \quad (1.5.9)$$

où \hat{R}_N^M est la contrainte normale maximale du matériau sans inclusion d'hydrures, \hat{R}_N^H est la contrainte normale maximale des hydrures.

La température est prise en compte dans les paramètres matériau et de décohésion (E_{coh} , \hat{R}_N).

Ce modèle a été utilisé pour l'étude de la fragilisation d'alliages de zirconium par les hydrures lors de mécanismes de type DHC¹⁰ (l'hydrogène migre vers les régions de forts gradients, par exemple en pointe de fissure, précipite lorsque la limite de solubilité est atteinte et entraîne la croissance de la fissure).

Ce modèle est à l'heure actuelle, dans la littérature, l'un des plus proche (avec celui de Jin et al. (2002) et Wang et Nakamura (2004), voir § 3.2.3) de celui que nous souhaitons développer pour l'analyse de la rupture de gainages hydrurés. Il repose notamment sur une approche locale de type zone cohésive et offre l'avantage indéniable d'être couplé à des modèles de diffusion de l'hydrogène. En anticipant sur la suite de la présente étude, nous pouvons indiquer que globalement notre démarche consistera à trouver des relations du type (1.5.8) et (1.5.9) sur la base de techniques d'homogénéisation numérique.

1.6 Bilan du chapitre

La présentation du contexte industriel et notamment de la microstructure des gaines de combustible à fort taux de combustion a permis de mettre en évidence les principales difficultés de l'étude :

- gaines de combustible mince et élancée : tubes d'épaisseur $\sim 570\mu m$, de diamètre $\sim 9.5mm$ et de hauteur $\sim 4m$,
- matériau à gradient de propriétés : l'hydruration durant la vie en réacteur entraîne la formation de plaquettes d'hydrures dans le matériau, la concentration d'hydrogène variant dans

¹⁰Delayed Hydride Cracking

l'épaisseur de la gaine. Les hydrures ont un effet fragilisant pour la tenue mécanique de la gaine de combustible,

- amorçage de fissure sans préfissure et sans critère d'amorçage *ad hoc*,
- chargement dynamique rapide : un accident de réactivité (de type RIA) est caractérisé par un chargement rapide ($\sim 50ms$) et de fortes déformations de la gaine (quelques %).

Les limitations des approches globales (mécanique de la rupture) pour la prise en compte des phénomènes de fissuration dans une structure mince à gradient de propriétés et la difficulté de cette approche pour l'amorçage de fissures nous amènent à considérer une approche locale, reposant ici sur des techniques de zones cohésives (prise en compte de la microstructure locale, possibilité d'amorçage de fissures), pour ce type d'étude.

Le chapitre suivant traite d'une part de la mise en œuvre des modèles de zone cohésive à travers une approche multicorps pour décrire la fissuration et d'autre part d'une démarche multiéchelle pour l'étude de la fissuration des structures minces et élancées à gradient de propriétés.

Chapitre 2

Démarche multiéchelle et modélisation multicorps

Sommaire

2.1	Approche multicorps et complémentarité volumique/surfacique . . .	41
2.2	Démarche multiéchelle	42
2.2.1	Problématique	42
2.2.2	Echelle microscopique	43
2.2.2.a	Modélisation volumique : homogénéisation analytique	43
2.2.2.b	Modélisation surfacique : homogénéisation numérique périodique	44
2.2.3	Echelle macroscopique	45
2.2.4	Démarche	46
2.3	Bilan du chapitre	47

Lors de l'étude de la fissuration de structures minces et élancées à gradient de propriétés, les approches globales arrivent en limite d'application et des approches locales semblent plus adaptées. Ce chapitre décrit, dans une première partie, la mise en œuvre locale de modèles de zone cohésive à partir d'une approche multicorps.

Dans une seconde partie, la démarche générale de l'étude sera exposée.

2.1 Approche multicorps et complémentarité volumique/surfacique

La fissuration est étudiée à travers une approche locale appelée modèle de zone cohésive. Ces modèles permettent d'initier et de propager des fissures grâce à l'utilisation de paramètres locaux (en contrainte et en énergie) tout en conservant les notions clés des approches globales (voir § 3.2). La stratégie utilisée pour la mise en œuvre de ces modèles de zone cohésive repose sur la notion de corps¹. Dans notre cas, chaque élément d'un maillage Eléments Finis est considéré comme un corps indépendant² (voir FIG. 2.1). Les mailles, ou corps, sont reliées par des relations surfaciques de type conditions aux limites mixtes. Les fissures peuvent ainsi s'initier ou se propager entre chaque maille. La stratégie de résolution est qualifiée de multicorps.

Remarque 2.1. *Les zones cohésives sont généralement introduites dans les calculs Eléments Finis sous la forme d'éléments surfaciques (Xu et Needleman, 1994; Ortiz et Pandolfi, 1999) ou de conditions surfaciques mixtes (Needleman, 1987; Tvergaard et Hutchinson, 1992; Monerie et Acary, 2001) entre les mailles. Dans cette étude, les conditions surfaciques mixtes entre les mailles ont été retenues. Les relations cohésives sont ainsi prises en compte sous forme de conditions aux limites.*

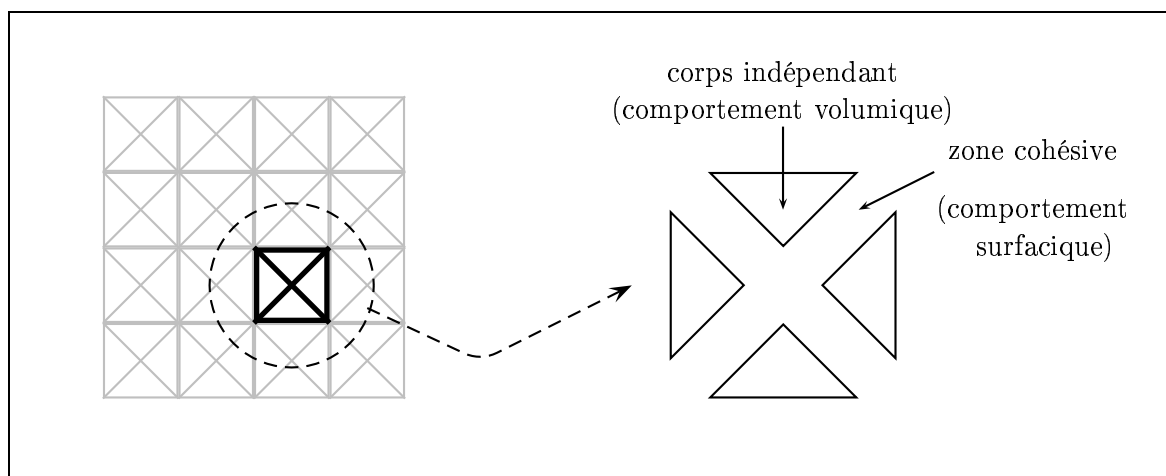


FIG. 2.1 – Stratégie multicorps : chaque maille est un corps

Le comportement du matériau est partagé en deux parties :

¹un corps est un objet matériel occupant une portion d'espace avec des propriétés spécifiques. Ici, un corps est un corps solide.

²cela implique en particulier, comme nous le verrons plus tard, que le support des fonctions de base est limité à la cellule courante.

- un comportement volumique durcissant (potentiel convexe) avec une loi de comportement introduite en chaque point de Gauss³ ; cette loi décrit le comportement du matériau sans endommagement,
- un comportement surfacique adoucissant (potentiel surfacique non convexe) avec la donnée d'une loi surfacique entre les éléments continus. Cette loi surfacique décrit l'ensemble des processus d'endommagement.

Un comportement volumique durcissant associé à un comportement surfacique adoucissant permet notamment de décrire un comportement élastoplastique endommageable (voir FIG.2.2).

Remarque 2.2. *Le caractère adoucissant du comportement surfacique ôte tout espoir d'obtenir un comportement global purement analytique (par homogénéisation).*

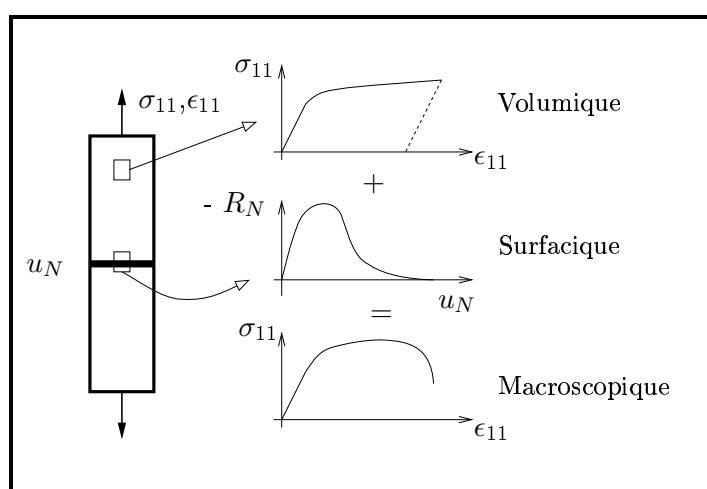


FIG. 2.2 – Découplage du comportement macroscopique entre comportement volumique et comportement surfacique (CZM) : l'endommagement est décrit par un modèle de zone cohésive.

Dans cette approche de la fissuration, la technique de découplage des comportements peut aussi bien s'appliquer à une échelle microscopique qu'à une échelle macroscopique.

2.2 Démarche multiéchelle

2.2.1 Problématique

La gaine de combustible possède une microstructure complexe. Elle est considérée composée d'un biphasé (Zircaloy et hydrures) à gradient de propriétés, la teneur en hydrogène variant dans l'épaisseur (voir § 1.2). La prise en compte des phénomènes complexes dus aux hétérogénéités du matériau implique une modélisation de la fissuration à l'échelle des inclusions (échelle microscopique). Cela se traduit, lors d'une simulation numérique, par l'introduction de propriétés volumiques locales en chaque point de Gauss et de propriétés surfaciques locales dans chaque zone cohésive. Ces propriétés locales dépendent des phases en présence (notamment du gradient d'hydrogène). Compte tenu de la taille des inclusions (épaisseur de l'ordre du μm) et des dimensions de la gaine (hauteur de l'ordre de quelques m), la simulation numérique de la structure entière devient prohibitive en terme

³point d'intégration ou de quadrature

de temps calcul et de place mémoire nécessaire. Par exemple, en ne considérant qu'une maille dans l'épaisseur d'un hydrure, le maillage de la structure serait composé de 6×10^{12} mailles.

Une démarche multiéchelle devient alors nécessaire pour conserver un temps calcul raisonnable tout en prenant en compte les phénomènes microscopiques pouvant intervenir. L'étude repose sur une approche à deux échelles, microscopique à l'échelle des inclusions et macroscopique à l'échelle de la structure.

2.2.2 Echelle microscopique

Les techniques mises en œuvre à l'échelle microscopique reposent sur l'utilisation de méthodes d'homogénéisation. Ces méthodes consistent à modéliser le comportement de milieux hétérogènes. Il s'agit de remplacer la description complexe de milieux hétérogènes par une description continue macroscopiquement équivalente (Bornert et al., 2001a,b) (voir FIG. 2.3).

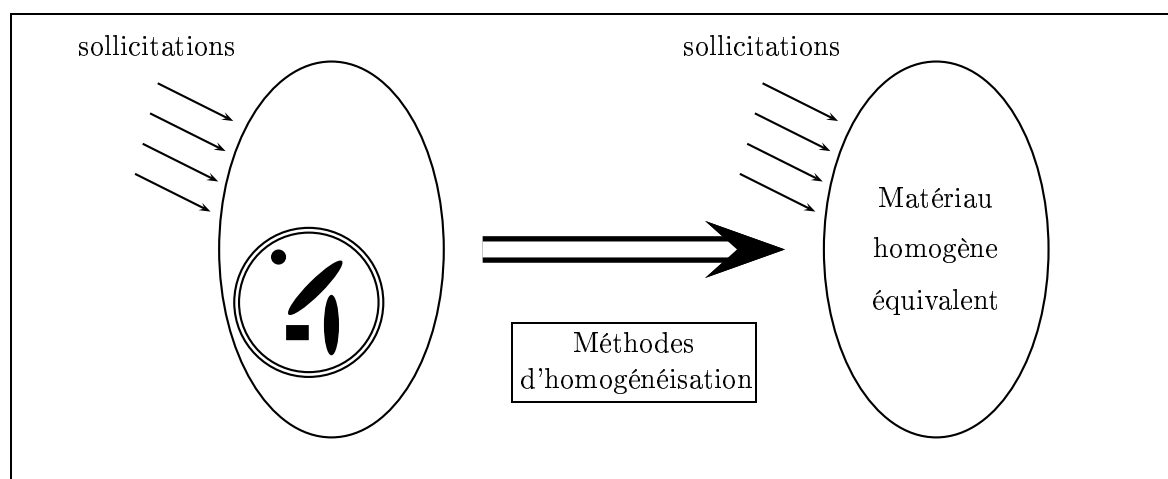


FIG. 2.3 – Principe des méthodes d'homogénéisation : le matériau hétérogène est remplacé par un matériau homogène équivalent.

Le comportement se décompose en une partie volumique et une partie surfacique (§ 2.1). Les deux comportements macroscopiques sont estimés par deux approches complémentaires : *homogénéisation analytique pour le comportement volumique* et *homogénéisation numérique pour le comportement surfacique*.

2.2.2.a Modélisation volumique : homogénéisation analytique

La modélisation volumique du Zircaloy hydruré utilisée ici est celle proposée par Monerie et al. (2004) et étendue par Vincent et al. (2005). Le but de cette modélisation est de trouver le comportement volumique équivalent d'une matrice anisotrope élastoplastique contenant des inclusions isotropes élastiques. Les inclusions sont présentes sous forme de plaquettes toutes orientées dans la même direction circonférentielle et dont les centres sont distribués aléatoirement. La matrice de Zircaloy est supposée élastoplastique orthotrope à écrouissage en loi puissance et les inclusions sont supposées élastiques linéaires isotropes. La méthode sécante modifiée (Ponte Castañeda et Suquet, 1998) est mise en œuvre en utilisant l'estimation de Ponte Castañeda et Willis (1995) pour le comportement effectif du composite linéaire de comparaison avec projection du milieu de référence sur la base d'isotropie. Avec cette estimation, les plaquettes sont représentées par des ellipsoïdes

oblates⁴. Des simulations numériques tridimensionnelles permettent de corrélérer le rapport de forme des plaquettes et des ellipsoïdes.

Le comportement effectif obtenu est élastoplastique anisotrope et dépend du taux d'hydrogène (FIG. 2.4). La loi peut s'écrire :

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{f}([\text{H}], \boldsymbol{\epsilon}), \quad (2.2.1)$$

où \mathbf{f} est une fonction décrivant le comportement volumique en fonction de la concentration en hydrogène $[\text{H}]$ et du tenseur des déformations $\boldsymbol{\epsilon}$.

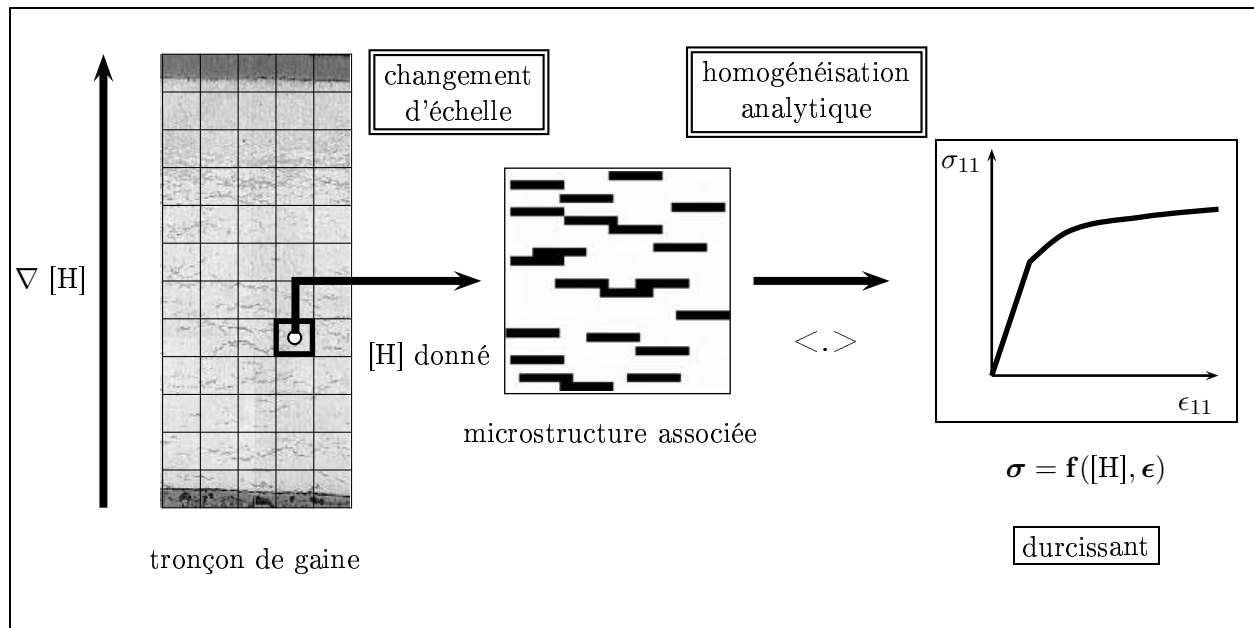


FIG. 2.4 – Echelle microscopique : obtention de la loi volumique homogène

2.2.2.b Modélisation surfacique : homogénéisation numérique périodique

La modélisation surfacique du Zircaloy hydruré fait l'objet de la présente étude. Le but est d'obtenir, comme pour le comportement volumique (2.2.1), une loi surfacique dépendant du taux d'hydrogène (FIG. 2.5) :

$$\mathbf{R} = \mathbf{g}([\text{H}], [\mathbf{u}]), \quad (2.2.2)$$

où \mathbf{g} décrit le comportement surfacique par zone cohésive en fonction de la concentration en hydrogène $[\text{H}]$ et du saut de déplacement $[\mathbf{u}]$ sur les lèvres de la fissure.

La technique mise en œuvre repose sur l'utilisation de méthodes d'*homogénéisation numérique*. Les paramètres surfaciques de la zone cohésive (contrainte cohésive maximale, énergie de décohesion) sont estimés à partir de simulations numériques sur des volumes élémentaires représentatifs (VER). Le choix de la taille des VER n'est pas unique et conditionne le nombre de réalisations à effectuer pour obtenir les propriétés effectives du matériau. Une démarche statistique est alors nécessaire pour déterminer la taille des VER et la morphologie des hétérogénéités (Kanit et al., 2003; Forest,

⁴ellipsoïdes aplatis de forme lenticulaire

2004).

Le cadre de l'homogénéisation périodique est adoptée pour cette étude. Les simulations numériques sont effectuées sur des VER à microstructures périodiques⁵ avec des conditions aux limites particulières (périodiques) et un chargement homogène (voir Chapitre 4).

Les microstructures, dépendantes du taux d'hydrogène, sont issues de tirages aléatoires de plaquettes d'hydrures orientées dans la direction circonférentielle.

Les calculs de structure permettent d'obtenir, à partir d'une loi volumique et d'une loi surfacique, une loi volumique élastoplastique endommageable. Les paramètres de la loi surfacique adoucissante sont ensuite déduits des paramètres de la loi volumique obtenue (énergie de fissuration, déformation à rupture).

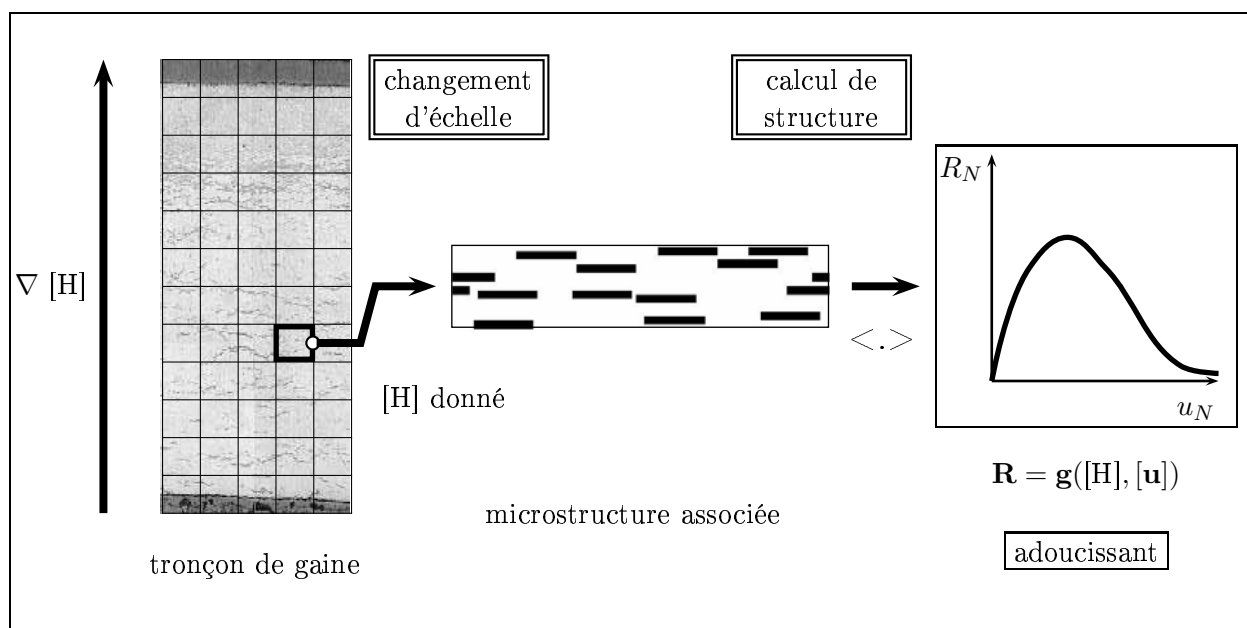


FIG. 2.5 – Echelle microscopique : obtention de la loi surfacique homogène

2.2.3 Echelle macroscopique

Les calculs de structure à l'échelle macroscopique permettent de définir un critère de rupture des gaines de combustible sous sollicitation dynamique rapide. Le gradient de propriétés de la gaine, c'est-à-dire le gradient d'hydrogène présent dans l'épaisseur, est pris en compte par l'utilisation de lois de comportements dépendant du taux d'hydrogène. Les lois de comportements volumiques durcissantes (2.2.1) et surfaciques adoucissantes (2.2.2) obtenues par l'application de techniques d'homogénéisations à l'échelle microscopique sont introduites aux points de Gauss et dans les zones cohésives (FIG. 2.6) :

$$\begin{cases} \text{par point de Gauss : } \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{f}([\mathbf{H}], \boldsymbol{\epsilon}), \\ \text{par zone cohésive : } \mathbf{R} = \mathbf{g}([\mathbf{H}], [\mathbf{u}]). \end{cases} \quad (2.2.3)$$

Le calcul permet ainsi d'obtenir le comportement endommageable avec multifissuration du matériau à gradient de propriétés.

⁵les VER périodiques sont appelés cellules de bases

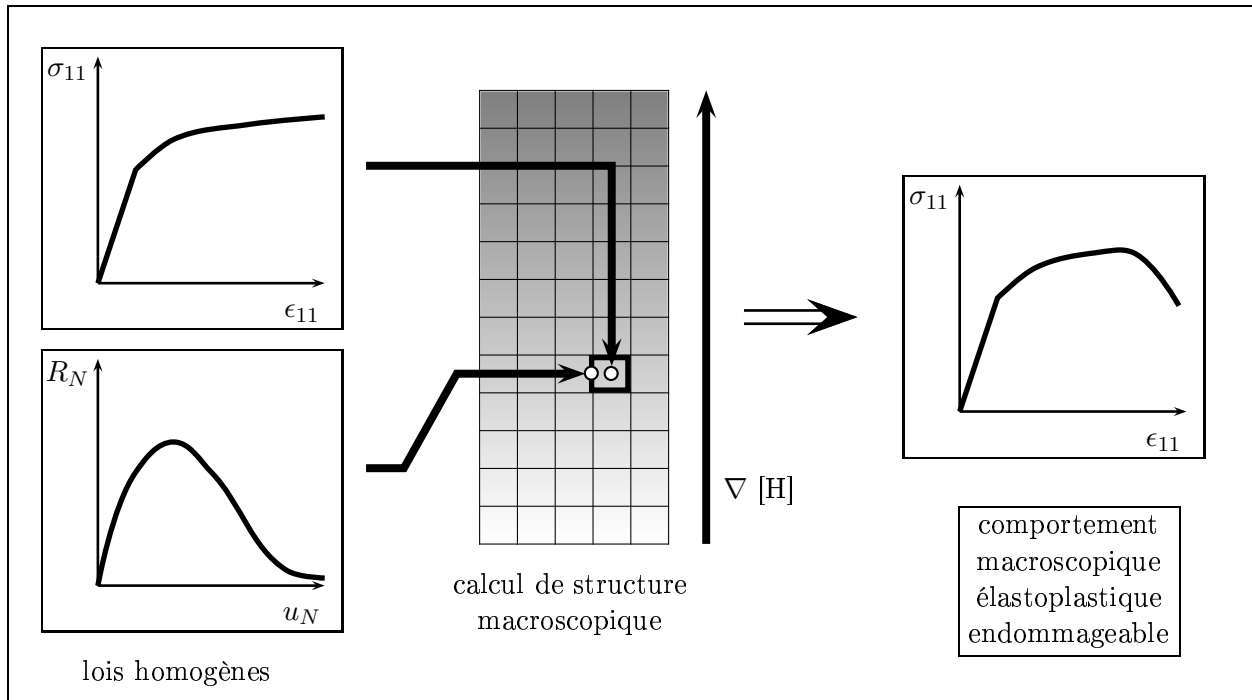


FIG. 2.6 – Echelle macroscopique : le calcul prend en compte le gradient de propriétés grâce aux lois homogènes microscopiques

2.2.4 Démarche

La FIG. 2.7 illustre la démarche multiéchelle adoptée. Cette démarche se résume comme suit :

- à l'échelle de la microstructure (μ) :
 - la prise en compte de comportements volumiques (V) et le choix de paramètres microstructuraux (μ) conduisent à un comportement volumique homogène équivalent (V_μ),
 - à la même échelle, la prise en compte supplémentaire de modèles de zone cohésive (S) conduit à un comportement volumique homogène équivalent adoucissant (VS_μ) ; ce dernier étant réduit à un comportement surfacique adoucissant (S_μ) ;
- à l'échelle de la structure ($\nabla\mu$: matériau à gradient de propriétés) :
 - les comportements volumiques (V_μ) et surfaciques (S_μ) homogènes équivalents sont introduits dans une structure à gradient de propriétés ($\nabla\mu$),
 - le comportement effectif de cette structure en est déduit.

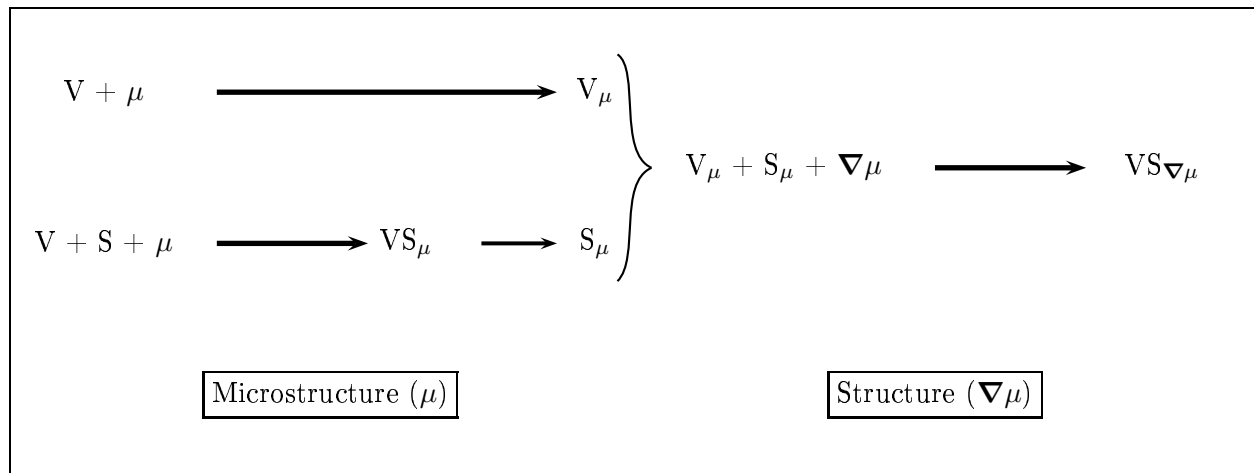


FIG. 2.7 – Schématisation de l’approche multicorps appliquée à la démarche multiéchelle. V et S représentent respectivement les lois volumique et surfacique

2.3 Bilan du chapitre

L’approche retenue pour décrire la fissuration est une approche multicorps qui repose sur des notions de comportement volumique et de comportement surfacique. Le comportement du matériau est ainsi découpé en :

- une partie **volumique durcissante** décrivant le comportement des corps sans endommagement,
- une partie **surfacique adoucissante**, sous forme de relations mixtes (modèles de zones cohésives) entre les corps, décrivant la fissuration. La description de ces modèles fait l’objet du chapitre suivant.

Cette approche de la fissuration est appliquée à toutes les échelles considérées : microscopique et macroscopique.

L’étude de la fissuration des gaines de combustible hydrurées nécessite un traitement particulier. En effet, lors d’une simulation numérique, le nombre de mailles pour décrire finement la fissuration devient prohibitif compte tenu des dimensions mises en jeu.

La démarche multiéchelle adoptée pour traiter ces problèmes est basée sur l’utilisation de techniques d’homogénéisation.

A l’échelle microscopique :

- l’utilisation de techniques d’**homogénéisation analytique** permet d’accéder, à partir d’un comportement volumique et de paramètres microstructuraux, à un comportement volumique équivalent. Ce modèle a été développé par Monerie et al. (2004) et étendu par Vincent et al. (2005),
- le couplage de comportements volumique et surfacique permet d’accéder, à travers des **simulations numériques périodiques**, à des relations entre les paramètres de la loi surfacique et la teneur en hydrogène. La recherche de ces relations fait l’objet de la présente étude et sera développée dans la suite, notamment à travers une formulation périodique du problème multicorps (Chapitre 4).

A l'échelle macroscopique, les comportements homogénéisés volumiques et surfaciques, trouvés à l'échelle microscopique et introduits dans une structure à gradient de propriétés, permettent de modéliser la fissuration de la structure et d'en déduire le comportement homogène équivalent.

Chapitre 3

Modèle de zone cohésive frottante

Sommaire

3.1	Approche locale retenue	51
3.2	Les modèles de zone cohésive	53
3.2.1	Introduction	53
3.2.2	Décomposition dans le repère normal/tangent	55
3.2.3	Différents modèles de zone cohésive	55
3.2.4	Les avantages des modèles de zone cohésive	66
3.2.5	Les principales difficultés et solutions associées	67
3.3	Contact unilatéral - frottement	69
3.3.1	Condition de Signorini	69
3.3.1.a	Condition classique	69
3.3.1.b	Condition avec pression normale	70
3.3.2	Frottement de Coulomb	70
3.4	Modèle de zone cohésive frottante	71
3.4.1	Adhésion et contact frottant	72
3.4.2	Loi adhésive	72
3.4.3	Paramètres et interprétation du modèle	73
3.4.3.a	Paramètres du modèle	73
3.4.3.b	Interprétation mécanique	73
3.4.3.c	Influence des paramètres	76
3.4.4	Energies de décohesion	78
3.4.4.a	Cas de la traction normale	78
3.4.4.b	Cas du cisaillement	79
3.5	Bilan du chapitre	80

3.1 Approche locale retenue

Nous avons mis en évidence au § 1.4 les limitations de la mécanique de la rupture pour traiter les problèmes de fissuration dans des structures minces à gradient de propriétés. Une approche locale est ainsi retenue dans le cadre de notre étude.

Différentes approches locales de la littérature sont présentées dans un premier temps.

Dynamique moléculaire

Les méthodes basées sur la dynamique moléculaire (MD¹) consistent à prédire le mouvement de millions d'atomes à partir de la résolution de l'équation de la dynamique pour chaque atome et à utiliser un potentiel d'interaction pour décrire les interactions entre atomes. Les détails de la méthode ainsi que des exemples de potentiels sont décrits dans Abraham et al. (1997). Afin de prédire les phénomènes de fissuration à des échelles plus grandes, Abraham (2001) a récemment développé une méthode à plusieurs échelles (MAAD²) :

- une approche quantique sur le front de fissure,
- la méthode MD proche de la fissure,
- la mécanique classique "loin" de la fissure.

Les faiblesses de ces méthodes sont d'une part leurs dépendances au choix du potentiel d'interaction et d'autre part les coûts numériques qui imposent l'utilisation de super-calculateurs.

Zones cohésives

Les modèles de zone cohésive (CZM³) permettent une approche locale (la physique des phénomènes de fissuration est introduite à l'échelle la plus fine) en conservant les notions clés des approches globales telles que la mécanique de la rupture. L'initiation et la propagation de fissures sont décrites grâce à la relation entre la contrainte appliquée sur les lèvres de fissure et la discontinuité de déplacement. Une synthèse dans ce domaine est proposée par Monerie (2000) et au § 3.2.

Les principales faiblesses des CZM sont les sauts de solution (Chaboche et al., 2001; Monerie et Acary, 2001) et l'impossibilité, dans le cas de matériaux élasto-plastiques parfaits, de propager une fissure lorsque la contrainte cohésive de la loi cohésive est supérieure à 3 fois la limite élastique du matériau (Tvergaard et Hutchinson, 1996).

Les avantages et inconvénients des CZM sont développés dans la suite.

Plasticity-free strip

Nous venons de voir les difficultés des CZM pour prédire la propagation de fissures dans les matériaux élastoplastiques parfaits sous certaines conditions. Ces faiblesses ont conduit aux développements par Suo et al. (1993) et Beltz et al. (1996) de modèles appelés "plasticity-free strip" (PFS) (appelés aussi modèles SSV⁴) et basés sur l'hypothèse que les dislocations ne jouent aucun rôle en front de fissure. Ces modèles sont capables de prédire l'avancée de fissures par l'introduction d'une bande élastique entre la zone plastique et la fissure. Dans ce cas, un critère en énergie permet la propagation de fissures.

¹Molecular Dynamics

²Macroscopic, Atomistic, Ab initio Dynamics

³Cohesive Zone Model

⁴Suo, Shih et Varias

Ces méthodes sont dépendantes de la bande élastique et de la contrainte d'ouverture des lèvres de fissures. En particulier lorsque cette contrainte devient petite, la zone d'ouverture de fissure devient de l'ordre de la bande élastique. Pour résoudre ce problème, Wei et Hutchinson (1999) ont développé un modèle unifié qui intègre la loi cohésive des modèles CZM et la bande élastique des modèles PFS. Le nombre de paramètres cohésifs et PFS devient une limitation de ces modèles unifiés.

Dans les modèles unifiés et PFS, le chemin de fissuration doit être connu a priori.

Virtual internal bound

Les méthodes "Virtual internal bound" (VIB), basées sur les travaux de Gao (1996) puis développées par Gao et Klein (1998) et Klein et Gao (1998), consistent à introduire des lois de type cohésives directement dans le modèle constitutif. Pour cela, dans un volume matériel, la densité d'énergie de déformation est égale au potentiel d'énergie stockée dans les liens cohésifs. Dans cette théorie, le corps est considéré comme une collection de points matériels orientés et connectés par un réseau de liens cohésifs.

Des études récentes étendent les modèles VIB aux matériaux anisotropes (Thiagarajan et Misra, 2004) et visqueux (méthodes VE-VIB⁵) (Nguyen et al., 2004).

Ces méthodes semblent devenir instables dans le cas de matériaux hétérogènes et sont coûteuses en temps calculs.

eXtended Finite Element Method

La méthode "eXtended Finite Element Method" n'est pas un modèle de fissuration mais plutôt une extension de la méthode standard des Elements Finis (FEM⁶).

L'étude de la propagation de fissure entraîne des difficultés dans la génération de maillage, le chemin de fissuration ne peut se faire qu'en bordure des éléments. Les maillages sont ainsi nécessairement isotropes et très fins. Des méthodes de remaillage, très coûteuses en temps, permettent de suivre une évolution de fissures sans pour autant mailler très finement toute la structure.

Afin d'éviter la dépendance de la fissuration au maillage, des méthodes récentes appelées "meshless" ou "meshfree" (Belytschko et al., 1996) ont été développées. Elles sont basées sur une approximation reposant sur un ensemble de points et non plus sur le maillage. En chaque point, des degrés de liberté, qui agissent sur des fonctions de base, sont définis. Plusieurs fonctions de bases sont présentes dans la littérature ; par exemple, Hao et al. (2000) ont développé la méthode "Reproducing Kernel Particle Method" et Krysl et Belytschko (1997) la méthode "Element-Free Galerkin".

Bien que très efficaces, ces méthodes sont très coûteuses en temps ; les calculs élémentaires en Elements Finis standards (calcul d'une fonction de forme en un point par exemple) deviennent très coûteux. De plus, ces méthodes restent dépendantes des paramètres introduits dans l'approximation. Enfin, les techniques "meshless", c'est-à-dire sans maillage, ne permettent pas l'utilisation de CZM.

Contrairement aux méthodes "meshfree", l'approche appelée "eXtended Finite Element Method" (X-FEM) (Moës et Belytschko, 2002) prend en compte le maillage existant et ainsi conserve les notions standards d'Elements Finis. L'indépendance de la fissuration au maillage passe par l'enrichissement

⁵ViscoElastic Virtual Internal Bound

⁶Finite Element Model

de fonctions de bases par des fonctions arbitraires. Une méthode classique d'enrichissement des fonctions de base est la technique de partition de l'unité (PU⁷) (Melenk et Babuska, 1996) et les méthodes associées "Partition of Unity Finite Element Method" (PUFEM).

Les méthodes X-FEM ont plusieurs avantages :

- elle ne sont pas liées à un modèle particulier (élastique, plastique...),
- elles ne représentent qu'un saut dans le champ,
- en l'absence de discontinuité, le cadre classique FEM est retrouvé.

En résumé, les X-FEM étendent la théorie des FEM sans en perdre les avantages.

Ainsi, l'étude de la propagation de fissures se fera par l'enrichissement des fonctions de bases près du front de fissure et à l'intérieur de la fissure. Ces méthodes ont été appliquées avec succès dans plusieurs études de fissuration ; dans le cadre de la mécanique de la rupture classique pour Sukumar et Prévost (2003), Daux et al. (2000), en trois dimensions pour Duarte et al. (2001), et dans le cadre des CZM pour Wells et Sluys (2001) et De Borst (2003). Ainsi la mise en œuvre des CZM peut aussi bien s'effectuer en FEM qu'en X-FEM.

Nous venons de voir les avantages et les inconvénients des différentes approches locales de la littérature. Dans la suite, nous mettrons en œuvre la méthode des CZM qui permet d'initier et de propager des fissures en conservant les notions clés de la mécanique de la rupture, sans l'utilisation de super-ordinateurs.

3.2 Les modèles de zone cohésive

3.2.1 Introduction

Le concept de modèles de zone cohésive a été introduit par Dugdale (1960) et Barenblatt (1962). Les deux auteurs ont divisé la surface de fissuration en deux parties, une surface sans contrainte loin du front de fissure et une surface soumise à une contrainte cohésive appelée "zone cohésive".

Barenblatt (1962) étudie la fissuration de matériau fragile. Ce modèle est d'origine atomistique : il prend en compte les forces atomiques qui agissent au voisinage du front de fissure. Pour cela, une contrainte dépendant de la distance d de fissure à partir du front est appliquée sur les lèvres de la fissure (FIG. 3.1).

Barenblatt a émis des hypothèses sur la contrainte cohésive :

- l'aire de la zone cohésive est négligeable devant l'aire de la fissure,
- la contrainte cohésive $R_N(X)$ est spécifique au matériau considéré et ne dépend pas du chargement global appliqué.

Sous les hypothèses énoncées, le critère de Barenblatt d'avancée de fissure en mode I est :

$$\sqrt{\frac{\pi}{2}} K_I \geq H, \quad (3.2.1)$$

où $H = \int_0^d \frac{R_N(x)}{\sqrt{x}} dx$ est le "module de cohésion" de Barenblatt, $R_N(x)$ est l'intensité des forces de cohésion, d est la taille de la zone cohésive et K_I est le facteur d'intensité de contrainte relatif au mode I de propagation de la fissure.

⁷Partition of Unity

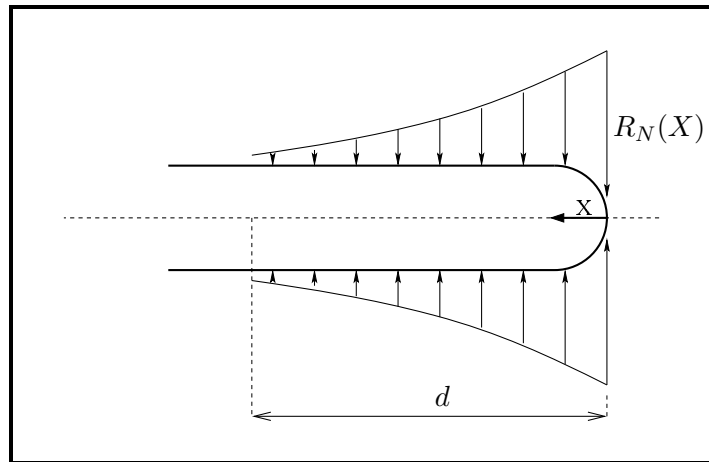


FIG. 3.1 – Modèle de zone cohésive de Barenblatt (1962) : la contrainte cohésive R_N dépend de la distance de fissure, pour $X > d$, la zone est sans contrainte.

Willis (1967) montre l'équivalence des critères de fissuration de Griffith et de Barenblatt au premier ordre en $\frac{d}{L}$ où L est la longueur totale de fissure.

Dugdale (1960) étudie la fissuration sous traction normale de matériaux ductiles présentant une plasticité localisée en pointe de fissure. Il considère un matériau élastoplastique parfait et ainsi applique une contrainte cohésive constante \hat{R}_N et indépendante de l'ouverture de la fissure u_N . Ce comportement est valable jusqu'à une valeur critique δ_N de u_N (FIG. 3.2).

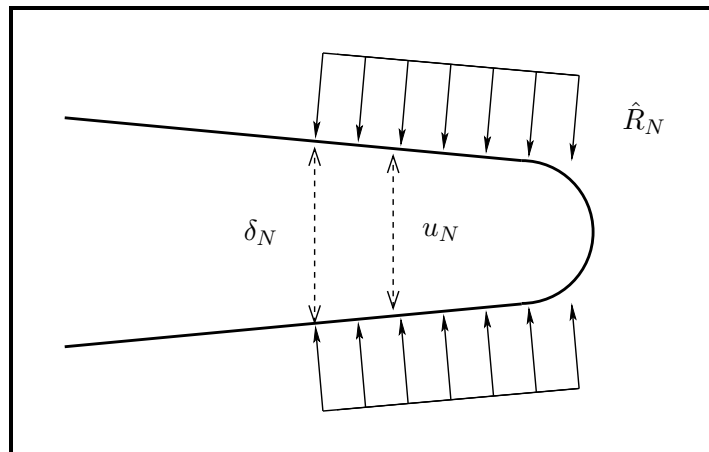


FIG. 3.2 – Modèle de zone cohésive de Dugdale (1960) : la contrainte cohésive constante \hat{R}_N est appliquée sur les lèvres de la fissure jusqu'à une valeur critique d'ouverture de la fissure δ_N .

Les modèles de zone cohésive modélisent la physique de fissuration dans une zone en pointe de fissure. Cette notion permet notamment d'envisager des processus de fissuration complexes (amorçage de multifissures sans pré-fissure et sans critère d'amorçage *ad hoc*, gradient de propriétés dans le matériau, évolution de la microstructure, fissuration tridimensionnelle, etc.) par la donnée d'une équation constitutive reliant la contrainte appliquée \mathbf{R} sur les lèvres de la fissure et le saut de dépla-

cement $[\mathbf{u}] = \mathbf{u}^+ - \mathbf{u}^-$, c'est-à-dire la différence entre les déplacements \mathbf{u}^+ et \mathbf{u}^- sur les lèvres de la fissure et de critères locaux la décrivant (énergie de décohesion E_{coh} , contrainte cohésive maximale $\hat{\mathbf{R}}$, discontinuité de déplacement critique δ). L'endommagement du matériau et éventuellement sa rupture sont alors décrits par une loi de comportement et non par des critères de rupture. Avec cette technique, l'amorçage et la propagation de fissures résultent naturellement du trajet de chargement.

3.2.2 Décomposition dans le repère normal/tangent

Le saut de déplacement à l'interface $[\mathbf{u}]$ est décomposé en partie normale u_N et tangente \mathbf{u}_T de la manière suivante (FIG. 3.3) :

$$[\mathbf{u}] = u_N \mathbf{n} + \mathbf{u}_T. \quad (3.2.2)$$

La décomposition de la contrainte cohésive s'écrit :

$$\mathbf{R} = R_N \mathbf{n} + \mathbf{R}_T. \quad (3.2.3)$$

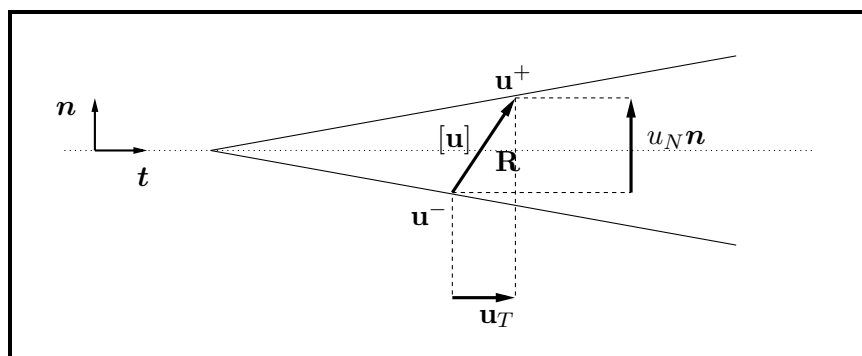


FIG. 3.3 – Notation : contrainte appliquée sur les lèvres de la fissure \mathbf{R} , discontinuité de déplacement $[\mathbf{u}]$ et décomposition dans le plan normal/tangent.

Remarque 3.1. *Les modèles considérés dans cette étude prennent en compte une adhésion couplée avec du contact unilatéral et du frottement. Lors de grandes transformations, la normale relative à l'adhésion peut être différente de celle relative au contact unilatéral (Bretelle et al., 2000). Cependant, lors de la fissuration, les distances caractéristiques locales mises en jeu dans l'adhésion sont très faibles. Ainsi, tant que l'interface n'est pas rompue, ni de grands glissements ni de grandes rotations n'apparaissent localement. Dans le cadre de l'étude de la fissuration, la décomposition (3.2.2) est donc valable.*

3.2.3 Différents modèles de zone cohésive

La notion de zone cohésive, introduite par Dugdale (1960) et Barenblatt (1962), ne prenait en compte que les efforts normaux s'appliquant sur les lèvres de la fissure (force de traction ou de compression). Le cisaillement a été introduit dans les modèles de zone cohésive par Ida (1972) et Palmer et Rice (1973) avec la donnée d'une contrainte tangentielle en fonction du saut de déplacement tangentiel. Les travaux de Fremond (1982, 1985) ont introduit la notion d'adhérence (avec une variable décrivant l'intensité d'adhésion) et de contact unilatéral. Les modèles complets de fissuration vont apparaître avec Needleman (1987) qui propose des modèles phénoménologiques,

inspirés des travaux atomistiques de Rose et al. (1981), permettant de décrire le processus de nucléation : de l'initiation jusqu'à la décohésion complète. Jusqu'au début des années 1990, les modèles ne prennent en compte que les comportements réversibles et donc ne représentent que partiellement la physique de fissuration. L'irréversibilité du comportement local dans les modèles a été introduite par Tvergaard (1990) et Needleman (1992). Le modèle proposé par Tvergaard (1990) propose de plus un frottement de Coulomb post-décohésion. Foulk et al. (2000) et (Pandolfi et al., 2000; Yu et al., 2002) ont respectivement proposé des formulations tridimensionnelles du modèle de Needleman (1987) et de Camacho et Ortiz (1996).

Notons que certains auteurs distinguent les modèles "extrinsèques" (CZM sans rigidité initiale, par exemple le modèle de Camacho et Ortiz (1996)) des modèles "intrinsèques" (CZM avec une rigidité initiale, par exemple le modèle de Needleman (1987)). Kubair et Geubelle (2003) ont notamment effectué une comparaison de stabilité de ces modèles dans le cas de fissures dynamiques.

De nombreux processus complexes de fissuration ont été modélisés grâce aux zones cohésives. Parmi les travaux les plus représentatifs, nous pouvons citer la fissuration sous chargement :

- quasi-statique (Needleman, 1990; Tvergaard et Hutchinson, 1992),
- dynamique (Xu et Needleman, 1994; Camacho et Ortiz, 1996; Siegmund et Needleman, 1997),
- cyclique (Yang et al., 2001),
- sous impacts (Xu et Needleman, 1994; Camacho et Ortiz, 1996).

Les modèles de zone cohésive ont été utilisés pour la simulation de processus de fissuration de nombreux matériaux dont :

- les matériaux métalliques (Siegmund et Brocks, 2000),
- les matériaux céramiques (Camacho et Ortiz, 1996),
- les matériaux composites (Needleman, 1987; Espinosa et al., 2000; Foulk et al., 2000; Monerie, 2000),
- les bimatériaux (Needleman, 1990; Siegmund et al., 1997; Romeo et Ballarini, 1997; Needleman et Rosakis, 1999),
- les polymères (Bjerke et Lambros, 2003).

Varias et Massih (2002) ont modélisé la fissuration de matériau en Zircaloy contenant des inclusions d'hydrures. Dans des travaux récents, Jin et al. (2002) et Wang et Nakamura (2004) proposent des modèles de zone cohésive pour des matériaux à gradient de propriétés de type métal/céramique.

Dans la suite, les principaux modèles sont présentés.

Modèle de Dugdale (1960)

Ce modèle décrit l'évolution d'une fissure dans un matériau élastoplastique parfait. La contrainte cohésive normale R_N appliquée sur les lèvres de la fissure est constante jusqu'à une valeur critique δ_N d'ouverture de fissure puis la résistance à la fissuration devient nulle (FIG. 3.4).

$$\begin{cases} R_N = -\hat{R}_N & \text{si } 0 \leq u_N \leq \delta_N, \\ R_N = 0 & \text{si } u_N > \delta_N. \end{cases} \quad (3.2.4)$$

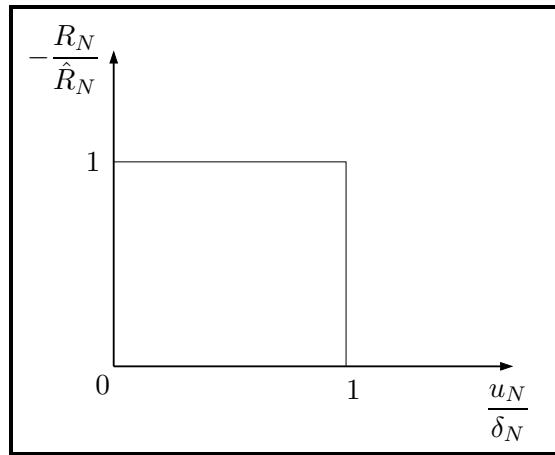


FIG. 3.4 – Relation entre la contrainte normale appliquée sur les lèvres de la fissure en fonction du saut de déplacement normal dans le modèle de Dugdale (1960).

Modèle de Palmer et Rice (1973)

Ce modèle décrit le cisaillement par la donnée de l'évolution d'une contrainte cohésive tangentielle \mathbf{R}_T en fonction du saut de déplacement tangentiel \mathbf{u}_T . Le glissement apparaît lorsque le cisaillement dépasse une valeur critique τ_i puis le seuil de cisaillement décroît pour atteindre la valeur τ_f (FIG. 3.5).

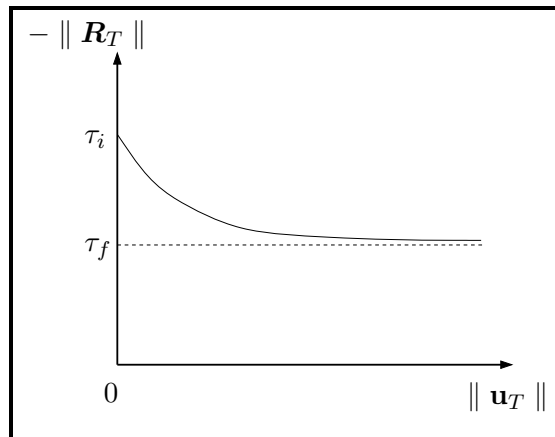


FIG. 3.5 – Relation entre la contrainte tangentielle appliquée sur les lèvres de la fissure en fonction du saut de déplacement tangentiel dans le modèle de Palmer et Rice (1973).

Modèle de Needleman (1987)

L'évolution des contraintes cohésives normale R_N et tangentielle \mathbf{R}_T est ici décrite en fonction des composantes normale u_N et tangentielle \mathbf{u}_T du saut de déplacement (FIG. 3.6). Cette évolution est donnée en terme de potentiel $\phi(u_N, \mathbf{u}_T)$:

$$\phi(u_N, \mathbf{u}_T) = - \int_0^{[\mathbf{u}]} [R_N du_N + \mathbf{R}_T \cdot d\mathbf{u}_T]. \quad (3.2.5)$$

Le potentiel est choisi polynômial :

$$\phi(u_N, \mathbf{u}_T) = \begin{cases} \frac{27}{8} \hat{R}_N \delta_N \left\{ \left(\frac{u_N}{\delta_N} \right)^2 \left[1 + \frac{4}{3} \left(\frac{u_N}{\delta_N} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{u_N}{\delta_N} \right)^2 \right] \right. \\ \quad \left. + \alpha \left(\frac{\|\mathbf{u}_T\|}{\delta_N} \right)^2 \left[1 + 2 \left(\frac{u_N}{\delta_N} \right) + \left(\frac{u_N}{\delta_N} \right)^2 \right] \right\} & \text{si } 0 \leq u_N \leq \delta_N, \\ E_{coh} & \text{si } u_N > \delta_N, \end{cases} \quad (3.2.6)$$

où \hat{R}_N et δ_N sont des paramètres, α représente la part de résistance au cisaillement par rapport à la résistance normale et E_{coh} est l'énergie de décohésion.

Lorsque $u_N < 0$, la valeur de R_N joue le rôle d'une pénalisation (force de réaction s'opposant à la pénétration des deux lèvres de la fissure).

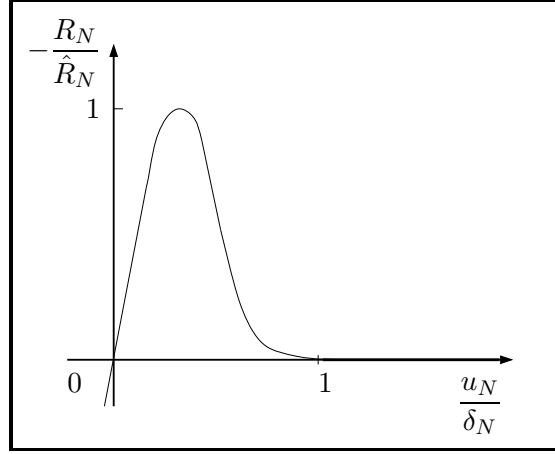


FIG. 3.6 – Relation entre la contrainte normale appliquée sur les lèvres de la fissure en fonction du saut de déplacement normal dans le modèle de Needleman (1987) lorsque $\mathbf{u}_T = \mathbf{0}$.

Modèle de Needleman (1990)

Ce modèle (FIG. 3.7) est une variante du modèle précédent. Le potentiel ϕ est donné sous forme exponentielle :

$$\phi(u_N, \mathbf{u}_T) = \begin{cases} \frac{\hat{R}_N e \delta_N}{z} \left\{ 1 - \left[1 - z \frac{u_N}{\delta_N} - \alpha z^2 \left\{ 1 - \cos \left(2\pi \frac{\|\mathbf{u}_T\|}{\delta_T} \right) \right\} \right] \exp \left(z \frac{u_N}{\delta_N} \right) \right\}, \\ \phi(0, 0) = 0, \\ \lim_{u_N \rightarrow \infty} \phi = E_{coh}, \end{cases} \quad (3.2.7)$$

où $z = \frac{16}{9}e$.

Lorsque $u_N = 0$, les fonctions R_N et \mathbf{R}_T sont périodiques en \mathbf{u}_T de période δ_T . Ainsi dans ce cas, le travail interfacial total associé au glissement $\|\mathbf{u}_T\| = \delta_T$ est nul. Ceci est une limitation d'application de la représentation périodique.

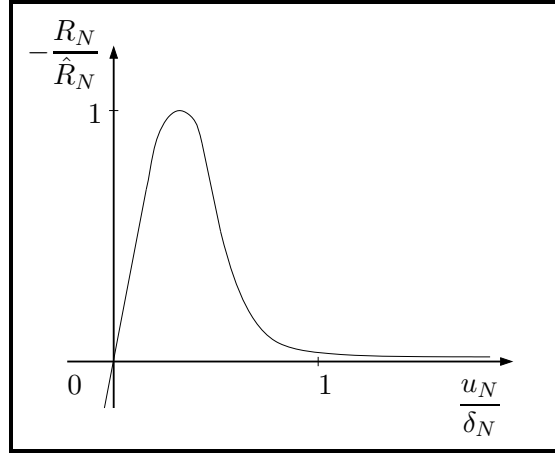


FIG. 3.7 – Relation entre la contrainte normale appliquée sur les lèvres de la fissure en fonction du saut de déplacement normal dans le modèle de Needleman (1990) lorsque $\mathbf{u}_T = \mathbf{0}$.

Modèle de Tvergaard (1990)

Ce modèle introduit l'irréversibilité du comportement et un frottement de Coulomb post décohésion dans le modèle de Needleman (1987). Il est défini, en deux dimensions, par (FIG. 3.8) :

$$\left. \begin{array}{l} R_N = -\frac{u_N}{\delta_N} F(\lambda) \\ \mathbf{R}_T = -\alpha \frac{\mathbf{u}_T}{\delta_T} F(\lambda) \end{array} \right\} \text{si } \dot{\lambda} \geq 0 \text{ et } \lambda = \lambda_{\max} < 1, \quad (3.2.8)$$

$$\left. \begin{array}{l} R_N = -\frac{u_N}{\delta_N} F(\lambda_{\max}) \\ \mathbf{R}_T = -\alpha \frac{\mathbf{u}_T}{\delta_T} F(\lambda_{\max}) \end{array} \right\} \text{si } \dot{\lambda} < 0 \text{ ou } \lambda < \lambda_{\max} < 1,$$

où $\lambda = \sqrt{\left(\frac{u_N}{\delta_N}\right)^2 + \left(\frac{\|\mathbf{u}_T\|}{\delta_T}\right)^2}$, $F(\lambda) = \frac{27}{4} \hat{R}_N (1 - \lambda)^2$ pour $0 \leq \lambda \leq 1$ et λ_{\max} est la plus grande valeur de λ atteinte.

Pour $\lambda_{\max} \geq 1$, nous avons un frottement de Coulomb post décohésion et donc $\mathbf{u}_T = -\text{signe}(\dot{\mathbf{u}}_T) \mu_{\text{rot}} |R_N|$.

Modèle de Tvergaard et Hutchinson (1992)

Ce modèle définit une relation de type trapézoïdale entre la contrainte cohésive normale et le saut de déplacement normal (Eq. 1.5.7 page 36). Le processus de fissuration est entièrement défini avec les paramètres $E_{coh} = \int_0^{\delta_N} R_N d\delta_N$ énergie de décohésion, \hat{R}_N contrainte cohésive maximale, u_1/δ_N et u_2/δ_N (FIG. 3.9).

Modèle de Xu et Needleman (1994)

Ce modèle concerne la fissuration dynamique de matériaux élastiques. Comme dans le modèle de Needleman (1987), l'évolution est donnée en terme de potentiel :

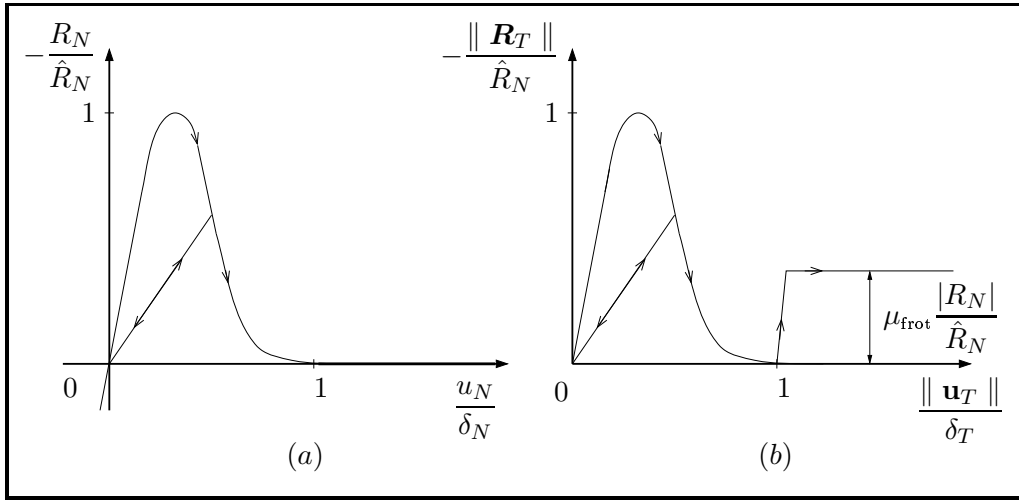


FIG. 3.8 – Relation entre la contrainte (a) normale (b) tangentielle appliquée sur les lèvres de la fissure en fonction du saut de déplacement (a) normal (b) tangent dans le modèle de Tvergaard (1990) lorsque (a) $\mathbf{u}_T = \mathbf{0}$ (b) $u_N = 0$.

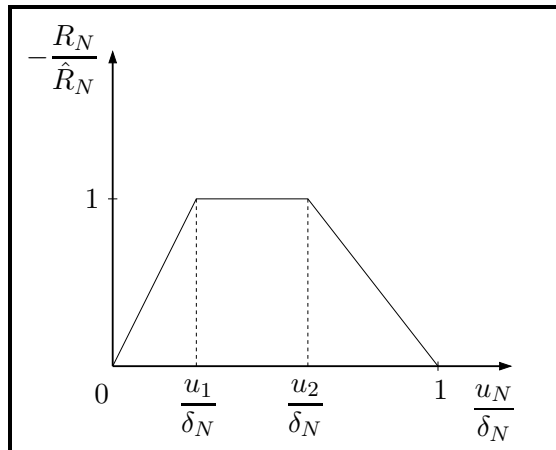


FIG. 3.9 – Relation entre la contrainte normale appliquée sur les lèvres de la fissure en fonction du saut de déplacement normal dans le modèle de Tvergaard et Hutchinson (1992).

$$\phi(\mathbf{u}_T, u_N) = \phi_N + \phi_N \exp\left(-\frac{u_N}{\delta_{cN}}\right) \left\{ \left[1 - r + \frac{u_N}{\delta_{cN}}\right] \frac{1-q}{r-1} - \left[q + \left(\frac{r-q}{r-1}\right) \frac{u_N}{\delta_{cN}} \right] \exp\left(-\frac{\|\mathbf{u}_T\|^2}{\delta_{cT}^2}\right) \right\}, \quad (3.2.9)$$

où q est le ratio entre l'énergie de décohésion tangentielle et normale, r est le ratio entre u_N^* et δ_{cN} (u_N^* étant la valeur de u_N lorsque $\mathbf{R}_T = \mathbf{0}$) et ϕ_N et ϕ_T sont respectivement l'énergie de décohésion normale et tangentielle :

$$\phi_N = e \hat{R}_N \delta_{cN}, \quad \phi_T = \sqrt{\frac{e}{2}} \hat{R}_T \delta_{cT}, \quad (3.2.10)$$

avec \hat{R}_N et \hat{R}_T les valeurs maximales de R_N et $\|\mathbf{R}_T\|$, δ_{cN} et δ_{cT} sont les sauts de déplacements correspondants à ces valeurs maximales (FIG. 3.10).

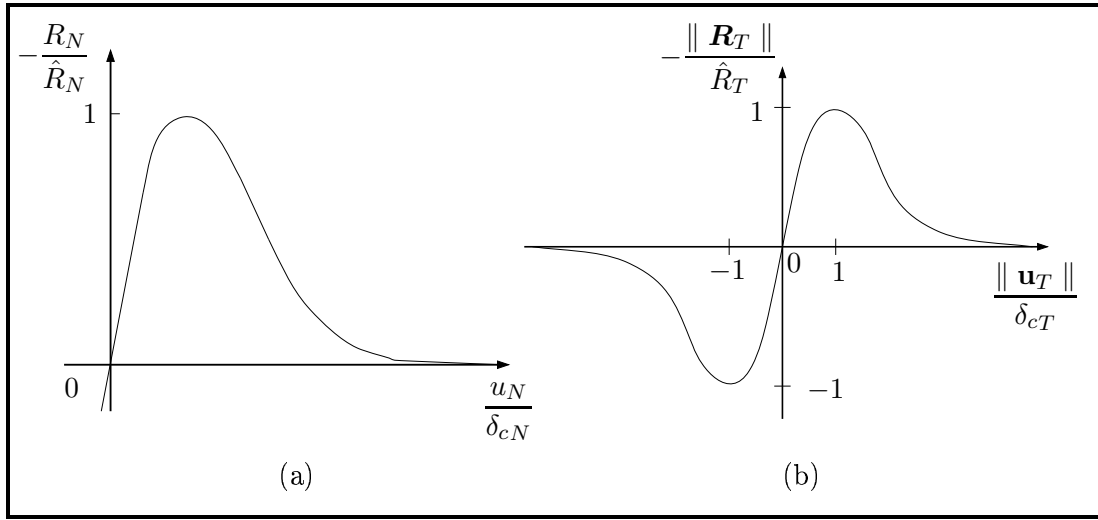


FIG. 3.10 – Relation entre la contrainte (a) normale (b) tangentielle appliquée sur les lèvres de la fissure en fonction du saut de déplacement (a) normal (b) tangent dans le modèle de Xu et Needleman (1994).

Modèle de Michel et Suquet (1994)

Ce modèle concerne les décohésions interfaciales dans les composites à matrice métallique et renfort particulaire. Le modèle est défini en deux dimensions par (FIG. 3.11) :

$$\begin{cases} R_N = -(1-D)K^0 \frac{u_N}{L}, \\ \mathbf{R}_T = -(1-D)\mu^0 \frac{\mathbf{u}_T}{L}, \end{cases} \quad (3.2.11)$$

où K^0 et μ^0 sont les raideurs initiales normale et tangente de l'interface (en Pa), L est proportionnel à la taille des particules et D est un paramètre d'endommagement régi par la loi de normalité portant sur le taux de restitution de l'énergie G suivante :

$$G \leq H(D)|\Gamma|, \quad \dot{D} = 0 \text{ si } G < H(D)|\Gamma|, \quad \dot{D} \geq 0 \text{ si } G = H(D)|\Gamma|, \quad (3.2.12)$$

avec $(\gamma_0 > 0, \eta > 0)$:

$$H(D) = \gamma_0 \left(1 + \eta \frac{D}{2-D} \right)^2. \quad (3.2.13)$$

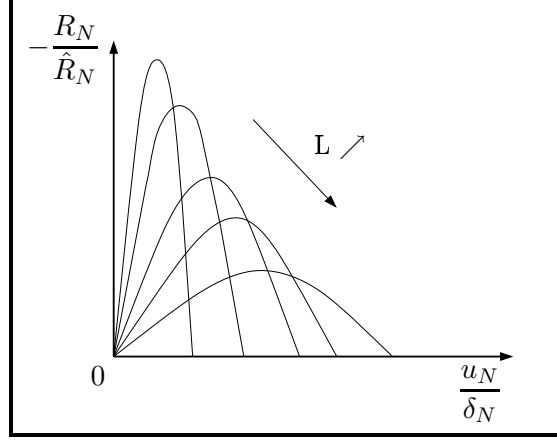


FIG. 3.11 – Relation entre la contrainte normale appliquée sur les lèvres de la fissure en fonction du saut de déplacement normal dans le modèle de Michel et Suquet (1994).

Modèle de Raous et al. (1999)

Ce modèle, basé sur une formulation thermodynamique locale, étend le modèle de Fremond (1987). Fremond (1987) a introduit une variable d'endommagement β . Raous et al. (1999) introduisent, de plus, un contact unilatéral et un frottement de Coulomb. Le modèle inclut une sensibilité à la vitesse de sollicitation.

Le modèle est défini par (FIG. 3.12) :

Contact unilatéral avec adhésion

$$R_N + C_N \beta^2 u_N \geq 0, \quad u_N \geq 0, \quad (R_N + C_N \beta^2 u_N) u_N = 0. \quad (3.2.14)$$

Frottement de Coulomb avec adhésion

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_T^r &= C_T \beta^2 \mathbf{u}_T, \\ \|\mathbf{R}_T + \mathbf{R}_T^r\| &\leq \mu_{\text{frot}} |R_N + C_N \beta^2 u_N|, \\ \|\mathbf{R}_T + \mathbf{R}_T^r\| &< \mu_{\text{frot}} |R_N + C_N \beta^2 u_N| \Rightarrow \dot{\mathbf{u}}_T = 0, \\ \|\mathbf{R}_T + \mathbf{R}_T^r\| &= \mu_{\text{frot}} |R_N + C_N \beta^2 u_N| \Rightarrow \exists \lambda \geq 0, \dot{\mathbf{u}}_T = -\lambda (\mathbf{R}_T + \mathbf{R}_T^r). \end{aligned} \quad (3.2.15)$$

Evolution de l'intensité d'adhésion

$$\begin{aligned} \dot{\beta} &= - \left[\frac{1}{b} (\omega h'(\beta) - (C_N u_N^2 + C_T \|\mathbf{u}_T\|^2) \beta) \right]^{-\frac{1}{p}} \text{ si } \beta \in [0, 1[, \\ \dot{\beta} &\leq - \left[\frac{1}{b} (\omega h'(\beta) - (C_N u_N^2 + C_T \|\mathbf{u}_T\|^2) \beta) \right]^{-\frac{1}{p}} \text{ si } \beta = 1. \end{aligned} \quad (3.2.16)$$

où C_N et C_T sont les raideurs initiales normale et tangente de la liaison interfaciale, ω est une énergie de référence, μ_{frot} est le coefficient de frottement de Coulomb, b est un coefficient de viscosité, $0 \leq p \leq 1$, h est une fonction et $(x)^- = \max(0, -x)$, $\forall x \in \mathbb{R}$ est la partie négative.

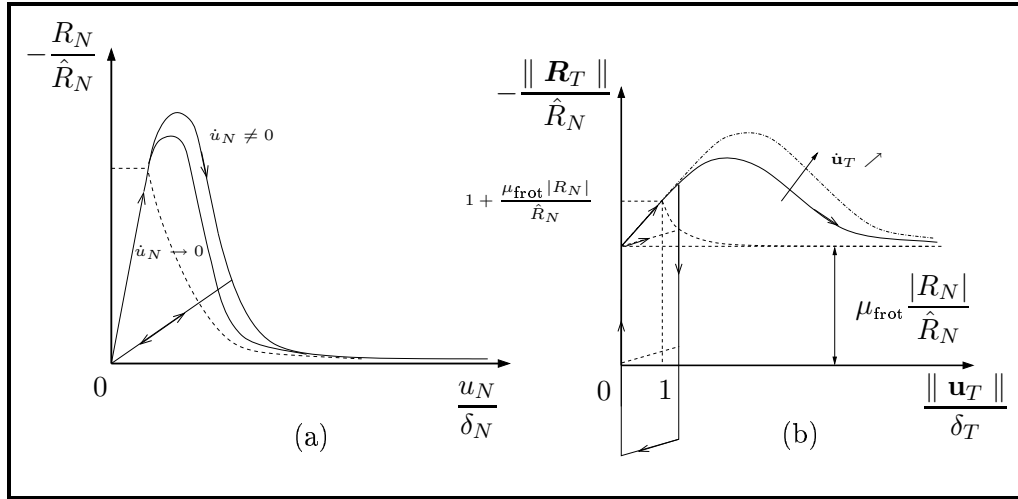


FIG. 3.12 – Relation entre la contrainte (a) normale (b) tangentielle appliquée sur les lèvres de la fissure en fonction du saut de déplacement (a) normal (b) tangent dans le modèle de Raous et al. (1999).

Modèle de Monerie (2000)

Ce modèle est une variante du modèle de Raous et al. (1999). Monerie (2000) inclut, à travers une formulation thermodynamique non locale, un coefficient de frottement variable en fonction du niveau d'endommagement de l'interface et un gradient d'intensité d'adhésion par une théorie du premier gradient d'endommagement proposé par Fremond (1985).

Le coefficient de frottement de Coulomb μ_{frot} s'écrit :

$$\mu_{\text{frot}} = \bar{\mu} f(\beta), \quad (3.2.17)$$

où $f(\beta) : [0, 1] \rightarrow [0, 1]$ est une fonction continue décroissante de β .

L'évolution de l'intensité devient :

$$\begin{aligned} \dot{\beta} &= - \left[\frac{1}{b} (\omega h'(\beta) - (C_N u_N^2 + C_T \|\mathbf{u}_T\|^2) \beta - k \Delta \beta)^- \right]^{\frac{1}{p}} \text{ si } \beta \in [0, 1[, \\ \dot{\beta} &\leq - \left[\frac{1}{b} (\omega h'(\beta) - (C_N u_N^2 + C_T \|\mathbf{u}_T\|^2) \beta - k \Delta \beta)^- \right]^{\frac{1}{p}} \text{ si } \beta = 1, \end{aligned} \quad (3.2.18)$$

où k est une constante négative (en J).

Ce modèle de frottement variable a été utilisé par Acary (2001) avec $f(\beta) = (1 - \beta)$, Raous et Monerie (2001) avec $f(\beta) = (1 - \beta)$ et Karray et al. (2004) avec $f(\beta) = (1 - \beta^2)$.

Modèle de Varias et Massih (2002)

Ce modèle a été présenté au § 1.5. Il traite de la fissuration de matériau en Zircaloy hydruré avec la loi de décohésion de Tvergaard et Hutchinson (1992) (FIG. 3.9). Le gradient de propriété du matériau composite est pris en compte dans une loi des mélanges pour l'énergie de décohésion :

$$E_{\text{coh}} = f^H E_{\text{coh}}^H + (1 - f^H) E_{\text{coh}}^M, \quad (3.2.19)$$

avec f^H fraction volumique d'hydrures, E_{coh}^M énergie de décohesion du matériau sans inclusion d'hydrures ($f^H = 0$) et E_{coh}^H énergie de décohesion des hydrures ($f^H = 1$).

La contrainte normale maximale, \hat{R}_N , s'écrit :

$$\hat{R}_N = \sqrt{f^H(\hat{R}_N^H)^2 + (1 - f^H)(\hat{R}_N^M)^2}, \quad (3.2.20)$$

où \hat{R}_N^M est la contrainte normale maximale du matériau sans inclusions d'hydrures, \hat{R}_N^H est la contrainte normale maximale des hydrures.

Modèle de Jin et al. (2002)

Ce modèle est destiné à la description de la fissuration dans des matériaux à gradient de propriétés (FGM) de type céramique/métal. Pour la description tridimensionnelle du modèle cohésif, une contrainte effective R_{eff} et un déplacement effectif u_{eff} sont introduits (Camacho et Ortiz, 1996) :

$$R_{\text{eff}} = \sqrt{R_N^2 + \eta^{-2} \|\mathbf{R}_T\|^2}, \quad u_{\text{eff}} = \sqrt{u_N^2 + \eta^2 \|\mathbf{u}_T\|^2}, \quad (3.2.21)$$

où η est un paramètre qui permet de pondérer les effets normaux et tangentiels (généralement, $\eta = \sqrt{2}$).

Les contraintes cohésives normale R_N et tangentielle \mathbf{R}_T dérivent d'un potentiel de type (Needleman, 1987) avec pondération par la fraction volumique de métal :

$$\begin{aligned} \phi(x, u_{\text{eff}}, (u_{\text{eff}})_{\text{max}}) = & \\ & \frac{f^{\text{met}}(x)}{f^{\text{met}}(x) + \beta^{\text{met}}[1 - f^{\text{met}}(x)]} \exp(1) \hat{R}_N^{\text{met}} \delta_{cN}^{\text{met}} \left[1 - \left(1 - \frac{u_{\text{eff}}}{\delta_{cN}^{\text{met}}} \right) \exp\left(\frac{u_{\text{eff}}}{\delta_{cN}^{\text{met}}}\right) \right] \\ & + \frac{1 - f^{\text{met}}(x)}{1 - f^{\text{met}}(x) + \beta^{\text{cer}} f^{\text{met}}(x)} \exp(1) \hat{R}_N^{\text{cer}} \delta_{cN}^{\text{cer}} \left[1 - \left(1 - \frac{u_{\text{eff}}}{\delta_{cN}^{\text{cer}}} \right) \exp\left(\frac{u_{\text{eff}}}{\delta_{cN}^{\text{cer}}}\right) \right], \end{aligned} \quad (3.2.22)$$

où $f^{\text{met}}(x)$ est la fraction volumique de métal, $\beta^{\text{met}} (\geq 1)$, $\beta^{\text{cer}} (\geq 1)$ sont des paramètres d'adhésions, \hat{R}_N est la valeur maximale de R_N , δ_{cN} le saut de déplacement correspondant à \hat{R}_N et $(u_{\text{eff}})_{\text{max}}$ est la plus grande valeur atteinte par u_{eff} .

Les contraintes cohésives sont données par :

$$R_N = \frac{\partial \phi}{\partial u_N} = \left(\frac{R_{\text{eff}}}{u_{\text{eff}}} \right) u_N, \quad \mathbf{R}_T = \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{u}_T} = \eta^2 \left(\frac{R_{\text{eff}}}{u_{\text{eff}}} \right) \mathbf{u}_T, \quad (3.2.23)$$

avec :

$$R_{\text{eff}} = \begin{cases} \frac{f^{\text{met}}(x)}{f^{\text{met}}(x) + \beta^{\text{met}}[1 - f^{\text{met}}(x)]} \exp(1) \hat{R}_N^{\text{met}} \left(-\frac{u_{\text{eff}}}{\delta_{cN}^{\text{met}}} \right) \exp\left(\frac{u_{\text{eff}}}{\delta_{cN}^{\text{met}}}\right) & \text{si } u_{\text{eff}} = u_{\text{eff}}^{\text{max}} \text{ et } \dot{u}_{\text{eff}} \geq 0, \\ + \frac{1 - f^{\text{met}}(x)}{1 - f^{\text{met}}(x) + \beta^{\text{cer}} f^{\text{met}}(x)} \exp(1) \hat{R}_N^{\text{cer}} \left(-\frac{u_{\text{eff}}}{\delta_{cN}^{\text{cer}}} \right) \exp\left(\frac{u_{\text{eff}}}{\delta_{cN}^{\text{cer}}}\right) & \\ \left(\frac{R_{\text{eff}}^{\text{max}}}{\delta_{\text{eff}}^{\text{max}}} \right) u_{\text{eff}} & \text{si } u_{\text{eff}} < u_{\text{eff}}^{\text{max}} \text{ ou } \dot{u}_{\text{eff}} < 0, \end{cases}$$

où $R_{\text{eff}}^{\text{max}}$ est la valeur de R_{eff} lorsque $u_{\text{eff}} = u_{\text{eff}}^{\text{max}}$.

En l'absence de cisaillement ($\mathbf{u}_T = \mathbf{0}$ et $\mathbf{R}_T = \mathbf{0}$), on a $u_{\text{eff}} = u_N$, $R_{\text{eff}} = R_N$ et $\delta_{cN} = \delta_N$ (FIG. 3.13).

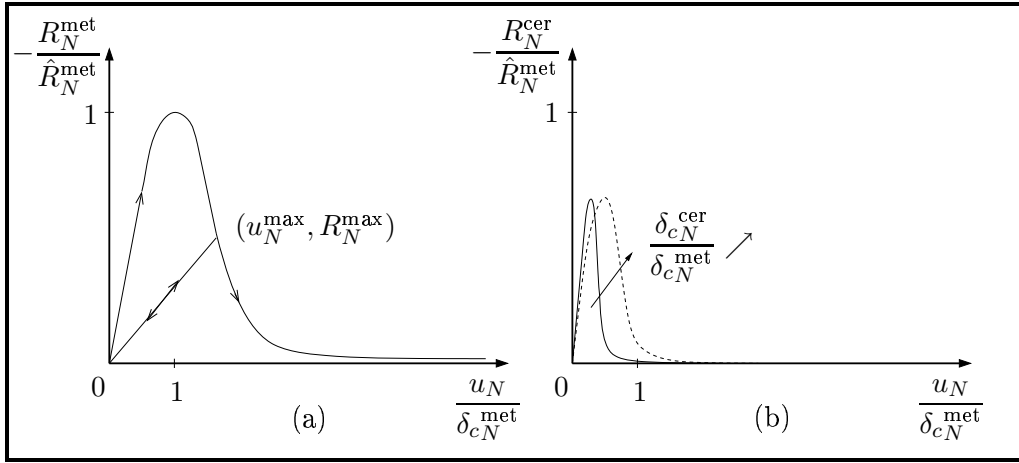


FIG. 3.13 – Relation entre la contrainte normale (a) du métal ($R_N^{\text{met}}/\hat{R}_N^{\text{met}}$) (b) de la céramique ($R_N^{\text{cer}}/\hat{R}_N^{\text{met}}$) appliquée sur les lèvres de la fissure en fonction du saut de déplacement normal ($u_N/\delta_{cN}^{\text{met}}$) dans le modèle de Jin et al. (2002) lorsque $\mathbf{u}_T = \mathbf{0}$ et $\mathbf{R}_T = \mathbf{0}$.

Modèle de Wang et Nakamura (2004)

Ce modèle traite de la propagation de fissures dans des matériaux élastoplastiques à gradient de propriétés (FGM). Il est basé sur le modèle de Xu et Needleman (1994) :

$$\phi(u_N, \mathbf{u}_T) = \phi_N \left\{ 1 + \exp\left(-\frac{u_N}{\delta_N}\right) \left[\left(1 + \frac{u_N}{\delta_N}\right)(q-1) - \left(1 + \frac{u_N}{\delta_N}\right)q \exp\left(-\frac{\|\mathbf{u}_T\|^2}{\delta_T^2}\right) \right] \right\}, \quad (3.2.24)$$

où q est le ratio entre l'énergie de décohésion tangentielle et normale.

Le modèle tient compte de l'hétérogénéité du matériau en faisant dépendre les fonctions de la position ($\phi_N(x), \hat{R}_N(x)$) ou de la composition de chaque phase. Le paramètre \hat{R}_N étant très difficile à déterminer en chaque point d'un matériau à gradient de propriétés, Wang et Nakamura (2004) envisagent une relation entre ϕ_N et \hat{R}_N telle que (FIG. 3.14) :

$$\frac{\hat{R}_N}{(\hat{R}_N)_{\text{ref}}} = \left(\frac{\phi_N}{(\phi_N)_{\text{ref}}} \right)^\alpha, \quad (3.2.25)$$

où $(\phi_N)_{\text{ref}}$ et $(\hat{R}_N)_{\text{ref}}$ sont définis en un point de référence et $\alpha \in \mathbb{R}$ définit la variation de \hat{R}_N en fonction de ϕ_N . Bien que α puisse dépendre du chargement, Wang et Nakamura (2004) considèrent α comme un paramètre matériau (dépendant de la composition du FGM).

Les modèles spécifiques aux matériaux à gradient de propriétés imposent de connaître les paramètres relatifs aux zones cohésives en chaque point du matériau. Or, il est souvent très difficile de déterminer certains paramètres, par exemple la contrainte maximale $\hat{\mathbf{R}}$, en chaque point. Il serait peut-être judicieux d'envisager des modèles non locaux qui permettent de prendre en compte les évolutions spatiales de certains paramètres, par exemple l'évolution de l'endommagement surfacique par l'intermédiaire du gradient de β dans le modèle de Monerie (2000). Mais une nouvelle longueur interne apparaît, k dans le modèle de Monerie (2000), dont le sens physique n'est pas clair et la détermination expérimentale très délicate.

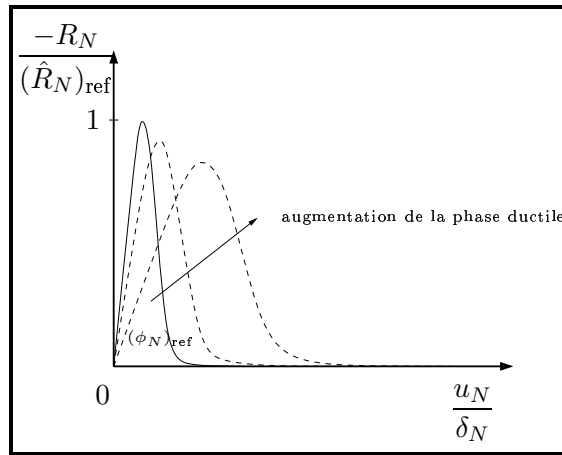


FIG. 3.14 – Relation entre la contrainte normale appliquée sur les lèvres de la fissure en fonction du saut de déplacement normal et de la phase ductile dans le modèle de Wang et Nakamura (2004) dans le cas $\alpha < 0$ et lorsque $\mathbf{R}_T = \mathbf{0}$.

3.2.4 Les avantages des modèles de zone cohésive

Amorçage de fissures

L'amorçage de fissures résulte naturellement du trajet de chargement et des caractéristiques de la zone cohésive. Aucun critère d'amorçage n'est nécessaire.

Evolution spatiale des fissures

Là encore, aucun critère de branchement n'est nécessaire, les fissures résultent naturellement du trajet du chargement. L'idée, développée initialement par Xu et Needleman (1994), est d'implémenter des modèles de zone cohésive entre chaque maille d'un maillage éléments finis (FIG. 3.15).

Le problème de la localisation ne se pose pas ici car les modèles de zone cohésive sont des modèles locaux.

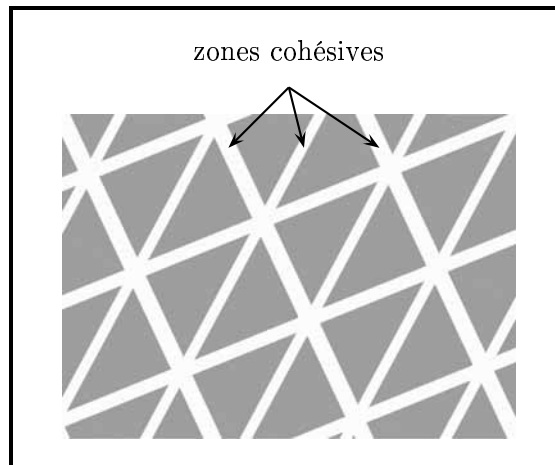


FIG. 3.15 – Représentation d'un maillage éléments finis "éclaté" : entre chaque maille est implémenté un modèle de zone cohésive.

Simulation de processus de fissuration complexe

Ces modèles permettent d'envisager des phénomènes de fissurations très complexes : frottement, contact unilatéral, etc. Ces phénomènes seront pris en compte sur les lèvres de la fissure à partir de conditions de bords particulières.

Conservation du taux de restitution de l'énergie

On a :

$$G = \int_0^\delta \mathbf{R}([\mathbf{u}]) \cdot d[\mathbf{u}], \quad (3.2.26)$$

où G est le taux de restitution de l'énergie.

Monerie (2000) montre que la relation (3.2.26) n'est en toute rigueur correcte que pour une fissure se propageant en ligne droite de manière stable. Ainsi, dans ce cas, il est équivalent d'utiliser un modèle de zone cohésive ou un critère de type Griffith. La fissuration stationnaire ne dépend que de l'aire sous la courbe $\mathbf{R}([\mathbf{u}])$ et non de sa forme (ceci n'est plus vrai lorsque la vitesse de propagation de la fissure varie, lors de propagations instables de fissures ou lors de l'amorçage de fissures). Ceci est confirmé par Monerie et al. (1998) pour une propagation de fissure en mode II.

3.2.5 Les principales difficultés et solutions associées

Définition d'une longueur caractéristique

Les modèles de zone cohésive introduisent la notion de discontinuité de déplacement. Une difficulté est alors de définir une longueur caractéristique (Falk et al., 2001). Cette longueur peut être égale, par exemple, à la taille de la "process zone" (zone d'élaboration de la fissure).

Perte de rigidité de la structure

La rigidité d'un milieu incorporant les éléments d'interfaces est inférieure à celle d'un milieu classique modélisé par des éléments finis. En effet, les modèles de zone cohésive introduisent pour la plupart de la souplesse dans le milieu (cela peut se comprendre si l'on parcourt la courbe en cloche de Needleman (1987) par exemple, une traction introduit nécessairement un écartement des mailles).

On peut remédier à ce problème en utilisant, par exemple, des modèles d'interface à rigidité interfaciale initiale infinie (ces modèles sont appelés "extrinsèques") ou en calibrant la pente à l'origine des modèles "intrinsèques" telle que la raideur apparente soit proche de la raideur théorique (i.e. sans CZM).

Problèmes d'initiation dans les matériaux élastoplastiques parfaits

Tvergaard et Hutchinson (1996) ont étudié la propagation de fissures dans des matériaux élastoplastiques et ont notamment observé que les CZM étaient incapables de prédire l'initiation de fissures dans le cas de matériaux élastoplastiques parfaits lorsque le ratio entre la contrainte cohésive maximale et la contrainte à rupture du matériau était supérieur à 3. Cette limitation a conduit au développement de méthodes PFS (§ 2.2.2.b).

Saut de solution

La discontinuité de solution (ou saut de solution) est une difficulté majeure dans l'utilisation de modèles de zone cohésive pour le calcul de structures. Les problèmes de localisation ne se posent pas car les modèles d'interface sont localisés. Par contre, le comportement interfacial adoucissant de ces modèles rend le problème mal posé et des sauts de solution peuvent apparaître avec perte de l'unicité de la solution. Monerie (2000) et Monerie et Acary (2001) démontrent un théorème d'unicité conditionnelle pour le cas de solides élastiques cohésifs soumis à une évolution quasi-statique.

L'exemple uniaxial qui suit, développé dans Chaboche et al. (2001), est une illustration simple de saut de solution lors de l'utilisation d'un modèle adoucissant de type Needleman (1987).

Soit une structure composée d'un ressort associé à un élément d'interface (FIG. 3.16). Le système est soumis à un chargement monotone croissant. Dans le repère local (u_N, R_N) de la loi d'interface, le ressort peut être vu comme une droite de pente k/L où k est la raideur du ressort et L sa longueur initiale, l'ordonnée à l'origine augmentant avec le chargement. Deux situations peuvent se présenter :

- k/L est suffisamment grand : il existe toujours un point de fonctionnement et donc la solution est toujours stable,
- sinon un saut de solution (sur la FIG. 3.16 : passage de u_a à $u_b > u_a$) peut se produire : la solution peut être instable.

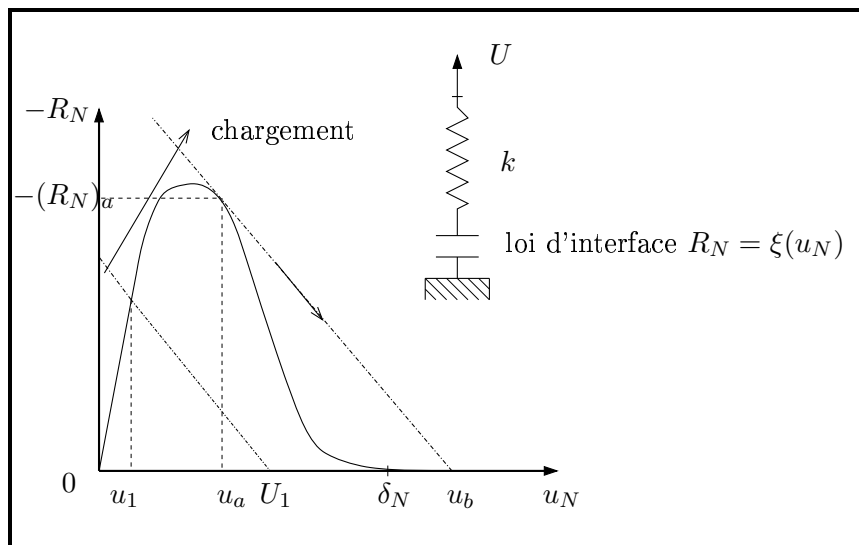


FIG. 3.16 – Exemple uniaxial illustrant le saut de solution d'un modèle adoucissant de type Needleman (1987).

Chaboche et al. (2001) et Monerie (2000) proposent plusieurs méthodes pour éliminer le saut ou contrôler la solution :

- raffiner le maillage éléments finis dans la région où se produit le saut de solution. Dans ce cas, les tailles de mailles sont généralement très faibles et la méthode devient numériquement coûteuse,

- contrôler localement la solution : après avoir détecté le noeud concerné par la discontinuité, un pilotage local peut forcer la solution à suivre la courbe interfaciale ; les états d'équilibres intermédiaires obtenus sont ainsi fictifs et ne tiennent plus compte du chargement global,
- utiliser une théorie du premier gradient de la variable d'endommagement ($\nabla\beta$ dans le modèle de Monerie (2000)),
- effectuer une modélisation dynamique : l'énergie élastique stockée dans la structure est transformée en énergie cinétique,
- utiliser une technique de régularisation visqueuse pour retarder la restitution d'énergie : pour certains matériaux, l'existence d'une viscosité interfaciale n'est pas démontrée.

Notons que les deux dernières méthodes possèdent une justification physique (sensibilité à la vitesse de sollicitation, évolution rapide). En l'absence d'informations sur une éventuelle viscosité du processus de fissuration, la modélisation dynamique est la seule à posséder un sens physique. Cette approche est retenue pour la suite.

3.3 Contact unilatéral - frottement

Dans un matériau hétérogène dont les constituants possèdent des coefficients de Poisson différents, il peut apparaître du contact et du frottement à l'interface de ces constituants (Comminou, 1977). L'étude, à l'échelle microscopique, consiste à étudier la fissuration d'une matrice en Zircaloy contenant des inclusions d'hydrures. Ces deux matériaux possèdent des coefficients de Poisson différents. Le contact unilatéral (condition de Signorini) et le frottement de Coulomb sont donc pris en compte dans la suite de l'étude.

3.3.1 Condition de Signorini

3.3.1.a Condition classique

La condition de Signorini est la condition unilatérale utilisée pour modéliser le contact parfait.

Le contact unilatéral parfait est exprimé par (condition d'impénétrabilité) :

$$u_N \geq 0, \tag{3.3.1}$$

et peut être décomposé en deux situations (FIG. 3.17(a)) :

- absence de contact si $u_N > 0$ et $R_N = 0$,
- le contact a lieu si $u_N = 0$ et $R_N \geq 0$.

La condition de Signorini peut être écrite sous la forme d'une condition de complémentarité :

$$u_N \geq 0, \quad R_N \geq 0, \quad u_N R_N = 0, \tag{3.3.2}$$

qui peut se réécrire sous la forme d'une sous-différentielle :

$$-R_N \in \partial I_{\mathbb{R}_+}(u_N), \tag{3.3.3}$$

où I est la fonction indicatrice telle que : $K \in \mathbb{R}^n, n \in \mathbb{N}, I_K(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x \in K, \\ +\infty & \text{sinon.} \end{cases}$

Dans la suite, nous noterons que (u_N, R_N) respecte le graphe de Signorini par :

$$(u_N, R_N) \in \text{GR-Signorini} . \quad (3.3.4)$$

3.3.1.b Condition avec pression normale

La prise en compte dans la condition de Signorini d'une réaction normale p en l'absence de contact s'écrit (FIG. 3.17(b)) :

$$u_N \geq 0, \quad (R_N - p) \geq 0, \quad u_N(R_N - p) = 0, \quad (3.3.5)$$

qui se réécrit sous la forme d'une sous-différentielle :

$$-(R_N - p) \in \partial I_{\mathbb{R}_+}(u_N) . \quad (3.3.6)$$

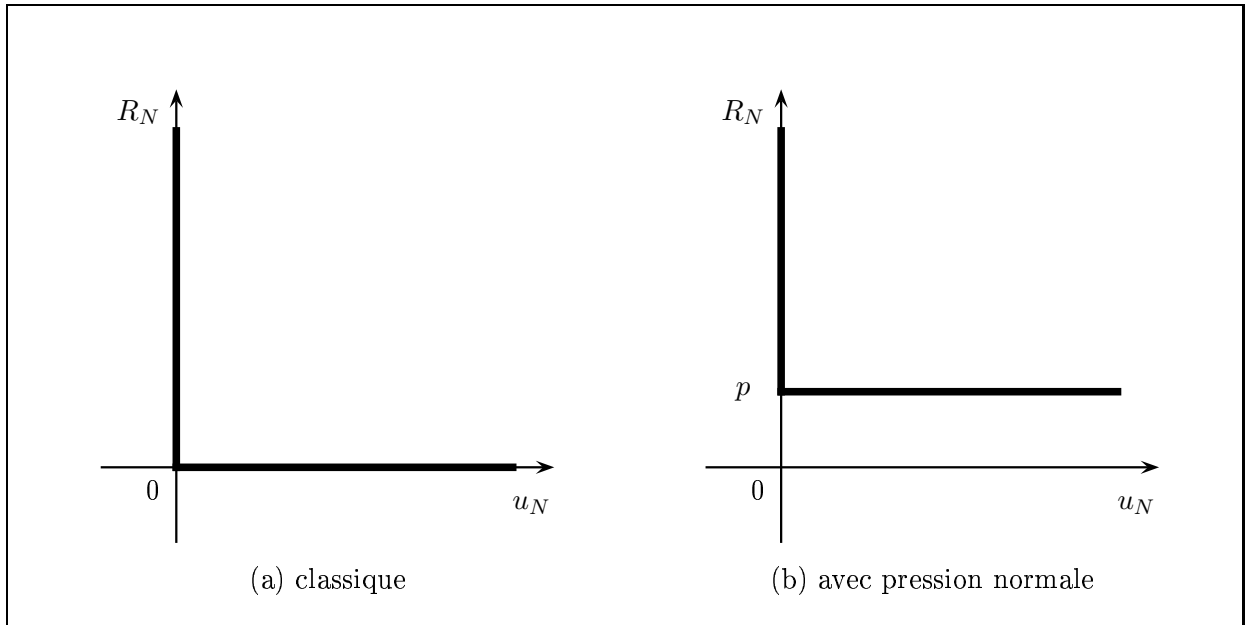


FIG. 3.17 – Condition de Signorini

3.3.2 Frottement de Coulomb

Le frottement de Coulomb exprime le frottement sec entre deux solides.

Le frottement de Coulomb est caractérisé par un seuil de frottement dépendant de la réaction normale. Deux situations peuvent se produire (FIG. 3.18) :

- non glissement si $\|\mathbf{R}_T\| < \mu_{\text{frot}} |R_N|$ et $\dot{\mathbf{u}}_T = 0$,
- glissement si $\|\mathbf{R}_T\| = \mu_{\text{frot}} |R_N|$ et $\exists \lambda \geq 0$ tel que $\dot{\mathbf{u}}_T = -\lambda \mathbf{R}_T$.

D'où :

$$\|\mathbf{R}_T\| \leq \mu_{\text{frot}} |R_N|, \begin{cases} \|\mathbf{R}_T\| < \mu_{\text{frot}} |R_N| \Rightarrow \dot{\mathbf{u}}_T = \mathbf{0}, \\ \|\mathbf{R}_T\| = \mu_{\text{frot}} |R_N| \Rightarrow \exists \lambda \geq 0, \dot{\mathbf{u}}_T = -\lambda \mathbf{R}_T. \end{cases} \quad (3.3.7)$$

De même que pour la condition de Signorini, le frottement de Coulomb peut s'écrire sous la forme d'une inclusion sous différentielle :

$$\mathbf{R}_T \in \partial_{\dot{\mathbf{u}}_T} (\mu_{\text{frot}} |R_N| \|\dot{\mathbf{u}}_T\|). \quad (3.3.8)$$

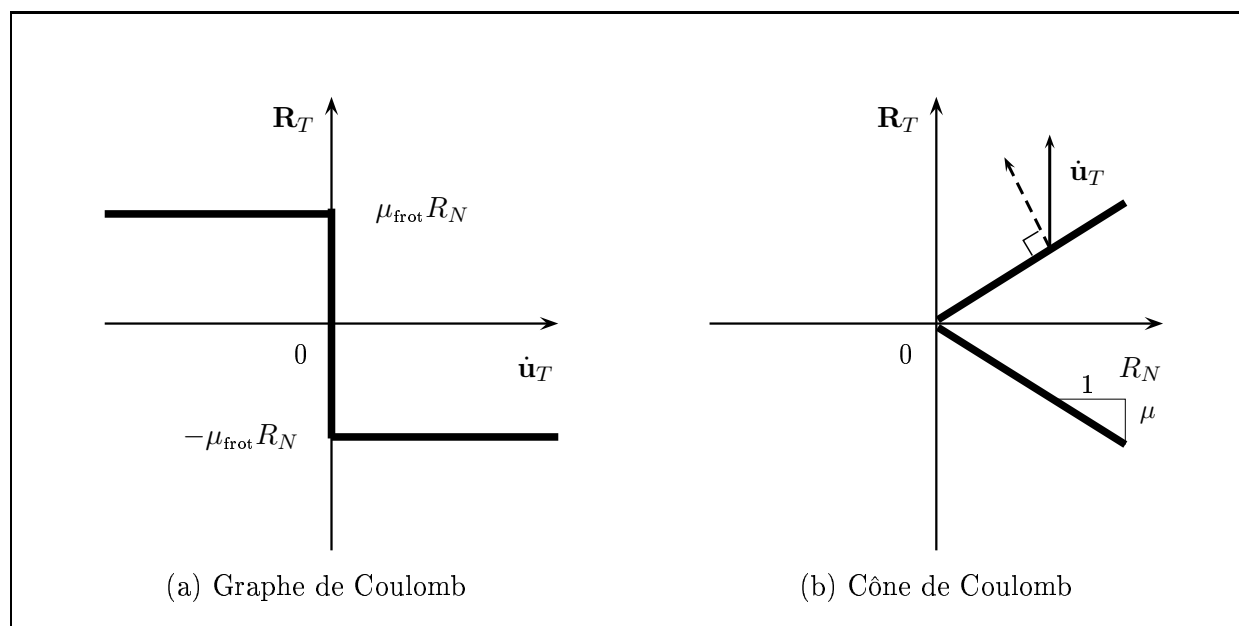


FIG. 3.18 – Frottement de Coulomb

Remarque 3.2. La loi de Coulomb (3.3.8) n'est pas une loi associée au sens du respect de la normalité (voir FIG. 3.18(b)).

Dans la suite, nous noterons que $(\mathbf{u}_T, \mathbf{R}_T)$ respecte le graphe de Coulomb par :

$$(\mathbf{u}_T, \mathbf{R}_T) \in \text{GR-Coulomb}. \quad (3.3.9)$$

3.4 Modèle de zone cohésive frottante

Le modèle de zone cohésive frottante présenté ici est un modèle couplant adhésion, contact unilatéral et frottement. Il repose sur les travaux de Raous et al. (1999) et Raous et Monerie (2001) pour la prise en compte de l'adhésion dans le problème de contact frottant et les travaux de Michel et Suquet (1994) et Michel et al. (1994) pour l'écriture de la loi adhésive. La transition entre adhésion et contact frottant est pilotée par une variable d'intensité d'adhésion β (Fremond, 1987). L'adhésion est ici comprise au sens d'une résistance à la séparation traduisant le processus de rupture.

3.4.1 Adhésion et contact frottant

Le modèle de zone cohésive frottante s'inspire de la loi adhésive de Raous et al. (1999) et Raous et Monerie (2001). Le modèle de Raous et al. (1999), basé sur une formulation thermodynamique, couple une contrainte adhésive à du frottement de Coulomb et du contact unilatéral. Pour cela, une contrainte de résistance à la séparation normale et tangente, notée \mathbf{R}^{adh} , est introduite dans le problème de Signorini-Coulomb (3.3.2)-(3.3.7) :

$$\begin{cases} (u_N, R_N + R_N^{adh}) \in \text{GR-Signorini}, \\ (\dot{\mathbf{u}}_T, \mathbf{R}_T + \mathbf{R}_T^{adh}) \in \text{GR-Coulomb}. \end{cases} \quad (3.4.1)$$

3.4.2 Loi adhésive

La loi adhésive utilisée ici est une variante de la loi d'endommagement surfacique de Michel et Suquet (1994) et Michel et al. (1994) :

$$\mathbf{R}^{adh} = K(\beta) \cdot [\mathbf{u}], \quad (3.4.2)$$

avec :

$$K(\beta) = \beta \left(C_N \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} + C_T \frac{\mathbf{u}_T \otimes \mathbf{u}_T}{\|\mathbf{u}_T\|^2} \right). \quad (3.4.3)$$

La variable β , comprise entre 0 et 1, décrit le degré d'endommagement surfacique : pour $\beta = 1$ la zone cohésive est parfaite, pour $0 < \beta < 1$ la zone cohésive est partiellement endommagée et pour $\beta = 0$ la zone cohésive est rompue. L'évolution de β permet la prise en compte de l'adoucissement du comportement surfacique (le cas $\beta = 0$ correspond ici à une zone totalement fissurée).

L'évolution de l'intensité d'adhésion, prenant en compte l'irréversibilité du comportement lorsque l'interface est partiellement endommagée ($\beta < 1$), est gouvernée par le système suivant :

$$\begin{cases} \beta = \min(g([\mathbf{u}]_{\max}), g([\mathbf{u}])) , \\ g(x) = \begin{cases} \beta_0 & \text{si } \|x\| < \delta_c, \\ \beta_0 \frac{3\delta_c - \|x\|}{\delta_c + \|x\|} & \text{si } \delta_c \leq \|x\| \leq 3\delta_c, \\ 0 & \text{sinon,} \end{cases} \end{cases} \quad (3.4.4)$$

avec :

$$\delta_c := \sqrt{\frac{\omega}{(9 - 4\ln 4) \left(\frac{1}{C_N} + \frac{1}{C_T} \right)}}, \quad (3.4.5)$$

où C_N et C_T sont respectivement des raideurs linéiques interfaciales normale et tangente, $0 \leq \beta_0 \leq 1$ est un niveau d'endommagement surfacique initial, ω est une énergie de référence surfacique, $[\mathbf{u}]_{\max}$ est la plus grande valeur atteinte par le saut de déplacement $[\mathbf{u}]$ et \ln désigne le logarithme népérien. La fonction décroissante g décrit l'adoucissement de l'adhésion.

La contrainte adhésive est similaire à (3.4.2) avec, de plus, la prise en compte d'une pression interne normale p qui s'applique sur les lèvres de la fissure lors de la décohésion :

$$\mathbf{R}^{adh} = \begin{cases} K(\beta) \cdot [\mathbf{u}] & \text{si } \beta > 0 \text{ ou } u_N = 0, \\ K(\beta) \cdot [\mathbf{u}] - p \mathbf{n} & \text{sinon.} \end{cases} \quad (3.4.6)$$

Le paramètre p (qui ne sera pas utilisé dans la suite de ce travail) permet par exemple la prise en compte d'une pression gazeuse agissant sur les lèvres de la fissure nouvellement créée : on peut par exemple penser à la modélisation d'une cavité pressurisée, au bord de laquelle s'initierait une fissure.

3.4.3 Paramètres et interprétation du modèle

3.4.3.a Paramètres du modèle

Le modèle, défini par le système d'équations (3.4.1), (3.4.6), (3.4.3) et (3.4.4), repose sur le choix des différents paramètres mécaniques suivant :

- C_N et C_T , raideurs initiales interfaciales normale et tangente,
- $\hat{\mathbf{R}}$, contrainte cohésive maximale,
- δ , saut de déplacement à rupture,
- δ_c , saut de déplacement correspondant à \hat{R}_N ou \hat{R}_T ,
- ω , énergie de référence,
- β_0 , intensité d'adhésion initiale,
- p , pression interne normale post-décohésion,
- μ_{frot} , coefficient de frottement de Coulomb.

Remarque 3.3. *Les sauts de déplacement critique normal et tangent sont égaux. Il en est de même pour les sauts de déplacement à rupture.*

Notons que les paramètres C_N , C_T , \hat{R}_N , \hat{R}_T , δ , δ_c et ω sont reliés par les formules suivantes :

$$\begin{cases} \delta_c = \sqrt{\frac{\omega}{(9 - 4\ln 4)} \left(\frac{1}{C_N} + \frac{1}{C_T} \right)}, \\ \hat{R}_N = C_N \delta_c, \\ \hat{R}_T = C_T \delta_c, \\ \delta = 3\delta_c. \end{cases} \quad (3.4.7)$$

Le modèle est ainsi entièrement défini avec 6 paramètres, par exemple \hat{R}_N , \hat{R}_T , ω , β_0 , p , μ_{frot} . En l'absence de frottement ($\mu_{\text{frot}} = 0$), de pression post-décohésion ($p = 0$), et pour une liaison initiale parfaite ($\beta_0 = 1$) et des raideurs initiales normale et tangente identiques ($C_N = C_T$), le modèle est entièrement défini avec 2 paramètres, par exemple $\hat{R}_N = \hat{R}_T$ et ω . Dans la suite, les paramètres contrainte maximale \hat{R} et énergie de référence surfacique ω (et par conséquent les raideurs interfaciales initiales C_N et C_T) seront les paramètres principaux à déterminer.

3.4.3.b Interprétation mécanique

La figure 3.19 représente le modèle d'interface en 2D lors d'un essai de charge-décharge en traction normale avec $u_T = 0$ et la figure 3.20 lors d'un essai de charge-décharge en cisaillement avec R_N

constant et $u_N = 0$.

★ *Charge-décharge en traction normale* (FIG. 3.19)

Pour l'étude de l'évolution de la loi cohésive normale lors d'un essai en traction normale, nous supposons qu'il n'y a pas de cisaillement ($u_T = 0$) et que l'interface est initialement vierge.

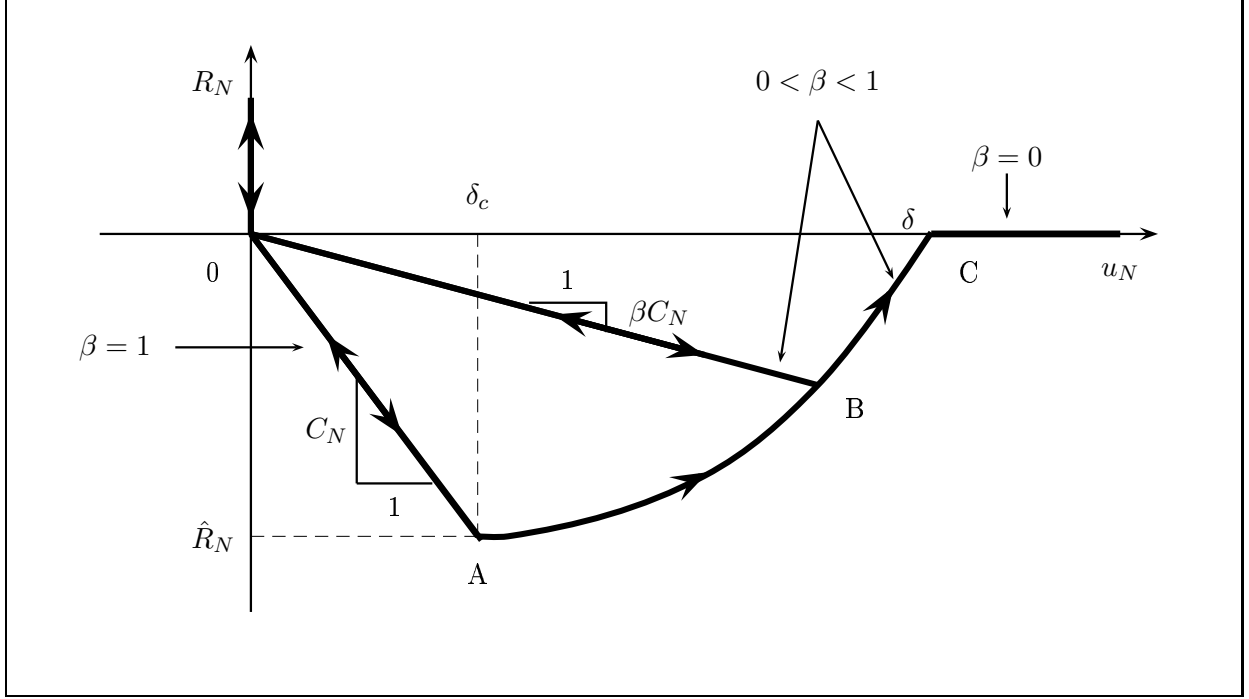


FIG. 3.19 – Loi cohésive normale en 2D : charge-décharge en traction normale ($u_T = 0$)

Le problème en traction peut ainsi s'écrire :

$$\begin{cases} -(R_N + R_N^{adh}) \in \partial I_{\mathbb{R}_+}(u_N), \\ R_N^{adh} = \beta C_N u_N, \\ \beta = \min(g((u_N)_{\max}, u_N)). \end{cases} \quad (3.4.8)$$

L'évolution du comportement de l'interface peut être décrite comme ceci :

- pour $u_N < 0$, les conditions de Signorini (3.3.2) s'appliquent,
- pour $u_N < \delta_c = \sqrt{\hat{R}_N/C_N}$ (partie OA sur la FIG. 3.19), l'intensité d'adhésion β reste égale à 1 (l'interface reste vierge) ; le comportement est alors linéaire de pente l'opposé de la raideur interfaciale $-C_N$ ($R_N = -C_N u_N$),
- pour $\delta_c \leq u_N \leq \delta = 3\delta_c$ (partie AC), l'interface s'endommage et β suit la loi (3.4.4). Supposons une décharge au point B (au temps t_B). L'intensité d'adhésion β reste alors constante égale à $\beta(u_N(t_B))$ et le comportement devient linéaire de pente $-\beta(u_N(t_B))C_N$ ($R_N = -\beta(u_N(B))C_N u_N$),
- pour $u_N > \delta$, la réaction normale s'annule et les conditions de bords sur les lèvres de la fissure sont libres.

* Charge-décharge en cisaillement (FIG. 3.20)

Dans l'étude de l'évolution tangentielle, nous supposons, pour des raisons de clarté, une réaction normale constante, un saut de déplacement normal nul et une interface initialement vierge.

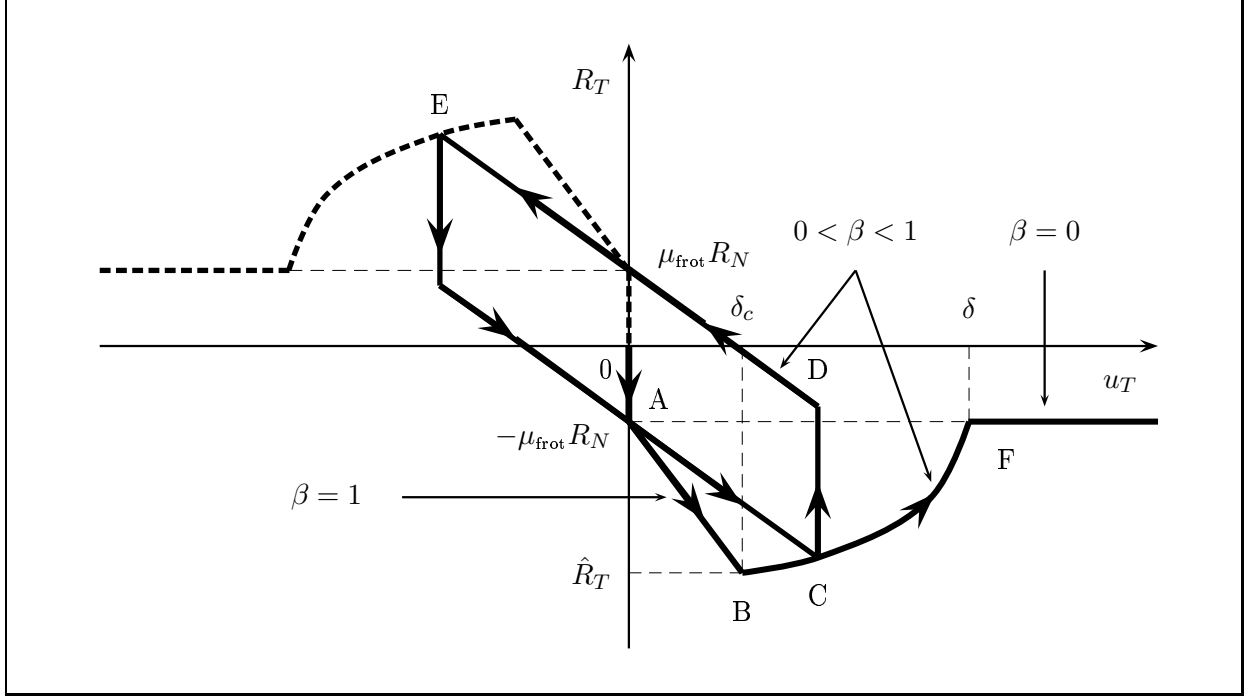


FIG. 3.20 – Loi cohésive tangente en 2D : charge-décharge en cisaillement (R_N constant et $u_N = 0$)

Le problème dans la direction tangente s'écrit :

$$\begin{cases} (\mathbf{R}_T + \mathbf{R}_T^{adh}) \in \partial_{\dot{\mathbf{u}}_T} (\mu_{\text{frot}} |R_N + R_N^{adh}| \|\dot{\mathbf{u}}_T\|) , \\ \mathbf{R}_T^{adh} = \beta C_T \mathbf{u}_T , \\ \beta = \min (g((\mathbf{u}_T)_{\text{max}}, \mathbf{u}_T)) . \end{cases} \quad (3.4.9)$$

L'évolution du comportement tangential de l'interface peut être décrite par :

- pour $u_T = 0$, en charge la réaction évolue pour atteindre $-\mu_{\text{frot}} R_N$ (partie OA sur la FIG. 3.20),
- pour $0 < u_T < \delta_c$ (partie AB), le comportement est linéaire de pente $-C_T$ ($R_T = -C_T u_T - \mu_{\text{frot}} R_N$),
- pour $\delta_c \leq u_T \leq \delta$ (partie BC), β suit la loi (3.4.4). Si au point C (au temps t_C), on effectue une décharge, β reste constante égale à $\beta(u_T(t_C))$ jusqu'au point D⁸ ($\|R_T\|$ décroît de la quantité $2\mu_{\text{frot}} |R_N|$, $\dot{u}_T = 0$) puis la réaction suit un comportement linéaire de pente $-\beta(u_T(t_C)) C_T$ jusqu'au point E (symétrique de C par rapport à O). A ce stade, nous retrouvons un mouvement opposé à celui initial avec l'endommagement $\beta(u_T(t_C))$,
- pour $u_T > \delta$, la partie adhésive s'annule et on retrouve un comportement de frottement de Coulomb (3.3.7).

⁸l'autre face du cône de Coulomb

Remarque 3.4. Lorsque $\beta = 0$, c'est-à-dire la liaison adhésive est rompue, nous retrouvons les conditions de Signorini et le frottement de Coulomb classiques.

★ *Sauts de solutions*

Comme précédemment mentionné, l'adoucissement du modèle peut conduire à des problèmes de sauts de solutions (§ 3.2.5). Bien que la formulation dynamique du problème retenue par la suite (Chapitre 5) garantisse la régularité des solutions, le modèle de zone cohésive proposé présente un atout majeur dans la maîtrise des sauts de solution.

L'avantage du modèle adoucissant adopté ici réside dans le fait que la pente de la courbe contrainte cohésive-saut de déplacement est nulle à l'initiation de l'endommagement et est maximale au moment de la rupture (FIG. 3.21). La longueur d'onde des instabilités variant comme l'inverse de la dérivée de la contrainte cohésive par rapport au saut de déplacement (Monerie, 2000), le modèle n'est jamais instable au sommet de la courbe et sauf éventuelle instabilité ne croît que lorsque l'on approche de la rupture. Une augmentation de la raideur de la structure permet ainsi de retarder le saut vers les derniers instants de la rupture, ce qui limite la perte d'énergie provoquée par le saut de solution.

Ce modèle est plus "stable" qu'un modèle à pente maximale proche de la contrainte cohésive maximale (par exemple le modèle de Raous et al. (1999)).

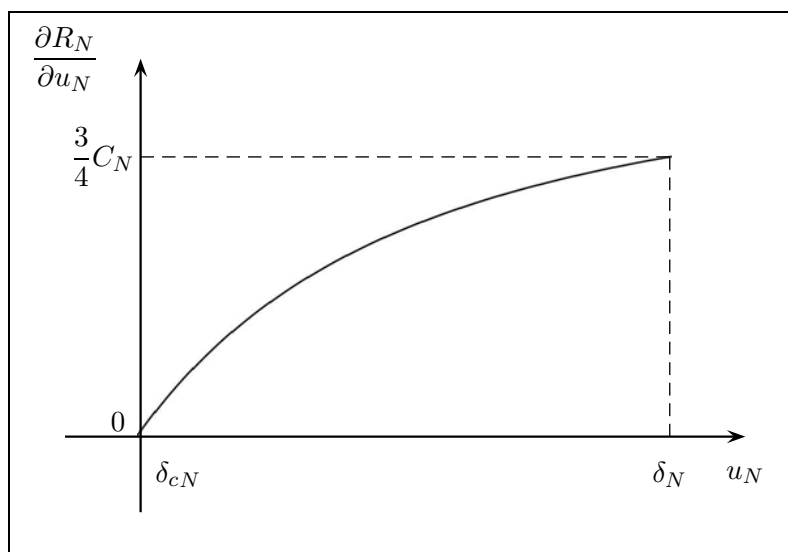


FIG. 3.21 – Dérivée de la partie adoucissante de loi cohésive normale par rapport au saut de déplacement normal pour $C_N = C_T = 10^{18} Pa/m$ et $\omega = 0.5 J/m^2$.

3.4.3.c Influence des paramètres

L'influence des paramètres principaux du modèle - l'énergie de référence et la contrainte cohésive maximale - est illustrée dans le cas d'un chargement en traction normale.

★ *Energie de référence ω*

Supposons les raideurs initiales interfaciales constantes. La FIG. 3.22 représente le comportement interfacial prévu par le modèle pour différentes valeurs de l'énergie de référence.

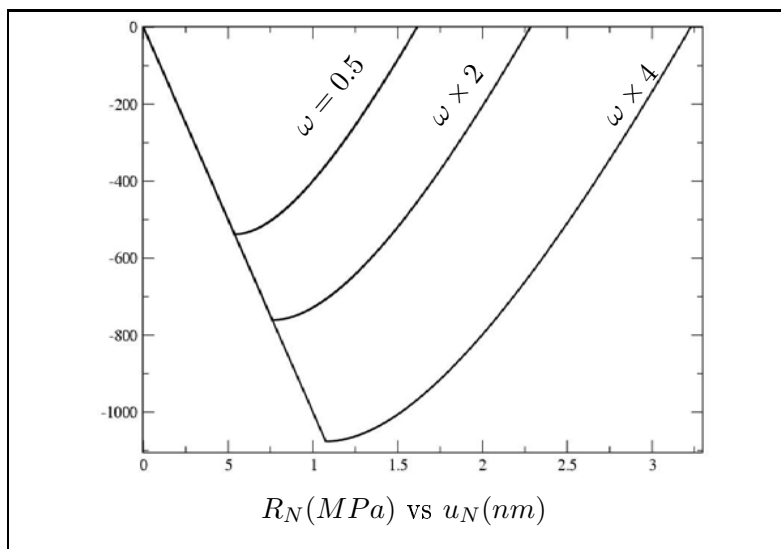


FIG. 3.22 – Evolution de R_N en fonction de u_N pour $\omega = 0.5J/m^2$, $\omega = 1J/m^2$ et $\omega = 2J/m^2$ et $C_N = 10^{18}Pa/m$.

Une augmentation de ω d'un facteur $k \geq 0$, implique une augmentation d'un facteur \sqrt{k} de la contrainte maximale et du saut de déplacement à rupture (voir Eq. (3.4.7)) :

$$\tilde{\omega} = k\omega \Rightarrow \begin{cases} \tilde{R}_N &= \sqrt{k} \hat{R}_N, \\ \tilde{\delta} &= \sqrt{k} \delta, \\ \tilde{\delta}_c &= \sqrt{k} \delta_c. \end{cases} \quad (3.4.10)$$

Une augmentation de l'énergie de référence se traduit par une liaison interfaciale plus résistante.

★ Contrainte cohésive maximale \hat{R}

Supposons l'énergie de référence constante. La FIG. 3.23 indique le comportement interfacial normal pour différentes contraintes cohésives maximales.

Nous observons une augmentation du comportement "ductile"⁹ de la liaison interfaciale lorsque \hat{R}_N décroît. Ce comportement est similaire à celui du modèle de Wang et Nakamura (2004). Dans ce modèle, une augmentation de la phase ductile du matériau à gradient de propriétés entraîne une diminution de la contrainte maximale et une augmentation de l'énergie de référence (voir page 65).

Remarque 3.5. Dans la suite, nous pourrions paramétrer le modèle afin d'obtenir, par exemple, un comportement interfacial "fragile" pour les hydrures et "ductile" pour la matrice en Zircaloy.

⁹ductile doit être pris au sens de : l'énergie dissipée à rupture est bien supérieure à l'énergie élastique nécessaire pour commencer à endommager la liaison.

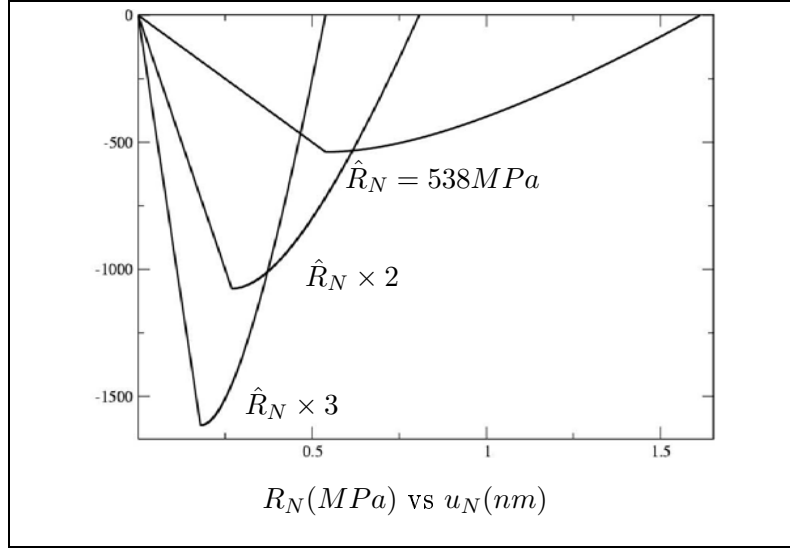


FIG. 3.23 – Evolution de R_N en fonction de u_N pour $\hat{R}_N = 538\text{MPa}$, $\hat{R}_N = 1076\text{MPa}$ et $\hat{R}_N = 1614\text{MPa}$ et $\omega = 0.5\text{J/m}^2$.

La variation de \hat{R}_N d'un facteur $k \geq 0$, implique les relations suivantes :

$$\tilde{\hat{R}}_N = k \hat{R}_N \Rightarrow \begin{cases} \tilde{C}_N &= k^2 C_N, \\ \tilde{\delta} &= k \delta, \\ \tilde{\delta}_c &= k \delta_c. \end{cases} \quad (3.4.11)$$

Remarque 3.6. Il existe le même type de relations concernant une variation de la raideur initiale :

$$\tilde{C}_N = k C_N \Rightarrow \begin{cases} \tilde{\hat{R}}_N &= \sqrt{k} \hat{R}_N, \\ \tilde{\delta} &= 1/\sqrt{k} \delta, \\ \tilde{\delta}_c &= 1/\sqrt{k} \delta_c. \end{cases} \quad (3.4.12)$$

3.4.4 Energies de décohésion

3.4.4.a Cas de la traction normale

Nous reprenons l'exemple de charge-décharge en traction normale du § 3.4.3. Supposons $u_T = 0$. Durant l'évolution de la loi adhésive normale (partie élastique OA puis endommagement AB sur la FIG. 3.24), une partie de l'énergie de décohésion est stockée par la liaison interfaciale \blacklozenge_2 et une autre est dissipée par endommagement \blacklozenge_1 . L'énergie \blacklozenge_2 stockée peut être récupérée par une décharge, par exemple au point B (partie BO). Au point B, ces énergies peuvent s'écrire :

$$\begin{cases} E_{\text{stockée}} &= \frac{\beta(u_N(t_B))C_N}{2} u_N(t_B)^2, \\ E_{\text{endommagement}} &= \int_0^{u_N(t_B)} \beta(u_N)C_N u_N du_N - \frac{\beta(u_N(t_B))C_N}{2} u_N(t_B)^2. \end{cases} \quad (3.4.13)$$

Au point D, on a :

$$E_{\text{endommagement}} = \omega. \quad (3.4.14)$$

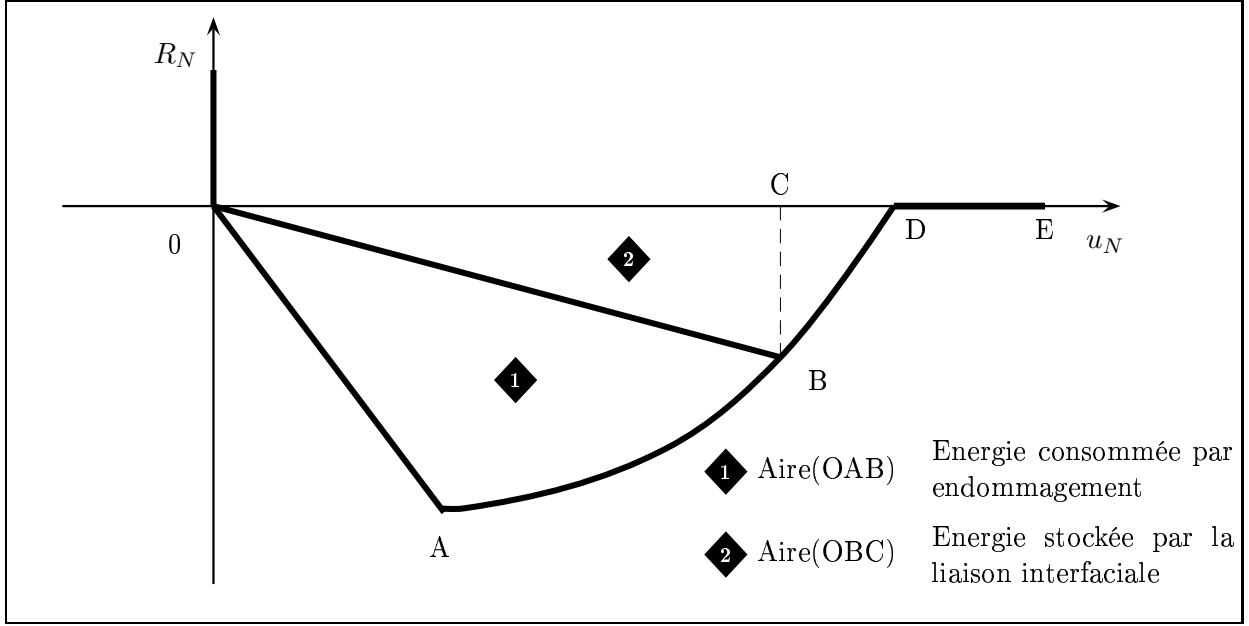


FIG. 3.24 – Energies de décohésion interfaciale normale

3.4.4.b Cas du cisaillement

Supposons R_N constant et $u_N = 0$. La FIG. 3.25 représente le détail des énergies lors de la décohésion interfaciale tangentielle.

Nous retrouvons les énergies stockées \blacklozenge et consommées par endommagement \blacklozenge de la liaison normale (FIG. 3.24). De plus, une énergie dissipée par frottement \blacklozenge intervient dès le début du cisaillement, c'est-à-dire avant le début de l'endommagement (interface encore vierge). Néanmoins, cette énergie, avant endommagement de l'interface, reste négligeable devant les autres énergies si la raideur de l'interface est suffisamment grande. Au point C, ces énergies peuvent s'écrire :

$$\begin{cases} E_{\text{stockée}} &= \frac{\beta(u_T(t_C))C_N}{2} u_T(t_C)^2, \\ E_{\text{endommagement}} &= \int_0^{u_T(t_C)} \beta(u_T)C_N u_T du_T - \frac{\beta(u_T(t_C))C_N}{2} u_T(t_C)^2, \\ E_{\text{frottement}} &= \mu_{\text{frot}} |R_N| u_T(t_C). \end{cases} \quad (3.4.15)$$

Une condition sur la raideur interfaciale pour conserver une énergie de frottement négligeable devant ω avant décohésion complète pourrait se résumer ainsi :

$$\begin{aligned} w &\gg \mu_{\text{frot}} |R_N| \delta \\ \Leftrightarrow w &\gg \mu_{\text{frot}} |R_N| 3 \sqrt{\frac{\omega}{9 - 4 \ln 4} \left(\frac{1}{C_N} + \frac{1}{C_T} \right)} \\ \Leftrightarrow \left(\frac{1}{C_N} + \frac{1}{C_T} \right) &\gg \frac{9 \mu_{\text{frot}}^2 R_N^2}{w(9 - 4 \ln 4)}. \end{aligned} \quad (3.4.16)$$

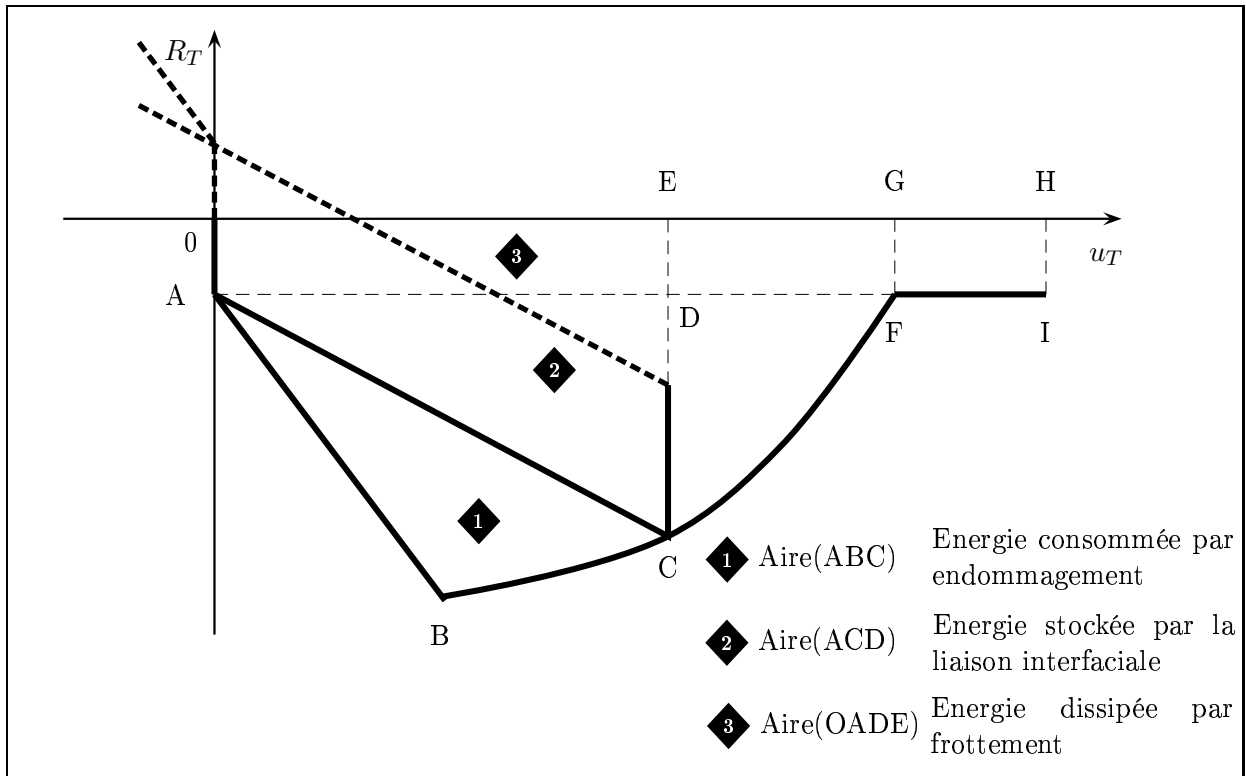


FIG. 3.25 – Energies de décohésion interfaciale tangente

3.5 Bilan du chapitre

Les modèles de zone cohésive décrivent la physique de fissuration en pointe de fissure par la donnée d'une loi constitutive reliant la contrainte appliquée sur les lèvres de la fissure et le saut de déplacement et de critères locaux (énergie de décohésion, contrainte cohésive maximale). Ces modèles permettent de surmonter les difficultés des approches globales tout en conservant les notions clés de ces approches (taux de restitution de l'énergie). Les inconvénients majeurs de ces modèles sont l'introduction de souplesse dans la structure lorsque la loi cohésive possède une raideur initiale (la quantification de la souplesse et sa limitation fait l'objet du § 7.2.1) et l'éventuelle apparition de saut de solution.

Le modèle de zone cohésive utilisé dans la suite est un modèle couplant adhésion, contact unilatéral et frottement. La transition entre l'adhésion et le contact frottant est notamment pris en compte par une variable d'intensité d'adhésion. Une spécificité forte de ce modèle est la prise en compte des problèmes de sauts de solutions dans la forme de la loi surfacique. Le modèle n'est jamais instable à l'initiation de l'endommagement et sa potentielle instabilité est retardée au maximum vers le moment de la rupture finale de la liaison.

Deuxième partie

Traitement numérique

Chapitre 4

Elements finis périodiques : formulation à deux champs

Sommaire

4.1	Motivations	85
4.2	Champs microscopiques périodiques	86
4.3	Problème périodique	87
4.3.1	Position du problème périodique	87
4.3.1.a	Cadre du problème	87
4.3.1.b	Conditions aux limites particulières	88
4.3.1.c	inconnue principale $\mathbf{u}^\#$	90
4.3.1.d	inconnue principale \mathbf{u}	91
4.3.2	Formulation variationnelle spécifique	91
4.3.2.a	inconnue principale $\mathbf{u}^\#$	92
4.3.2.b	inconnue principale \mathbf{u}	94
4.3.3	Approximation variationnelle	94
4.3.3.a	Espaces Elements Finis	94
4.3.3.b	Formulation du problème discret	96
4.4	Bilan du chapitre	97

La démarche multiéchelle adoptée dans cette étude implique l'obtention à l'échelle microscopique de propriétés effectives du matériau afin de les introduire dans un calcul de structure à l'échelle macroscopique (Chapitre 2). De plus, l'approche multicorps entraîne le découplage du comportement en une partie volumique et en une partie surfacique. A l'échelle microscopique, le comportement volumique effectif est ainsi obtenu à partir de techniques d'homogénéisation analytique (Monerie et al., 2004; Vincent et al., 2005) et le comportement surfacique est obtenu à partir de techniques d'homogénéisation numérique.

L'homogénéisation numérique consiste à déduire, à partir de calculs sur des volumes, un comportement homogène équivalent d'un matériau hétérogène. Dans le cas présent de matériaux aléatoires, ces propriétés effectives sont déterminées grâce à un nombre suffisant de réalisations (essais numériques) sur des VER possédant une certaine statistique de distribution des hétérogénéités (Kanit et al., 2003; Forest, 2004). Le nombre de réalisations à effectuer est directement relié à la taille du VER (la détermination de la taille du VER par analyse d'image fera l'objet du § 7.3.1).

L'étude s'oriente vers une branche particulière de l'homogénéisation numérique : l'homogénéisation périodique. Les principales motivations de ce choix sont exposées dans le premier §. Le problème multicorps périodique est ensuite posé puis traité numériquement (formulation faible, Eléments Finis).

Un éventuel accident de type RIA entraîne des déformations importantes de la gaine de combustible, pouvant atteindre 30 %. Le cadre des grandes transformations est ainsi naturellement adapté à cette étude. L'Annexe F regroupe des rappels et notations en grandes transformations.

4.1 Motivations

L'homogénéisation périodique s'applique naturellement au calcul de l'estimation des propriétés effectives des matériaux à microstructure périodique. Pour de tels matériaux, des calculs sur une cellule de base unitaire, contenant un motif susceptible d'engendrer la microstructure par périodicité, permettent d'obtenir directement les propriétés matérielles vers lesquelles convergent les approches par modules effectifs en déformation ou en contrainte lorsque la taille du VER devient infiniment grande (Michel, 2001).

Sur le plan théorique, l'homogénéisation périodique permet de définir rigoureusement la notion de comportement homogénéisé. Sanchez-Palencia (1974) a montré que, dans le cas de l'homogénéisation périodique, les contraintes et déformations macroscopiques sont les quantités vers lesquelles convergent les champs locaux de contraintes et de déformations régnant dans la cellule de base lorsque le rapport d'échelle entre le microscopique et le macroscopique tend vers 0. Enfin, le lemme de Hill s'applique aux milieux périodiques (Suquet, 1987).

La méthode de l'homogénéisation périodique est parfaitement applicable aux milieux aléatoires (Michel et al., 1999; Moulinec et Suquet, 1998). Bien qu'elle perde la propriété d'exactitude des résultats¹, due au manque d'information sur la microstructure dans la cellule de base, elle fournit d'excellentes approximations des coefficients homogénéisés (Kanit et al., 2003). La FIG. 4.1 met en évidence le fait qu'une microstructure aléatoire peut être approchée par une microstructure obtenue par périodicité d'une cellule de base.

¹et par conséquent de l'indépendance du choix de la cellule de base

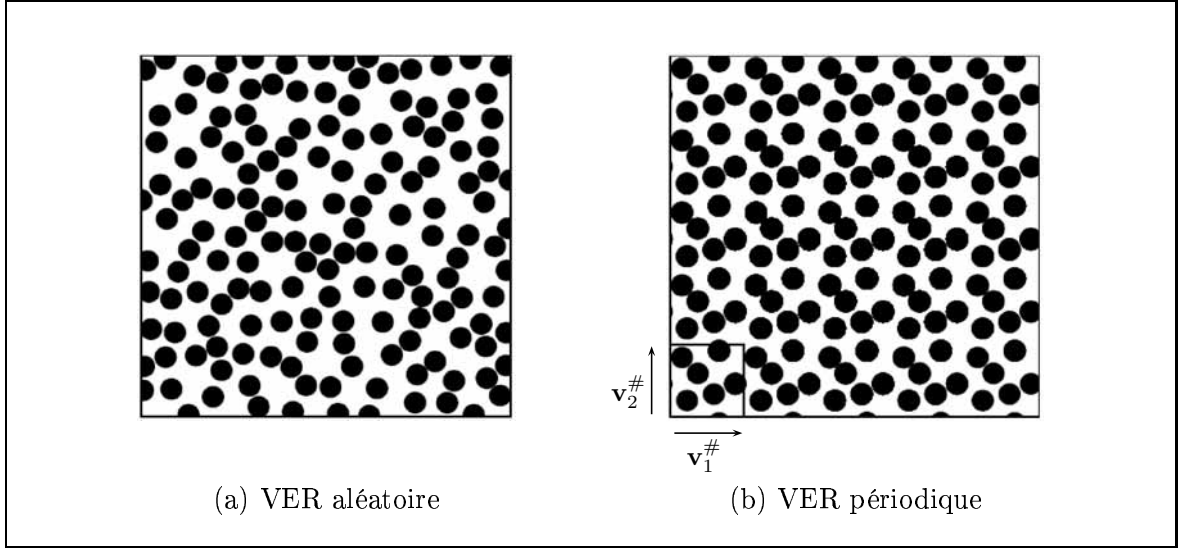


FIG. 4.1 – Comparaison entre (a) un VER aléatoire et (b) un VER reproduit par périodicité (d’après Monerie et al. (2004)).

4.2 Champs microscopiques périodiques

Considérons un milieu périodique. Il existe des vecteurs de périodicité suivant lesquels la géométrie du milieu est périodique par translation ($\mathbf{v}_1^\#$ et $\mathbf{v}_2^\#$ sur la FIG. 4.1). Loin du bord, en faisant abstraction des conditions aux limites², les solutions champ de gradient de la transformation \mathbf{F} , et par conséquent $\nabla \mathbf{u}$ (car $\mathbf{F} = \mathbf{I} + \nabla \mathbf{u}$), et champ de contraintes de Piola-Kirchhoff de première espèce $\mathbf{\Pi}$ sont également périodiques de même période. De plus, dans la cellule de base hétérogène notée V , ces champs \mathbf{F} , $\nabla \mathbf{u}$ et $\mathbf{\Pi}$ varient autour de leurs valeurs moyennes notées respectivement $\bar{\mathbf{F}}$, $\bar{\nabla} \mathbf{u}$ et $\bar{\mathbf{\Pi}}$. La moyenne est définie sur la configuration de référence VER_0 par :

$$\bar{f} := \langle f \rangle_{VER_0} := \frac{1}{|VER_0|} \int_{VER_0} f dX. \quad (4.2.1)$$

Le champ local de gradient de déplacements est donc la somme d’un champ moyen, champ régnant si la cellule de base était homogène, et d’une correction fluctuante périodique notée $\nabla \mathbf{u}^\#$ due à la présence des hétérogénéités. La décomposition s’écrit :

$$\nabla \mathbf{u} = \bar{\nabla} \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^\#, \quad (4.2.2)$$

qui peut se réécrire sous la forme :

$$\begin{aligned} \mathbf{I} + \nabla \mathbf{u} &= \mathbf{I} + \bar{\nabla} \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^\# \\ \Leftrightarrow \mathbf{F} &= \bar{\mathbf{F}} + \nabla \mathbf{u}^\#. \end{aligned} \quad (4.2.3)$$

Cette relation conduit à poser :

$$\mathbf{u}^\# = \mathbf{x} - \bar{\mathbf{F}} \cdot \mathbf{X}, \quad (4.2.4)$$

montrant que $\mathbf{u}^\#$ peut être vu comme un champ de déplacement qui vérifie :

²principe de Saint-Venant en élasticité

$$\langle \nabla \mathbf{u}^\# \rangle_{VER_0} = 0. \quad (4.2.5)$$

La périodicité de $\nabla \mathbf{u}^\#$ et la relation (4.2.5) entraînent la périodicité du champ de déplacements $\mathbf{u}^\#$ (Léné, 1984).

Le champ de déplacements admet la décomposition suivante :

$$\mathbf{u} = (\bar{\mathbf{F}} - \mathbf{I}) \cdot \mathbf{X} + \mathbf{u}^\#. \quad (4.2.6)$$

Le champ de contraintes $\mathbf{\Pi}$ est également périodique. La normale sortante prenant des valeurs opposées sur les faces externes se correspondant par périodicité, $\mathbf{\Pi} \cdot \mathbf{N}$ prend aussi des valeurs opposées sur ces faces. Les vecteurs contraintes $\mathbf{\Pi} \cdot \mathbf{N}$ sont qualifiés d'anti-périodiques.

Remarque 4.1. *Le champ de déplacements périodiques $\mathbf{u}^\#$ prend en compte les hétérogénéités du matériau. Les hétérogénéités sont dues à la microstructure (inclusions, gradient de propriétés) mais aussi à la présence de possibles fissures. En anticipant sur la suite, le champ $\mathbf{u}^\#$ contiendra en particulier dans nos applications (fissuration de microstructures) l'ensemble des contributions des sauts de déplacement interfaciaux $[\mathbf{u}]$ entre chaque maille de la cellule de base.*

Dans le cas de transformations infinitésimales, les décompositions du champ de déplacements \mathbf{u} et de déformation linéarisée ϵ sont équivalentes à celles obtenues en grandes transformations (4.2.3)-(4.2.6) (Michel et al., 1999) :

$$\mathbf{u} = \bar{\epsilon} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{u}^\#, \quad (4.2.7)$$

$$\epsilon = \bar{\epsilon} + \epsilon^\#, \quad (4.2.8)$$

où $\bar{\epsilon}$ est la valeur moyenne du champ de déformation linéarisée et $\epsilon^\#$ est le champ de déformation linéarisée périodique.

Le champ de contraintes σ est périodique et les vecteurs contraintes $\sigma \cdot \mathbf{n}$ sont anti-périodiques.

4.3 Problème périodique

La description adoptée est une description lagrangienne totale.

La démarche qui suit n'est pas classique. En effet, une approche multicorps est utilisée pour étudier la fissuration (§ 2.1). Un découpage du domaine en corps est alors nécessaire pour initier et propager des fissures entre les corps.

De plus, des conditions de périodicité sont appliquées à la frontière d'un domaine polyédrique. Ces conditions impliquent l'application de sollicitations homogènes sur la structure.

4.3.1 Position du problème périodique

4.3.1.a Cadre du problème

Soit un polyèdre déformable Ω_0 dans \mathbb{R}^m , $m \in \{2, 3\}$ dont les faces opposées sont parallèles deux à deux³ et de frontière $\partial\Omega_0$. Le polyèdre est reproduit par translation suivant des vecteurs de périodicité dans toutes les directions de l'espace pour décrire un milieu périodique. Chaque polyèdre est relié à ses polyèdres adjacents⁴ par des relations surfaciques dépendant du saut de déplacement

³pour que les conditions de périodicité aient un sens

⁴deux polyèdres sont adjacents si ils ont une face en commun

entre ces polyèdres (voir FIG. 4.2). En d'autres termes, chaque polyèdre est séparé par une zone cohésive, une fissure pourra alors s'initier ou se propager entre les polyèdres décrivant le milieu périodique.

Le solide est soumis à un champ de gradient de la transformation homogène $\bar{\mathbf{F}}_{\text{imp}}$ ou un champ de contraintes homogène $\bar{\mathbf{\Pi}}_{\text{imp}}$.

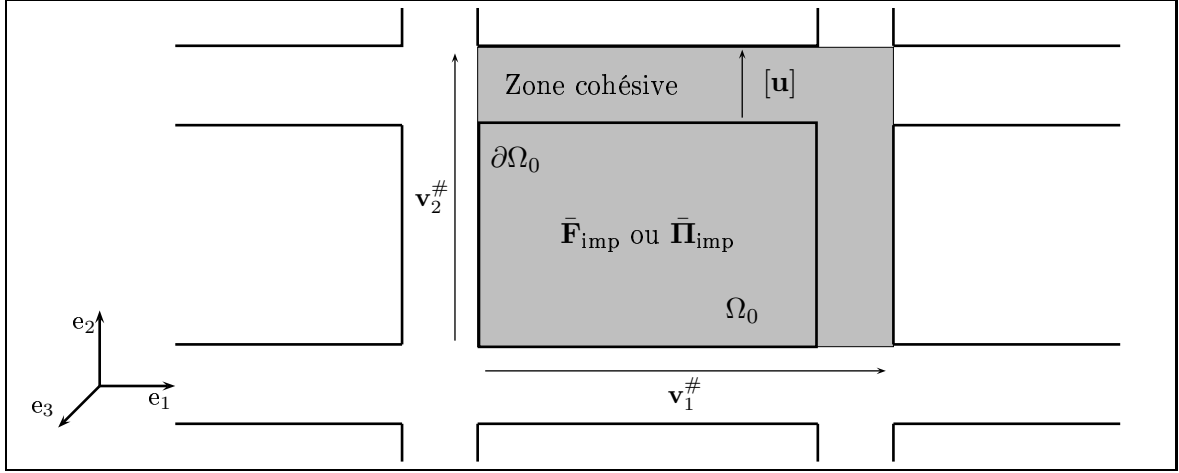


FIG. 4.2 – Cellule se reproduisant par périodicité. Schématisation des zones cohésives entre les cellules. Une cellule pouvant être un corps maillé possédant ou non des zones cohésives.

La fermeture $\bar{\Omega}_0$ de ce domaine polyédrique est découpée, à l'aide d'une triangulation \mathcal{T}_0^h , en τ sous domaines dont les faces appartenant à la frontière $\partial\Omega_0$ se correspondent par périodicité (FIG. 4.3) :

$$\bar{\Omega}_0 = \bigcup_{K_0^e \in \mathcal{T}_0^h} K_0^e \quad (4.3.1)$$

Remarque 4.2. *Le découpage du domaine correspond ici à un maillage Elements Finis. Dans le cas général, chaque élément du découpage pourrait être à nouveau découpé lors de la construction des espaces d'approximation par la méthodes Elements Finis (par exemple, lors d'une fissuration entre corps maillé). Dans cette étude, chaque élément du découpage correspond à un élément finis et nous ne ferons pas de distinction entre éléments du découpage initial et éléments finis standards.*

4.3.1.b Conditions aux limites particulières

Chaque sous domaine $K_0^e \in \mathcal{T}_0^h$ est un milieu continu (corps) relié aux sous domaines adjacents par des relations surfaciques (§ 2.1). Les faces du sous domaine K_0^e se décomposent en faces externes $\partial K_0^e \cap \partial\Omega_0$ ($\partial K_0^e \cap \partial\Omega_0$ peut être éventuellement vide) et en faces internes $\partial K_0^e \setminus \partial\Omega_0$.

Les sous domaines sont soumis aux conditions aux limites suivantes :

- pour chaque face interne E_{int} de la triangulation \mathcal{T}_0^h , il existe deux sous domaines K_0^e et K_0^d adjacents à E_{int} tels que $E_{int} = \partial K_0^e \cap \partial K_0^d$ (FIG. 4.3). On peut ainsi définir pour la face interne E_{int} :

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_{E_{int}}^- &= \text{trace de } \mathbf{u}|_{K_0^e} \text{ sur } E_{int}, \\ \mathbf{u}_{E_{int}}^+ &= \text{trace de } \mathbf{u}|_{K_0^d} \text{ sur } E_{int}, \end{aligned} \quad (4.3.2)$$

et le saut de déplacement sur E_{int} :

$$[\mathbf{u}]_{E_{int}} = \mathbf{u}_{E_{int}}^+ - \mathbf{u}_{E_{int}}^-, \quad (4.3.3)$$

- les faces externes sont périodiques. Pour chaque face externe $E_{ext} \subset K_0^e \cap \partial\Omega_0$ de K_0^e , il existe, à l'instant initial, une face externe correspondante par périodicité notée E'_{ext} et un unique sous domaine $K_0^f \neq K_0^e$, $K_0^f \in \mathcal{T}_0^h$, possédant cette face (FIG. 4.3). On peut alors définir pour la face externe E_{ext} :

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_{E_{ext}}^- &= \text{trace de } \mathbf{u}|_{K_0^e} \text{ sur } E_{ext}, \\ \mathbf{u}_{E'_{ext}}^- &= \text{trace de } \mathbf{u}|_{K_0^f} \text{ sur } E'_{ext}. \end{aligned} \quad (4.3.4)$$

Soit, de plus, $\mathbf{u}_{E_{ext}}^+$ correspondant à $\mathbf{u}_{E'_{ext}}^-$ par périodicité. Par abus de notations, les vecteurs positions initiales de $\mathbf{u}_{E'_{ext}}^-$ et $\mathbf{u}_{E_{ext}}^-$ sont notés respectivement \mathbf{X}^- et \mathbf{X}^+ . On a les relations suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{u}_{E_{ext}}^+ = (\bar{\mathbf{F}} - \mathbf{I}) \cdot \mathbf{X}^+ + (\mathbf{u}_{E_{ext}}^+)^{\#} \\ (\mathbf{u}_{E'_{ext}}^-)^{\#} = \mathbf{u}_{E'_{ext}}^- - (\bar{\mathbf{F}} - \mathbf{I}) \cdot \mathbf{X}^- \\ (\mathbf{u}_{E_{ext}}^+)^{\#} = (\mathbf{u}_{E'_{ext}}^-)^{\#} \end{array} \right\} \begin{array}{l} \text{relation (4.2.6),} \\ \\ \text{conditions de périodicité.} \end{array} \quad (4.3.5)$$

Le saut de déplacement sur la face périodique E_{ext} est défini par :

$$[\mathbf{u}]_{E_{ext}} = \mathbf{u}_{E_{ext}}^+ - \mathbf{u}_{E_{ext}}^-, \quad (4.3.6)$$

qui se réécrit compte tenu des relations (4.3.5) :

$$[\mathbf{u}]_{E_{ext}} = \mathbf{u}_{E'_{ext}}^- - \mathbf{u}_{E_{ext}}^- + (\bar{\mathbf{F}} - \mathbf{I}) \cdot (\mathbf{X}^+ - \mathbf{X}^-). \quad (4.3.7)$$

Compte tenu des résultats (4.3.3) et (4.3.6), le saut de déplacement est défini par :

$$[\mathbf{u}] = \sum_{E_{int}} \mathbf{1}_{E_{int}} [\mathbf{u}]_{E_{int}} + \sum_{E_{ext}} \mathbf{1}_{E_{ext}} [\mathbf{u}]_{E_{ext}}, \quad (4.3.8)$$

où $\mathbf{1}_X$ est la fonction caractéristique définie sur \mathbb{N} et à valeurs 0 ou 1 par $\mathbf{1}_X(k) = 1$ si $k \in X$ et $\mathbf{1}_X(k) = 0$ sinon.

Les sous domaines sont soumis à un seul type de condition aux limites : des conditions aux limites mixtes dépendant du saut de déplacement (4.3.8).

Le saut de déplacement peut s'écrire en fonction du champ de déplacement périodique. Pour une face interne ou externe notée E :

$$\begin{aligned} [\mathbf{u}]_E &= \mathbf{u}_E^+ - \mathbf{u}_E^- \\ &= (\mathbf{u}_E^+)^{\#} + (\bar{\mathbf{F}} - \mathbf{I}) \cdot \mathbf{X} - \left((\mathbf{u}_E^-)^{\#} + (\bar{\mathbf{F}} - \mathbf{I}) \cdot \mathbf{X} \right) \\ &= (\mathbf{u}_E^+)^{\#} - (\mathbf{u}_E^-)^{\#} \\ &= [\mathbf{u}^{\#}]_E \end{aligned} \quad \text{sur } \partial K_0^e, \quad (4.3.9)$$

où \mathbf{X} est le vecteur position initiale de \mathbf{u}_E^+ et \mathbf{u}_E^- .

L'écriture du saut de déplacement ne dépend pas du choix des inconnues (standard \mathbf{u} ou périodique $\mathbf{u}^{\#}$).

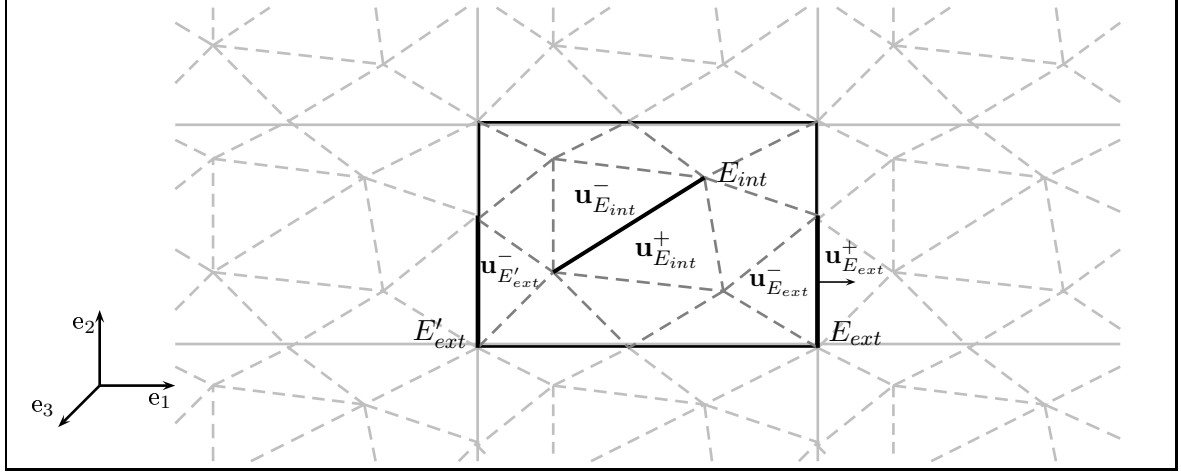


FIG. 4.3 – Découpage de la cellule : les faces externes se correspondent par périodicité.

4.3.1.c inconnue principale $\mathbf{u}^\#$

Nous supposons que le solide n'est pas soumis à des forces volumiques.

Sur chaque corps $K_0^e \in \mathcal{T}_0^h$, l'équilibre dynamique local s'écrit dans la configuration initiale :

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\Pi} = \rho \ddot{\mathbf{u}} \quad \text{dans } K_0^e, \quad (4.3.10)$$

et on a :

$$\boldsymbol{\Pi} \cdot \mathbf{N}_{K_0^e} = \mathbf{T}([\mathbf{u}]) = \mathbf{T}([\mathbf{u}^\#]) \quad \text{sur } \partial K_0^e, \quad (4.3.11)$$

où \mathbf{T} est une force de liaison, $\mathbf{N}_{K_0^e}$ est une normale sortante au sous domaine K_0^e et $[\mathbf{u}]$ est défini par la relation (4.3.8).

Le problème périodique formulé en terme de $\mathbf{u}^\#$ est ainsi le suivant :

trouver le champ des déplacements périodiques $\mathbf{u}^\#$, le champ de gradient de la transformation \mathbf{F} et le champ des contraintes $\boldsymbol{\Pi}$ respectant :

- les relations locales pour chaque $K_0^e \in \mathcal{T}_0^h$:

$$\begin{cases} \nabla \cdot \boldsymbol{\Pi} = \rho \frac{d^2}{dt^2} (\mathbf{u}^\# + (\bar{\mathbf{F}} - \mathbf{I}) \cdot \mathbf{X}) & \text{dans } K_0^e, \\ \boldsymbol{\Pi}(\mathbf{F}) & \text{(Loi de comportement),} \\ \mathbf{F} = \bar{\mathbf{F}} + \nabla \mathbf{u}^\# & \text{dans } K_0^e, \\ \boldsymbol{\Pi} \cdot \mathbf{N}_{K_0^e} = \mathbf{T}([\mathbf{u}^\#]) & \text{sur } \partial K_0^e, \end{cases} \quad (4.3.12)$$

- les conditions globales sur Ω_0 :

$$\begin{cases} \bar{\mathbf{F}} = \langle \mathbf{F} \rangle_{\Omega_0} = \bar{\mathbf{F}}_{\text{imp}} & \text{si le gradient de la transformation macroscopique } \bar{\mathbf{F}}_{\text{imp}} \text{ est imposée,} \\ \bar{\boldsymbol{\Pi}} = \langle \boldsymbol{\Pi} \rangle_{\Omega_0} = \bar{\boldsymbol{\Pi}}_{\text{imp}} & \text{si la contrainte macroscopique } \bar{\boldsymbol{\Pi}}_{\text{imp}} \text{ est imposée.} \end{cases} \quad (4.3.13)$$

Remarque 4.3. *La formulation lagrangienne totale permet l'écriture des moyennes macroscopiques sur le domaine Ω_0 . En effet, dans cette formulation, les grandeurs sont exprimées sur la configuration initiale qui ne possède pas de vide (zones cohésives d'épaisseur nulle initialement).*

Remarque 4.4. *La périodicité du champ $\mathbf{u}^\#$ est prise en compte dans la relation de saut $[\mathbf{u}^\#]$ sur les faces externes (voir Eq. (4.3.7) et (4.3.9)). Aucun traitement spécifique n'est nécessaire pour traiter les conditions périodiques.*

Remarque 4.5. *Les relations locales sur les faces externes $\mathbf{\Pi} \cdot \mathbf{N}_{K_0^e} = \mathbf{T}([\mathbf{u}^\#])$ impliquent que les vecteurs contraintes $\mathbf{\Pi} \cdot \mathbf{N}$ sont anti-périodiques sur la frontière $\partial\Omega_0$.*

4.3.1.d inconnue principale \mathbf{u}

En prenant le champ de déplacement \mathbf{u} comme inconnue principale, le problème périodique devient : trouver le champ des déplacements \mathbf{u} , le champ de gradient de la transformation \mathbf{F} et le champ des contraintes $\mathbf{\Pi}$ respectant :

- les relations locales pour chaque $K_0^e \in \mathcal{T}_0^h$:

$$\begin{cases} \nabla \cdot \mathbf{\Pi} = \rho \ddot{\mathbf{u}} & \text{dans } K_0^e, \\ \mathbf{\Pi}(\mathbf{F}) & \text{(Loi de comportement),} \\ \mathbf{F} = \mathbf{I} + \nabla \mathbf{u} & \text{dans } K_0^e, \\ \mathbf{\Pi} \cdot \mathbf{N}_{K_0^e} = \mathbf{T}([\mathbf{u}]) & \text{sur } \partial K_0^e, \end{cases} \quad (4.3.14)$$

- les conditions globales sur Ω_0 :

$$\begin{cases} \bar{\mathbf{F}} = \langle \mathbf{F} \rangle_{\Omega_0} = \bar{\mathbf{F}}_{\text{imp}} & \text{si le gradient de la transformation macroscopique } \bar{\mathbf{F}}_{\text{imp}} \text{ est imposée,} \\ \bar{\mathbf{\Pi}} = \langle \mathbf{\Pi} \rangle_{\Omega_0} = \bar{\mathbf{\Pi}}_{\text{imp}} & \text{si la contrainte macroscopique } \bar{\mathbf{\Pi}}_{\text{imp}} \text{ est imposée.} \end{cases} \quad (4.3.15)$$

Remarque 4.6. *La périodicité du champ $\mathbf{u} - (\bar{\mathbf{F}} - \mathbf{I}) \cdot \mathbf{X}$ est prise en compte dans la relation de saut sur les faces externes.*

4.3.2 Formulation variationnelle spécifique

La recherche d'une solution analytique des systèmes (4.3.12)-(4.3.13) ou (4.3.14)-(4.3.15) en tout point du milieu est hors de portée. La méthode des Eléments Finis permet la résolution approchée de tels systèmes. Cette méthode nécessite l'écriture des équations sous une forme variationnelle appelée forme faible.

Cette section a pour objectif l'écriture d'une formulation variationnelle pour les problèmes périodiques en prenant en compte les relations de périodicité sur le domaine Ω_0 ainsi que les relations de moyennes entre les quantités microscopiques et macroscopiques.

Introduisons les espaces suivants ("broken Sobolev space") :

$$\begin{aligned} U &= \left\{ \mathbf{v} \in [L^2(\Omega_0)]^m, \mathbf{v}|_{K_0^e} \in [H^1(K_0^e)]^m \quad \forall K_0^e \in \mathcal{T}_0^h \right\}, \\ U^\# &= \left\{ \mathbf{v} \in [L^2(\Omega_0)]^m, \mathbf{v}|_{K_0^e} \in [H^1(K_0^e)]^m \quad \forall K_0^e \in \mathcal{T}_0^h, \mathbf{v} \text{ périodique} \right\}, \end{aligned} \quad (4.3.16)$$

et l'espace :

$$V = \mathcal{L}(\mathbb{R}^m), \quad (4.3.17)$$

où $\mathcal{L}(\mathbb{R}^m)$ est l'espace des applications linéaires de \mathbb{R}^m dans \mathbb{R}^m .

Considérons, de plus, un champ de vitesses virtuelles \mathbf{v}^* ⁵, cinématiquement admissible et définie par :

$$\mathbf{v}^* = (\mathbf{v}^*)^\# + \dot{\mathbf{F}}^* \cdot \mathbf{X}, \quad (4.3.18)$$

où :

$$\dot{\mathbf{F}}^* = \langle \nabla \mathbf{v}^* \rangle_{K_0^e}. \quad (4.3.19)$$

Remarque 4.7. $\mathbf{v}^* \in U$ entraîne que le support des fonctions tests \mathbf{v}^* est réduit au sous domaine K_0^e c'est-à-dire à la maille courante.

4.3.2.a inconnue principale $\mathbf{u}^\#$

Le champ de déplacements $\mathbf{u}^\#$ est choisi comme inconnue principale.

Une projection (au sens des produits scalaires dans les espaces de fonctions) de l'équation d'équilibre de (4.3.12) sur le champ de vitesses virtuelles \mathbf{v}^* s'écrit dans le sous domaine K_0^e :

$$\int_{K_0^e} \nabla \cdot \mathbf{\Pi} \cdot \mathbf{v}^* dx = \int_{K_0^e} \rho \frac{d^2}{dt^2} \left(\mathbf{u}^\# + (\bar{\mathbf{F}} - \mathbf{I}) \cdot \mathbf{X} \right) \cdot \mathbf{v}^* dx \quad \forall \mathbf{v}^* \in U, \quad (4.3.20)$$

qui se réécrit avec la décomposition (4.3.18) :

$$\begin{aligned} & \int_{K_0^e} \nabla \cdot \mathbf{\Pi} \cdot \left((\mathbf{v}^*)^\# + \dot{\mathbf{F}}^* \cdot \mathbf{X} \right) dx \\ &= \int_{K_0^e} \rho \frac{d^2}{dt^2} \left(\mathbf{u}^\# + (\bar{\mathbf{F}} - \mathbf{I}) \cdot \mathbf{X} \right) \cdot \left((\mathbf{v}^*)^\# + \dot{\mathbf{F}}^* \cdot \mathbf{X} \right) dx \end{aligned} \quad \forall (\mathbf{v}^*)^\# \in U^\#, \forall \dot{\mathbf{F}}^* \in V. \quad (4.3.21)$$

L'application du théorème de Green au premier terme de (4.3.21) donne :

$$\begin{aligned} & \int_{\partial K_0^e} \mathbf{\Pi} \cdot \mathbf{N}_{K_0^e} \cdot \left((\mathbf{v}^*)^\# + \dot{\mathbf{F}}^* \cdot \mathbf{X} \right) dS - \int_{K_0^e} \mathbf{\Pi} : \nabla \left((\mathbf{v}^*)^\# + \dot{\mathbf{F}}^* \cdot \mathbf{X} \right) dx \\ &= \int_{K_0^e} \rho \frac{d^2}{dt^2} \left(\mathbf{u}^\# + (\bar{\mathbf{F}} - \mathbf{I}) \cdot \mathbf{X} \right) \cdot \left((\mathbf{v}^*)^\# + \dot{\mathbf{F}}^* \cdot \mathbf{X} \right) dx \end{aligned} \quad \forall (\mathbf{v}^*)^\# \in U^\#, \forall \dot{\mathbf{F}}^* \in V. \quad (4.3.22)$$

L'application une nouvelle fois de la formule de Green :

$$\int_{\partial K_0^e} \mathbf{\Pi} \cdot \mathbf{N}_{K_0^e} \cdot \left(\dot{\mathbf{F}}^* \cdot \mathbf{X} \right) dS = \int_{K_0^e} \mathbf{\Pi} : \dot{\mathbf{F}}^* dx + \int_{K_0^e} \nabla \cdot \mathbf{\Pi} \cdot \left(\dot{\mathbf{F}}^* \cdot \mathbf{X} \right) dx, \quad (4.3.23)$$

associée à la relation d'équilibre issue de (4.3.12), entraînent :

$$\begin{aligned} & \int_{\partial K_0^e} \mathbf{\Pi} \cdot \mathbf{N}_{K_0^e} \cdot (\mathbf{v}^*)^\# dS - \int_{K_0^e} \mathbf{\Pi} : \nabla \left((\mathbf{v}^*)^\# + \dot{\mathbf{F}}^* \cdot \mathbf{X} \right) dx + \int_{K_0^e} \mathbf{\Pi} : \dot{\mathbf{F}}^* dx \\ &= \int_{K_0^e} \rho \frac{d^2}{dt^2} \left(\mathbf{u}^\# + (\bar{\mathbf{F}} - \mathbf{I}) \cdot \mathbf{X} \right) \cdot (\mathbf{v}^*)^\# dx \end{aligned} \quad \forall (\mathbf{v}^*)^\# \in U^\#, \forall \dot{\mathbf{F}}^* \in V. \quad (4.3.24)$$

⁵il s'agit d'un champ arbitraire de vitesses infinitésimales différentiables au moins par morceaux qui respecte la continuité dans chaque sous domaine

En ajoutant les équations obtenues pour chaque sous domaine, et l'écriture de la définition de la moyenne :

$$\sum_{e=1}^{\tau} \int_{K_0^e} \mathbf{\Pi} : \dot{\mathbf{F}}^* dx = \int_{\Omega_0} \mathbf{\Pi} : \dot{\mathbf{F}}^* dx = |\Omega_0| \bar{\mathbf{\Pi}} : \dot{\mathbf{F}}^*, \quad (4.3.25)$$

nous permet de réécrire (4.3.24) sous la forme :

$$\begin{aligned} \sum_{e=1}^{\tau} \int_{\partial K_0^e} \mathbf{\Pi} \cdot \mathbf{N}_{K_0^e} \cdot (\mathbf{v}^*)^\# dS - \sum_{e=1}^{\tau} \int_{K_0^e} \mathbf{\Pi} : \left(\nabla(\mathbf{v}^*)^\# + \dot{\mathbf{F}}^* \right) dx + |\Omega_0| \bar{\mathbf{\Pi}} : \dot{\mathbf{F}}^* \\ = \sum_{e=1}^{\tau} \int_{K_0^e} \rho \frac{d^2}{dt^2} \left(\mathbf{u}^\# + (\bar{\mathbf{F}} - \mathbf{I}) \cdot \mathbf{X} \right) \cdot (\mathbf{v}^*)^\# dx \end{aligned} \quad \forall (\mathbf{v}^*)^\# \in U^\#, \forall \dot{\mathbf{F}}^* \in V. \quad (4.3.26)$$

L'application des conditions aux limites sur chaque sous domaine implique :

$$\begin{aligned} \sum_{e=1}^{\tau} \int_{\partial K_0^e} \mathbf{T}([\mathbf{u}^\#]) \cdot (\mathbf{v}^*)^\# dS - \sum_{e=1}^{\tau} \int_{K_0^e} \mathbf{\Pi} : \left(\nabla(\mathbf{v}^*)^\# + \dot{\mathbf{F}}^* \right) dx + |\Omega_0| \bar{\mathbf{\Pi}} : \dot{\mathbf{F}}^* \\ = \sum_{e=1}^{\tau} \int_{K_0^e} \rho \frac{d^2}{dt^2} \left(\mathbf{u}^\# + (\bar{\mathbf{F}} - \mathbf{I}) \cdot \mathbf{X} \right) \cdot (\mathbf{v}^*)^\# dx \end{aligned} \quad \forall (\mathbf{v}^*)^\# \in U^\#, \forall \dot{\mathbf{F}}^* \in V. \quad (4.3.27)$$

Ainsi, le problème variationnel périodique s'écrit sous la forme de deux équations variationnelles :

Trouver $\mathbf{u}^\# \in U^\#$ et $\bar{\mathbf{F}} \in V$ tels que :

$$\left\{ \begin{aligned} \sum_{e=1}^{\tau} \int_{\partial K_0^e} \mathbf{T}([\mathbf{u}^\#]) \cdot (\mathbf{v}^*)^\# dS - \sum_{e=1}^{\tau} \int_{K_0^e} \mathbf{\Pi} : \nabla(\mathbf{v}^*)^\# dx \\ = \sum_{e=1}^{\tau} \int_{K_0^e} \rho \frac{d^2}{dt^2} \left(\mathbf{u}^\# + (\bar{\mathbf{F}} - \mathbf{I}) \cdot \mathbf{X} \right) \cdot (\mathbf{v}^*)^\# dx \end{aligned} \right. \quad \forall (\mathbf{v}^*)^\# \in U^\#, \quad (4.3.28)$$

$$\sum_{e=1}^{\tau} \int_{K_0^e} \mathbf{\Pi} : \dot{\mathbf{F}}^* dx = |\Omega_0| \bar{\mathbf{\Pi}} : \dot{\mathbf{F}}^* \quad \forall \dot{\mathbf{F}}^* \in V.$$

Le système (4.3.28) est formé par :

- la formulation faible de l'équation de la dynamique écrite en déplacements périodiques,
- une condition sur la contrainte macroscopique.

La condition sur la contrainte implique que la moyenne des contraintes microscopiques reste égale à la contrainte macroscopique imposée ou reste nulle dans le cas de contraintes macroscopiques libres. Imposer la contrainte macroscopique revient à imposer $\bar{\mathbf{\Pi}}$.

Remarque 4.8. Rappelons que le saut de déplacement dépend du type de frontière considérée. Ainsi l'écriture : $\sum_{e=1}^{\tau} \int_{\partial K_0^e} \mathbf{T}([\mathbf{u}^\#]) \cdot (\mathbf{v}^*)^\# dS$ peut porter à confusion. En toute rigueur, la relation doit être réécrite en utilisant la partition de la frontière en faces internes et faces externes.

4.3.2.b inconnue principale \mathbf{u}

La démarche est similaire à celle du § 4.3.2.a. La projection, effectuée sur le champ de vitesses virtuelles périodiques $(\mathbf{v}^*)^\# = \mathbf{v}^* - \dot{\bar{\mathbf{F}}}^* \cdot \mathbf{X}$, conduit à la formulation variationnelle suivante :

$$\sum_{e=1}^{\tau} \int_{\partial K_0^e} \mathbf{T}([\mathbf{u}]) \cdot \mathbf{v}^* dS - \sum_{e=1}^{\tau} \int_{K_0^e} \mathbf{\Pi} : (\nabla \mathbf{v}^* - \dot{\bar{\mathbf{F}}}^*) dx - |\Omega_0| \bar{\mathbf{\Pi}} : \dot{\bar{\mathbf{F}}}^* = \sum_{e=1}^{\tau} \int_{K_0^e} \rho \ddot{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{v}^* dx \quad (4.3.29)$$

$$\forall \mathbf{v}^* \in U, \forall \dot{\bar{\mathbf{F}}}^* \in V,$$

qui se réécrit sous la forme :

trouver $\mathbf{u} \in U$ et $\bar{\mathbf{F}} \in V$ tels que :

$$\begin{cases} \sum_{e=1}^{\tau} \int_{\partial K_0^e} \mathbf{T}([\mathbf{u}]) \cdot \mathbf{v}^* dS - \sum_{e=1}^{\tau} \int_{K_0^e} \mathbf{\Pi} : \nabla \mathbf{v}^* dx = \sum_{e=1}^{\tau} \int_{K_0^e} \rho \ddot{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{v}^* dx & \forall \mathbf{v}^* \in U, \\ \sum_{e=1}^{\tau} \int_{K_0^e} \mathbf{\Pi} : \dot{\bar{\mathbf{F}}}^* dx = |\Omega_0| \bar{\mathbf{\Pi}} : \dot{\bar{\mathbf{F}}}^* & \forall \dot{\bar{\mathbf{F}}}^* \in V. \end{cases} \quad (4.3.30)$$

Remarque 4.9. *L'avantage de cette écriture est de mettre en jeu le déplacement réel \mathbf{u} .*

4.3.3 Approximation variationnelle

L'approche en déplacement périodique comme inconnue principale a été retenue pour la suite de l'étude. L'inconnue principale ne sera donc plus précisée dans la suite.

Une approximation de type Galerkin du problème variationnel (4.3.28) est obtenue en approchant les espaces $U^\#$ et V par des espaces de dimension finie notés respectivement $U_h^\#$ et V_h .

Le problème variationnel approché est le suivant,

trouver $\mathbf{u}_h \in U_h^\#$ et $\bar{\mathbf{f}}_h \in V_h$ tels que :

$$\begin{cases} \sum_{e=1}^{\tau} \int_{\partial K_0^e} \mathbf{T}([\mathbf{u}_h]) \cdot (\mathbf{v}_h^*)^\# dS - \sum_{e=1}^{\tau} \int_{K_0^e} \mathbf{\Pi} : \nabla (\mathbf{v}_h^*)^\# dx & \forall (\mathbf{v}_h^*)^\# \in U_h^\#, \\ = \sum_{e=1}^{\tau} \int_{K_0^e} \rho \frac{d^2}{dt^2} (\mathbf{u}_h + (\bar{\mathbf{f}}_h - \mathbf{I}) \cdot \mathbf{X}) \cdot (\mathbf{v}_h^*)^\# dx & \\ \sum_{e=1}^{\tau} \int_{K_0^e} \mathbf{\Pi} : \dot{\bar{\mathbf{F}}}^* dx = |\Omega_0| \bar{\mathbf{\Pi}} : \dot{\bar{\mathbf{F}}}^* & \forall \dot{\bar{\mathbf{F}}}^* \in V_h. \end{cases} \quad (4.3.31)$$

La résolution numérique du problème est effectuée en utilisant la méthode des Eléments Finis (Dhatt et Touzot, 1984). Les espaces U_h et V_h sont construits par cette méthode.

4.3.3.a Espaces Eléments Finis

La triangulation envisagée est celle introduite au § 4.3.1.a (voir remarque 4.2).

Soit l'espace W_h défini par :

$$W_h = \text{vect} \{e_i \otimes e_j, 0 \leq i, j \leq m\} = \text{vect} \{\boldsymbol{\pi}_j, 0 \leq j \leq m^2\}, \quad (4.3.32)$$

où e_i sont des vecteurs de bases de l'espace vectoriel \mathbb{R}^m et $\boldsymbol{\pi}_j$ sont des vecteurs de bases de l'espace vectoriel $\mathcal{L}(\mathbb{R}^m)$.

Soit l'ensemble \mathbb{J} tel que :

$$\mathbb{J} = \{j \in [1, m^2], \bar{\mathbf{F}} \cdot \boldsymbol{\pi}_j \text{ ne soit pas imposé}\}, \quad (4.3.33)$$

On note : $N_{\mathbf{u}}^{dof}$ le nombre de degrés de libertés relatifs aux déplacements périodiques et N^{noeuds} le nombre de noeuds.

Définissons les espaces d'approximation :

$$\begin{aligned} V_h &= \text{vect} \{ \boldsymbol{\pi}_j, j \in \mathbb{J} \}, \\ U_h^\# &= \text{vect} \{ \varphi_i, 0 \leq i \leq N_{\mathbf{u}}^{dof} \}, \end{aligned} \quad (4.3.34)$$

où φ_i sont les fonctions d'interpolation globale définies sur Ω_0 à valeur dans \mathbb{R}^m .

Les fonctions de bases φ_i sont associées à un noeud géométrique et ont leur support réduit à la maille contenant ce noeud⁶ (FIG. 4.4) :

$$\forall i \in [1, N_{\mathbf{u}}^{dof}], \quad \text{Supp } \varphi_i \subset \bar{K}_0^e, \quad (4.3.35)$$

où K_0^e est la maille contenant le noeud associé à la fonction de base φ_i et $\text{Supp } \varphi_i$ est le support de la fonction φ_i .

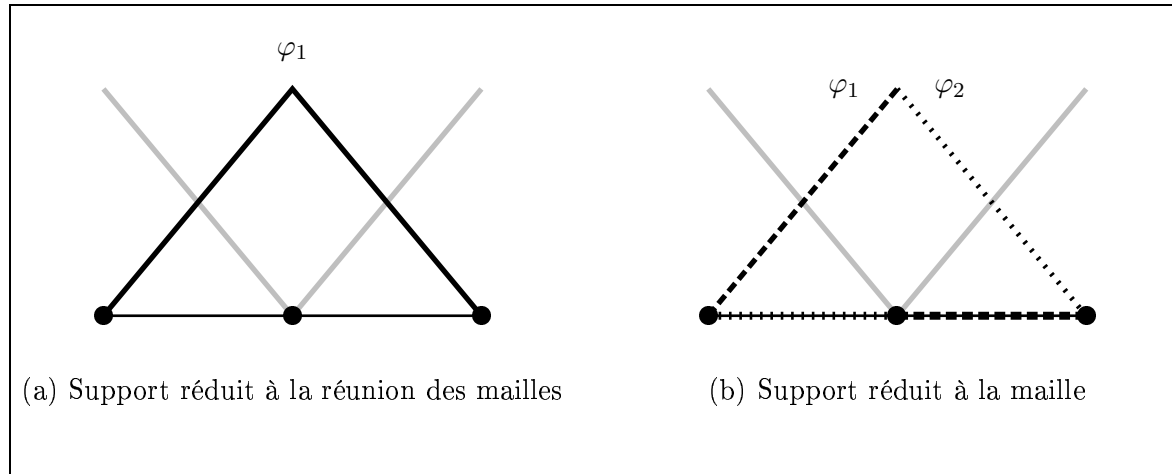


FIG. 4.4 – Illustration 1D de fonctions de bases dont le support est (a) réduit à la réunion de mailles (b) réduit à la maille courante. Dans le cas (b), le nombre de fonctions de bases est doublé.

Remarque 4.10. *La formulation du problème périodique ne faisant pas intervenir de déplacement imposé, mais des conditions globales sur le gradient de la transformation macroscopique, le nombre de degrés de liberté relatifs aux déplacements périodiques est égal à $N_{\mathbf{u}}^{dof} = N^{noeuds} \times m$. Ce nombre est beaucoup plus élevé que dans le cas d'Eléments Finis "standards" (un noeud pouvant appartenir à plusieurs mailles).*

Toute fonction $\mathbf{v} \in U^\#$ et toute application linéaire $\mathbf{w} \in V$ peuvent alors être approximées par leurs interpolations éléments finis \mathbf{v}_h et \mathbf{w}_h définies par :

⁶un noeud appartient à une seule maille

$$\forall x \in \Omega_0, \quad \mathbf{v}_h(x) = \sum_{i=1}^{N_{\mathbf{u}}^{dof}} v_i \varphi_i(x), \quad (4.3.36)$$

$$\mathbf{w}_h = \sum_{j \in \mathbb{J}} w_j \boldsymbol{\pi}_j + \sum_{j \notin \mathbb{J}} (\bar{\mathbf{F}}_{\text{imp}} \cdot \boldsymbol{\pi}_j) \boldsymbol{\pi}_j, \quad (4.3.37)$$

où les scalaires $v_i \in \mathbb{R}$ et $w_j \in \mathbb{R}$ sont appelés degrés de liberté.

Les composantes du gradient de la transformation macroscopique w_j peuvent être considérées comme des degrés de liberté supplémentaires venant s'ajouter aux déplacements périodiques nodaux.

Le nombre de degrés de liberté supplémentaires venant s'ajouter à $N_{\mathbf{u}}^{dof}$ est donc $N_{\bar{\mathbf{F}}}^{dof} = \text{card } \mathbb{J}$, où $\text{card } X$ est le cardinale de l'ensemble X .

Remarque 4.11. *Cette démarche s'apparente à la technique du "noeud macroscopique" (Debordes et al., 1985). Dans cette dernière, les degrés de liberté macroscopiques supplémentaires sont pris en compte par l'intermédiaire d'un noeud supplémentaire commun à tous les éléments du maillage. La partition du gradient de la transformation discrète sous la forme $\mathbf{F}_h = \bar{\mathbf{d}} + \nabla \mathbf{q}$ devient alors naturelle. Cependant, cette technique ne permet pas de définir clairement le saut de déplacement discret entre les corps.*

Remarque 4.12. *Le problème périodique (4.3.31) peut aussi être vu comme un problème d'optimisation sous contrainte. Une résolution possible est l'utilisation de multiplicateurs de Lagrange. Dans ce cas, les multiplicateurs de Lagrange ont une signification mécanique claire, ils représentent les composantes du champ moyen de gradient de la transformation sur la cellule.*

4.3.3.b Formulation du problème discret

Les inconnues v_i forment un vecteur de $\mathbb{R}^{N_{\mathbf{u}}^{dof}}$.

Les inconnues w_j , $j \in \mathbb{J}$ sont indexées par une suite d'entiers contigus :

$$j \in \mathbb{J} \xrightarrow[\text{contiguë}]{\text{indexation}} J \in [1, N_{\bar{\mathbf{F}}}^{dof}], \quad (4.3.38)$$

et forment ainsi un vecteur de $\mathbb{R}^{N_{\bar{\mathbf{F}}}^{dof}}$.

Le problème discret (4.3.31) formulé sous la forme matricielle conduit à rechercher les vecteurs $\mathbf{q}^\#$ et $\bar{\mathbf{d}}$ solutions de :

trouver $\mathbf{q}^\# \in \mathbb{R}^{N_{\mathbf{u}}^{dof}}$ et $\bar{\mathbf{d}} \in \mathbb{R}^{N_{\bar{\mathbf{F}}}^{dof}}$ tels que

$$\mathbf{M}(\mathbf{q}^\#, t) \cdot \ddot{\mathbf{q}}^\# + \mathbf{N}(\mathbf{q}^\#, t) \cdot \ddot{\bar{\mathbf{d}}} = \mathbf{F}(\mathbf{q}^\#, \dot{\mathbf{q}}^\#, \bar{\mathbf{d}}, \dot{\bar{\mathbf{d}}}, t) + \mathbf{r}, \quad (4.3.39a)$$

$$\mathbf{G}(\mathbf{q}^\#, \dot{\mathbf{q}}^\#, \bar{\mathbf{d}}, \dot{\bar{\mathbf{d}}}, t) = \mathbf{H}(t), \quad (4.3.39b)$$

avec :

$$\begin{aligned}
 M_{IJ} &= \sum_{e=1}^{\tau} \int_{K_0^e} \rho \boldsymbol{\varphi}_I \cdot \boldsymbol{\varphi}_J dx & 0 \leq I, J \leq N_{\mathbf{u}}^{dof}, \\
 F_I &= - \sum_{e=1}^{\tau} \int_{K_0^e} \boldsymbol{\Pi}(\mathbf{q}^{\#}, \bar{\mathbf{d}}) : \nabla \boldsymbol{\varphi}_I dx & 0 \leq I \leq N_{\mathbf{u}}^{dof}, \\
 r_I &= \sum_{e=1}^{\tau} \int_{\partial K_0^e \setminus \partial \Omega_0} \mathbf{T}([\mathbf{q}^{\#}]) \cdot \boldsymbol{\varphi}_I dS & 0 \leq I \leq N_{\mathbf{u}}^{dof}, \\
 N_{IJ} &= \sum_{e=1}^{\tau} \int_{K_0^e} \rho \boldsymbol{\varphi}_I \cdot (\boldsymbol{\pi}_J \cdot \mathbf{X}) dx & 0 \leq I \leq N_{\mathbf{u}}^{dof}, \quad 0 \leq J \leq N_{\mathbf{F}}^{dof}, \\
 G_I &= \sum_{e=1}^{\tau} \int_{K_0^e} \boldsymbol{\Pi}(\mathbf{q}^{\#}, \bar{\mathbf{d}}) : \boldsymbol{\pi}_I & 0 \leq I \leq N_{\mathbf{F}}^{dof}, \\
 H_I &= |\Omega_0| \bar{\boldsymbol{\Pi}} : \boldsymbol{\pi}_I & 0 \leq I \leq N_{\mathbf{F}}^{dof},
 \end{aligned} \tag{4.3.40}$$

où $[\mathbf{q}^{\#}]$ est la discrétisation du saut de déplacement périodique $[\mathbf{u}^{\#}]$.

Les termes $\mathbf{M}(\mathbf{q}^{\#}, t)$ et $\mathbf{N}(\mathbf{q}^{\#}, t)$ sont appelés matrice de masse “classique” et matrice de masse globale concentrée, $\mathbf{F}(\mathbf{q}^{\#}, \dot{\mathbf{q}}^{\#}, \bar{\mathbf{d}}, \dot{\bar{\mathbf{d}}}, t)$ représente les forces internes et externes et \mathbf{r} représente les efforts associés aux liaisons. Les termes $\mathbf{G}(\mathbf{q}^{\#}, \dot{\mathbf{q}}^{\#}, \bar{\mathbf{d}}, \dot{\bar{\mathbf{d}}}, t)$ et \mathbf{H} représentent respectivement la moyenne des contraintes microscopiques et la contrainte macroscopique imposée.

4.4 Bilan du chapitre

A l'échelle microscopique, les propriétés effectives de la loi surfacique sont obtenues par des techniques d'homogénéisation numérique périodique. Le choix s'est porté sur l'homogénéisation périodique en raison de la définition rigoureuse, au sens mathématique, du comportement homogène équivalent, de l'indépendance de la taille du VER dans le cas de milieux périodiques et des excellentes approximations dans le cas de milieux aléatoires.

Dans cette approche, le champ de gradient de la transformation (périodique) est séparé en une partie homogène et une correction fluctuante (périodique). La partie fluctuante du gradient de la transformation décrit la contribution des hétérogénéités du matériau, provenant des inclusions mais aussi des fissures (MZCF). Le champ de déplacement, à partir duquel dérive le gradient de la transformation, est lui-même décomposé en un déplacement obtenu dans un matériau sans hétérogénéité et une correction fluctuante.

Les variables principales retenues ici sont ainsi la moyenne du gradient de la transformation et le gradient de la transformation périodique.

Prenant en compte cette décomposition, la formulation variationnelle du problème périodique conduit à :

- la formulation faible de l'équation de dynamique en terme de déplacements périodiques,
- une condition sur la contrainte macroscopique.

Dans la formulation Eléments Finis, l'approche multicorps, un corps correspondant ici à une maille, entraîne que le support des fonctions de base est réduit à la maille courante. Le nombre de degrés de libertés est ainsi doublé par rapport à une formulation Eléments Finis “standard”.

Il reste, à présent, à prendre en compte les conditions mixtes entre les corps (ou mailles) et l'intégration temporelle. Ces points sont traités dans le cadre d'une approche adaptée, Non-Smooth Contact Dynamics, au chapitre suivant.

Chapitre 5

Traitement dynamique du problème multicorps

Sommaire

5.1	Extension de la méthode Non-Smooth Contact Dynamics au cas périodique	101
5.1.1	Écriture au sens des mesures	101
5.1.2	Intégration temporelle	102
5.1.3	Intégration des non linéarités	103
5.1.4	Changement de variables	106
5.2	Relations entre les variables globales et locales	107
5.2.1	Condensation des variables aux contacts	107
5.2.2	Condensation de la matrice des itérations aux contacts	108
5.3	Résolution à l'échelle du contact	108
5.3.1	Résolution du problème de contact frottant	108
5.3.2	NSCD et CZM	109
5.4	Algorithme de résolution	110
5.4.1	Problème standard	110
5.4.2	Problème périodique	110
5.5	Bilan du chapitre	113

Les conditions mixtes entre les corps peuvent engendrer des discontinuités de vitesse et l'accélération peut ne plus être définie. Ces conditions non régulières sont traitées localement par une approche adaptée, appelée Non-Smooth Contact Dynamics (NSCD).

Ce chapitre propose une extension de la méthode NSCD au cas d'un problème multicorps possédant des conditions de périodicité (voir Chapitre 4). Une spécificité de ce problème est la partition, en un champ moyen et un champ périodique, du champ de gradient de la transformation (§ 4.2). L'inconnue principale devient alors le déplacement périodique et une nouvelle inconnue, le champ moyen du gradient de la transformation, apparaît.

Dans la suite, nous décrivons les grandes étapes de la méthode NSCD étendue aux problèmes périodiques.

5.1 Extension de la méthode Non-Smooth Contact Dynamics au cas périodique

L'approche NSCD, initialement développée par Moreau (1988) et Jean (1999) et formalisée par Vola et al. (1998), est particulièrement adaptée aux interactions multicorps avec frottement et contact unilatéral. Un traitement non régularisé (sans pénalisation) des conditions de contact unilatéral et de frottement de Coulomb est notamment proposé dans cette méthode. Des modifications mineures de cette méthode permettent une prise en compte des modèles de zones cohésives tridimensionnelles en présence de contact unilatéral (Monerie et Acary, 2001).

La suite décrit son extension au cas périodique.

5.1.1 Ecriture au sens des mesures

L'équation de la dynamique discrétisée en espace associée au problème périodique (voir Chapitre 4) s'écrit :

$$\begin{cases} M(\mathbf{q}^\#, t) \cdot \ddot{\mathbf{q}}^\# + N(\mathbf{q}^\#, t) \cdot \ddot{\bar{\mathbf{d}}} = \mathbf{F}(\mathbf{q}^\#, \dot{\mathbf{q}}^\#, \bar{\mathbf{d}}, \dot{\bar{\mathbf{d}}}, t) + \mathbf{r}, \\ \mathbf{G}(\mathbf{q}^\#, \dot{\mathbf{q}}^\#, \bar{\mathbf{d}}, \dot{\bar{\mathbf{d}}}, t) = \mathbf{H}(t), \end{cases} \quad (5.1.1)$$

où $\mathbf{q}^\#, \dot{\mathbf{q}}^\#$ et $\ddot{\mathbf{q}}^\#$ sont respectivement le déplacement, la vitesse et l'accélération périodiques discrets, $\bar{\mathbf{d}}, \dot{\bar{\mathbf{d}}}$ et $\ddot{\bar{\mathbf{d}}}$ sont respectivement la moyenne du gradient de la transformation et ses dérivées première et seconde par rapport au temps, $M(\mathbf{q}^\#, t)$ et $N(\mathbf{q}^\#, t)$ sont des matrices de masse, $\mathbf{F}(\mathbf{q}^\#, \dot{\mathbf{q}}^\#, \bar{\mathbf{d}}, \dot{\bar{\mathbf{d}}}, t)$ représentent les forces internes et externes et \mathbf{r} représente les efforts associés aux liaisons. Les termes $\mathbf{G}(\mathbf{q}^\#, \dot{\mathbf{q}}^\#, \bar{\mathbf{d}}, \dot{\bar{\mathbf{d}}}, t)$ et $\mathbf{H}(t)$ représentent respectivement la moyenne des contraintes microscopiques et la contrainte macroscopique imposée.

En présence de conditions unilatérales, des discontinuités du champ de vitesse périodique peuvent apparaître et l'accélération, au sens de la dérivée de la vitesse par rapport au temps, n'est pas définie. Dans la suite, pour prendre en compte ces conditions, les dérivations seront prises au sens des mesures. Le système différentiel s'écrit :

$$M(\mathbf{q}^\#, t) \cdot d\dot{\mathbf{q}}^\# + N(\mathbf{q}^\#, t) \cdot d\dot{\bar{\mathbf{d}}} = \mathbf{F}(\mathbf{q}^\#, \dot{\mathbf{q}}^\#, \bar{\mathbf{d}}, \dot{\bar{\mathbf{d}}}, t)dt + \mathbf{r}d\nu, \quad (5.1.2a)$$

$$\mathbf{G}(\mathbf{q}^\#, \dot{\mathbf{q}}^\#, \bar{\mathbf{d}}, \dot{\bar{\mathbf{d}}}, t)dt = \mathbf{H}(t)dt, \quad (5.1.2b)$$

où dt est une mesure de Lebesgue, $\mathbf{r}d\nu$ représente l'impulsion totale générée par les conditions unilatérales et $d\nu$ est une mesure réelle positive. Pour chaque élément $d\dot{\mathbf{q}}^\#$ et chaque élément $d\dot{\bar{\mathbf{d}}}$,

on peut associer à leurs dérivées des mesures différentielles notées respectivement $\dot{\mathbf{q}}^\#$ et $\dot{\bar{\mathbf{d}}}$ qui vérifient dans l'intervalle $[t_1, t_2] \in]0, T]^1$:

$$\begin{cases} \int_{t_1}^{t_2} d\dot{\mathbf{q}}^\# = \dot{\mathbf{q}}^\#(t_2^+) - \dot{\mathbf{q}}^\#(t_1^-), \\ \int_{t_1}^{t_2} d\dot{\bar{\mathbf{d}}} = \dot{\bar{\mathbf{d}}}(t_2^+) - \dot{\bar{\mathbf{d}}}(t_1^-). \end{cases} \quad (5.1.3)$$

Pour plus de détails concernant le cadre mathématique permettant d'écrire le système différentiel (5.1.2), nous renvoyons aux travaux fondamentaux de Moreau (1974, 1988).

5.1.2 Intégration temporelle

L'intégration de (5.1.2a) et (5.1.2b) et l'intégration implicite de $\mathbf{u}^\#$ et $\bar{\mathbf{d}}$ sur un intervalle $]t_i, t_{i+1}]$ de longueur h_i s'écrit :

$$\begin{cases} \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{M}(\mathbf{q}^\#, t) \cdot d\dot{\mathbf{q}}^\# + \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{N}(\mathbf{q}^\#, t) \cdot d\dot{\bar{\mathbf{d}}} = \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{F}(\mathbf{q}^\#, \dot{\mathbf{q}}^\#, \bar{\mathbf{d}}, \dot{\bar{\mathbf{d}}}, t) dt + \int_{]t_i, t_{i+1}]} \mathbf{r} d\nu, \\ \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{G}(\mathbf{q}^\#, \dot{\mathbf{q}}^\#, \bar{\mathbf{d}}, \dot{\bar{\mathbf{d}}}, t) dt = \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{H}(t) dt, \\ \mathbf{q}(t_{i+1}) = \mathbf{q}(t_i) + \int_{t_i}^{t_{i+1}} \dot{\mathbf{q}}(\tau) d\tau, \\ \bar{\mathbf{d}}(t_{i+1}) = \bar{\mathbf{d}}(t_i) + \int_{t_i}^{t_{i+1}} \dot{\bar{\mathbf{d}}}(\tau) d\tau. \end{cases} \quad (5.1.4)$$

On suppose que les matrices d'inerties $\mathbf{M}(\mathbf{q}^\#, t)$ et $\mathbf{N}(\mathbf{q}^\#, t)$ varient lentement avec $\mathbf{q}^\#$. L'intégration par un schéma implicite conduit à :

$$\begin{aligned} & \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{M}(\mathbf{q}^\#, t) \cdot d\dot{\mathbf{q}} + \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{N}(\mathbf{q}^\#, t) \cdot d\dot{\bar{\mathbf{d}}} \\ &= \mathbf{M}(\mathbf{q}_{i+1}^\#, t_{i+1}) \cdot (\dot{\mathbf{q}}^\#(t_{i+1}^+) - \dot{\mathbf{q}}^\#(t_i^-)) + \mathbf{N}(\mathbf{q}_{i+1}^\#, t_{i+1}) \cdot (\dot{\bar{\mathbf{d}}}(t_{i+1}^+) - \dot{\bar{\mathbf{d}}}(t_i^-)). \end{aligned} \quad (5.1.5)$$

Numériquement, les variables ne prennent qu'une valeur à un incrément donné. Dans la suite, on notera : $\dot{\mathbf{q}}^\#(t_{i+1}^+) := \dot{\mathbf{q}}^\#(t_{i+1})$, $\dot{\mathbf{q}}^\#(t_i^-) := \dot{\mathbf{q}}^\#(t_i)$, $\dot{\bar{\mathbf{d}}}(t_{i+1}^+) = \dot{\bar{\mathbf{d}}}(t_{i+1})$ et $\dot{\bar{\mathbf{d}}}(t_i^-) = \dot{\bar{\mathbf{d}}}(t_i)$.

La méthode d'intégration choisie, en accord avec la théorie (Moreau, 1985), est une θ -méthode avec $\theta \geq 1/2$:

$$\begin{cases} \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{F}(\mathbf{q}^\#, \dot{\mathbf{q}}^\#, \bar{\mathbf{d}}, \dot{\bar{\mathbf{d}}}, t) dt = h_i \{ (1 - \theta) \mathbf{F}(\mathbf{q}_i^\#, \dot{\mathbf{q}}_i^\#, \bar{\mathbf{d}}_i, \dot{\bar{\mathbf{d}}}_i, t_i) + \theta \mathbf{F}(\mathbf{q}_{i+1}^\#, \dot{\mathbf{q}}_{i+1}^\#, \bar{\mathbf{d}}_{i+1}, \dot{\bar{\mathbf{d}}}_{i+1}, t_{i+1}) \}, \\ \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{G}(\mathbf{q}^\#, \dot{\mathbf{q}}^\#, \bar{\mathbf{d}}, \dot{\bar{\mathbf{d}}}, t) dt = h_i \{ (1 - \theta) \mathbf{G}(\mathbf{q}_i^\#, \dot{\mathbf{q}}_i^\#, \bar{\mathbf{d}}_i, \dot{\bar{\mathbf{d}}}_i, t_i) + \theta \mathbf{G}(\mathbf{q}_{i+1}^\#, \dot{\mathbf{q}}_{i+1}^\#, \bar{\mathbf{d}}_{i+1}, \dot{\bar{\mathbf{d}}}_{i+1}, t_{i+1}) \}, \\ \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{H}(t) dt = h_i \{ (1 - \theta) \mathbf{H}(t_i) + \theta \mathbf{H}(t_{i+1}) \}, \\ \mathbf{q}_{i+1}^\# = \mathbf{q}_i^\# + h_i \{ (1 - \theta) \dot{\mathbf{q}}_i^\# + \theta \dot{\mathbf{q}}_{i+1}^\# \}, \\ \bar{\mathbf{d}}_{i+1} = \bar{\mathbf{d}}_i + h_i \{ (1 - \theta) \dot{\bar{\mathbf{d}}}_i + \theta \dot{\bar{\mathbf{d}}}_{i+1} \}, \end{cases} \quad (5.1.6)$$

¹les vitesses discontinues sont considérées appartenir à l'ensemble des fonctions bornées continues à droite

où les indices i et $i + 1$ représentent respectivement les valeurs des variables aux temps t_i et t_{i+1} . L'impulsion moyenne $h_i \mathbf{r}_{i+1}$ est conservée comme variable principale :

$$\int_{]t_i, t_{i+1}] } \mathbf{r} d\nu = h_i \mathbf{r}_{i+1}. \quad (5.1.7)$$

En utilisant la notation $\mathbf{F}_i := \mathbf{F}(\mathbf{q}_i, \dot{\mathbf{q}}_i, \bar{\mathbf{d}}_i, \dot{\bar{\mathbf{d}}}_i, t_i)$, le schéma numérique s'écrit :

$$\mathbf{M}(\mathbf{q}_{i+1}^\#, t_{i+1}) \cdot (\dot{\mathbf{q}}_{i+1}^\# - \dot{\mathbf{q}}_i^\#) + \mathbf{N}(\mathbf{q}_{i+1}^\#, t_{i+1}) \cdot (\dot{\bar{\mathbf{d}}}_{i+1} - \dot{\bar{\mathbf{d}}}_i) = h_i \{(1 - \theta) \mathbf{F}_i + \theta \mathbf{F}_{i+1}\} + h_i \mathbf{r}_{i+1}, \quad (5.1.8a)$$

$$h_i \{(1 - \theta) \mathbf{G}_i + \theta \mathbf{G}_{i+1}\} = h_i \{(1 - \theta) \mathbf{H}_i + \theta \mathbf{H}_{i+1}\}, \quad (5.1.8b)$$

et

$$\mathbf{q}_{i+1}^\# = \mathbf{q}_i^\# + h_i \{(1 - \theta) \dot{\mathbf{q}}_i^\# + \theta \dot{\mathbf{q}}_{i+1}^\#\}, \quad (5.1.9a)$$

$$\bar{\mathbf{d}}_{i+1} = \bar{\mathbf{d}}_i + h_i \{(1 - \theta) \dot{\bar{\mathbf{d}}}_i + \theta \dot{\bar{\mathbf{d}}}_{i+1}\}. \quad (5.1.9b)$$

Les inconnues du problème sont les approximations de la vitesse périodique $\dot{\mathbf{q}}_{i+1}^\#$, la dérivée temporelle de la moyenne du gradient de la transformation $\dot{\bar{\mathbf{d}}}_{i+1}$ et l'impulsion $h_i \mathbf{r}_{i+1}$. Les déplacements $\mathbf{q}_{i+1}^\#$ et la moyenne du gradient de la transformation $\bar{\mathbf{d}}_{i+1}$ seront considérés comme des variables secondaires.

5.1.3 Intégration des non linéarités

La résolution du problème non linéaire est réalisée par un algorithme de Newton-Raphson. Les équations (5.1.8) sont ainsi reformulées sous forme de résidus dont les racines sont solutions du problème. Soient les résidus suivants :

$$\begin{cases} \mathcal{F}(\dot{\mathbf{q}}_{i+1}^\#, \dot{\bar{\mathbf{d}}}_{i+1}, \mathbf{r}_{i+1}) := \mathbf{M}(\mathbf{q}_{i+1}^\#, t_{i+1}) \cdot (\dot{\mathbf{q}}_{i+1}^\# - \dot{\mathbf{q}}_i^\#) \\ \quad + \mathbf{N}(\mathbf{q}_{i+1}^\#, t_{i+1}) \cdot (\dot{\bar{\mathbf{d}}}_{i+1} - \dot{\bar{\mathbf{d}}}_i) - h_i \{(1 - \theta) \mathbf{F}_i + \theta \mathbf{F}_{i+1}\} - h_i \mathbf{r}_{i+1}, \\ \mathcal{G}(\dot{\mathbf{q}}_{i+1}^\#, \dot{\bar{\mathbf{d}}}_{i+1}) := h_i \{(1 - \theta) \mathbf{G}_i + \theta \mathbf{G}_{i+1}\} - h_i \{(1 - \theta) \mathbf{H}_i + \theta \mathbf{H}_{i+1}\}. \end{cases} \quad (5.1.10)$$

La vitesse périodique $\dot{\mathbf{q}}_{i+1}^\#$, la dérivée temporelle de la moyenne du gradient de la transformation $\dot{\bar{\mathbf{d}}}_{i+1}$ et l'impulsion $h_i \mathbf{r}_{i+1}$ sont solutions du système non-linéaire :

$$\begin{cases} \mathcal{F}(\dot{\mathbf{q}}_{i+1}^\#, \dot{\bar{\mathbf{d}}}_{i+1}, \mathbf{r}_{i+1}) = 0, \\ \mathcal{G}(\dot{\mathbf{q}}_{i+1}^\#, \dot{\bar{\mathbf{d}}}_{i+1}) = 0. \end{cases} \quad (5.1.11)$$

L'application de l'algorithme de Newton-Raphson nous amène à résoudre, à l'itération $k + 1$, le système linéaire suivant :

$$\mathbf{J}((\dot{\mathbf{q}}_{i+1}^\#)^k, \dot{\mathbf{d}}_{i+1}^k, \mathbf{r}_{i+1}^k) \cdot \begin{Bmatrix} (\dot{\mathbf{q}}_{i+1}^\#)^{k+1} - (\dot{\mathbf{q}}_{i+1}^\#)^k \\ \dot{\mathbf{d}}_{i+1}^{k+1} - \dot{\mathbf{d}}_{i+1}^k \\ \mathbf{r}_{i+1}^{k+1} - \mathbf{r}_{i+1}^k \end{Bmatrix} = - \begin{Bmatrix} \mathcal{F}((\dot{\mathbf{q}}_{i+1}^\#)^k, \dot{\mathbf{d}}_{i+1}^k, \mathbf{r}_{i+1}^k) \\ \mathcal{G}((\dot{\mathbf{q}}_{i+1}^\#)^k, \dot{\mathbf{d}}_{i+1}^k) \end{Bmatrix}, \quad (5.1.12)$$

où, en adoptant les notations $\mathcal{F} := \mathcal{F}(\dot{\mathbf{q}}^\#, \dot{\mathbf{d}}, \mathbf{r})$ et $\mathcal{G} := \mathcal{G}(\dot{\mathbf{q}}^\#, \dot{\mathbf{d}}, \mathbf{r})$, la Jacobienne \mathbf{J} est définie par :

$$\mathbf{J}((\dot{\mathbf{q}}_{i+1}^\#)^k, \dot{\mathbf{d}}_{i+1}^k, \mathbf{r}_{i+1}^k) = \begin{Bmatrix} \left. \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \dot{\mathbf{q}}^\#} \right|_{(\dot{\mathbf{q}}_{i+1}^\#)^k} + \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathbf{q}^\#} \frac{\partial \mathbf{q}^\#}{\partial \dot{\mathbf{q}}^\#} \Big|_{(\dot{\mathbf{q}}_{i+1}^\#)^k}, \left. \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \dot{\mathbf{d}}} \right|_{\dot{\mathbf{d}}_{i+1}^k} + \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \bar{\mathbf{d}}} \frac{\partial \bar{\mathbf{d}}}{\partial \dot{\mathbf{d}}} \Big|_{\dot{\mathbf{d}}_{i+1}^k}, \left. \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathbf{r}} \right|_{\mathbf{r}_{i+1}^k} \\ \left. \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \dot{\mathbf{q}}^\#} \right|_{(\dot{\mathbf{q}}_{i+1}^\#)^k} + \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \mathbf{q}^\#} \frac{\partial \mathbf{q}^\#}{\partial \dot{\mathbf{q}}^\#} \Big|_{(\dot{\mathbf{q}}_{i+1}^\#)^k}, \left. \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \dot{\mathbf{d}}} \right|_{\dot{\mathbf{d}}_{i+1}^k} + \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \bar{\mathbf{d}}} \frac{\partial \bar{\mathbf{d}}}{\partial \dot{\mathbf{d}}} \Big|_{\dot{\mathbf{d}}_{i+1}^k}, \left. \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \mathbf{r}} \right|_{\mathbf{r}_{i+1}^k} \end{Bmatrix}. \quad (5.1.13)$$

La dérivation des équations (5.1.9) entraîne :

$$\frac{\partial \mathbf{q}^\#}{\partial \dot{\mathbf{q}}^\#} = h_i \quad \text{et} \quad \frac{\partial \bar{\mathbf{d}}}{\partial \dot{\mathbf{d}}} = h_i, \quad (5.1.14)$$

d'où, en notant $\mathbf{F} := \mathbf{F}(\mathbf{q}^\#, \dot{\mathbf{q}}^\#, \bar{\mathbf{d}}, \dot{\mathbf{d}}, t)$ et $\mathbf{G} := \mathbf{G}(\mathbf{q}^\#, \dot{\mathbf{q}}^\#, \bar{\mathbf{d}}, \dot{\mathbf{d}}, t)$ et en utilisant l'hypothèse de la variation lente de $\mathbf{M}(\mathbf{q}^\#, t)$ et de $\mathbf{N}(\mathbf{q}^\#, t)$ avec $\mathbf{q}^\#$:

$$\begin{cases} \left. \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \dot{\mathbf{q}}^\#} \right|_{(\dot{\mathbf{q}}_{i+1}^\#)^k} + \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathbf{q}^\#} \frac{\partial \mathbf{q}^\#}{\partial \dot{\mathbf{q}}^\#} \Big|_{(\dot{\mathbf{q}}_{i+1}^\#)^k} &= \mathbf{M}(\mathbf{q}_{i+1}^\#, t_{i+1}) - h_i \theta \left. \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \dot{\mathbf{q}}^\#} \right|_{(\dot{\mathbf{q}}_{i+1}^\#)^k} - h_i^2 \theta^2 \left. \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{q}^\#} \right|_{(\mathbf{q}_{i+1}^\#)^k}, \\ \left. \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \dot{\mathbf{d}}} \right|_{\dot{\mathbf{d}}_{i+1}^k} + \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \bar{\mathbf{d}}} \frac{\partial \bar{\mathbf{d}}}{\partial \dot{\mathbf{d}}} \Big|_{\dot{\mathbf{d}}_{i+1}^k} &= \mathbf{N}(\mathbf{q}_{i+1}^\#, t_{i+1}) - h_i \theta \left. \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \dot{\mathbf{d}}} \right|_{\dot{\mathbf{d}}_{i+1}^k} - h_i^2 \theta^2 \left. \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \bar{\mathbf{d}}} \right|_{\bar{\mathbf{d}}_{i+1}^k}, \\ \left. \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathbf{r}} \right|_{\mathbf{r}_{i+1}^k} &= -h_i, \end{cases} \quad (5.1.15)$$

et

$$\begin{cases} \left. \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \dot{\mathbf{q}}^\#} \right|_{(\dot{\mathbf{q}}_{i+1}^\#)^k} + \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \mathbf{q}^\#} \frac{\partial \mathbf{q}^\#}{\partial \dot{\mathbf{q}}^\#} \Big|_{(\dot{\mathbf{q}}_{i+1}^\#)^k} &= -h_i \theta \left. \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \dot{\mathbf{q}}^\#} \right|_{(\dot{\mathbf{q}}_{i+1}^\#)^k} - h_i^2 \theta^2 \left. \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{q}^\#} \right|_{(\mathbf{q}_{i+1}^\#)^k}, \\ \left. \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \dot{\mathbf{d}}} \right|_{\dot{\mathbf{d}}_{i+1}^k} + \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \bar{\mathbf{d}}} \frac{\partial \bar{\mathbf{d}}}{\partial \dot{\mathbf{d}}} \Big|_{\dot{\mathbf{d}}_{i+1}^k} &= -h_i \theta \left. \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \dot{\mathbf{d}}} \right|_{\dot{\mathbf{d}}_{i+1}^k} - h_i^2 \theta^2 \left. \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \bar{\mathbf{d}}} \right|_{\bar{\mathbf{d}}_{i+1}^k}, \\ \left. \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \mathbf{r}} \right|_{\mathbf{r}_{i+1}^k} &= 0. \end{cases} \quad (5.1.16)$$

L'introduction des notations suivantes :

$$\begin{cases} \mathbf{w}_{\mathbf{q}^\# \mathbf{q}^\#}^k = \left(\mathbf{M}^k + h_i \theta \mathbf{C}_F^k + h_i^2 \theta^2 \mathbf{K}_F^k \right)^{-1}, & \mathbf{w}_{\mathbf{q}^\# \dot{\mathbf{d}}}^k = \left(\mathbf{N}^k + h_i \theta \mathbf{L}_F^k + h_i^2 \theta^2 \mathbf{D}_F^k \right)^{-1}, \\ \mathbf{w}_{\dot{\mathbf{d}} \mathbf{q}^\#}^k = \left(h_i \theta \mathbf{C}_G^k + h_i^2 \theta^2 \mathbf{K}_G^k \right)^{-1}, & \mathbf{w}_{\dot{\mathbf{d}} \dot{\mathbf{d}}}^k = \left(h_i \theta \mathbf{L}_G^k + h_i^2 \theta^2 \mathbf{D}_G^k \right)^{-1}, \end{cases} \quad (5.1.17)$$

avec :

$$\begin{cases} \mathbf{M}^k = \mathbf{M}((\mathbf{q}_{i+1}^\#)^k, t_{i+1}), & \mathbf{N}^k = \mathbf{N}((\mathbf{q}_{i+1}^\#)^k, t_{i+1}), \\ \mathbf{K}_F^k = - \left. \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{q}^\#} \right|_{(\mathbf{q}_{i+1}^\#)^k}, & \mathbf{K}_G^k = - \left. \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{q}^\#} \right|_{(\mathbf{q}_{i+1}^\#)^k}, \\ \mathbf{C}_F^k = - \left. \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \dot{\mathbf{q}}^\#} \right|_{(\dot{\mathbf{q}}_{i+1}^\#)^k}, & \text{et } \mathbf{C}_G^k = - \left. \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \dot{\mathbf{q}}^\#} \right|_{(\dot{\mathbf{q}}_{i+1}^\#)^k}, \\ \mathbf{D}_F^k = - \left. \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \dot{\mathbf{d}}} \right|_{\dot{\mathbf{d}}_{i+1}^k}, & \mathbf{D}_G^k = - \left. \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \dot{\mathbf{d}}} \right|_{\dot{\mathbf{d}}_{i+1}^k}, \\ \mathbf{L}_F^k = - \left. \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \dot{\mathbf{d}}} \right|_{\dot{\mathbf{d}}_{i+1}^k}, & \mathbf{L}_G^k = - \left. \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \dot{\mathbf{d}}} \right|_{\dot{\mathbf{d}}_{i+1}^k}, \end{cases} \quad (5.1.18)$$

entraîne l'écriture de la Jacobienne :

$$\mathbf{J}((\dot{\mathbf{q}}_{i+1}^\#)^k, \dot{\mathbf{d}}_{i+1}^k, \mathbf{r}_{i+1}^k) = \begin{Bmatrix} \left(\mathbf{w}_{\mathbf{q}^\# \mathbf{q}^\#}^k \right)^{-1}, & \left(\mathbf{w}_{\mathbf{q}^\# \dot{\mathbf{d}}}^k \right)^{-1}, & -h_i \\ \left(\mathbf{w}_{\dot{\mathbf{d}} \mathbf{q}^\#}^k \right)^{-1}, & \left(\mathbf{w}_{\dot{\mathbf{d}} \dot{\mathbf{d}}}^k \right)^{-1}, & 0 \end{Bmatrix}. \quad (5.1.19)$$

Le système linéaire (5.1.12) peut donc se réécrire :

$$\begin{cases} \left(\mathbf{w}_{\mathbf{q}^\# \mathbf{q}^\#}^k \right)^{-1} \cdot \left((\dot{\mathbf{q}}_{i+1}^\#)^{k+1} - (\dot{\mathbf{q}}_{i+1}^\#)^k \right) + \left(\mathbf{w}_{\mathbf{q}^\# \dot{\mathbf{d}}}^k \right)^{-1} \cdot \left(\dot{\mathbf{d}}_{i+1}^{k+1} - \dot{\mathbf{d}}_{i+1}^k \right) - h_i \left(\mathbf{r}_{i+1}^{k+1} - \mathbf{r}_{i+1}^k \right) \\ \quad = -\mathbf{M}(\mathbf{q}_{i+1}^\#, t_{i+1}) \cdot ((\dot{\mathbf{q}}_{i+1}^\#)^k) - \dot{\mathbf{q}}_i^\# - \mathbf{N}(\mathbf{q}_{i+1}^\#, t_{i+1}) \cdot (\dot{\mathbf{d}}_{i+1}^k - \dot{\mathbf{d}}_i) \\ \quad \quad + h_i \{ (1 - \theta) \mathbf{F}_i + \theta \mathbf{F}_{i+1}^k \} + h_i \mathbf{r}_{i+1}^k, \\ \left(\mathbf{w}_{\dot{\mathbf{d}} \mathbf{q}^\#}^k \right)^{-1} \cdot \left((\dot{\mathbf{q}}_{i+1}^\#)^{k+1} - (\dot{\mathbf{q}}_{i+1}^\#)^k \right) + \left(\mathbf{w}_{\dot{\mathbf{d}} \dot{\mathbf{d}}}^k \right)^{-1} \cdot \left(\dot{\mathbf{d}}_{i+1}^{k+1} - \dot{\mathbf{d}}_{i+1}^k \right) \\ \quad = -h_i \{ (1 - \theta) \mathbf{G}_i + \theta \mathbf{G}_{i+1} \} + h_i \{ (1 - \theta) \mathbf{H}_i + \theta \mathbf{H}_{i+1} \}. \end{cases} \quad (5.1.20)$$

En simplifiant la première équation par $h_i \mathbf{r}_{i+1}^k$ et en notant $\dot{\mathbf{q}}_{lib}^\#$ et $\dot{\mathbf{d}}_{lib}$ respectivement les valeurs de la vitesse périodique et de la dérivée de la moyenne du gradient de la transformation lorsque $\mathbf{r}_{i+1}^{k+1} = 0$, le système se réécrit sous la forme :

$$\begin{pmatrix} \left(\mathbf{w}_{\mathbf{q}^\# \mathbf{q}^\#}^k \right)^{-1} & \left(\mathbf{w}_{\mathbf{q}^\# \dot{\mathbf{d}}}^k \right)^{-1} \\ \left(\mathbf{w}_{\dot{\mathbf{d}} \mathbf{q}^\#}^k \right)^{-1} & \left(\mathbf{w}_{\dot{\mathbf{d}} \dot{\mathbf{d}}}^k \right)^{-1} \end{pmatrix} \cdot \begin{Bmatrix} (\dot{\mathbf{q}}_{i+1}^\#)^{k+1} - (\dot{\mathbf{q}}_{lib}^\#)^{k+1} \\ \dot{\mathbf{d}}_{i+1}^{k+1} - \dot{\mathbf{d}}_{lib}^{k+1} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} h_i \mathbf{r}_{i+1}^{k+1} \\ 0 \end{Bmatrix}, \quad (5.1.21)$$

où le couple vitesse libre périodique et dérivée du gradient de la transformation homogène libre $(\dot{\mathbf{q}}_{lib}^\#, \dot{\mathbf{d}}_{lib})$ est solution² de :

$$\begin{aligned}
 & \begin{pmatrix} \left(\mathbf{w}_{\mathbf{q}^\# \mathbf{q}^\#}^k \right)^{-1} & \left(\mathbf{w}_{\mathbf{q}^\# \dot{\mathbf{d}}}^k \right)^{-1} \\ \left(\mathbf{w}_{\dot{\mathbf{d}} \mathbf{q}^\#}^k \right)^{-1} & \left(\mathbf{w}_{\dot{\mathbf{d}} \dot{\mathbf{d}}}^k \right)^{-1} \end{pmatrix} \cdot \begin{Bmatrix} (\dot{\mathbf{q}}_{lib}^\#)^{k+1} - (\dot{\mathbf{q}}_{i+1}^\#)^k \\ \dot{\mathbf{d}}_{lib}^{k+1} - \dot{\mathbf{d}}_{i+1}^k \end{Bmatrix} \\
 &= \begin{Bmatrix} -\mathbf{M}(\mathbf{q}_{i+1}^\#, t_{i+1}) \cdot ((\dot{\mathbf{q}}_{i+1}^\#)^k) - \dot{\mathbf{q}}_i^\# - \mathbf{N}(\mathbf{q}_{i+1}^\#, t_{i+1}) \cdot (\dot{\mathbf{d}}_{i+1}^k - \dot{\mathbf{d}}_i) + h_i \{ (1-\theta) \mathbf{F}_i + \theta \mathbf{F}_{i+1}^k \} \\ -h_i \{ (1-\theta) \mathbf{G}_i + \theta \mathbf{G}_{i+1} \} + h_i \{ (1-\theta) \mathbf{H}_i + \theta \mathbf{H}_{i+1} \} \end{Bmatrix}. \tag{5.1.22}
 \end{aligned}$$

Remarque 5.1. Dans notre démarche, par soucis de simplicité et parce que le déroulement de l'algorithme numérique reste inchangé, nous avons volontairement omis que :

- $h_i \mathbf{r}_{i+1}$ (résultante nodale des impulsions de contact) n'est pas la variable appropriée au problème. Il aurait fallu utiliser l'impulsion de contact $h_i \mathbf{R}_{i+1}$ (§ 5.2.1),
- la relation (5.2.2) : $\mathbf{r} = H^\alpha(\mathbf{q}) \mathbf{R}^\alpha$ ajoute un certain nombre de termes "supplémentaires" dans l'opérateur tangent. Toutefois ceux-ci disparaissent dans le cas de surfaces en contact planes (courbure nulle),
- le caractère multi-valué des lois de contact nécessite d'utiliser un algorithme de Newton adapté. Pour plus de détails, nous renvoyons aux travaux de Alart et Curnier (1988), Dubois (1994) et Vola (1998).

5.1.4 Changement de variables

Les inconnues du problème sont la vitesse périodique discrète $\dot{\mathbf{q}}^\#$ et la dérivée temporelle du gradient de la transformation homogène discrète $\dot{\mathbf{d}}$.

Un changement de variable, équivalent discret formulé en vitesse de l'Eq. (4.2.6), permet de se ramener à la vitesse discrète $\dot{\mathbf{q}}$ à partir du couple $(\dot{\mathbf{q}}^\#, \dot{\mathbf{d}})$:

$$\dot{\mathbf{q}} = P^{-1} \begin{Bmatrix} \dot{\mathbf{q}}^\# \\ \dot{\mathbf{d}} \end{Bmatrix}, \tag{5.1.23}$$

où P est une application telle que :

$$\begin{cases} P : \mathbb{R}^{N_u^{dof}} \longrightarrow \mathbb{R}^{N_u^{dof} + N_F^{dof}} \\ \dot{\mathbf{q}} \longmapsto \begin{Bmatrix} \dot{\mathbf{q}}^\# \\ \dot{\mathbf{d}} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \dot{\mathbf{q}} - \mathbf{Rel} \langle \nabla \dot{\mathbf{q}} \rangle_d \cdot \mathbf{X}_d \\ \langle \nabla \dot{\mathbf{q}} \rangle_d \end{Bmatrix} \end{cases}, \tag{5.1.24}$$

²le couple vitesse périodique libre et gradient de la transformation homogène libre est donc la solution du système linéaire sans la prise en compte des conditions unilatérales.

avec $\mathbf{Rel} \in \mathbb{R}^{N_u^{dof}} \times \mathbb{R}^m$ une matrice de relèvement, \mathbf{X}_d le vecteur position discrétisé et $\langle \cdot \rangle_d : \mathbb{R}^{N_u^{dof}} \times \mathbb{R}^m \longrightarrow \mathbb{R}^{N_F^{dof}}$ l'application moyenne sur le domaine Ω_0 agissant sur des valeurs discrètes.

A l'itération $k+1$, les vitesses discrète et libre s'écrivent :

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{q}}_{i+1}^{k+1} = P^{-1} \begin{Bmatrix} \dot{\mathbf{q}}_{i+1}^{k+1} \\ \dot{\mathbf{d}}_{i+1}^{k+1} \end{Bmatrix}, \\ \dot{\mathbf{q}}_{lib}^{k+1} = P^{-1} \begin{Bmatrix} \left(\dot{\mathbf{q}}_{lib}^\# \right)^{k+1} \\ \dot{\mathbf{d}}_{lib}^{k+1} \end{Bmatrix}. \end{cases} \quad (5.1.25)$$

Le principe d'action et de réaction entre les noeuds du maillage implique en particulier que :

$$\langle \nabla \mathbf{r} \rangle_d = 0. \quad (5.1.26)$$

Compte tenu de cette relation, l'application P agit sur les réactions \mathbf{r} de la façon suivante :

$$P \mathbf{r} = \begin{Bmatrix} \mathbf{r} \\ 0 \end{Bmatrix}. \quad (5.1.27)$$

Appliquons le changement de variable à la matrice des itérations du système (5.1.22) :

$$(\mathbf{w}^k)^{-1} := P^{-1} \begin{pmatrix} \left(\mathbf{w}_{\mathbf{q}^\# \mathbf{q}^\#}^k \right)^{-1} & \left(\mathbf{w}_{\mathbf{q}^\# \dot{\mathbf{d}}}^k \right)^{-1} \\ \left(\mathbf{w}_{\dot{\mathbf{d}} \mathbf{q}^\#}^k \right)^{-1} & \left(\mathbf{w}_{\dot{\mathbf{d}} \dot{\mathbf{d}}}^k \right)^{-1} \end{pmatrix} P. \quad (5.1.28)$$

5.2 Relations entre les variables globales et locales

La résolution est effectuée à deux échelles, globale et locale. A l'échelle locale, c'est-à-dire celle du contact, est résolu un système composé de la condensation de l'équation de la dynamique et de relations unilatérales.

5.2.1 Condensation des variables aux contacts

La vitesse relative locale $\dot{\mathbf{U}}$, à la liaison, appelée contact, α , est reliée à la vitesse globale $\dot{\mathbf{q}}$ de la manière suivante :

$$\dot{\mathbf{U}}^\alpha = H^{\star\alpha}(\mathbf{q})\dot{\mathbf{q}}. \quad (5.2.1)$$

L'opérateur H^\star est une application linéaire dépendant du déplacement \mathbf{q} et du temps t .

Des considérations concernant la puissance mise en jeu dans la liaison permettent, par dualité, d'exprimer une relation entre les réactions relatives locales \mathbf{R} au contact, α et les réactions globales \mathbf{r} :

$$\mathbf{r} = H^\alpha(\mathbf{q})\mathbf{R}^\alpha, \quad (5.2.2)$$

où H est une application linéaire duale de H^\star ($H^\star = H^T$).

5.2.2 Condensation de la matrice des itérations aux contacts

Le choix est fait de ne pas construire explicitement la condensée aux contacts de la matrice des itérations, trop coûteuse d'un point de vue numérique (inversion complète de matrice). Une méthode de calcul terme à terme est adoptée. Elle conduit à l'écriture locale, au contact α , de l'équation (5.1.21). En notant $\tilde{\mathbf{q}}$ une évolution intermédiaire de \mathbf{q} (Jean, 1999), on pose pour un contact α :

$$\begin{cases} (\mathbf{W}^{\alpha\gamma})^k = H^{*\alpha}(\tilde{\mathbf{q}})\mathbf{w}^k H^\gamma(\tilde{\mathbf{q}}), \\ (\dot{\mathbf{U}}_{lib}^\alpha)^{k+1} = H^{*\alpha}(\tilde{\mathbf{q}})\dot{\mathbf{q}}_{lib}^{k+1}. \end{cases} \quad (5.2.3)$$

Ainsi, l'écriture locale de l'équation de la dynamique discrétisée et linéarisée³ s'écrit :

$$(\dot{\mathbf{U}}^\alpha)_{i+1}^{k+1} = (\dot{\mathbf{U}}_{lib}^\alpha)^{k+1} + \sum_{\gamma=1}^{\chi} h_i(\mathbf{W}^{\alpha\gamma})^k \cdot (\mathbf{R}^\gamma)_{i+1}^{k+1}, \quad (5.2.4)$$

où χ est le nombre de contacts.

La vitesse locale en un point de contact est donc estimée à partir de la somme de la vitesse libre et des contributions des réactions de tous les points de contact.

5.3 Résolution à l'échelle du contact

5.3.1 Résolution du problème de contact frottant

La résolution locale est effectuée par une méthode dite de Gauss-Seidel par blocs⁴. Cette méthode consiste à calculer la solution du problème de contact frottant pour chaque contact α en supposant les valeurs des autres contacts connues. La résolution complète du problème se fera en balayant la liste des contacts jusqu'à convergence.

Soit α le contact où les réactions sont inconnues. Les valeurs des réactions aux autres contacts $\gamma \neq \alpha$ étant fixés, on peut réécrire l'Eq. (5.2.4) :

$$(\dot{\mathbf{U}}^\alpha)_{i+1}^{k+1} = (\dot{\mathbf{U}}_{lib}^\alpha)^{k+1} + \sum_{\substack{\gamma=1 \\ \gamma \neq \alpha}}^{\chi} (\mathbf{W}^{\alpha\gamma})^k \cdot h_i(\mathbf{R}^\gamma)_{i+1}^{k+1} + (\mathbf{W}^{\alpha\alpha})^k \cdot h_i(\mathbf{R}^\alpha)_{i+1}^{k+1}. \quad (5.3.1)$$

En notant :

$$(\dot{\mathbf{U}}_{libloc}^\alpha)^{k+1} := (\dot{\mathbf{U}}_{lib}^\alpha)^{k+1} + \sum_{\substack{\gamma=1 \\ \gamma \neq \alpha}}^{\chi} (\mathbf{W}^{\alpha\gamma})^k \cdot h_i(\mathbf{R}^\gamma)_{i+1}^{k+1}, \quad (5.3.2)$$

on obtient la vitesse locale suivante :

$$(\dot{\mathbf{U}}^\alpha)_{i+1}^{k+1} = (\dot{\mathbf{U}}_{libloc}^\alpha)^{k+1} + (\mathbf{W}^{\alpha\alpha})^k \cdot h_i(\mathbf{R}^\alpha)_{i+1}^{k+1}. \quad (5.3.3)$$

La vitesse locale s'exprime donc comme une fonction linéaire de la réaction locale.

³le terme linéarisé est à comprendre par pas de Newton

⁴le nom vient de la similitude entre l'algorithme utilisé ici et l'algorithme classique de Gauss-Seidel

Le problème local de contact frottant, pour un contact α , peut s'écrire sous la forme :

$$\begin{cases} (\dot{\mathbf{U}}^\alpha)_{i+1}^{k+1} = (\dot{\mathbf{U}}_{libloc}^\alpha)^{k+1} + (\mathbf{W}^{\alpha\alpha})^k \cdot h_i(\mathbf{R}^\alpha)_{i+1}^{k+1}, \\ (U_N^\alpha, R_N^\alpha) \in \text{GR-Signorini}, \\ (\dot{\mathbf{U}}_T^\alpha, \mathbf{r}_T^\alpha) \in \text{GR-Coulomb}(\mu_{\text{frot}} \dot{U}_N^\alpha). \end{cases} \quad (5.3.4)$$

En deux dimensions, la résolution de (5.3.4) s'appuie sur l'intersection des graphes affines.

En trois dimensions, réécrivons le problème sous la forme :

$$\begin{cases} (\dot{\mathbf{U}}^\alpha)_{i+1}^{k+1} - (\dot{\mathbf{U}}_{libloc}^\alpha)^{k+1} - (\mathbf{W}^{\alpha\alpha})^k \cdot h_i(\mathbf{R}^\alpha)_{i+1}^{k+1} = 0, \\ (R_N^\alpha)_{i+1}^{k+1} - \text{proj}_{\mathbb{R}^+}(R_N^\alpha - \rho U_N^\alpha) = 0, \\ (\mathbf{R}_T^\alpha)_{i+1}^{k+1} - \text{proj}_{D(\mu|R_N^\alpha|)}(\mathbf{R}_T^\alpha - \rho \dot{\mathbf{U}}_T^\alpha) = 0, \end{cases} \quad (5.3.5)$$

où $\rho > 0$ et $D(\mu|R_N^\alpha|)$ est la section du cône de Coulomb pour le contact α i.e. le disque centré en 0 et de rayon $\mu|R_N^\alpha|$.

D'où l'existence d'une fonctionnelle non linéaire telle que :

$$\phi((\dot{\mathbf{U}}^\alpha)_{i+1}^{k+1}, (\mathbf{R}^\alpha)_{i+1}^{k+1}) = 0. \quad (5.3.6)$$

Pour chaque contact α , les racines de la fonctionnelle non linéaire (5.3.6) sont calculées par la méthode de Newton généralisée aux fonctions non régulières de Alart et Curnier (1988).

5.3.2 NSCD et CZM

La prise en compte de l'adhérence dans la méthode NSCD est due à Monerie et Acary (2001). Ces auteurs introduisent une force de résistance \mathbf{R}^{adh} par le changement de variables suivant :

$$\tilde{\mathbf{R}} = \mathbf{R} + \mathbf{R}^{adh}. \quad (5.3.7)$$

Pour le modèle de zone cohésive frottante introduit au Chapitre 3, le changement de variable s'écrit :

$$\tilde{\mathbf{R}} = \mathbf{R} + \beta(C_N U_N \mathbf{n} + C_T \mathbf{U}_T). \quad (5.3.8)$$

La réécriture de l'équation de la dynamique condensée (5.3.3) avec adhérence est alors :

$$\begin{aligned} (\dot{\mathbf{U}}^\alpha)_{i+1}^{k+1} &= (\dot{\mathbf{U}}_{libloc}^\alpha)^{k+1} + (\mathbf{W}^{\alpha\alpha})^k \cdot h_i(\mathbf{R}^\alpha)_{i+1}^{k+1} \\ &= (\dot{\mathbf{U}}_{libloc}^\alpha)^{k+1} + (\mathbf{W}^{\alpha\alpha})^k \cdot h_i\left((\tilde{\mathbf{R}}^\alpha)_{i+1}^{k+1} - ((\mathbf{R}^{adh})^\alpha)_{i+1}^{k+1}\right) \\ &= (\tilde{\mathbf{U}}_{libloc}^\alpha)^{k+1} + (\mathbf{W}^{\alpha\alpha})^k \cdot h_i(\tilde{\mathbf{R}}^\alpha)_{i+1}^{k+1}, \end{aligned} \quad (5.3.9)$$

où on note la vitesse libre modifiée par l'adhérence par :

$$(\tilde{\mathbf{U}}_{libloc}^\alpha)^{k+1} := (\dot{\mathbf{U}}_{libloc}^\alpha)^{k+1} - (\mathbf{W}^{\alpha\alpha})^k \cdot h_i((\mathbf{R}^{adh})^\alpha)_{i+1}^{k+1}. \quad (5.3.10)$$

Remarque 5.2. *Le changement de variable dans l'Eq. (5.3.9) ne concerne que le contact courant α . En effet, lors du parcours des contacts dans l'algorithme de Gauss-Seidel, la contribution de la force d'adhérence pour les autres contacts est soit déjà prise en compte pour ce parcours ($\gamma < \alpha$) soit était prise en compte lors du parcours précédent ($\gamma > \alpha$).*

5.4 Algorithme de résolution

5.4.1 Problème standard

La résolution est effectuée à deux échelles (FIG. 5.1) :

- Au niveau global, l'équation de la dynamique discrétisée et linéarisée est résolue. Les variables prises en compte sont les vitesses $\dot{\mathbf{q}}$ et les réactions \mathbf{r} reliées aux valeurs locales par l'opérateur H (Eq. 5.2.2).
- Au niveau local, la résolution des contraintes associées aux contacts est effectuée dans des repères locaux par une méthode de Gauss-Seidel par blocs (§ 5.3.1). Les variables mises en jeux sont les vitesses relatives au contact $\dot{\mathbf{U}}$ et les réactions locales \mathbf{R} reliées aux variables globales par H^* (Eq. 5.2.1).

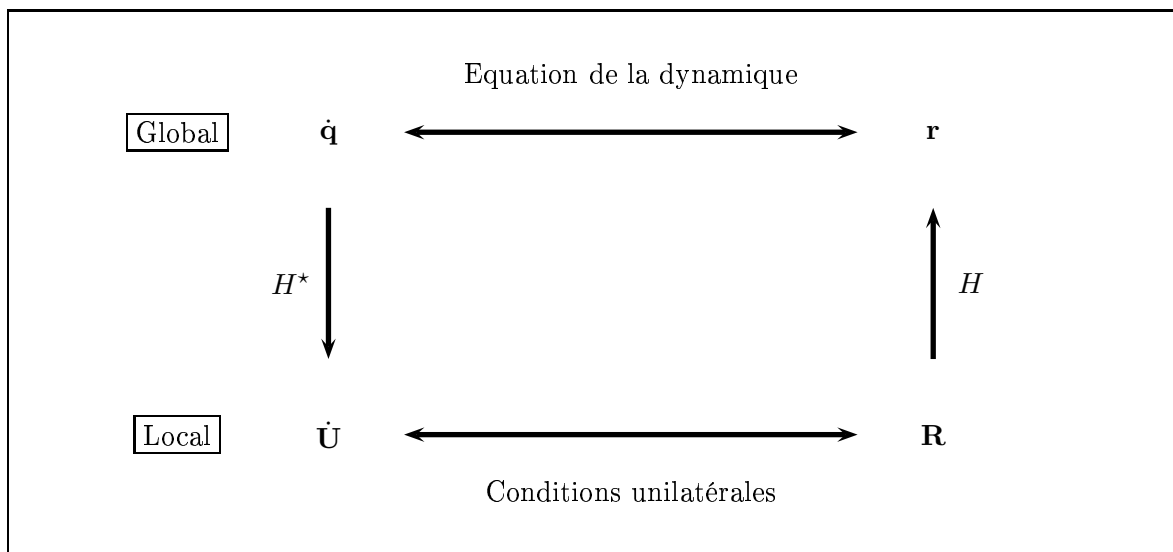


FIG. 5.1 – Schématisation de la méthode NSCD

Une particularité de cet algorithme est la séparation des traitements des non linéarités. Les non linéarités de type matérielles et géométriques sont traitées à une échelle globale, les non linéarités dues aux contacts à une échelle locale. Cela permet d'introduire des phénomènes complexes tant à l'échelle globale (plasticité) qu'à l'échelle des contacts (cohésion, contact, frottement). Des phénomènes différents par point de Gauss (loi volumique) ou par point de contact (loi cohésive) peuvent ainsi être introduits de façon simple.

5.4.2 Problème périodique

Une étape supplémentaire est nécessaire à l'échelle globale (voir FIG. 5.2). Un changement de variable permet de retrouver la vitesse discrète comme inconnue principale (5.1.23).

- Au niveau global, le système d'équation (5.1.22) est résolu. Les inconnues sont la vitesse discrète périodique $\dot{\mathbf{q}}^\#$ et le gradient de la transformation discret homogène $\dot{\mathbf{d}}$.
- Un changement de variable permet de retrouver la vitesse discrète $\dot{\mathbf{q}}$ comme inconnue (5.1.23). Les vitesses $\dot{\mathbf{q}}$ et les réactions \mathbf{r} sont reliées aux variables locales par l'opérateur H (5.2.2).
- A l'échelle locale, la résolution est similaire à celle du problème standard.

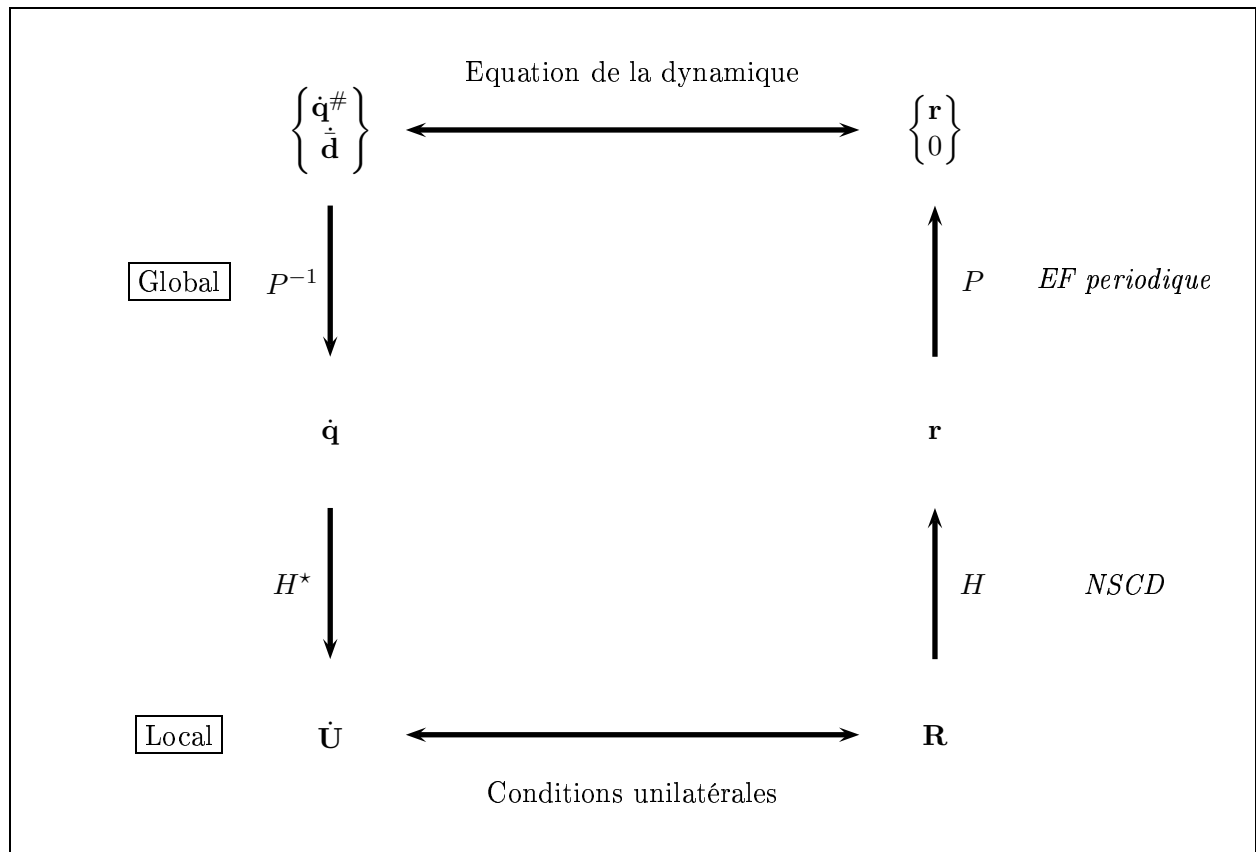


FIG. 5.2 – Schématisation de la méthode NSCD dans le cas périodique

L'algorithme de résolution de la méthode NSCD avec prise en compte des CZM est décrit dans la FIG. 5.3.

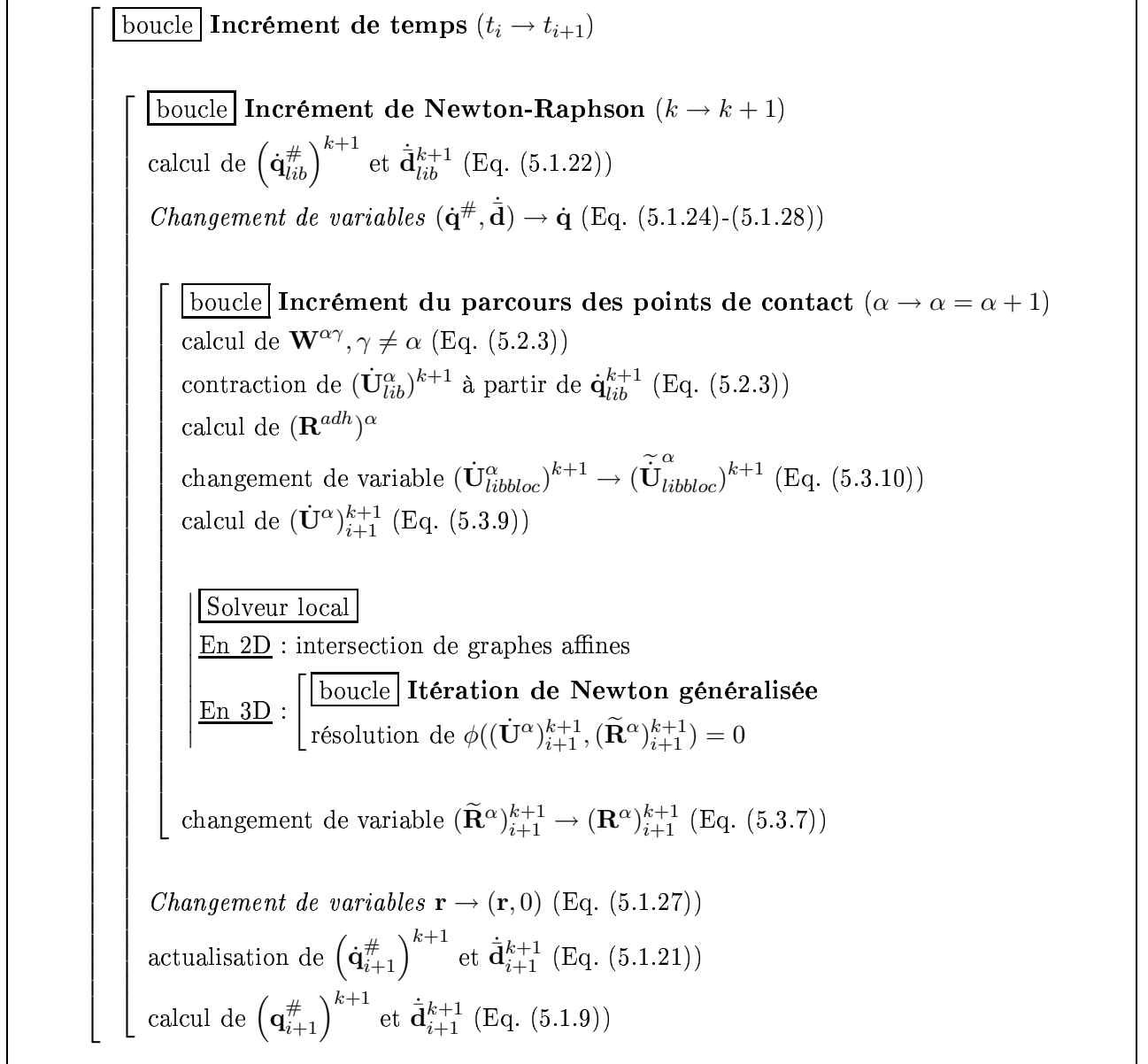


FIG. 5.3 – Algorithme de résolution de la méthode NSCD dans le cas périodique

5.5 Bilan du chapitre

L'approche Non-Smooth Contact Dynamics (NSCD) est adaptée au traitement, sans pénalisation et sans régularisation, des interactions multicorps avec adhésion, frottement et contact unilatéral. Une extension aux problèmes périodiques est proposée.

Une spécificité du problème périodique est la séparation du gradient de la transformation en une partie homogène et une partie fluctuante (Chapitre 4). Cela implique la réécriture du problème discrétisé en espace et en temps sous la forme :

- d'une équation écrite en terme de vitesse périodique,
- d'une équation écrite en terme de dérivée de la moyenne du gradient de la transformation.

Les inconnues du problème deviennent naturellement la vitesse périodique, la dérivée temporelle de la moyenne du gradient de la transformation et l'impulsion. Un changement de variables permet de ramener le problème périodique, composé de trois inconnues, à un problème standard, composé de deux inconnues (vitesse et impulsion). Le problème à l'échelle local peut ainsi être résolu en utilisant, sans modification *ad hoc*, l'algorithme standard local (condensation des variables au contact, résolution du problème de contact frottant).

La gestion de la périodicité est donc traitée exclusivement dans la formulation Eléments Finis du problème.

La mise en œuvre informatique par le couplage de plusieurs bibliothèques est traitée dans le chapitre suivant.

Chapitre 6

Plateforme numérique développée

Sommaire

6.1	Présentation des librairies	117
6.1.1	LMGC90	117
6.1.2	PELICANS	117
6.1.3	MATLIB	118
6.2	Architecture logicielle	118
6.2.1	Description	118
6.2.2	Application PELICANS	119
6.2.3	Interface PELICANS/MATLIB	121
6.2.4	Interface LMGC90/PELICANS	121
6.3	Le logiciel X-per	121
6.3.1	Fonctionnalités	121
6.3.2	Entrées/Sorties	122
6.3.3	Evolution future	123
6.4	Bilan du chapitre	123

La plateforme numérique doit permettre, en grandes déformations, la prise en compte de comportements surfaciques complexes (MZCF) entre plusieurs corps, chaque corps ayant un comportement volumique non linéaire. L'implémentation "from scratch" n'étant pas judicieuse et raisonnable en termes de coûts de programmation, la stratégie utilisée ici est le couplage et l'extension de plusieurs librairies. Cette stratégie permet notamment de bénéficier de la maintenance des librairies tout en développant la plateforme globale. Les librairies retenues ont une signification mécanique claire dans la plateforme :

- LMGC90 est dédiée au traitement de comportements surfaciques,
- PELICANS joue le rôle d'une librairie éléments finis,
- MATLIB concerne les comportements volumiques.

6.1 Présentation des librairies

6.1.1 LMGC90

La librairie LMGC90 ("Logiciel de Mécanique Gérant le Contact") est développée par Dubois au Laboratoire de Mécanique et Génie Civil de Montpellier et Jean au Laboratoire de Mécanique et d'Acoustique de Marseille (Dubois et Jean, 2003). LMGC90 est dédiée à la modélisation et au traitement des problèmes d'interactions entre corps (matériaux granulaires, édifices composés de blocs...). Les interactions peuvent être de nature quelconque, par exemple contact, frottement ou MZC. L'algorithme utilisé s'appuie sur l'approche NSCD qui permet notamment une prise en compte de modèles de zones cohésives en présence de contraintes unilatérales (voir Chapitre 5).

Le langage de programmation est le Fortran90. Bien qu'étant implémentée en langage procédural, l'architecture de la librairie LMGC90 est conçue sous forme de modules avec une approche orientée objet et propose notamment une démarche et des outils adaptés pour accueillir des évolutions sans modifier l'architecture. En particulier, le principe Ouvert-Fermé¹ est respecté (Meyer, 1997).

LMGC90 peut être utilisée sous la forme de modules ou d'un logiciel via un macro langage.

6.1.2 PELICANS

La librairie PELICANS ("Plateforme Evolutive de Librairies de Composants pour l'Analyse Numérique et Statistique") est développée par la Direction de Prévention des Accidents Majeurs de l'Institut de Radioprotection et de Sécurité Nucléaire (Piar et al., 2003). PELICANS est un outil d'implémentation de solveurs numériques de systèmes d'équations aux dérivées partielles (EDPs). Cet outil est composé de classes organisées en librairies, elles-mêmes conceptuellement organisées en couches formant ainsi une interface entre l'application développée et la partie interne de PELICANS. Les classes peuvent être séparées en deux types : les "plug-points" destinées à servir de classe mère pour les classes implémentées et les "fournisseurs de services" destinées à être appelées dans le code.

PELICANS respecte des principes de développement à base de composants logiciels tels que : la Programmation par Contrats, la séparation des commandes et des requêtes, l'héritage (Principe de substitution de Liskov), le nommage et l'autodocumentation (Piar, 2003; Martin, 1996b, 2003; Meyer, 1997).

Le langage de programmation est le C++ (version standardisée ISO/IEC 14882 :1998).

¹les modules sont ouverts pour des extensions mais fermés pour toutes modifications

PELICANS est un framework dédié à la résolution de systèmes d'EDPs en laissant au programmeur le choix des discrétisations, des méthodes numériques et des EDPs à traiter. L'application développée avec PELICANS joue le rôle d'une librairie éléments finis dans la plateforme finale.

6.1.3 MATLIB

La librairie MATLIB ("MATerial LIBrary") est développée par Stainier au Département Aérospatiale, Mécanique et Matériaux de Liège (Belgique) (Stainier et al., 2003). MATLIB est une librairie de modèles constitutifs volumiques pour le calcul non-linéaire des structures. L'implémentation est basée sur un formalisme variationnel de la viscoplasticité incrémentale (Ortiz et Stainier, 1999). Ce formalisme repose sur la combinaison de potentiels conduisant naturellement à une structure orientée objet. L'architecture autorise la création de nouveaux modèles à partir de modèles existants et leurs intégrations dans la librairie.

L'interface, commune à tous les modèles constitutifs, permet d'introduire simplement dans un code de calcul des comportements volumiques complexes indépendants ou couplés.

Le langage de programmation est le C++.

6.2 Architecture logicielle

6.2.1 Description

La plateforme numérique, appelée X-per ("eXtended cohesive zone models and PERiodic homogenization"), s'appuie sur une conception globale orientée objet permettant ainsi une évolution future du logiciel.

Cette conception repose sur le couplage encapsulé de bibliothèques LMGC90>PELICANS>MATLIB (voir FIG. 6.1). La bibliothèque LMGC90 joue ainsi le rôle du programme maître qui gère la discrétisation temporelle et les boucles de Newton. Ce choix a été effectué pour des raisons de coût de programmation. Une implémentation naturelle reposerait sur une application maître indépendante des bibliothèques précédentes. Cependant, la stratégie choisie ne perturbe pas la conception globale de la plateforme.

Le choix du programme maître étant effectué, le rôle mécanique de chaque bibliothèque est clair. Rappelons qu'une stratégie multicorps a été adoptée (§ 2.1). Le comportement est découplé en un comportement volumique décrivant la déformation de chaque corps et un comportement surfacique décrivant l'interaction entre tous les corps.

Le comportement volumique est pris en compte par le couplage de la bibliothèque éléments finis développée à partir de PELICANS et de la bibliothèque de modèles constitutifs MATLIB. Les deux bibliothèques étant développées en C++, le couplage devient naturel, par exemple un objet d'une classe de MATLIB peut être instancié depuis l'application PELICANS. Une interface PELICANS-MATLIB permet de gérer les objets de MATLIB dans PELICANS tout en conservant un découplage des bibliothèques et ainsi de faciliter la maintenance du code.

Le comportement surfacique entre les corps est géré par LMGC90. Le couplage LMGC90 et PELICANS nécessite l'utilisation de techniques de programmation mixte Fortran90/C++. Une interface LMGC90-PELICANS est notamment développée pour la gestion du passage des arguments du langage Fortran90 vers le C++ et inversement.

La stratégie adoptée permet de compiler les bibliothèques séparément puis de rassembler les modules dans la plateforme finale lors de l'édition de liens.

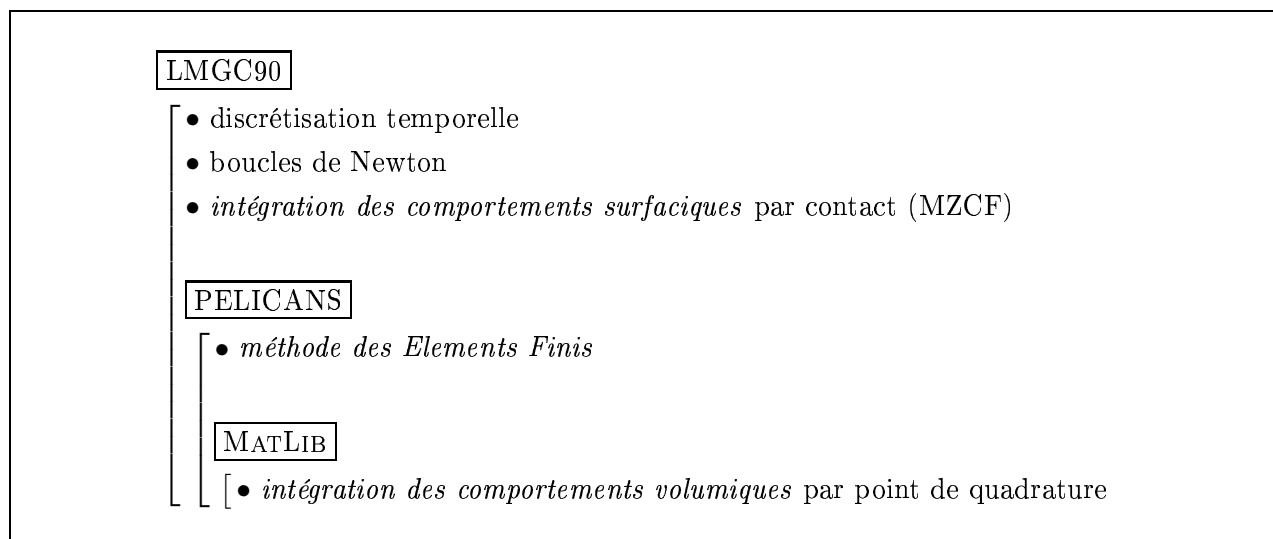


FIG. 6.1 – Architecture encapsulée de la plateforme.

Le détail du couplage est schématisé sur la FIG. 6.2. Dans cette étude, la partie centrale du schéma a été développée. Cette partie regroupe le développement de l'application éléments finis à partir de la librairie PELICANS, cette application contenant les interfaces LMGC90/PELICANS et PELICANS/MATLIB. Des modifications mineures de la librairie LMGC90 ont toutefois été nécessaires avec, en particulier, le développement d'une interface LMGC90/PELICANS dans LMGC90.

6.2.2 Application PELICANS

L'implémentation classique de la méthode des éléments finis (gestion des entrées/sorties, gestion du maillage, etc...) ne sera pas abordée.

Précisons les implémentations spécifiques à la méthode NSCD (au niveau global), les relations introduites par le problème périodique et les échanges avec les librairies LMGC90 et MATLIB. Les grandes étapes de calculs développées dans l'application Elements Finis, pour une itération $k + 1$ de l'algorithme de Newton-Raphson, sont (FIG. 6.2) :

- construction de la matrice des itérations $(\mathbf{w}^k)^{-1}$: les termes élémentaires dans les cas standard et périodique sont donnés en Annexe I. La construction de la matrice des itérations, mettant en jeu les lois de comportement volumique, fait l'objet d'échanges avec la librairie MATLIB,
- calcul de la vitesse libre : construction du second membre (Annexe I) puis résolution du système linéaire,
- *changement de variables : cette étape est effectuée dans le cas de résolution d'un problème périodique. Le changement de variables permet de passer de variables périodiques en variables standards,*
- envoi de la vitesse libre à LMGC90,
- condensation : étape de passage des variables d'une échelle globale à l'échelle du contact. Les opérateurs de condensation sont gérés par LMGC90,
- récupération depuis LMGC90 des impulsions aux noeuds qui vont constituer le second membre du système linéaire,

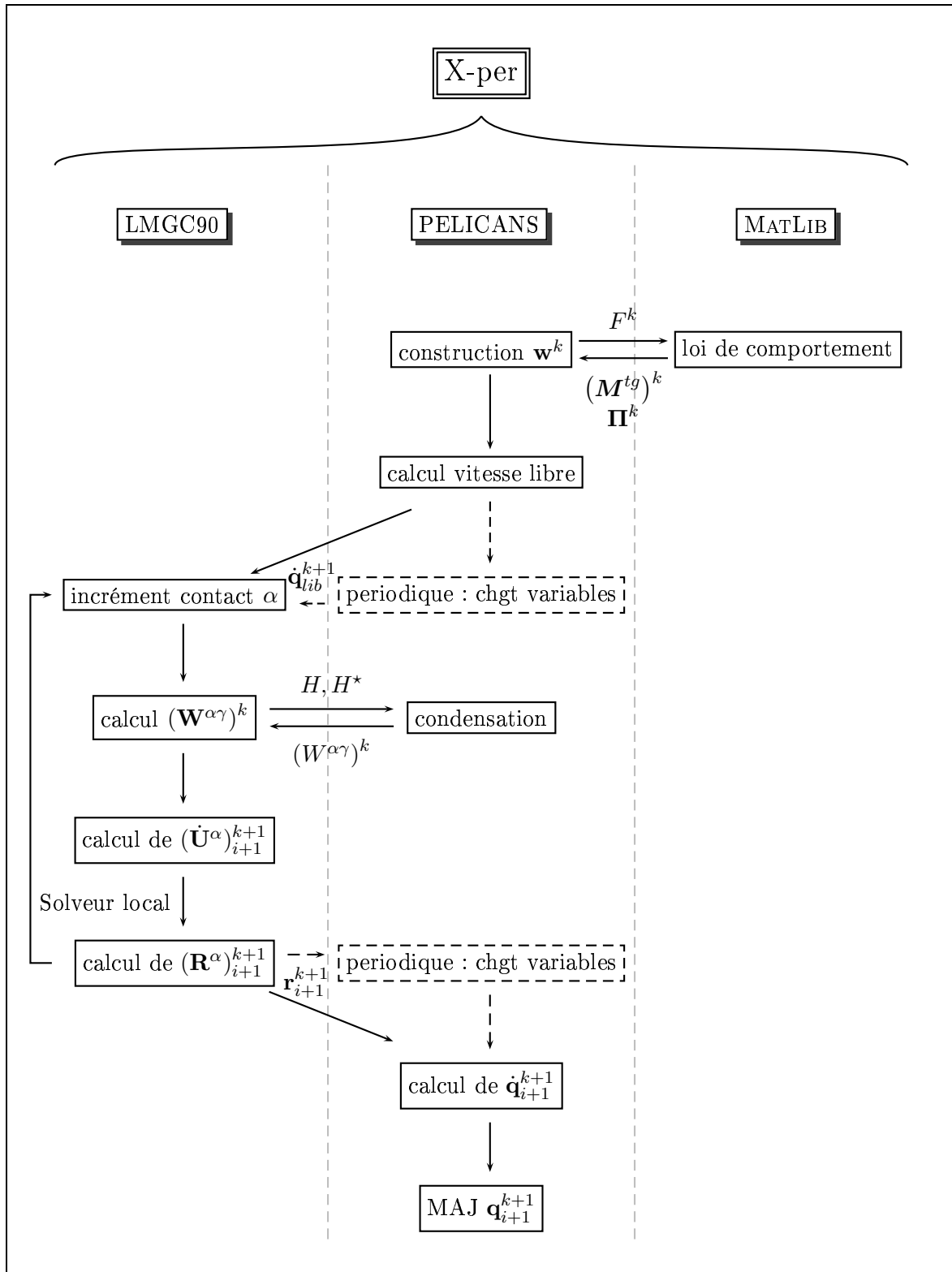


FIG. 6.2 – Schématisation du couplage entre bibliothèques pour une itération de Newton.

- *changement de variables : résolution d'un problème périodique. Le changement de variables*

permet de revenir à des variables périodiques,

- calcul de la vitesse : résolution d'un système linéaire constitué de $(\mathbf{w}^k)^{-1}$ et du second membre composé des impulsions,
- mise à jour des déplacements.

6.2.3 Interface PELICANS/MATLIB

L'interface PELICANS/MATLIB est développée dans l'application PELICANS. L'interface fournit les fonctionnalités suivantes :

- instantiation des objets de classes de MATLIB,
- méthodes permettant l'utilisation des objets MATLIB,
- destruction des objets MATLIB.

6.2.4 Interface LMGC90/PELICANS

Deux interfaces complémentaires, une dans LMGC90 et une dans l'application PELICANS, sont nécessaires pour coupler les bibliothèques LMGC90/PELICANS. Les interfaces offrent les fonctionnalités suivantes :

- initialisation de la bibliothèque PELICANS,
- méthodes permettant le passage d'arguments de LMGC90 vers PELICANS et inversement (les translations d'indices sont notamment gérées dans les interfaces),
- finalisation de la bibliothèque PELICANS.

6.3 Le logiciel X-per

6.3.1 Fonctionnalités

Le logiciel X-per permet une mise en œuvre numérique :

- dynamique,
- en grandes déformations,
- pour des comportements non linéaires,
- pour des structures hétérogènes,
- dans le cadre de la méthode des Elements Finis multicorps périodique,
- d'amorçage et de propagation de multifissures, sans pré-fissures et sans critères d'amorçage *ad hoc*,
- de phénomènes de contact, frottement, dilatance aux interfaces matérielles et sur les lèvres de fissures.

Le logiciel permet notamment de simuler la rupture dynamique des matériaux hétérogènes et à gradients de propriétés, de l'amorçage de multifissures jusqu'à la ruine du matériau.

6.3.2 Entrées/Sorties

La FIG. 6.3 représente les entrées/sorties du logiciel X-per.

En entrée, l'utilisateur doit spécifier :

- les lois de comportements volumiques pour chaque phase (jeu de données MATLIB),
- les lois de comportements surfaciques (jeu de données LMGC90) :
 - pour chaque phase en présence,
 - pour chaque interface entre phases,
- les conditions initiales et aux limites (jeu de données application PELICANS),
- éventuellement, les conditions de périodicité (jeu de données application PELICANS),
- les méthodes numériques : (jeu de données application PELICANS ou LMGC90)
 - maillage (en particulier les éléments),
 - pas de temps (adaptatif),
 - critère d'arrêt de l'algorithme de Newton-Raphson,
 - interpolation,
 - solveurs (directs ou itératifs),
 - solveur local (résolution à l'échelle du contact).

En sortie, le logiciel retourne les champs de déplacements, vitesses, déformation, contrainte et le bilan des énergies mises en jeux.

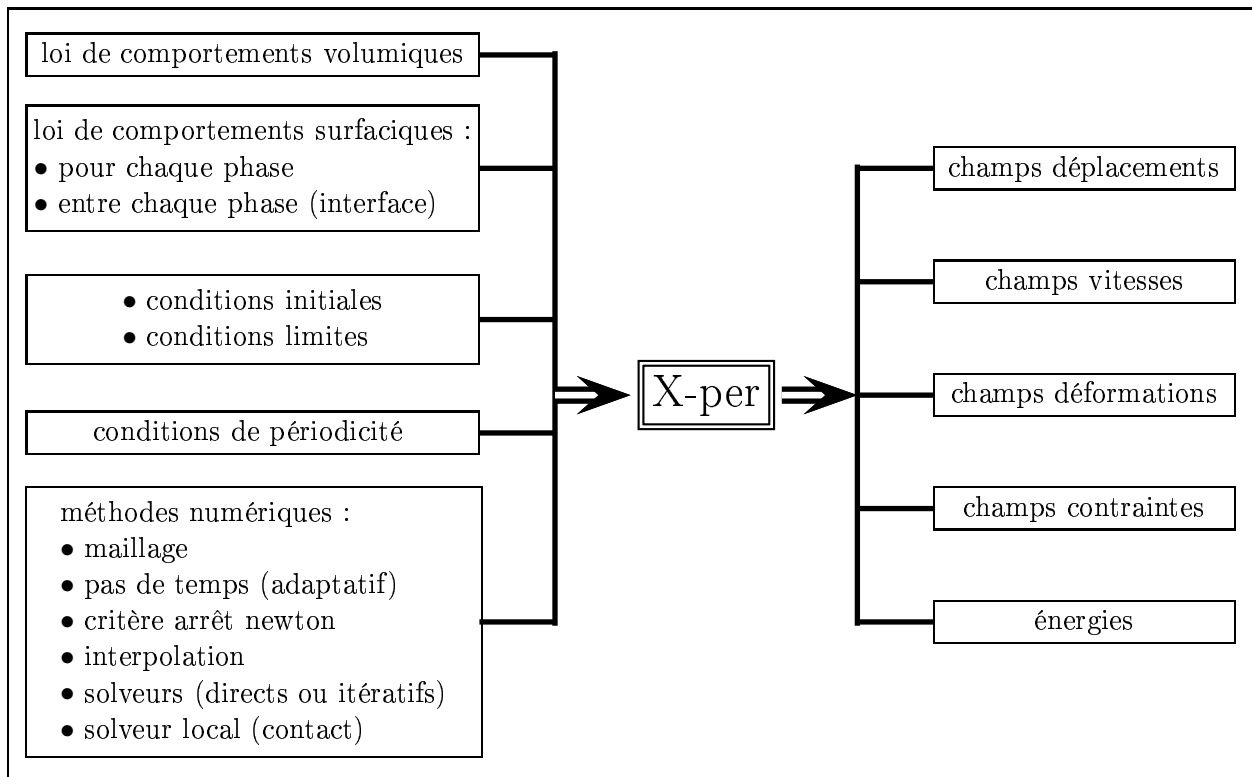


FIG. 6.3 – Entrées/Sorties du logiciel X-per

6.3.3 Evolution future

L'architecture orientée objet de la plateforme permet une évolution future du logiciel (par exemple une microstructure évolutive, une thermomécanique couplée...).

6.4 Bilan du chapitre

La plateforme numérique, appelée X-per, est obtenue par le couplage mixte de trois bibliothèques avec une conception globale orientée objet. Chaque bibliothèque a une signification mécanique claire :

- LMGC90 , développée en Fortran90, est dédiée au traitement de comportements surfaciques,
- PELICANS , développée en C++, joue le rôle d'une bibliothèque Eléments Finis,
- MATLIB , développée en C++, concerne les comportements volumiques.

La plateforme permet des simulations, en grandes déformations, de la fissuration dynamique des matériaux hétérogènes et à gradient de propriétés de l'amorçage de multifissures jusqu'à la ruine du matériau. Elle permet notamment de simuler des comportements complexes sur les lèvres de la fissure (contact, frottement).

La conception orientée objet autorise des évolutions futures du logiciel.

La mise en œuvre de cet outil numérique, et plus généralement de la démarche adoptée dans cette étude, sur un cas industriel, la fissuration des gaines de combustible à fort taux de combustion en situation accidentelle, fait l'objet de la partie suivante.

Troisième partie

Application au Zircaloy hydruré

Chapitre 7

Choix et hypothèses de modélisation

Sommaire

7.1 Comportements volumiques	129
7.1.1 Zircaloy	129
7.1.2 Hydrures	131
7.1.3 Zircone	131
7.1.4 Bilan sur les comportements volumiques	131
7.2 Comportements surfaciques	132
7.2.1 Détermination de la raideur initiale interfaciale	132
7.2.1.a Estimation théorique de la perte de raideur	132
7.2.1.b Raideurs initiales des différentes phases	136
7.2.2 Détermination de la contrainte cohésive maximale	137
7.2.2.a Zircaloy-Zircaloy	137
7.2.2.b hydrure-hydrure	137
7.2.2.c zircone-zircone	138
7.2.2.d Zircaloy-hydrure	138
7.2.2.e Zircaloy hydruré-zircone	140
7.2.3 Bilan sur les comportements surfaciques	140
7.3 Microstructure	141
7.3.1 Taille de la cellule de base	141
7.3.2 Taille des inclusions d'hydrure	142
7.4 Maillage	142
7.4.1 Géométrie des mailles	142
7.4.2 Taille des mailles	144
7.5 Bilan du chapitre	148

Ce chapitre traite des choix de modélisation adoptés.

L'utilisation de techniques de zone cohésive impose le choix de comportements volumiques et de comportements surfaciques pour chaque phase en présence ainsi que pour leurs interfaces (§ 2.1). La microstructure est composée d'une matrice métallique en Zircaloy avec des inclusions d'hydrures (§ 1.2). De plus, une couche de zircone sur la face externe de la gaine est prise en compte dans les calculs à l'échelle macroscopique. Le choix des comportements et l'identification des paramètres associés sont donc effectués sur le Zircaloy, les hydrures et la zircone.

L'étude est menée à température ambiante. Les paramètres matériaux sont identifiés à $20^{\circ}C$ à des vitesses de déformations faibles (essais quasi-statiques et isothermes).

Les influences de l'orientation et de la taille des mailles du maillage Elements Finis sont ensuite abordées.

7.1 Comportements volumiques

7.1.1 Zircaloy

Le Zircaloy-4 détendu est actuellement majoritairement présent en réacteur. Nous retenons cet état pour l'analyse conduite ici.

Le comportement macroscopique de ce matériau est élastoplastique. De plus, une augmentation de la résistance du matériau en cours de charge et de déformation plastique est généralement observée (Arsène, 1997; Grange, 1998). Le comportement est ainsi qualifié de durcissant.

Les résultats expérimentaux obtenus dans le cadre du programme PROMETRA¹ (Balourdet et al., 1999; Desquines et al., 2004; Cazalis et al., 2005) pour un matériau en Zircaloy vierge indiquent que l'hypothèse d'un comportement élastoplastique à écrouissage isotrope de type Prandtl-Reuss modélisé par une loi puissance est raisonnable. Ce résultat est confirmé par les essais de traction effectués avec Charnoz (2005) au Laboratoire de Mécanique et Génie Civil de Montpellier (CNRS-UMR5508). Ces essais sont réalisés sur des plaques de Zircaloy vierge, sous sollicitations quasi-statiques monotones et en conditions isothermes (température ambiante), jusqu'à la ruine par striction des éprouvettes (voir FIG. 7.1). Par souci de simplification et de compréhension des phénomènes physiques, l'écrouissage, très faible dans le cas du Zircaloy (plasticité quasi-parfaite), est supposé linéaire (correspondant à un exposant d'écrouissage égal à 1 dans la loi de Prandtl-Reuss). De plus, le comportement est supposé isotrope conformément aux observations de Nakatsuka et Nagai (1987), confirmées par les modélisations de Vincent et al. (2005) concernant l'influence de l'irradiation sur la perte d'anisotropie du matériau. A l'échelle microscopique, l'anisotropie est donc induite exclusivement par la présence des inclusions.

La loi décrivant le comportement volumique du Zircaloy est donc définie par 4 paramètres, identifiés à température ambiante ($20^{\circ}C$) à partir de la base PROMETRA et des essais réalisés par Charnoz (2005) (essais quasi-statiques et isothermes) :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \bullet E = 99GPa & \text{le module d'Young,} \\ \bullet \nu = 0.325 & \text{le coefficient de poisson,} \\ \bullet \sigma_0 = 450MPa & \text{la limite élastique,} \\ \bullet H_Y = 850MPa & \text{le coefficient d'écrouissage.} \end{array} \right. \quad (7.1.1)$$

¹PROpriétés MEcanique en TRAnsitoire. Ce programme a été mis en place par EDF dans le cadre de l'obtention de lois de comportement et de caractéristiques à la rupture de gainage des crayons REP qui soient représentatives des conditions spécifiques de fonctionnement.

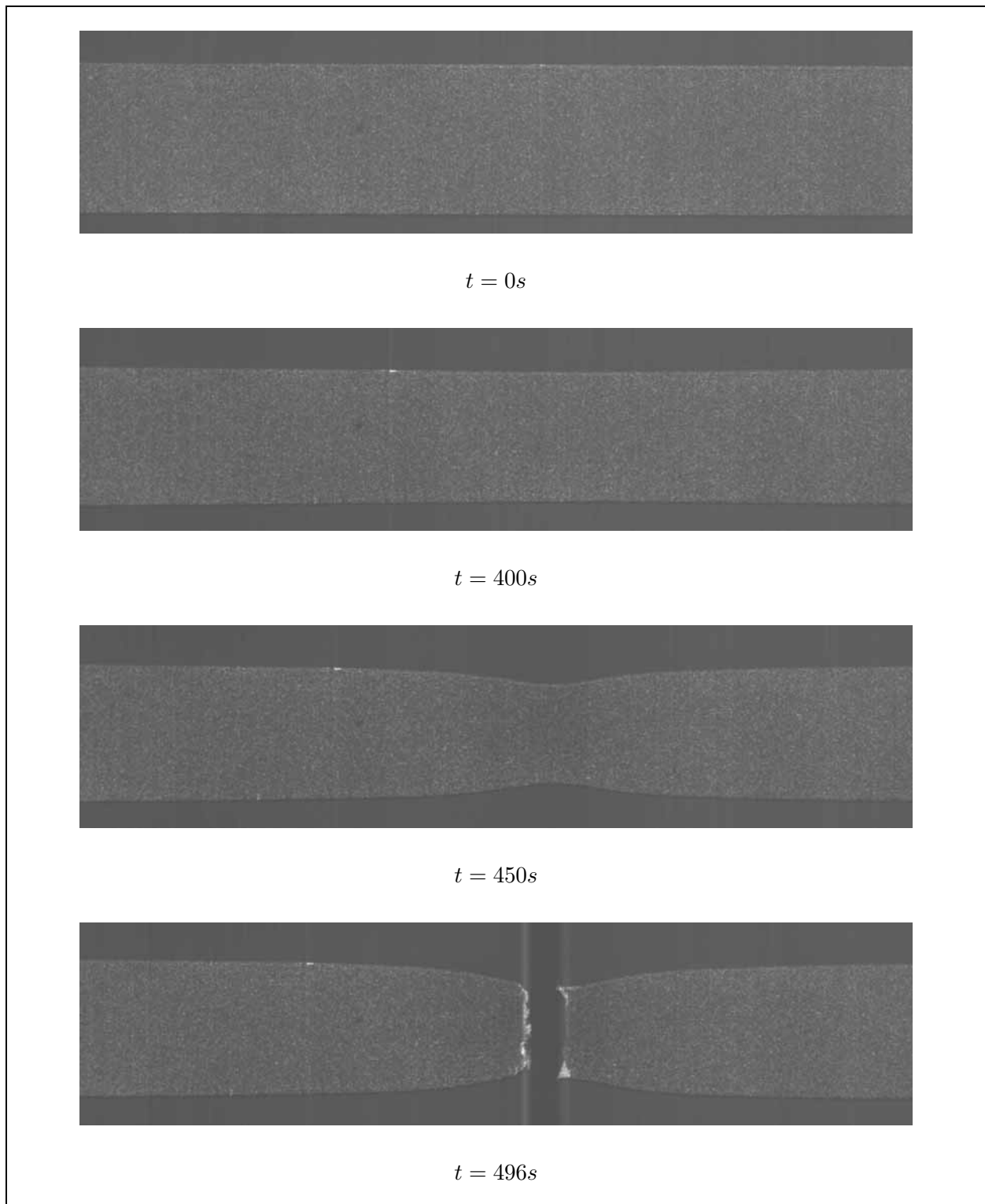


FIG. 7.1 – Essais de traction monotone unidirectionnelle ($\dot{F}_{xx} = 5 \times 10^{-4} s^{-1}$) jusqu'à rupture sur une éprouvette non fissurée de longueur utile : $74mm$, largeur : $9.75mm$ et épaisseur : $3.1mm$ (Charnoz, 2005).

7.1.2 Hydrures

Le caractère fragilisant des hydrures de zirconium pour le matériau en Zircaloy hydruré est largement observé dans la littérature (Northwood et Kosasih, 1983; Garde, 1989; Bai et al., 1994; Garde et al., 1996; Arsène, 1997; Grange, 1998; Bertolino et al., 2003). Cette fragilisation est généralement associée à un comportement élastique fragile des hydrures. Cependant, certaines études montrent une déformabilité apparente des hydrures (Yunchang et Koss, 1985; Grange, 1998; Arsène, 1997). Grange (1998) et Arsène (1997) soulignent en particulier que ce sont les hydrures qui se déforment et non les ligaments entre la matrice et les inclusions. Une relation entre la taille des hydrures et leur capacité à se déformer (Grange, 1998; Hong et al., 2002) ou les mécanismes mis en jeu (dissolution de l'hydrure ou déformation des précipités) (Arsène, 1997) pourraient expliquer l'observation de ces différents comportements.

D'un point de vue de l'identification des paramètres, très peu de résultats sont présents dans la littérature. Barraclough et Beevers (1969a,b) et plus récemment Puls et al. (2005) mettent en évidence une limite d'élasticité en compression comprise entre 700MPa et 900MPa . Arsène (1997) confirme la valeur de 700MPa . Cependant, Choubey et Puls (1994) proposent une limite d'élasticité proche des 300MPa . Par ailleurs, le module d'écroissage semble élevé (environ 3GPa pour Yamanaka et al. (1999) et 13GPa pour Arsène (1997)).

L'existence de déformations anélastiques des hydrures semble donc probable mais encore non expliquée ni clairement établie. De plus, le manque de résultats concernant les paramètres plastiques (limite élastique, coefficient d'écroissage) nous amène à considérer les hydrures élastiques afin de comprendre, dans un premier temps, les phénomènes physiques qui interviennent. Une loi élasto-plastique pourra facilement être introduite par la suite via la librairie MATLIB (§ 6.1.3).

Les inclusions d'hydrures existent sous trois phases γ , δ et ϵ (§ 1.2.3). La seule phase stable en condition isotherme est la phase δ de composition comprise entre $\text{ZrH}_{1,5}$ et $\text{ZrH}_{1,66}$ (Grange, 1998). Pour des hydrures en phase δ , Yamanaka et al. (1999, 2001) observent une très faible variation du module d'Young E et du coefficient de poisson ν de l'hydrure ZrH_{2-x} avec la teneur en hydrogène. Les valeurs identifiées à 20°C sont :

$$\begin{cases} \bullet E = 135\text{GPa}, \\ \bullet \nu = 0.32. \end{cases} \quad (7.1.2)$$

7.1.3 Zircone

Les propriétés mécaniques de l'oxyde de zirconium, appelée zircone, sont très peu étudiées dans la littérature (Tassot, 1988; Robert-Berat, 2001). La zircone est un matériau céramique de type fragile. Le comportement est purement élastique avec un module d'Young élevé. Robert-Berat (2001) suppose la zircone isotrope avec les propriétés mécaniques à température ambiante suivantes :

$$\begin{cases} \bullet E = 200\text{GPa}, \\ \bullet \nu = 0.255. \end{cases} \quad (7.1.3)$$

7.1.4 Bilan sur les comportements volumiques

Les comportements volumiques retenus sont rassemblés dans le TAB. 7.1.

matériau	modèle	$E(GPa)$	ν	$\sigma_0(MPa)$	$H_Y(MPa)$
Zircaloy-4 détendu	élastoplastique isotrope à écrouissage linéaire isotrope	99	0.325	450	850
δ -hydrures	élastiques isotropes	135	0.32	-	-
zircone	élastique isotrope	200	0.255	-	-

TAB. 7.1 – Comportements volumiques retenus pour la matrice en Zircaloy-4 détendu, les inclusions d’hydrures de zirconium en phase δ et l’oxyde de zirconium à température ambiante ($20^\circ C$).

7.2 Comportements surfaciques

La loi surfacique utilisée est décrite au Chapitre 3. Le modèle est entièrement défini par six paramètres (§ 3.4.3.a). Les hypothèses de modélisation sont les suivantes :

- $C_N = C_T$, les raideurs initiales interfaciales normales et tangente sont égales². Cette relation implique l’égalité des contraintes cohésives maximales normale et tangente $\hat{R} := \hat{R}_N = \hat{R}_T$,
- $\beta_0 = 1$, l’interface initiale de chaque zone cohésive est vierge,
- $p = 0$, pas de pression interne normale post-décohésion,
- $\mu_{\text{rot}} = 0$, pas de frottement post-décohésion.

Le modèle est ainsi entièrement défini par la raideur initiale interfaciale C_N (qui dépend de la taille de maille, § 7.2.1) et la contrainte cohésive maximale \hat{R} . Ces deux paramètres sont à identifier pour chaque phase : Zircaloy, hydrures, zircone et les interfaces Zircaloy-hydrure, Zircaloy hydruré-zircone.

7.2.1 Détermination de la raideur initiale interfaciale

L’utilisation de MZCF avec raideur initiale (modèles “extrinsèques”) entre chaque maille d’un maillage Eléments Finis ajoute de la souplesse dans le matériau (§ 3.2). Cette souplesse additionnelle et sa limitation doivent être quantifiées au mieux.

L’estimation théorique de la perte de raideur a été effectuée par Monerie (2005).

7.2.1.a Estimation théorique de la perte de raideur

L’estimation théorique de la perte de raideur est effectuée à partir de considérations micromécaniques. L’effet de la raideur initiale des MZCF sur la raideur macroscopique est ainsi étudiée.

Considérons une matrice élastique contenant des inclusions élastiques de formes ellipsoïdales oblates distribuées et orientées aléatoirement.

Le tenseur de Hooke (tenseur d’ordre 4) de la matrice, noté \mathbb{C}^M , s’exprime dans la base d’isotropie de la façon suivante :

$$\mathbb{C}^M = 3k^M \mathbb{J} + 2\mu^M \mathbb{K}, \quad (7.2.1)$$

²dans la suite, nous noterons seulement C_N

où k^M et μ^M sont respectivement les modules de compressibilité hydrostatique et de cisaillement de la matrice, et \mathbb{J} et \mathbb{K} constituent une base de l'espace des tenseurs isotropes d'ordre 4 : $\mathbb{J} = \frac{1}{3}\mathbf{I} \otimes \mathbf{I}$,

$\mathbb{K} = \mathbb{I} - \mathbb{J}$ avec $\mathbb{I}_{ij}^{kl} = \frac{1}{2}(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk})$ tenseur identité d'ordre 4.

Le tenseur de Hooke des inclusions \mathbb{C}^I est défini en fonction d'un paramètre, noté e , décrivant l'épaisseur d'un domaine équivalent représenté par un modèle de zone cohésive (sans épaisseur). Ce paramètre doit ainsi tendre vers zéro. Nous montrons que \mathbb{C}^I suit la relation :

$$\mathbb{C}^I = e \tilde{\mathbb{C}}, \quad \text{avec} \quad \tilde{\mathbb{C}} = C_N \mathbb{E}_I + C_T \mathbb{K}_I, \quad (7.2.2)$$

où \mathbb{E}_I et \mathbb{K}_I sont données par :

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_I &= \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}, \\ \mathbb{K}_I &= 2(j_s \otimes j_s + j_t \otimes j_t) \quad \text{où} \quad j_s = \mathbf{n} \otimes_s \mathbf{s} \quad \text{et} \quad j_t = \mathbf{n} \otimes_s \mathbf{t}, \end{aligned} \quad (7.2.3)$$

où les vecteurs \mathbf{s} et \mathbf{t} définissent une base orthogonale du plan tangent à la zone cohésive et $\mathbf{n} \otimes_s \boldsymbol{\alpha} = (\mathbf{n} \otimes \boldsymbol{\alpha} + \boldsymbol{\alpha} \otimes \mathbf{n})/2$.

La relation (7.2.2) peut être prouvée en utilisant les Eq. (3.4.2) et (7.2.1) dans la zone élastique du MZCF, i.e. pour $\beta = 1$. Dans ce cas, le tenseur des contraintes de la zone cohésive normale $\boldsymbol{\sigma}$ s'écrit :

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma} &= \mathbf{R}^{adh} \otimes_s \mathbf{n} \\ &= \left(\left(C_N \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} + C_T \frac{u_T \otimes u_T}{\|u_T\|^2} \right) \cdot [\mathbf{u}] \right) \otimes_s \mathbf{n} \\ &= (C_N u_N \mathbf{n} + C_T \mathbf{u}_T) \otimes_s \mathbf{n} \\ &= C_N u_N \mathbf{n} \otimes_s \mathbf{n} + C_T \mathbf{u}_T \otimes_s \mathbf{n} \\ &= C_N u_N \mathbb{E}_I : (\mathbf{n} \otimes_s \mathbf{n}) + C_T \mathbb{K}_I : (\mathbf{u}_T \otimes_s \mathbf{n}) \\ &= (C_N \mathbb{E}_I + C_T \mathbb{K}_I) : (u_N \mathbf{n} \otimes_s \mathbf{n} + \mathbf{u}_T \otimes_s \mathbf{n}) \\ &= (C_N \mathbb{E}_I + C_T \mathbb{K}_I) : ([\mathbf{u}] \otimes_s \mathbf{n}). \end{aligned} \quad (7.2.4)$$

La déformation d'une couche d'épaisseur e peut être approchée par (Michel et Suquet, 1994) :

$$\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u}) \simeq \frac{[\mathbf{u}] \otimes_s \mathbf{n}}{e}. \quad (7.2.5)$$

Une combinaison des Eq. (7.2.4) et (7.2.5) fournit la propriété annoncée (7.2.2).

Le tenseur de Hooke équivalent \mathbb{C}^{hom} de la microstructure étudiée peut être estimé grâce à des estimations de type Hashin et Shtrikman (1963) où il est supposé que les inclusions sont orientées et distribuées aléatoirement (maillage de type Delaunay) :

$$\mathbb{C}^{hom}(\mathbb{C}^0) = \left\langle \left(f^I (\mathbb{C}^*(\mathbb{C}^0) + \mathbb{C}^I) + (1 - f^I) (\mathbb{C}^*(\mathbb{C}^0) + \mathbb{C}^M)^{-1} \right)^{-1} - \mathbb{C}^*(\mathbb{C}^0) \right\rangle_{\circ}, \quad (7.2.6)$$

où f^I est la fraction volumique d'inclusions et \mathbb{C}^* est défini par :

$$\mathbb{C}^*(\mathbb{C}^0) = \mathbb{C}^0 : (\mathbb{S}(\mathbb{C}^0) - \mathbb{I}), \quad (7.2.7)$$

\mathbb{S} étant le tenseur d'Eshelby associé à une inclusion dans une matrice infinie de tenseur élastique \mathbb{C}^0 . La fraction volumique f^I peut être définie par un produit eZ (où Z est un paramètre de densité).

Dans le cas d'inclusions ellipsoïdales oblates, e tend vers zéro et le tenseur d'Eshelby prend la forme simple suivante (Mura, 1982) :

$$\mathbb{S}(\mathbb{C}^0) = \mathbb{E}_l + \mathbb{K}_l. \quad (7.2.8)$$

Suivant le choix du milieu de référence \mathbb{C}^0 dans l'Eq. (7.2.6), plusieurs bornes et estimations peuvent être obtenues pour \mathbb{C}^{hom} . Lorsque e tend vers zéro (i.e. $\mathbb{C}^I = e\tilde{\mathbb{C}} \rightarrow 0$ et $f^I = eZ \rightarrow 0$), la borne supérieure de Hashin et Shtrikman ($\mathbb{C}^0 = \mathbb{C}^M$), l'estimation de Mori et Tanaka ($\mathbb{C}^0 = \mathbb{C}^M$) et l'estimation autocohérente ($\mathbb{C}^0 = \mathbb{C}^{\text{hom}}$) sont égales et donnent le résultat trivial : $\mathbb{C}^{\text{hom}} = \mathbb{C}^M$; mais la borne inférieure de Hashin et Shtrikman entraîne :

$$\mathbb{C}^{\text{HS}^-} = \mathbb{C}^{\text{hom}}(\mathbb{C}^I) = \left\langle \left(Z\mathbb{S} : \tilde{\mathbb{C}}^{-1} + (\mathbb{C}^M)^{-1} \right)^{-1} \right\rangle_{\circ}. \quad (7.2.9)$$

En utilisant (7.2.8) et (7.2.9), on a :

$$\mathbb{S} : \tilde{\mathbb{C}}^{-1} = \frac{1}{C_N}\mathbb{E}_l + \frac{1}{C_T}\mathbb{K}_l, \quad (7.2.10)$$

et la moyenne de $\mathbb{S} : \tilde{\mathbb{C}}^{-1}$ sur toutes les orientations possibles s'écrit (Gatt et al., 2005) :

$$\left\langle \mathbb{S} : \tilde{\mathbb{C}}^{-1} \right\rangle_{\circ} = P_{\mathbb{J}\mathbb{K}}(\mathbb{S} : \tilde{\mathbb{C}}^{-1}), \quad (7.2.11)$$

où $P_{\mathbb{J}\mathbb{K}}(\mathbf{A})$ est la projection d'un tenseur d'ordre 4 \mathbf{A} sur la base \mathbb{J}, \mathbb{K} . Cette dernière quantité est égale à :

$$\left\langle \mathbb{S} : \tilde{\mathbb{C}}^{-1} \right\rangle_{\circ} = \frac{1}{3C_N}\mathbb{J} + \frac{2}{5} \left(\frac{1}{3C_N} + \frac{1}{C_T} \right) \mathbb{K}. \quad (7.2.12)$$

En réécrivant \mathbb{C}^{HS^-} sous la forme :

$$\mathbb{C}^{\text{HS}^-} = 3k^{\text{HS}^-}\mathbb{J} + 2\mu^{\text{HS}^-}\mathbb{K}, \quad (7.2.13)$$

où k^{HS^-} et μ^{HS^-} sont respectivement les modules de compressibilité hydrostatique et de cisaillement et en utilisant l'Eq. 7.2.9, on obtient après quelques calculs algébriques :

$$\begin{aligned} k^{\text{HS}^-} &= k^M \frac{x}{1-x} \quad \text{avec} \quad x = \frac{C_N}{k^M Z}, \\ \mu^{\text{HS}^-} &= \mu^M \frac{y}{1-y} \quad \text{avec} \quad y = \frac{15C_N C_T}{4\mu^M (C_N + 3C_N) Z}. \end{aligned} \quad (7.2.14)$$

La combinaison de k^{HS^-} et μ^{HS^-} donne la borne inférieure suivante pour le module d'Young équivalent :

$$E^{\text{HS}^-} = \frac{9k^{\text{HS}^-}\mu^{\text{HS}^-}}{\mu^{\text{HS}^-} + 3k^{\text{HS}^-}}, \quad (7.2.15)$$

qui peut être réécrit sous la forme :

$$\frac{E^{\text{HS}^-}}{E^M} = \frac{\xi}{1+\xi}, \quad \text{où} \quad \xi = \frac{5}{1 + \frac{4}{3} \frac{C_N}{C_T}} \frac{C_N}{E^M Z}, \quad (7.2.16)$$

E^M étant le module d'Young de la matrice.

A ce stade, il peut être intéressant de comparer plusieurs modèles de zone cohésive :

- pas de cisaillement (MZC sans réaction tangentielle) :

$$C_T = 0 \quad \text{donne} \quad \xi = 0, \quad (7.2.17)$$

et la raideur interfaciale initiale normale du modèle de zone cohésive doit être infinie afin d'obtenir une raideur macroscopique de la structure non nulle (modèles "intrinsèques" impérativement),

- pas de glissement (MZC sans glissement tangentiel) :

$$C_T \rightarrow \infty \quad \text{donne} \quad \xi = \frac{5C_N}{E^M Z}, \quad (7.2.18)$$

- raideurs initiales normale et tangente égales :

$$C_N = C_T \quad \text{donne} \quad \xi = \frac{15}{7} \frac{C_N}{E^M} Z. \quad (7.2.19)$$

Dans la suite, ce dernier cas est retenu. L'équation permettant d'estimer le paramètre de densité Z dépend du type de maillage utilisé. Pour illustrer la précision de la borne inférieure (7.2.16) et la relation (7.2.19), nous considérons ici le cas approché d'une structure carrée divisée en carrés réguliers, chaque carré étant divisé en 4 triangles isocèles (voir FIG. 7.12). Ce type de maillage n'assure pas l'équiprobabilité des orientations des inclusions. Il offre cependant la possibilité de définir de manière univoque le paramètre Z tout en présentant un degré d'isotropie convenable pour des maillages assez grands. Nous notons L_{mesh} la longueur du plus grand côté des triangles, p le nombre de mailles par côté du carré, l la longueur totale de la zone cohésive (longueur totale des faces internes) et τ le nombre de mailles. Pour une épaisseur e non nulle de zone cohésive, la fraction volumique f^I s'écrit :

$$f^I = \frac{le}{le + (L_{\text{mesh}}^2/4) \tau}, \quad (7.2.20)$$

et lorsque $e \rightarrow 0$, la relation $f^I = Ze$ donne le cas limite :

$$Z = \frac{4l}{L_{\text{mesh}}^2 N}. \quad (7.2.21)$$

La longueur totale de zone cohésive l est reliée aux paramètres L_{mesh} et p par :

$$l = 2\sqrt{2}L_{\text{mesh}}p^2 + 2p(p-1)L_{\text{mesh}}. \quad (7.2.22)$$

Pour un très grand nombre de mailles (i.e. lorsque $p \rightarrow \infty$), on a :

$$Z = \frac{2(1 + \sqrt{2})}{L_{\text{mesh}}}. \quad (7.2.23)$$

En intégrant cette équation dans (7.2.16), on obtient la borne inférieure suivante pour ce type de mailles :

$$\frac{E^{\text{HS}^-}}{E^M} = \frac{\xi}{1 + \xi}, \quad \text{où} \quad \xi = \frac{5/(1 + \sqrt{2})}{2 \left(1 + \frac{4}{3} \frac{C_N}{C_T}\right)} \frac{C_N L_{\text{mesh}}}{E^M}. \quad (7.2.24)$$

La précision de cette borne inférieure est illustrée sur la FIG. 7.2. Le module d'Young équivalent d'une structure élastique contenant des modèles de zone cohésive élastique sur chaque face interne

d'un maillage Elements Finis est tracé pour plusieurs valeurs du paramètre ξ . La plage de valeur du paramètre ξ est $[0, 40]$ avec $C_N/C_T \in [1/3, 10/3]$ et $C_N L_{\text{mesh}}/E^M \in [7 \times 10^{-3}, 51]$.

Pour le cas particulier où les raideurs interfaciales normale et tangente sont égales, $C_N = C_T$, un critère sur C_N s'écrit :

$$C_N \geq \frac{21E^M}{L_{\text{mesh}}} \implies \frac{E^{\text{HS}^-}}{E^M} \geq 0.90. \quad (7.2.25)$$

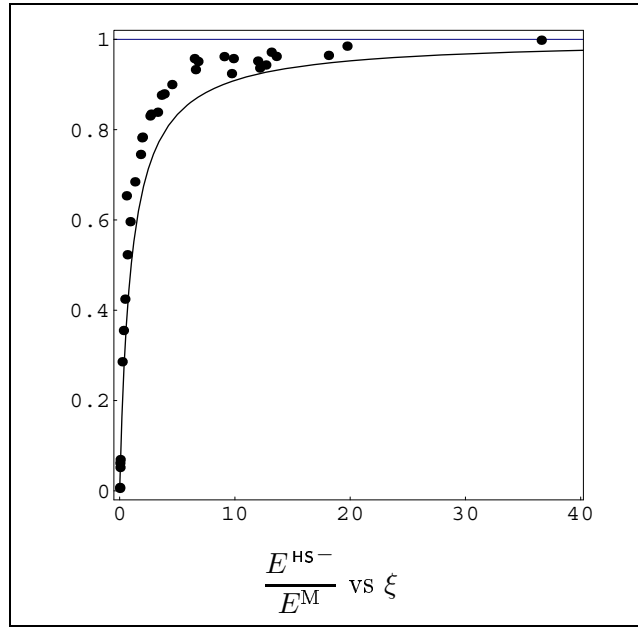


FIG. 7.2 – Module d'Young équivalent pour une structure élastique contenant des modèles de zone cohésive élastique sur chaque face interne d'un maillage Elements Finis pour plusieurs valeurs du paramètre ξ (voir (7.2.24)) : résultats numériques (points) et borne inférieure (7.2.24).

7.2.1.b Raideurs initiales des différentes phases

La taille de maille résulte d'un compromis entre le temps calcul et la précision des résultats.

Elle dépend notamment de l'échelle considérée. Les tailles de mailles retenues aux échelles microscopique et macroscopique sont respectivement $1\mu\text{m}$ et $17\mu\text{m}$.

Nous souhaitons garantir une raideur de la structure avec zone cohésive supérieure à 90 % de la raideur sans zone cohésive. Pour cela, les raideurs initiales interfaciales du Zircaloy retenues sont respectivement $2 \times 10^{18} \text{Pa/m}$ et 10^{17}Pa/m (7.2.25). La raideur initiale interfaciale des hydrures à l'échelle microscopique est choisie deux fois supérieure à celle du Zircaloy, représentant ainsi une raideur plus élevée des inclusions. A l'échelle macroscopique, les hydrures sont pris en compte dans la matrice à travers les coefficients homogénéisés. La zircone, à l'échelle macroscopique, possède une raideur interfaciale de $1.3 \times 10^{18} \text{Pa/m}$. Par hypothèse, les interfaces entre les phases possèdent une raideur initiale égale à celle de la phase la plus raide.

7.2.2 Détermination de la contrainte cohésive maximale

7.2.2.a Zircaloy-Zircaloy

Le travail expérimental que nous avons réalisé avec Charnoz (2005), en collaboration avec le Laboratoire de Mécanique et Génie Civil de Montpellier (CNRS-UMR5508), a mis en évidence, pour le Zircaloy, l'ordre de grandeur de l'énergie de décohésion d'un modèle de zone cohésive (voir FIG. 7.3). La mesure expérimentale a été effectuée à l'aide de techniques d'intercorrélation d'images de granularité. Ces techniques permettent notamment d'obtenir le comportement local des matériaux (typiquement pour des volumes élémentaires de quelques microns de côtés) (Wattrisse et al., 2001). Le comportement local pour les modèles de zone cohésive est décrit par le saut de déplacement et la variation de contrainte de part et d'autre de la fissure. La contrainte locale est obtenue grâce à la loi volumique du § 7.1.1. Cette contrainte est ensuite reliée au saut de déplacement local dépendant de la distance entre deux lignes symétriques par rapport à la direction de fissure. Une analyse d'un système à une dimension composé d'un modèle élastoplastique couplé à un modèle élastique non linéaire (MZC) permet d'identifier une énergie de référence de l'ordre de $1J/m^2$, qui correspond à une contrainte cohésive maximale de $\hat{R}^{Zr} = 1076MPa$. Ce résultat a été validé par comparaison avec des simulations numériques effectuées, en 2D déformations planes, avec le logiciel X-per.

Une identification plus précise est obtenue par confrontation des simulations numériques à des résultats expérimentaux de rupture de gaines de combustibles effectués dans le cadre du programme PROMETRA. Le paramètre retenu pour l'identification est la déformation à rupture. Elle se situe à environ 24% pour le Zircaloy vierge. Une méthode inverse permet ainsi, à partir de simulations numériques dépendantes de la contrainte cohésive maximale de la zone cohésive, d'obtenir la contrainte cohésive maximale de l'interface Zircaloy-Zircaloy.

Le comportement volumique utilisé pour les simulations numériques est le comportement élastoplastique à écrouissage isotrope défini dans le § 7.1.1 et la raideur initiale interfaciale est $C_N = 2 \times 10^{18} Pa/m$ (§ 7.2.1).

La FIG. 7.4 représente la résultante macroscopique du Zircaloy pur en fonction de la déformation pour $\hat{R}^{Zr} = 760MPa$. Cette simulation est effectuée avec le logiciel X-per sur une cellule de base rectangulaire de dimension $88\mu m \times 20\mu m$ et avec les coefficients matériaux volumiques décrits dans le TAB. 7.1. La déformation à rupture obtenue est alors de l'ordre de 22.5%. Dans la suite, la contrainte cohésive maximale $\hat{R}^{Zr} = 760MPa$ est retenue pour les simulations.

7.2.2.b hydrure-hydrure

La contrainte cohésive maximale pour les hydrures est un paramètre indéterminé de l'étude. Ce paramètre est important. En effet, son choix influence les propriétés de fissuration du matériau. Le composite passe ainsi d'un comportement ductile à un comportement fragile suivant la contrainte cohésive maximale considérée (fragilité des hydrures).

L'identification de ce paramètre passe donc par des simulations numériques et leurs confrontations aux mesures expérimentales macroscopiques.

Arsène (1997) et Grange (1998) observent l'initiation des fissures dans les hydrures puis leurs propagations dans la matrice. Ce résultat expérimental nous permet de borner la contrainte cohésive maximale des hydrures. Les simulations numériques effectuées permettent de trouver une limite supérieure de l'ordre de $1.34 \hat{R}^{Zr}$. Au delà, la rupture de la matrice intervient avant celle des hydrures (voir FIG. 7.5) ce qui est en contradiction avec les observations expérimentales.

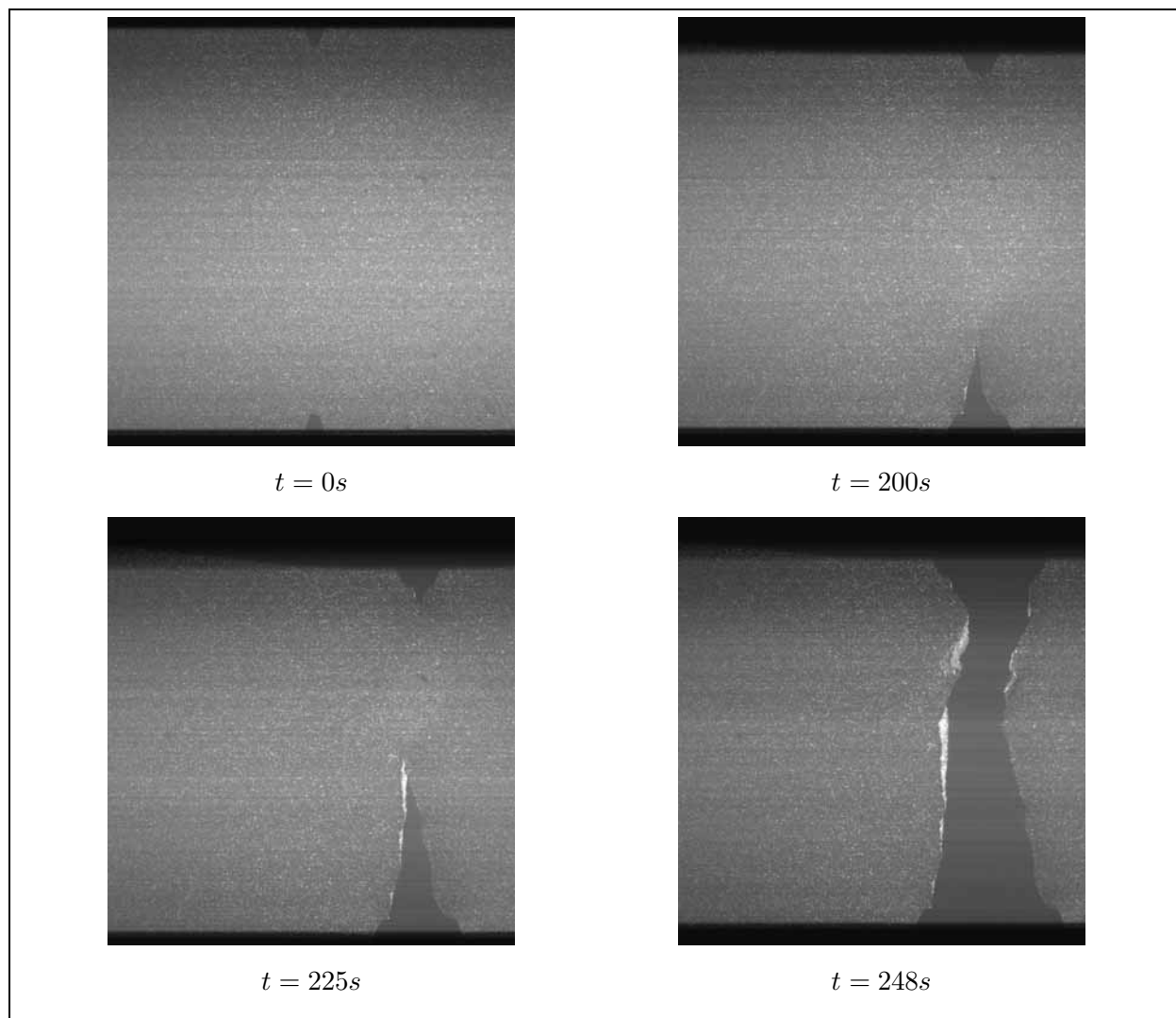


FIG. 7.3 – Essai de traction monotone unidirectionnelle jusqu’à rupture sur une éprouvette fissurée de longueur utile : $74mm$, largeur : $20.15mm$ et épaisseur : $3.04mm$ (Charnoz, 2005).

Le choix s’est porté sur deux contraintes cohésives maximales : $\hat{R}^H = 0.45 \hat{R}^{Zr} = 342 MPa$ (hydrures peu tenaces) et $\hat{R}^H = 1.3 \hat{R}^{Zr} = 988 MPa$ (hydrures très tenaces).

7.2.2.c zircon-zircon

La zircon est considérée très fragile avec très peu de tenue mécanique. Tassot (1988) observe une résistance à la traction de $136 MPa$. Cette valeur est retenue pour l’identification de la contrainte cohésive maximale. La confrontation avec les simulations numériques permet de trouver une contrainte maximale pour la zircon de $\hat{R}^{ZrO_2} = 300 MPa$.

7.2.2.d Zircaloy-hydrure

A l’interface d’un bimatérial (matrice et inclusion par exemple), la fissure matricielle peut soit traverser l’inclusion (pénétration) soit être déviée (déviation). La déviation ou la pénétration dépend

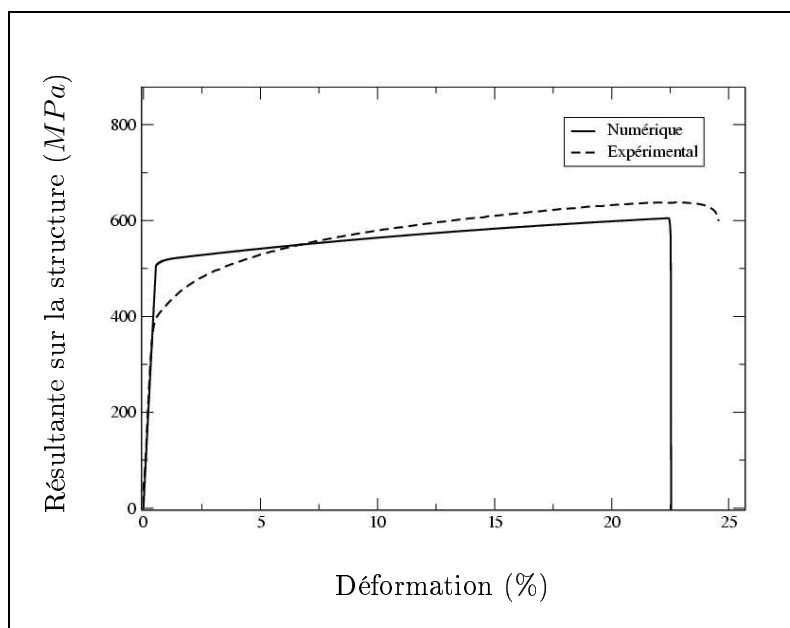


FIG. 7.4 – Comparaison des courbes résultante vs déformation pour le Zircaloy obtenues à partir d’une simulation numérique par le logiciel X-per et d’un essai expérimental réalisé par Charnoz (2005). Pour la simulation numérique, la loi volumique du § 7.1.1 est utilisée et la loi surfacique est définie par $C_N = 2 \times 10^{18} Pa/m$ et $\hat{R}^{Zr} = 760 MPa$.

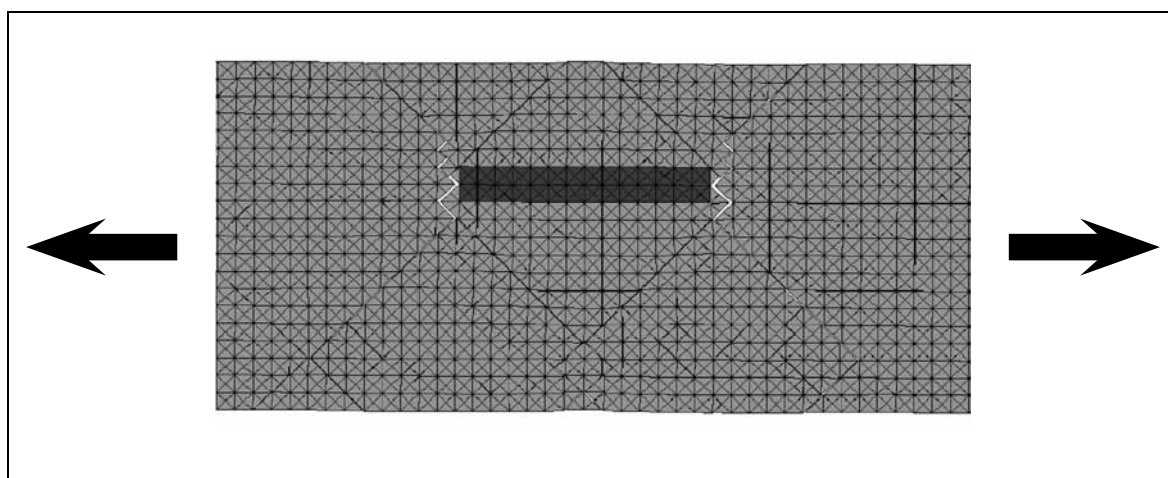


FIG. 7.5 – Simulation numérique de la fissuration d’une matrice en Zircaloy contenant une inclusion d’hydrure avec $\hat{R}^H = 1.34 \hat{R}^{Zr}$. Les fissures s’initient dans la matrice.

de la valeur du ratio des énergies de décohérence de l’interface et de l’inclusion E_{coh}^{Int}/E_{coh}^I . Plus précisément, la plage de valeur de transition, en 2D déformations planes, se situe entre 0.013 et 0.25 (He et Hutchinson, 1989; He et al., 1994; Siegmund et al., 1997; Martin et al., 1998; Xu et al., 1998). En terme de contraintes cohésives maximales, cette condition s’écrit $\hat{R}^{Int}/\hat{R}^I \in [0.11, 0.5]$. Ce résultat est confirmé pour une fissuration dynamique en 3D par Monerie (2000).

Ainsi, pour $\hat{R}^{Int}/\hat{R}^I < 0.11$ la fissure est déviée et pour $\hat{R}^{Int}/\hat{R}^I > 0.5$ la fissure pénètre dans l’inclusion. Ce résultat est vérifié numériquement sur du Zircaloy avec des inclusions d’hydrures (voir FIG. 7.6). Lorsque la résistance interfaciale est forte ($\hat{R}^{Int} \gg \hat{R}^I$), la fissure se propage

dans les hydrures. Lorsque la résistance est faible ($\hat{R}^{\text{Int}} \ll \hat{R}^{\text{I}}$), la fissure contourne les inclusions induisant une multifissuration du matériau.

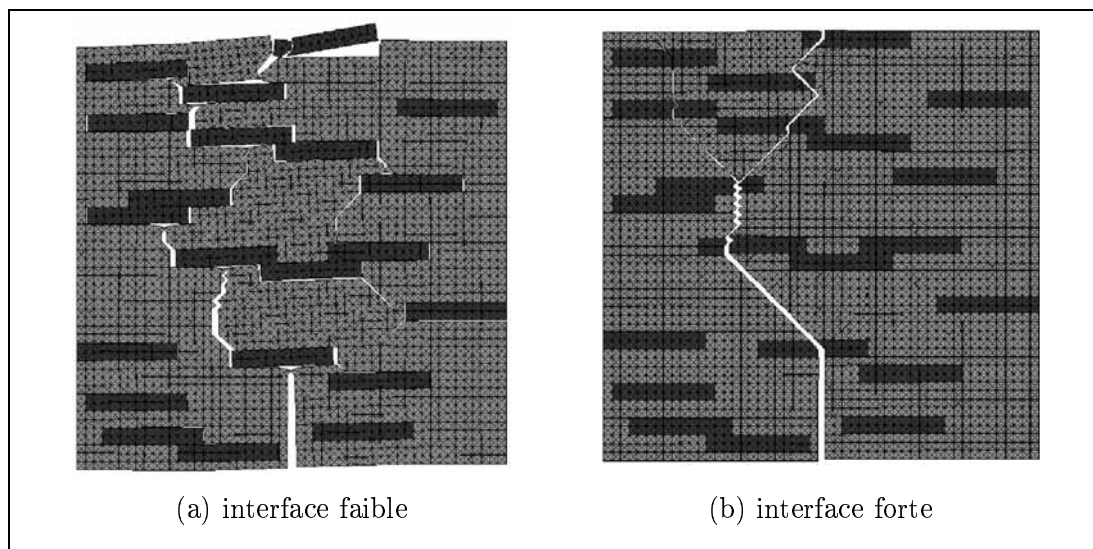


FIG. 7.6 – Faciès de rupture dans le cas d'une interface matrice/inclusions (a) faible et (b) forte. L'interface forte ($\hat{R}^{\text{Int}} \gg \hat{R}^{\text{I}}$) concorde avec les résultats expérimentaux.

Une valeur inférieure de la contrainte cohésive à l'interface Zircaloy-hydrure peut donc être déterminée à partir du comportement de la fissure observée expérimentalement à cette interface.

Arsène (1997) et Grange (1998) n'observent aucune décohésion de l'interface entre le Zircaloy et les inclusions d'hydrures. Ce résultat expérimental est confirmé par les observations de Coleman et Hardie (1966) et Rupa (2000) qui indiquent que les fissures traversent les hydrures et ne les contournent pas.

Ces observations impliquent la relation suivante $\hat{R}^{\text{Int}} > 0.5 \hat{R}^{\text{H}}$. Dans la suite, $\hat{R}^{\text{Int}} = 1076 \text{MPa} > \hat{R}^{\text{H}}$ est retenu.

7.2.2.e Zircaloy hydruré-zircone

A l'interface entre le Zircaloy hydruré et la zircone externe, certaines fissures de la zircone se propagent dans la matrice. De plus, une desquamation de la zircone peut apparaître (programme CABRI Rep-Na). Ces phénomènes dépendent notamment de la concentration d'hydrogène proche de la zircone (rim ou blister). Dans cette étude, nous considérons l'interface forte entre la matrice hydrurée et la zircone. Cette hypothèse permet une propagation des fissures de la zircone dans la matrice hydrurée. Par des considérations similaires à celles du § 7.2.2.d, une contrainte cohésive maximale de 1076MPa pour la zone cohésive à l'interface entre le Zircaloy hydruré et la zircone est retenue.

7.2.3 Bilan sur les comportements surfaciques

Les comportements surfaciques retenus à l'échelle microscopique et à l'échelle macroscopique sont respectivement résumés dans les TAB. 7.2.

interface	$C_N = C_T(Pa/m)$ ($L_{\text{mesh}} = 1\mu m$)	$C_N = C_T(Pa/m)$ ($L_{\text{mesh}} \simeq 17\mu m$)	$\hat{R}(MPa)$	β_0
Zr/Zr	2×10^{18}	10^{17}	760	1
H/H	4×10^{18}	*	$0.45\hat{R}^{\text{Zr}} = 342$ $1.3\hat{R}^{\text{Zr}} = 988$	1
ZrO ₂ /ZrO ₂	**	1.3×10^{18}	300	1
Zr/H	4×10^{18}	*	1076	1
ZrH/ZrO ₂	**	1.3×10^{18}	1076	1

* les raideurs interfaciales du Zircaloy hydruré à l'échelle macroscopique sont obtenues à partir des coefficients homogénéisés.

** à l'échelle microscopique, la zircone n'est pas prise en compte.

TAB. 7.2 – Comportements surfaciques retenus. La raideur initiale interfaciale dépend de l'échelle (taille de maille) : échelle micro ($L_{\text{mesh}} = 1\mu m$) ou échelle macro ($L_{\text{mesh}} = 17\mu m$).

7.3 Microstructure

7.3.1 Taille de la cellule de base

La taille de la cellule de base est obtenue à partir d'une analyse d'image sur une microstructure d'une gaine en Zircaloy-4 détendu à fort taux de combustion (FIG. 1.5) (Monerie, 2005). Le logiciel utilisé pour l'analyse d'image est ImageJ, ainsi que le développement de "plugins" associés.

La démarche est décrite ci-après.

A partir de l'image de référence (FIG. 1.5, page 22), une extraction d'ellipses est effectuée (FIG. 7.7). Chaque inclusion est ainsi remplacée par une ellipse. La fraction volumique est cependant conservée. Une analyse de la distribution des facteurs d'aspect permet de définir un facteur d'aspect (longueur/largeur) pour les ellipses égal à 12.5 (FIG. 7.8). L'étude conduite par Vincent et al. (2005) montre qu'en élastoplasticité le ratio entre les facteurs d'aspect des ellipses et des plaquettes est de l'ordre de 1.7. Le facteur d'aspect retenu est égal à 7.

La figure 7.9 (a) décrit le covariogramme dans les directions radiale et circonférentielle. Pour une longueur nulle, la probabilité de trouver une inclusion est ainsi égale à la fraction volumique d'hydrure (ici 6%) et pour une longueur infinie la probabilité de trouver une autre inclusion est égale au carré de la fraction volumique (ici 0.03%).

Kanit et al. (2003) ont démontré, dans le cas d'un comportement élastique des phases (sur un polycristal), que la longueur du VER optimal était donné par la première intersection des courbes du covariogramme avec leur asymptote. Les deux longueurs critiques dans les directions radiale et circonférentielle sont respectivement $10\mu m$ et $50\mu m$. La longueur du VER pour les comportements élastiques est donc ici (FIG. 7.9 (b)) d'environ $10\mu m \times 50\mu m$. Le comportement considéré dans cette étude est fortement non linéaire (élastoplastique) et endommageable. Ainsi, la taille du VER est considérée arbitrairement plus grande pour prendre en compte les non linéarités dans le matériau.

La taille retenue est de $20\mu m \times 88\mu m$.

Sur le covariogramme 7.9 (a), une répulsion des inclusions dans la direction radiale est observée. Cette répulsion est prise en compte dans la suite pour le tirage des microstructures (Annexe B).

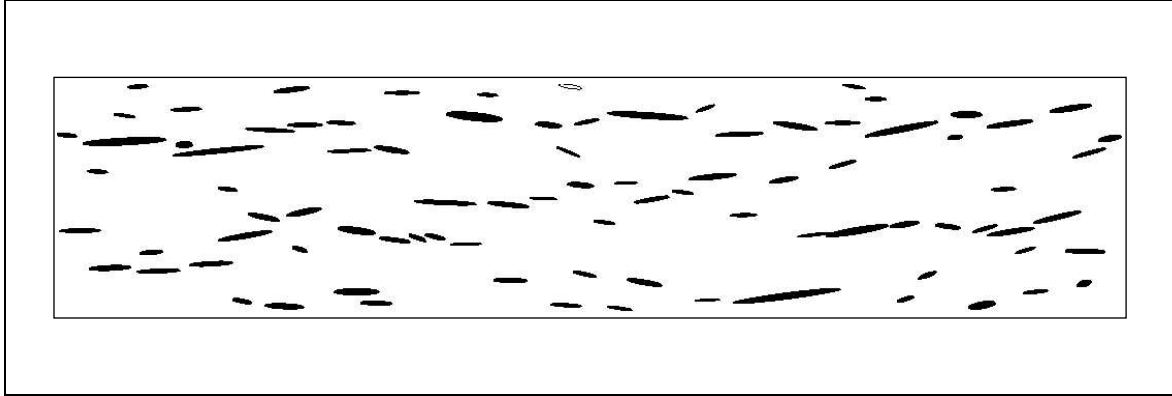


FIG. 7.7 – Extraction d'ellipses à partir d'une microstructure.

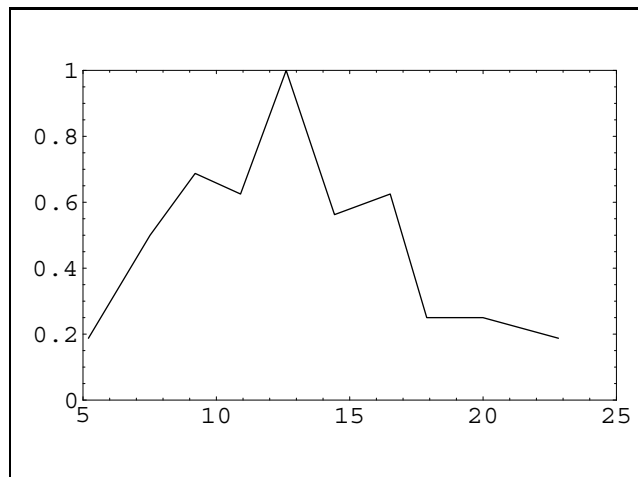


FIG. 7.8 – Densité de probabilité en fonction du rapport d'aspect des ellipses.

7.3.2 Taille des inclusions d'hydrure

L'épaisseur des hydrures est choisie à $2\mu m$ (Puls, 1991). Le rapport d'aspect est de 7 (§ 7.3.1). Les hydrures considérés sont donc des rectangles de taille $2\mu m \times 14\mu m$.

7.4 Maillage

La fissuration est décrite par l'introduction de modèles de zone cohésive entre toutes les mailles du maillage Eléments Finis. La géométrie et la taille des mailles sont deux paramètres à déterminer.

7.4.1 Géométrie des mailles

L'indépendance de la fissuration par rapport à la géométrie des mailles est illustrée sur deux exemples.

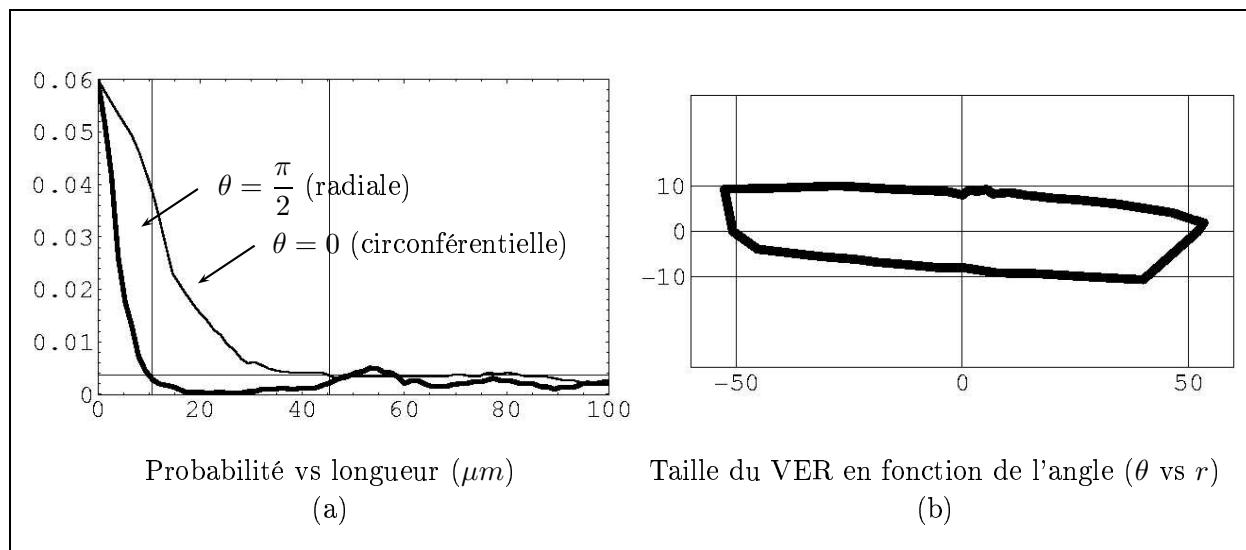


FIG. 7.9 – (a) Covariogramme et (b) taille du VER en fonction de l'angle.

Le premier exemple (FIG. 7.10) traite d'un maillage triangulaire non structuré avec des directions privilégiées "d'anisotropie" à 60° . La structure rectangulaire est composée d'un matériau élastique fragile. Deux préfissures en vis à vis sur les bords perpendiculaires à la direction de traction sont présentes.

Le chemin de fissuration est globalement rectiligne tout en suivant les frontières des mailles.

Le deuxième exemple (FIG. 7.11) traite d'un maillage structuré en mailles carrées, chaque maille carrée étant découpée en 4 mailles triangulaires³ (voir FIG. 7.12). La structure rectangulaire élastique fragile possède deux préfissures non alignées et perpendiculaires à la direction de traction.

Dans un premier temps, les fissures se propagent de manière rectiligne. Les concentrations de contrainte en pointe de fissures entraînent ensuite une bifurcation.

Ces deux exemples illustrent la situation suivante : les fissures peuvent se propager globalement rectilignement dans un maillage qui ne présente pas de direction privilégiée quant à cette avancée rectiligne, les fissures peuvent bifurquer sans être influencées par un maillage présentant une direction privilégiée qui n'est pas celle de la bifurcation.

Sans être une preuve définitive, ces deux exemples permettent d'avoir une confiance prononcée dans l'indépendance de la fissuration par rapport à la géométrie des mailles. De plus, les travaux de Tijssens et al. (2000) ont montré une dépendance forte du trajet de fissuration à la géométrie des mailles dans certaines situations, les paramètres macroscopiques qui nous intéressent dans cette étude n'en sont que peu affectés.

Afin de conserver une "isotropie" du maillage, le maillage en mailles carrées découpées en triangles (FIG. 7.12) est retenu pour la suite de l'étude.

³ce maillage a été introduit initialement par Xu et Needleman (1994). Il est appelé "crossed-triangle quadrilateral pattern" par ces auteurs.

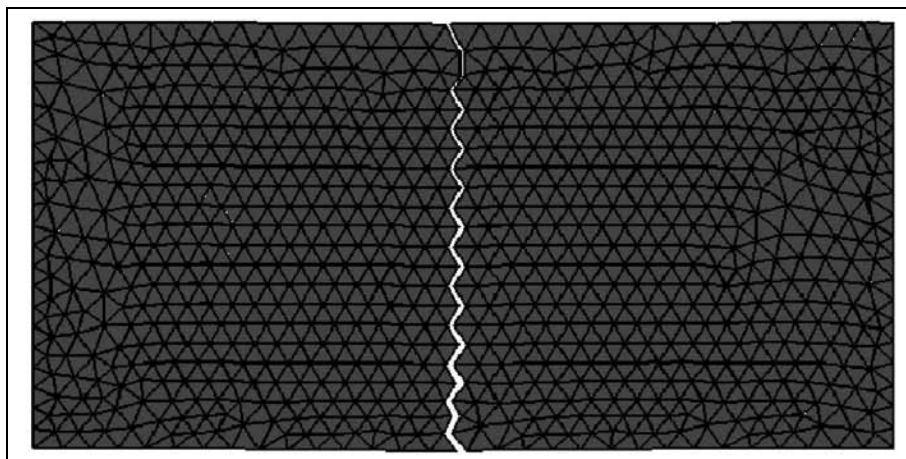


FIG. 7.10 – Maillage “non structuré” et propagation rectiligne de fissures.

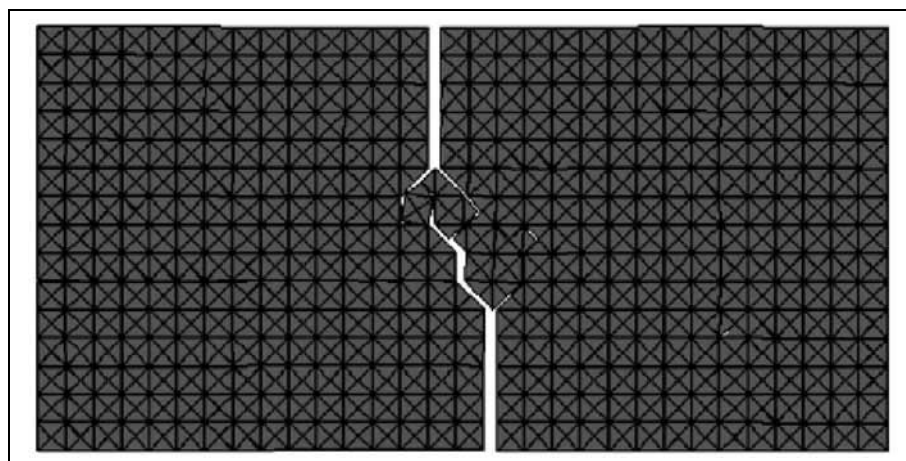


FIG. 7.11 – Maillage “structuré” et bifurcation de fissures.

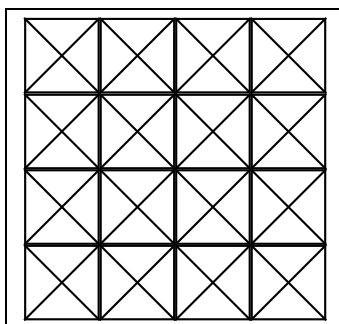


FIG. 7.12 – Maillage composé de mailles carrées, chaque maille carrée étant découpée en 4 mailles triangulaires.

7.4.2 Taille des mailles

La convergence au maillage, ou plus particulièrement l’influence de la taille de maille sur les paramètres macroscopiques de fissuration, est étudiée à travers plusieurs simulations numériques effec-

tuées sur une structure carrée homogène. Les dimensions de la structure sont de $10^{-5}(m) \times 10^{-5}(m)$. Le matériau considéré est l'hydrure de zirconium en phase δ modélisé par un matériau élastique fragile.

Une préfissure est introduite au centre de la structure et est perpendiculaire au chargement. Les paramètres mécaniques sont regroupés dans le TAB. 7.1 pour le comportement volumique de l'hydrure et dans le TAB. 7.2 pour le comportement surfacique hydrure-hydrure.

Le paramètre pris en compte pour étudier l'influence de la taille de maille est la variation de l'énergie de fissuration, c'est-à-dire l'énergie qu'il faut fournir pour rompre la structure, en fonction de la taille de maille notée L_{mesh} . Les tailles de mailles considérées sont : $2 \times 10^{-7}m$ (10000 mailles), $2.5 \times 10^{-7}m$ (6400 mailles), $\frac{1}{3} \times 10^{-7}m$ (3600 mailles) et $5 \times 10^{-7}m$ (1600 mailles).

Les modèles de zone cohésive entraînent une perte de raideur macroscopique. La valeur de la raideur initiale interfaciale est donc calibrée afin de conserver la même raideur macroscopique pour tous les maillages considérés (§ 7.2.1). Les valeurs retenues sont résumées dans le TAB. 7.3.

$\frac{L_{\text{mesh}}}{10^{-5}}$	2×10^{-2}	2.5×10^{-2}	$\frac{1}{3} \times 10^{-2}$	5×10^{-2}
$\frac{C_N}{E} (m^{-1})$	2.96×10^{10}	2.37×10^{10}	1.78×10^{10}	1.19×10^{10}

TAB. 7.3 – Choix des raideurs initiales en fonction de la taille de maille.

Les FIG. 7.13 et FIG. 7.14 représentent les faciès de rupture pour les différentes tailles de mailles. Bien que ces faciès soient sensiblement différents, l'énergie de fissuration atteint, dès une taille de maille de $5 \times 10^{-7}m$, la valeur convergée⁴ (voir TAB. 7.4 et FIG. 7.15). Ce paramètre mécanique étant l'un de ceux qui nous intéresse le plus dans la suite de l'étude, cette illustration nous permet d'affirmer avec une certaine confiance que, dès lors que les raideurs interfaciales sont convenablement ajustées, les résultats obtenus sont indépendants de la taille de maille (au-delà d'une taille permettant de considérer un calcul Eléments Finis comme "convergé").

$\frac{L_{\text{mesh}}}{10^{-5}}$	2×10^{-2}	2.5×10^{-2}	$\frac{1}{3} \times 10^{-2}$	5×10^{-2}
$E_{\text{tot}} (J)$	1.11×10^{-4}	1.11×10^{-4}	1.09×10^{-4}	1.081×10^{-4}

TAB. 7.4 – Energie macroscopique en fonction de la taille de maille.

⁴à comprendre au sens de : la taille de maille n'influe plus sur la valeur de l'énergie macroscopique

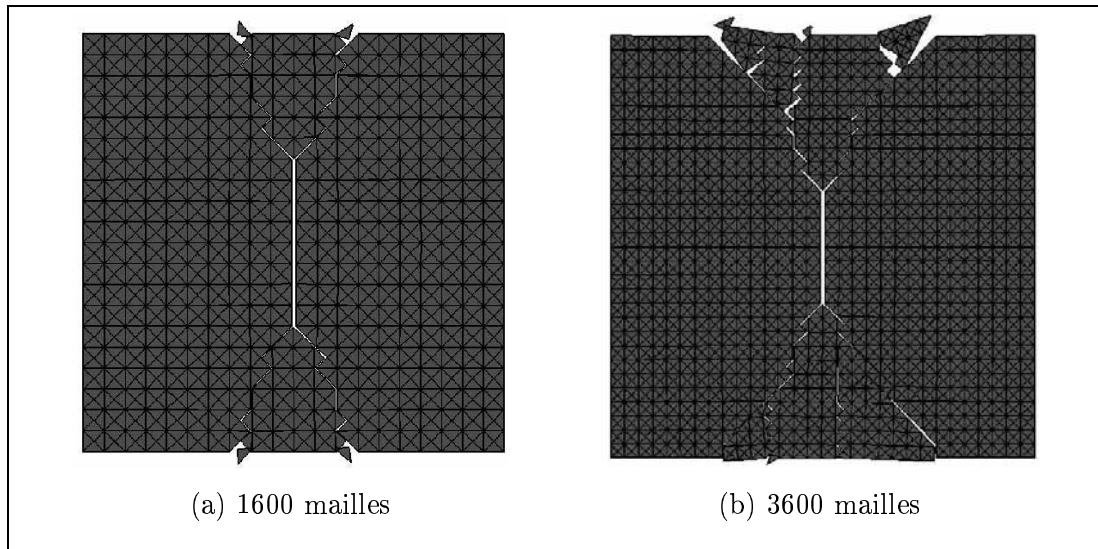


FIG. 7.13 – Faciès de rupture dans le cas (a) 1600 mailles et (b) 3600 mailles.

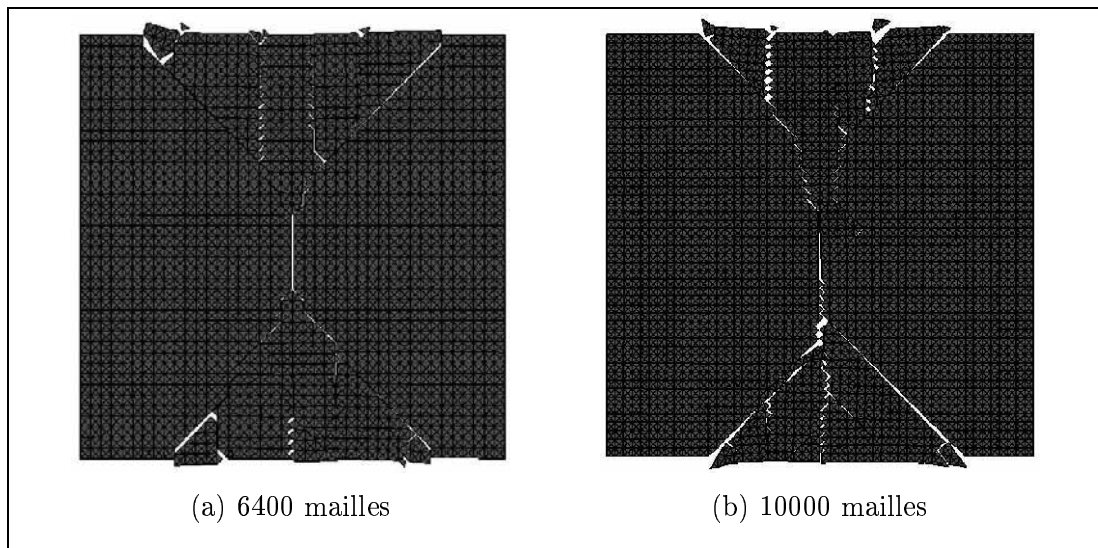


FIG. 7.14 – Faciès de rupture dans le cas (a) 6400 mailles et (b) 10000 mailles.

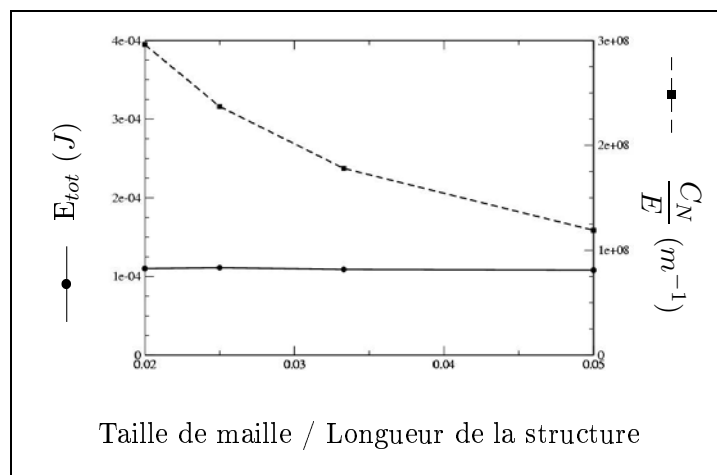


FIG. 7.15 – Energie macroscopique et raideur initiale interfaciale en fonction de la taille de maille.

7.5 Bilan du chapitre

Dans cette étude, le comportement est découplé en un comportement volumique et en un comportement surfacique (approche multicorps). Les identifications des lois volumiques et surfaciques, ainsi que les lois pour les différentes interfaces entre les phases mises en jeu, sont effectuées à température ambiante (essais isothermes à 20°C et quasi-statiques).

Le comportement volumique des différentes phases (Zircaloy, hydrure et zircon) est obtenu par identification par rapport à des essais expérimentaux effectués dans le cadre du programme PROMETRA et des essais réalisés avec Charnoz (2005), en collaboration avec le LMGC, pour le Zircaloy. Les hypothèses de modélisation retenues sont :

- Zircaloy-4 détendu irradié : loi élastoplastique à écrouissage linéaire et isotrope,
- hydrure : élastique (un comportement élastoplastique des hydrures pourra être pris en compte dans la suite),
- zircon : élastique.

Pour la loi surfacique (Chapitre 3), les hypothèses de modélisation sont :

- $C_N = C_T$, même raideur interfaciale initiale normale et tangente,
- $\beta_0 = 1$, interface initiale vierge,
- $p = 0$, pas de pression post-décohésion,
- $\mu_{\text{rot}} = 0$, pas de frottement.

La raideur initiale interfaciale et la contrainte cohésive maximale sont les deux paramètres retenus permettant de définir entièrement la loi surfacique :

- la raideur interfaciale initiale introduit de la souplesse dans le matériau. Cette souplesse est prise en compte par l'intermédiaire d'une relation entre la raideur théorique (sans CZM) et la raideur effective en fonction de la taille de maille pour une tolérance sur la souplesse introduite donnée. La relation est obtenue par homogénéisation en considérant les zones cohésives comme des inclusions de type "penny-shape". La tolérance retenue est une souplesse introduite d'au maximum 10% de la raideur théorique (moins en pratique),
- la contrainte cohésive maximale est quant à elle obtenue par confrontation des essais expérimentaux (base PROMETRA et essais réalisés avec Charnoz (2005)) et numériques (réalisés avec le logiciel X-per). Ce paramètre reste cependant indéterminé pour les hydrures ; deux comportements ont ainsi été retenus : hydrures fragilisants et hydrures fragilisants-durcissants.

La taille de la cellule de base est déterminée par analyse d'image sur une portion de gaine de combustible à fort taux de combustion (plusieurs cycles en réacteur).

Une analyse de l'influence du maillage a mis en valeur :

- une dépendance de la fissuration au chargement et non à l'orientation des mailles,
- une indépendance des paramètres effectifs à la taille des mailles, à partir d'une taille de maille assez faible.

Chapitre 8

Simulations numériques à l'échelle microscopique

Sommaire

8.1	Description des essais numériques	151
8.2	Zircaloy vierge	151
8.3	Zircaloy hydruré	152
8.3.1	Cas d'hydrures fragilisants ($\hat{R}^H = 0.45 \hat{R}^{Zr}$)	152
8.3.1.a	Analyse statistique	152
8.3.1.b	Analyse mécanique	152
8.3.2	Cas d'hydrures durcissants-fragilisants ($\hat{R}^H = 1.3 \hat{R}^{Zr}$)	155
8.3.2.a	Analyse statistique	156
8.3.2.b	Analyse mécanique	157
8.3.2.c	Comparaison des résultats avec quelques modèles de la littérature	157
8.3.3	Conclusion	160
8.4	Bilan du chapitre	161

A l'échelle microscopique, le comportement surfacique, c'est-à-dire la contrainte s'appliquant sur les lèvres de la fissure en fonction d'un saut de déplacement et d'un taux d'hydrogène, est déterminée par expérimentation numérique. L'expérimentation est basée sur des techniques d'homogénéisation périodique numérique (§ 2.2.2.b). En d'autres termes, les coefficients à l'échelle macroscopique sont obtenus à partir de simulations numériques à l'échelle microscopique.

Le comportement surfacique est défini par deux paramètres (voir § 7.2) : la contrainte cohésive maximale et la raideur interfaciale initiale.

Ces coefficients sont estimés à partir de simulations numériques sur plusieurs cellules de bases pour chaque taux d'hydrogène considéré.

Les résultats sont ensuite confrontés aux observations expérimentales.

8.1 Description des essais numériques

Les choix de modélisation sont décrits dans le Chapitre 7.

Les simulations numériques périodiques à l'échelle microscopique sont effectuées, en 2D en déformations planes, sur des cellules de base rectangulaires de dimension $88\mu m \times 20\mu m$. Les cellules de base sont découpées en 7040 mailles triangulaires (carrées coupés en triangles, $88 \times 20 \times 4$ mailles, § 7.4). La taille de maille est $L_{\text{mesh}} = 1\mu m$.

Les microstructures, obtenues à partir de tirages aléatoires, sont regroupées dans l'Annexe B.

Les comportements volumiques et surfaciques sont respectivement décrits dans les TAB. 7.1 et TAB. 7.2.

Le chargement en dérivée temporelle du gradient de la transformation macroscopique de $10^6 s^{-1}$ est appliqué suivant x (FIG. 8.1).

Aucune pré-fissure n'est initialement présente dans la structure.

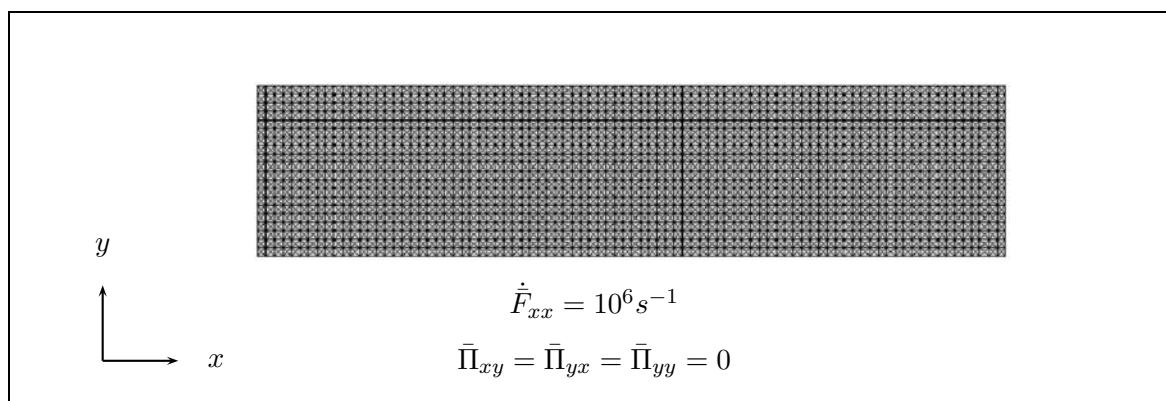


FIG. 8.1 – Cellule de base et sollicitations.

8.2 Zircaloy vierge

Le comportement équivalent du Zircaloy vierge, obtenu à l'échelle microscopique, est décrit sur la FIG. 7.4. Il apparaît clairement que le comportement équivalent de type élastoplastique endommageable résulte naturellement du couplage d'un comportement volumique élastoplastique durcissant dans les mailles et d'un comportement surfacique adoucissant (MZCF) entre les mailles.

La rupture se produit à 22.5% pour une énergie surfacique de fissuration de $11.1 kJ/m^2$.

8.3 Zircaloy hydruré

La contrainte cohésive maximale de l'interface hydrure-hydrure est un paramètre indéterminé du problème. L'étude de la réponse mécanique lorsque $\hat{R}^H = 0.45 \hat{R}^{Zr}$ et $\hat{R}^H = 1.3 \hat{R}^{Zr}$ permet une première identification de ce paramètre.

8.3.1 Cas d'hydrures fragilisants ($\hat{R}^H = 0.45 \hat{R}^{Zr}$)

Les résultats des expérimentations numériques pour $\hat{R}^H = 0.45 \hat{R}^{Zr}$ sont classés par fraction volumique d'hydrogène dans l'Annexe C.2.

8.3.1.a Analyse statistique

Les coefficients cohésifs de la loi surfacique sont estimés à partir de plusieurs simulations numériques. Le nombre de calculs nécessaires à la détermination des coefficients dépend de la taille de la cellule de base. Ce nombre doit être suffisamment grand pour garantir que la moyenne des résultats est bien la grandeur équivalente recherchée (Kanit et al., 2003; Forest, 2004). Le nombre de réalisations est cependant limité par le temps de calcul. En effet, la durée de chaque réalisation est en moyenne de l'ordre de 60h (les calculs ont été effectués sur des clusters de pc composés de processeurs cadencés à 1.8 GHz et 3 GHz avec 2 Go de RAM). Le temps de calcul peut ainsi devenir rapidement très important. L'objectif est donc d'effectuer un nombre de calculs raisonnable tout en préservant la validité du résultat.

La FIG. 8.2 montre l'écart type relatif (écart-type sur la moyenne) des énergies totales et déformations à rupture en fonction de la fraction volumique d'hydrogène. Pour une fraction volumique d'hydrogène de 1.5%, ce qui correspond à une inclusion (voir FIG. 8.3), l'indépendance du tirage pour un VER périodique est retrouvée. Ce résultat constitue une validation de l'implémentation des conditions de périodicité. La dispersion maximale se situe à des fractions volumiques de 3% et 5% avec des valeurs de l'écart type relatif aux alentours de 18% (voir FIG. 8.4). En dehors de ces valeurs, notamment pour des fractions volumiques plus élevées, la dispersion reste faible (écart type relatif < 5 %). En considérant la périodicité des VER, les tirages de microstructure pour des fractions volumiques supérieures à 5% sont "proches" (voir les VER reproduits par périodicité pour 9.5% d'hydrogène sur la FIG. 8.5).

Afin d'obtenir un résultat convenable, le nombre de calculs pour les fractions volumiques de 3% et 5% doit donc être élevé.

8.3.1.b Analyse mécanique

La FIG. 8.6 présente les résultantes sur la structure en fonction de la déformation pour différentes fractions volumiques. Pour des raisons de clarté, les résultats sont comparés pour un seul tirage par taux d'hydrogène (initiateur égal à 1).

L'introduction d'inclusions d'hydrures dans la matrice en Zircaloy entraîne une fragilisation de la structure. Cette fragilisation se traduit par une diminution à la fois de la déformation à rupture et de la contrainte maximale du composite.

Plus précisément, une augmentation de la raideur (partie initiale des courbes) est observée qui s'explique par une raideur des inclusions plus élevée que celle de la matrice ($E^H = 135GPa$ et $E^{Zr} = 99GPa$). La rupture des hydrures (fragiles) semble pilotée par un critère en déformation et intervient pour une déformation d'environ 0.21% (premier maximum local atteint). Ces ruptures créent des cavités dans le composite et entraînent ainsi une diminution de la résultante. La diminution est

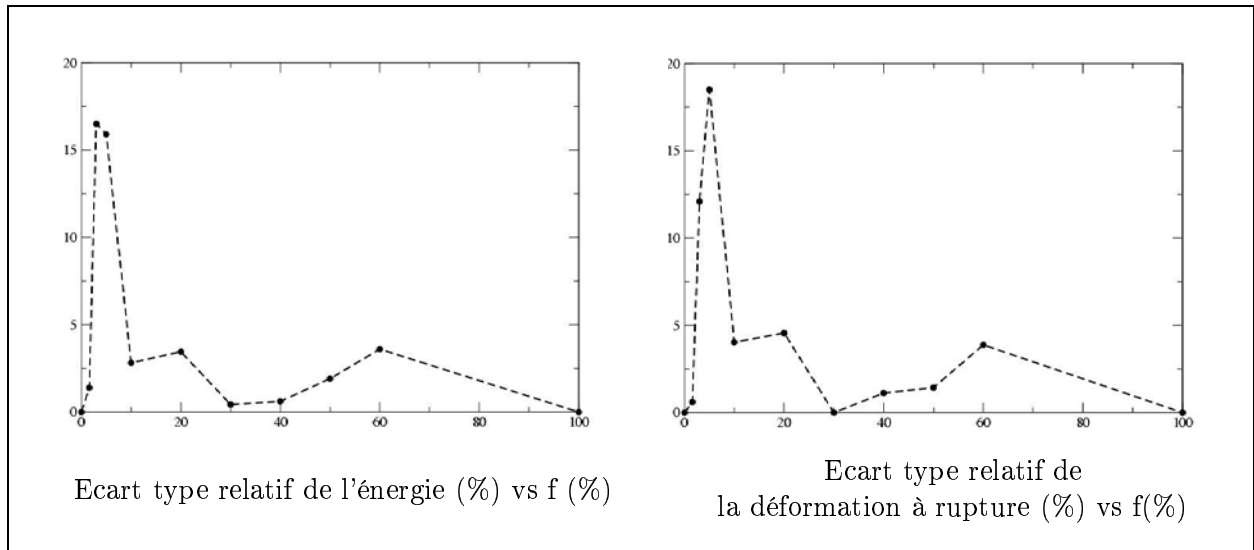


FIG. 8.2 - $\hat{R}^H = 0.45 \hat{R}^{Zr}$: Ecart type relatif des énergies totales et déformations à rupture en fonction de la fraction volumique d'hydrogène.

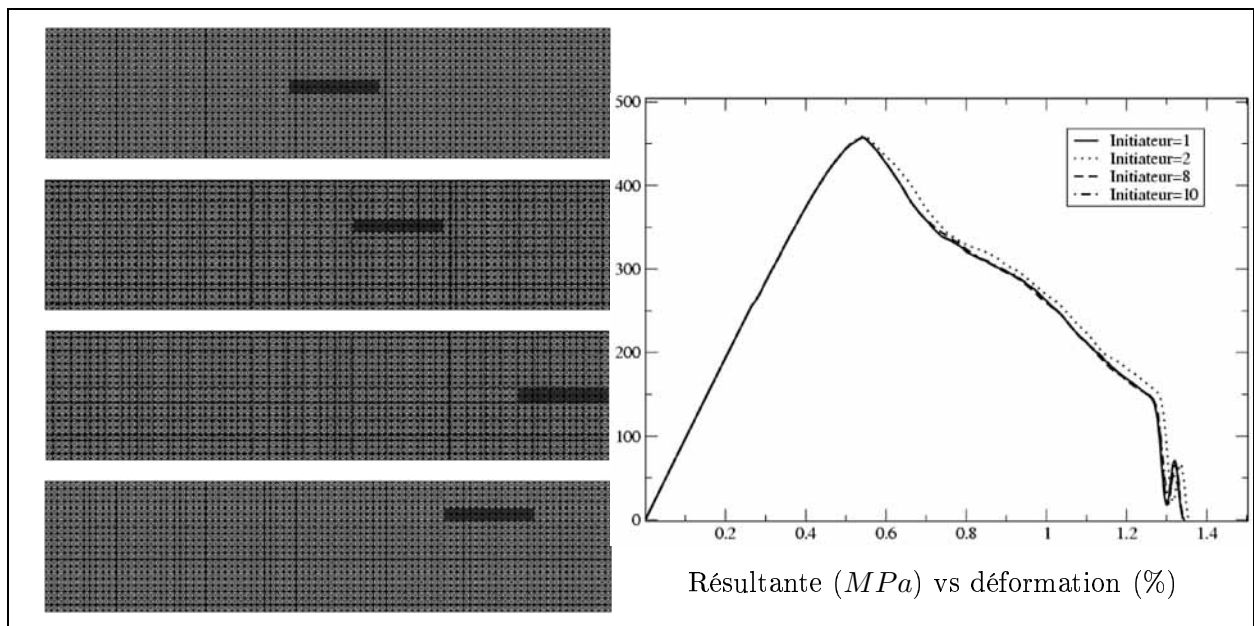


FIG. 8.3 - $\hat{R}^H = 0.45 \hat{R}^{Zr}$: Exemples de tirages de microstructures (à gauche) et résultantes en fonction de la déformation (à droite) pour une fraction volumique de 1.6%.

d'autant plus importante que la fraction volumique d'hydrogène, c'est-à-dire le nombre d'inclusions, est grande. Les vides jouent le rôle de pré-fissures dans le matériau biphasé et deviennent ainsi les zones dont les frontières sont les lieux de concentrations de contraintes (points de faiblesses) dans la structure. A ce stade, la matrice en Zircaloy ne contient pas de fissures. Nous observons ensuite une augmentation du chargement correspondant à l'arrêt des fissures aux interfaces inclusions/matrice. L'augmentation du chargement dépend du taux de matrice et est d'autant plus grand que la fraction volumique de matrice est grande (courbes jusqu'au deuxième maximum local). La rupture de la

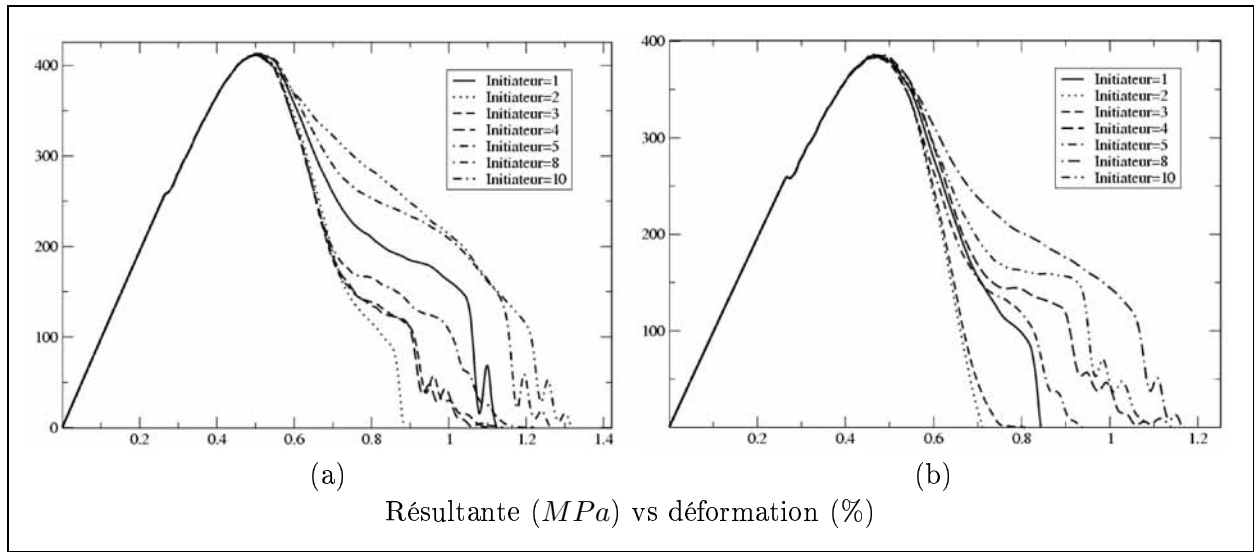


FIG. 8.4 – $\hat{R}^H = 0.45 \hat{R}^{Zr}$: Résultats sur la structure en fonction de la déformation pour (a) 3% et (b) 5% d'hydrogène.

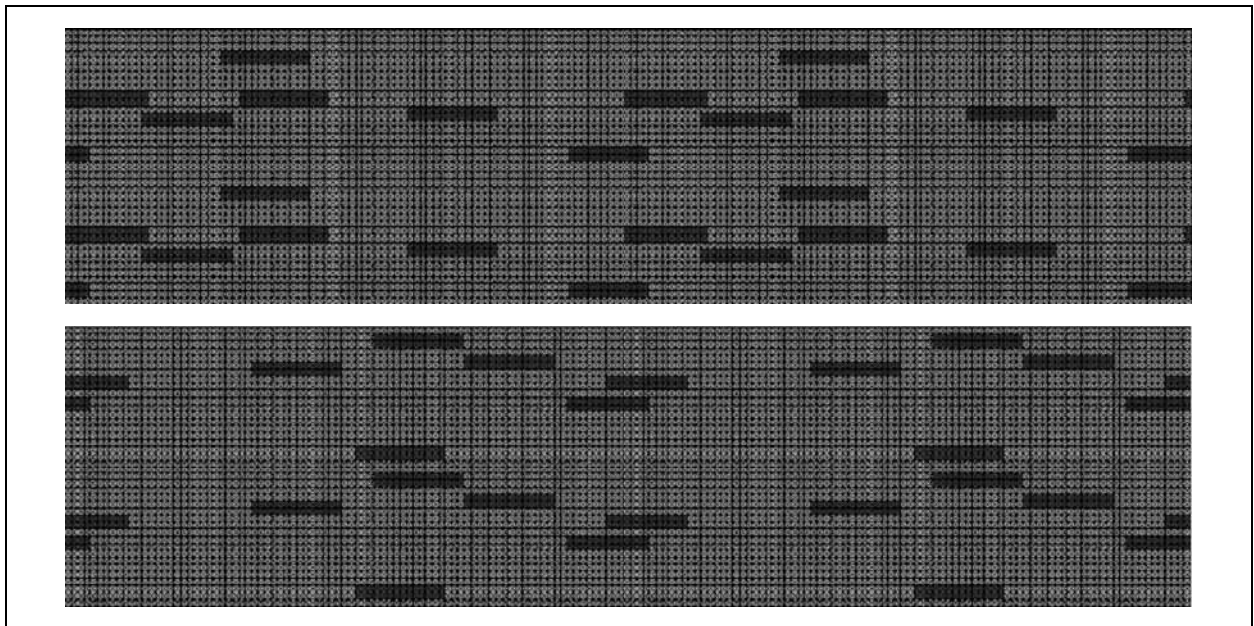


FIG. 8.5 – Comparaison de microstructures issues de tirages périodiques pour 9.5% d'hydrogène : initiateur=4 (en haut) et initiateur=1 (en bas).

matrice (ductile) semble pilotée par un critère à la fois en contrainte et en énergie. Les fissures dans les hydrures se propagent ensuite dans la matrice (endommagement progressif de la structure décrit par une diminution progressive de la résultante) pour conduire finalement à la rupture de la cellule.

La FIG. 8.7 illustre la rupture des hydrures puis la propagation dans la matrice. La cellule de base fissurée est reproduite par périodicité afin de reproduire la structure fissurée.

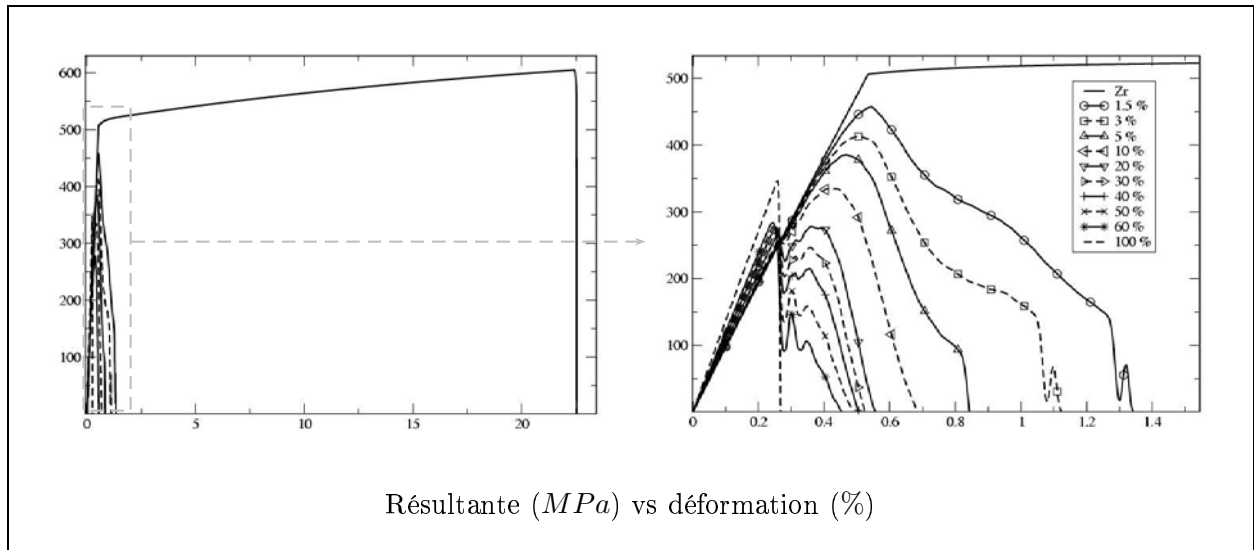


FIG. 8.6 – $\hat{R}^H = 0.45 \hat{R}^{Zr}$: Résultats en fonction de la déformation pour différentes fractions volumiques d’hydrogène avec, pour chaque taux, l’initiateur égal à 1.

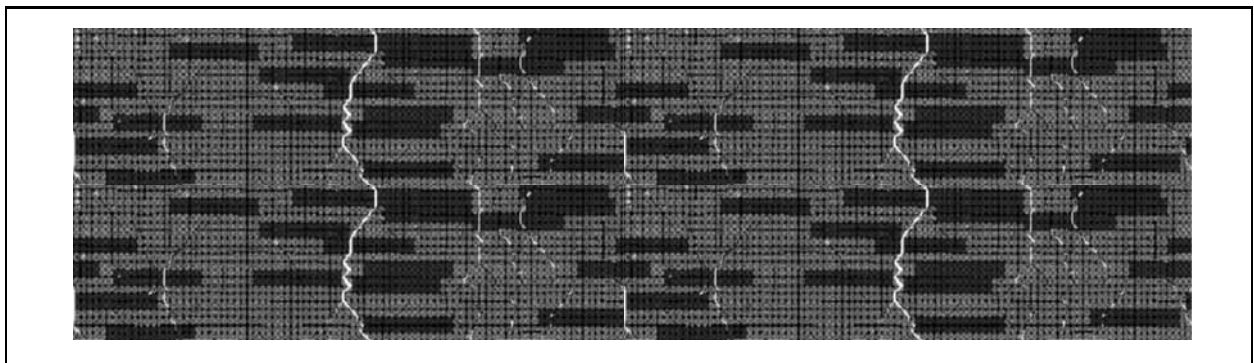


FIG. 8.7 – Illustration d’une cellule de base fissurée reproduite par périodicité.

La FIG. 8.8 donne l’évolution de l’énergie totale et de la déformation à rupture en fonction de la fraction volumique d’hydrogène. L’énergie décroît rapidement avec le taux d’hydrogène (1.5% d’hydrogène réduit l’énergie à rupture de 97 %). Le composite passe donc très rapidement d’un comportement ductile à un comportement fragile (au sens suivant : la contrainte maximale décroît *et* la déformation à rupture décroît). Un palier est atteint aux alentours de 20%, soit 3650 ppm (Eq. B.0.1) d’hydrogène (la courbe décroît légèrement en échelle logarithmique). Ce palier signifie qu’à partir d’un certain taux, l’introduction d’hydrogène dans le matériau n’a pratiquement plus d’effet sur la fragilisation du composite. Pour la déformation à rupture (courbe à droite sur la FIG. 8.8), une évolution similaire est observée.

8.3.2 Cas d’hydrures durcissants-fragilisants ($\hat{R}^H = 1.3 \hat{R}^{Zr}$)

Les résultats des expérimentations numériques pour $\hat{R}^H = 1.3 \hat{R}^{Zr}$ sont classés par fraction volumique dans l’Annexe C.3.

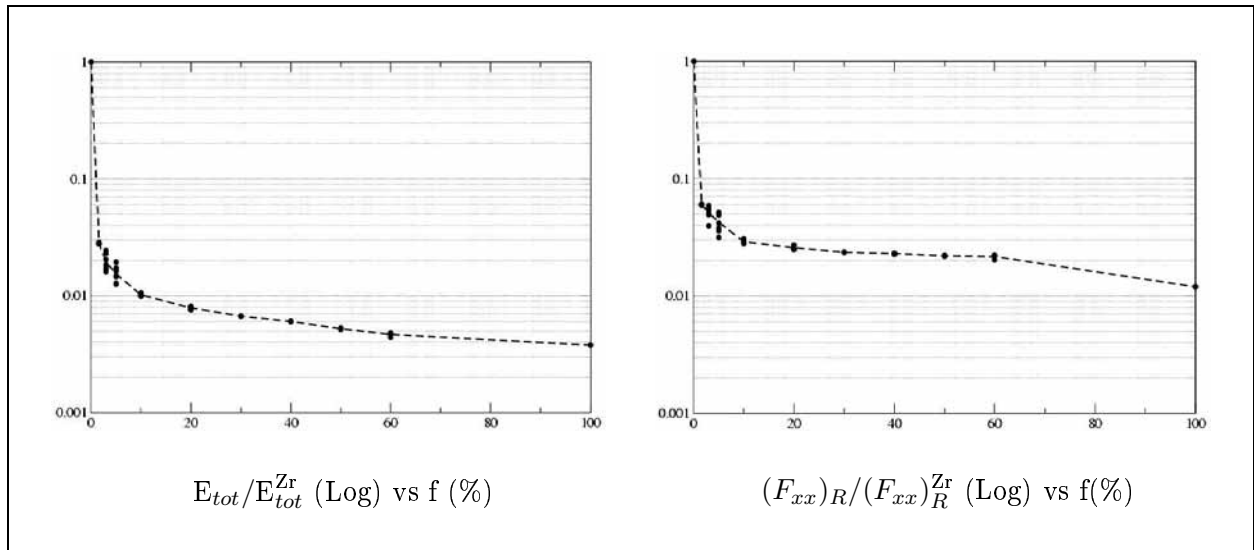


FIG. 8.8 – $\hat{R}^H = 0.45 \hat{R}^{Zr}$: Energies totales (à gauche) et déformations à rupture (à droite) en fonction de la fraction volumique d'hydrogène.

8.3.2.a Analyse statistique

La FIG. 8.9 montre l'écart-type relatif des énergies totales et déformations à rupture en fonction de la fraction volumique d'hydrogène.

Une dispersion des résultats proche du cas $\hat{R}^H = 0.45 \hat{R}^{Zr}$ (§ 8.3.1) est retrouvée. La dispersion maximale se situe autour de faibles valeurs de la fraction volumique d'hydrogène (3% et 10%, voir FIG. 8.10). Le nombre de calculs sur les cellules de base doit donc être plus élevé autour de ces taux d'hydrogène. Pour les autres taux, la dispersion reste inférieure à 5%.

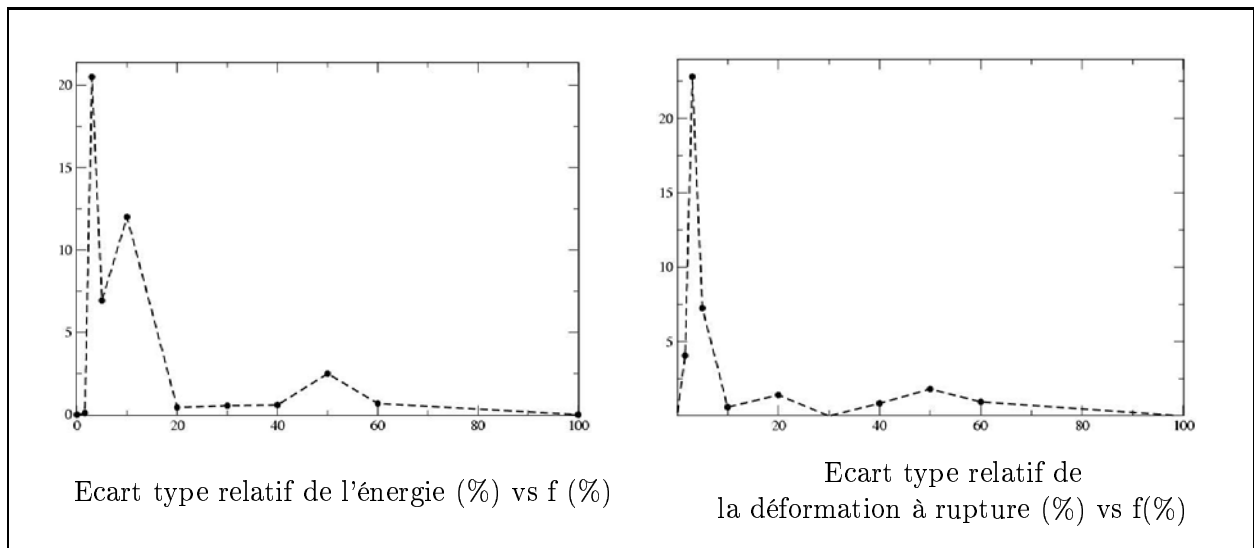


FIG. 8.9 – $\hat{R}^H = 1.3 \hat{R}^{Zr}$: Ecart type relatif des énergies totales et déformations à rupture en fonction de la fraction volumique d'hydrogène.

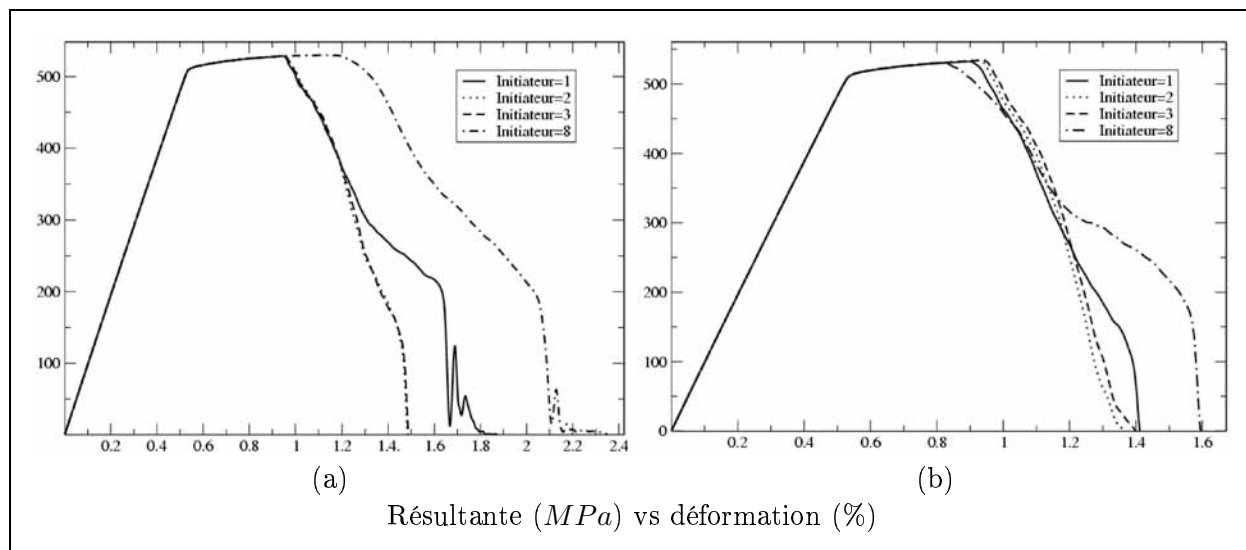


FIG. 8.10 – $\hat{R}^H = 1.3 \hat{R}^{Zr}$: Résultantes sur la structure en fonction de la déformation pour (a) 3% et (b) 5% d’hydrogène.

8.3.2.b Analyse mécanique

La FIG. 8.11 présente les résultantes sur la structure en fonction de la déformation pour différentes fractions volumiques (un tirage par fraction volumique, initiateur égal à 1).

La contrainte à rupture des inclusions d’hydrures est ici plus élevée que celle de la matrice en Zircaloy. La fragilisation par les hydrures se traduit ainsi par une diminution de la déformation à rupture et une augmentation de la contrainte maximale du composite. Le composite passe progressivement d’un comportement ductile (1.5% d’hydrogène) à un comportement fragile (100% d’hydrogène). En particulier, la raideur initiale et la limite d’élasticité augmentent avec le taux d’hydrogène du fait de la raideur plus élevée des hydrures. Le concept intermédiaire est ici appelé “durcissant-fragilisant” au sens suivant : la contrainte maximale croît et la déformation à rupture décroît.

Sur la courbe énergie totale en fonction de la fraction volumique d’hydrogène (FIG. 8.12), on observe une fragilisation de la matrice par les inclusions. A partir de 20% d’hydrogène, la courbe décrit un palier avec un minimum aux alentours de 60% d’hydrogène. Ce minimum correspond à la transition entre un comportement plutôt ductile vers un comportement plutôt fragile du biphasé. Le comportement du composite peut être ainsi plus fragile que le comportement d’un de ses constituants. Cette situation est celle d’un taux d’inclusions pour lequel le composite a perdu beaucoup de ductilité sans encore avoir acquis suffisamment de ténacité.

8.3.2.c Comparaison des résultats avec quelques modèles de la littérature

Les résultats du § 8.3.2.b sont comparés avec les modèles de Varias et Massih (2002), Wang et Nakamura (2004) et Jin et al. (2002) (voir § 3.2.3). Les comparaisons sont effectuées pour un comportement normal (sans cisaillement) sur les énergies cohésives des composites en Zircaloy hyduré.

Varias et Massih (2002) proposent une loi des mélange entre les énergies cohésives du Zircaloy et des hydrures pour obtenir l’énergie cohésive du Zircaloy hyduré en fonction de la fraction volumique d’hydrogène :

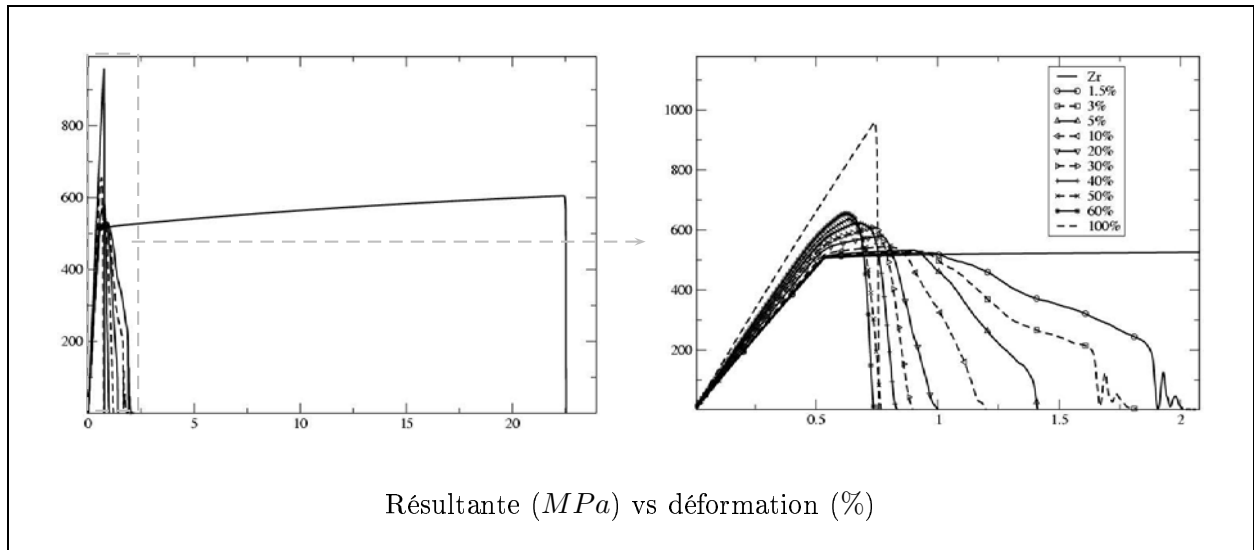


FIG. 8.11 – $\hat{R}^H = 1.3 \hat{R}^{Zr}$: Résultats en fonction de la déformation pour différentes fractions volumiques d'hydrogène avec, pour chaque taux, l'initiateur égal à 1.

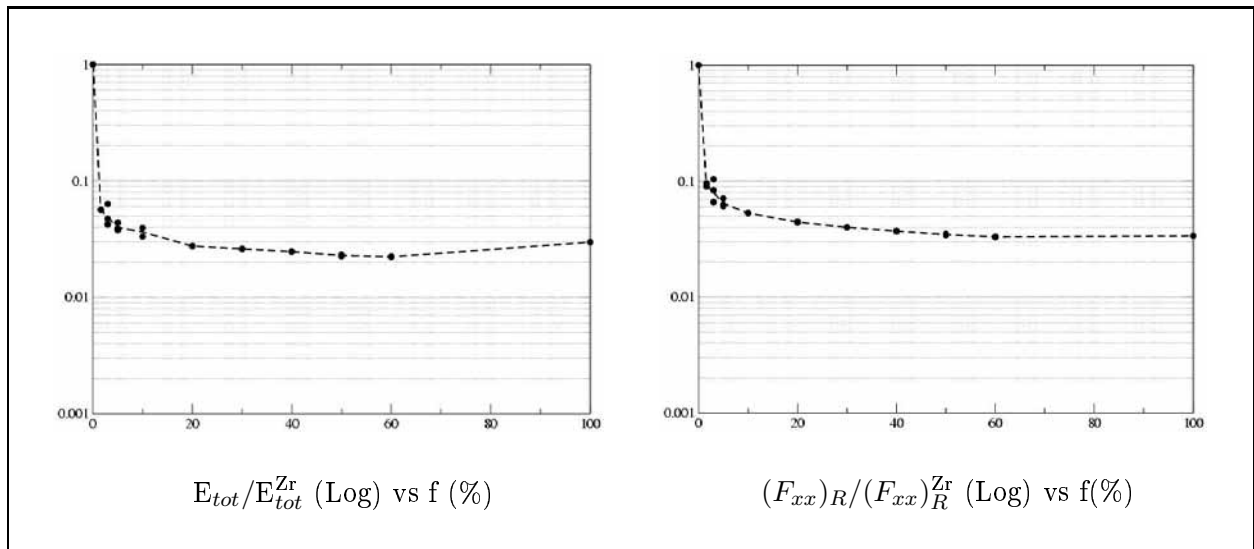


FIG. 8.12 – $\hat{R}^H = 1.3 \hat{R}^{Zr}$: Energies totales et déformations à rupture en fonction de la fraction volumique d'hydrogène.

$$E_{coh}^{ZrH}(f^{Zr}) = (1 - f^{Zr})E_{coh}^H + f^{Zr}E_{coh}^{Zr}. \quad (8.3.1)$$

Wang et Nakamura (2004) proposent de relier la contrainte maximale cohésive à l'énergie cohésive, ces valeurs étant adimensionnées par la valeur en un point de référence, par une loi puissance dépendant d'un paramètre α . Le point de référence choisi est la phase Zircaloy. La relation s'écrit pour une fissuration en mode I :

$$\frac{\hat{R}_N^{ZrH}}{(\hat{R}_N^{Zr})} = \left(\frac{E_{coh}^{ZrH}}{E_{coh}^{Zr}} \right)^\alpha. \quad (8.3.2)$$

La comparaison est effectuée sur les énergies. L'énergie cohésive est ainsi obtenue à partir des valeurs de la contrainte cohésive maximale, elle-même dépendante du taux d'hydrogène. La relation est la suivante :

$$\frac{E_{coh}^{ZrH}}{E_{coh}^{Zr}} = \left(\frac{\hat{R}_N^{ZrH}}{\hat{R}_N^{Zr}} \right)^{\frac{1}{\alpha}}. \quad (8.3.3)$$

Le paramètre α est déterminé ici par une comparaison avec les données obtenues pour la phase hydrure. La valeur obtenue est : $\alpha = -0.132$.

Le modèle de Jin et al. (2002) prend en compte deux paramètres supplémentaires par rapport à une loi des mélanges classique. Ces paramètres, β^{Zr} et β^H , décrivent l'intensité d'adhésion des phases Zircaloy et hydrure pour un taux d'hydrogène donné. Le modèle s'écrit :

$$E_{coh}^{ZrH} = \frac{f^{Zr}}{f^{Zr} + \beta^{Zr}[1 - f^{Zr}]} E_{coh}^{Zr} + \frac{1 - f^{Zr}}{1 - f^{Zr} + \beta^H f^{Zr}} E_{coh}^H. \quad (8.3.4)$$

Les paramètres β^{Zr} et β^H sont à déterminer pour le Zircaloy et les hydrures. Le paramètre β^H n'a pratiquement aucune influence sur l'énergie cohésive du composite (ce résultat a été observé par Jin et al. (2002) dans la cas d'un composite titane/borure de titane) et est pris égal à 1.

La FIG. 8.13 compare les résultats obtenus à l'échelle microscopique avec les modèles de Varias et Massih (2002), Wang et Nakamura (2004) et Jin et al. (2002). Dans ce dernier modèle, le paramètre d'adhésion pour le Zircaloy, β^{Zr} , est pris égal à 1, 10, 100 et 1000.

Les modèles "lois des mélanges", de type Varias et Massih (2002) et Jin et al. (2002) avec $\beta^{Zr} = 1$ et $\beta^H = 1$, surestiment l'énergie cohésive du Zircaloy hydruré.

Le modèle de Wang et Nakamura (2004) décrit de plus une augmentation de l'énergie cohésive qui se traduit par un renforcement du composite par les inclusions d'hydrures. Ce résultat est en contradiction avec les observations expérimentales (Grange, 1998). En effet, le modèle de Wang et Nakamura (2004) décrit le comportement d'un biphasé composé de deux matériaux élastoplastiques. Il est alors naturel de retrouver un comportement "ductile" pour le composite au sens suivant : l'énergie cohésive augmente lorsque la contrainte maximale diminue. Or, dans le cas du Zircaloy hydruré, le comportement tend vers le comportement élastique fragile des hydrures lorsque la fraction volumique d'hydrogène augmente, ce qui se traduit par une augmentation de la contrainte maximale et une diminution de l'énergie cohésive (comportement "durcissant-fragilisant" des hydrures, voir § 8.3.2.b).

Le calibrage du paramètre d'adhésion du Zircaloy pour le modèle de Jin et al. (2002) permet de retrouver l'évolution de l'énergie de cohésion à l'échelle microscopique. En particulier, lorsque β^{Zr} est assez grand, l'évolution présente un minimum (voir l'évolution du modèle de Jin et al. (2002) sur la FIG. 8.13 avec $\beta^{Zr} = 1000$). Ce minimum correspond à la transition entre un matériau plutôt ductile vers un matériau plutôt fragile.

Ce dernier modèle, avec les paramètres d'adhésion bien choisis, permet donc de retrouver l'influence des inclusions d'hydrures sur la fragilisation du matériau hydruré. Ce modèle est par ailleurs le seul à proposer l'existence d'un minimum de l'énergie surfacique à rupture, ce qui constitue un résultat important du présent travail.

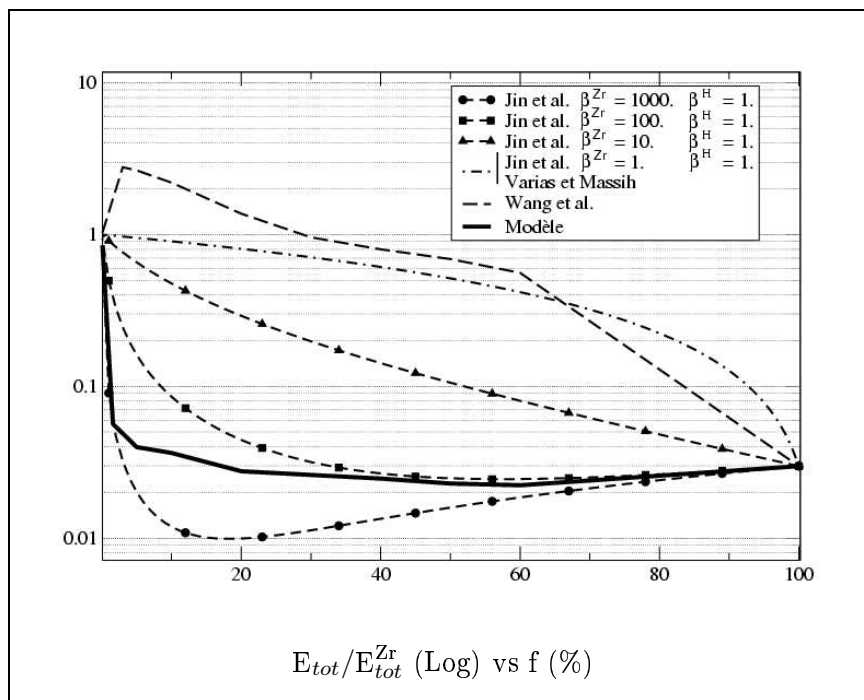


FIG. 8.13 – Comparaison des résultats des essais numériques avec les modèles de Varias et Massih (2002), Wang et Nakamura (2004) et Jin et al. (2002) pour plusieurs paramètres d'adhésions : $(\beta^{Zr} = 1., \beta^H = 1.)$, $(\beta^{Zr} = 10., \beta^H = 1.)$, $(\beta^{Zr} = 100., \beta^H = 1.)$, $(\beta^{Zr} = 1000., \beta^H = 1.)$.

8.3.3 Conclusion

L'effet très fragilisant des inclusions d'hydrures ainsi que le palier pour l'énergie totale et la déformation à rupture (fraction volumique $> 10\%$) ont été observés expérimentalement (programme PROMETRA). Cependant, le composite semble plus fragile que les résultats obtenus lors des essais expérimentaux. Rashid (2004) trouve notamment une déformation à rupture de l'ordre de 4% pour 400ppm, soit environ 2%, d'hydrogène. Ce résultat est en accord avec le programme PROMETRA. Lors des essais numériques, les déformations à rupture obtenus pour 3% d'hydrogène sont inférieures à 4% ($\hat{R}^H = 0.45 \hat{R}^{Zr}$: 1.17%, $\hat{R}^H = 1.3 \hat{R}^{Zr}$: 1.75%).

Le seul paramètre mécanique indéterminé de l'étude, pour la modélisation adoptée, est la contrainte cohésive maximale des hydrures. Ainsi, augmenter la déformation à rupture implique l'augmentation de cette contrainte. Or, l'augmentation de la contrainte maximale entraîne l'initiation de la fissuration dans la matrice, ce qui est en contradiction avec les observations expérimentales (voir § 7.2.2).

En considérant le comportement élastique fragile des hydrures, il est impossible de retrouver les résultats de la littérature concernant la fragilisation du Zircaloy par les hydrures en termes de déformations à rupture. Il semble ainsi nécessaire d'invoquer un comportement ductile pour les hydrures. Cette hypothèse n'est pas étudiée ici. Cependant, l'objet de cette étude étant l'obtention d'un critère de rupture dans le cadre de la sûreté nucléaire, le choix d'un comportement plus fragilisant que celui observé dans la littérature permet d'envisager un critère conservatif pour la sûreté.

Dans la suite, pour l'étude du comportement de la gaine à l'échelle macroscopique, les résultats obtenus pour une contrainte cohésive maximale des hydrures de $\hat{R}^H = 1.3 \hat{R}^{Zr}$ sont retenus.

8.4 Bilan du chapitre

Les essais numériques périodiques, à l'échelle microscopique, sont effectués sur plusieurs cellules de bases pour des taux d'hydrogène allant de 0 à 100%. Les paramètres effectifs, utilisés à l'échelle macroscopique, sont déterminés à partir de ces essais numériques.

Deux comportements pour les hydrures sont considérés : hydrures fragilisants et hydrures fragilisants-durcissants. Dans les deux cas, on observe une fragilisation du composite par les hydrures. Cependant, le composite semble plus fragile que les comportements observés expérimentalement.

Afin de reproduire ces observations, la contrainte cohésive maximale, seul paramètre encore indéterminé de l'étude, doit être augmenté. Or, une augmentation de ce paramètre entraîne une fissuration de la matrice avant celle des hydrures, ce qui est en contradiction avec les observations expérimentales. Le choix d'un comportement ductile des inclusions d'hydrure semble donc plus adapté. Cependant, cette étude porte sur une analyse de sûreté et ainsi l'étude d'un comportement plus fragile que celui observé dans la littérature permet d'obtenir un critère conservatif.

Pour l'étude à l'échelle macroscopique, le choix d'un comportement fragilisant-durcissant des hydrures est retenu. Cette étude fait l'objet du chapitre suivant.

Chapitre 9

Echelle macroscopique : calculs de structure

Sommaire

9.1	Paramètres surfaciques : passage de l'échelle micro à l'échelle macro	165
9.2	Gradient d'hydrogène dans la gaine	165
9.3	Portion de gaine de combustible	168
9.3.1	Description des calculs numériques paramétrés	168
9.3.2	Résultats des essais numériques	168
9.4	Gaine de combustible	171
9.4.1	Description de la simulation numérique	171
9.4.2	Résultats	171
9.5	Bilan du chapitre	176

A l'échelle macroscopique, l'objectif est l'obtention d'un critère de rupture sous sollicitations représentatives d'un accident RIA. Pour cela, des calculs de structures sont effectués sur des portions de gaines de combustibles à fort taux de combustion. Les influences du taux d'hydrogène et du gradient d'hydrogène sont notamment étudiées.

9.1 Paramètres surfaciques : passage de l'échelle micro à l'échelle macro

Les paramètres surfaciques à l'échelle macroscopique sont obtenus à partir des résultats des essais numériques à l'échelle microscopique pour $\hat{R}^H = 1.3 \hat{R}^{Zr}$ (§ 8.3.2).

Pour cela, l'énergie de fissuration et la déformation à rupture à l'échelle microscopique (FIG. 8.12) sont approchées par les expressions suivantes :

★ pour le ratio de l'énergie de fissuration :

$$E_{micro}(f) = (1 - f) \left(1 - \frac{1}{2} f^{0.02} - 0.487 \tanh(70f) \right) + 0.0298 \frac{1.0298 + f}{2.0596 - 0.0298f} f, \quad (9.1.1)$$

★ pour le ratio de la déformation à rupture :

$$\Delta_{micro}(f) = (1 - f) \left(1 - 0.492 f^{0.02} - 0.471 \tanh(70f) \right) + 0.0337 \frac{1.0337 + f}{2.0674 - 0.0674f} f. \quad (9.1.2)$$

Par hypothèse, l'énergie de référence et la déformation à rupture du Zircaloy hydruré sont reliées à leurs valeurs pour le Zircaloy par les relations :

$$E_{coh}(f) = E_{micro}(f) E_{coh}^{Zr}, \quad (9.1.3)$$

et

$$\delta(f) = \Delta_{micro}(f) \delta^{Zr}. \quad (9.1.4)$$

En utilisant les Eq. 3.4.7, les relations reliant la contrainte maximale et la raideur initiale interfaciale du Zircaloy hydruré à leurs valeurs pour le Zircaloy sont :

$$C_N(f) = \frac{E_{micro}(f)}{(\Delta_{micro}(f))^2} C_N^{Zr}, \quad (9.1.5)$$

et

$$\hat{R}(f) = \frac{E_{micro}(f)}{\Delta_{micro}(f)} \hat{R}^{Zr}. \quad (9.1.6)$$

9.2 Gradient d'hydrogène dans la gaine

L'hydruration de la gaine de combustible, durant sa vie en réacteur, est un phénomène complexe, due notamment à la précipitation interne des hydrures et au phénomène de surchargement.

Marino (1971, 1972) a étudié mathématiquement la distribution de la concentration d'hydrogène pour une plaque. La relation reliant la concentration d'hydrogène à la position dans l'épaisseur de la gaine est de la forme :

$$[H] = a + b \operatorname{ch}(c(r + d)), \quad (9.2.1)$$

où $d = 9.5\text{mm}$ est le diamètre du tube, ch est le cosinus hyperbolique et a , b et c sont des paramètres dépendant de la température, de la concentration d'hydrogène, de la concentration surchargée, de la limite de solubilité, du flux d'hydrogène au bord et du temps, r est la position dans l'épaisseur du tube.

Zhang (1992) a validé ce résultat par analyse d'image sur une gaine issue d'un réacteur.

Remarque 9.1. *Zhang (1992) trouve cependant une légère différence entre le modèle de diffusion et les observations expérimentales. Ces différences peuvent être attribuées aux effets de l'irradiation, des contraintes mécaniques, du gradient thermique axial ou du cyclage thermique.*

Le paramètre a est la limite de solubilité. Cette limite est donnée par la formule (Zhang, 1992) :

$$a = 9.9 \times 10^4 \exp(-4162/T), \quad (9.2.2)$$

ce qui entraîne à température ambiante :

$$a = 71\text{ppm}. \quad (9.2.3)$$

La relation (9.2.1) est réécrite en fonction du taux moyen d'hydrogène $[\bar{\text{H}}]$ et d'un paramètre p décrivant le gradient d'hydrogène (voir FIG. 9.1) en prenant en compte un rim d'hydrure qui peut apparaître en périphérie externe de la gaine. L'Eq. 9.2.1 s'écrit donc sous la forme exponentielle suivante :

$$\begin{cases} [\text{H}] = a + \frac{b}{2} \exp(c(r+d)) & \text{si } r < k, \\ [\text{H}] = [\text{H}]^{\text{rim}} & \text{sinon,} \end{cases} \quad (9.2.4)$$

où le terme $\exp(-c(r+d))$ est négligé (car $r+d \gg 0$). Cette équation qui doit vérifier les conditions suivantes :

$$\begin{cases} a + \frac{b}{2} \exp(c(k+d)) = [\text{H}]^{\text{rim}} & \text{Valeur de } [\text{H}]^{\text{rim}}, \\ \frac{bc}{2} \exp(c(k+d)) = \frac{[\text{H}]^{\text{rim}} - \left(a + \frac{b}{2}\right)}{k(1-p)} & \text{Dérivée de (9.2.4) au point } k, \\ R([\bar{\text{H}}] - [\text{H}]^{\text{rim}}) = (a - [\text{H}]^{\text{rim}})k + \frac{b}{2ck} [\exp(ck) - 1]k & \text{Aire sous la courbe,} \end{cases} \quad (9.2.5)$$

où $R = 570\mu\text{m}$.

Les coefficients sont exprimés en fonction du paramètre p et du taux moyen d'hydrogène $[\bar{\text{H}}]$ (FIG. 9.1) :

$$\begin{cases} b = ([\text{H}]^{\text{rim}} - a) \frac{2}{\exp(Y)}, \\ c = \frac{Y}{k}, \\ Y = \frac{1}{1-p} + X, \\ k = R \frac{[\bar{\text{H}}] - [\text{H}]^{\text{rim}}}{(a - [\text{H}]^{\text{rim}}) + \frac{b}{2} \frac{\exp(Y) - 1}{Y}}, \\ [\text{H}]^{\text{rim}} = 0.9 \left(a + ([\bar{\text{H}}] - a) \frac{Y - \exp(Y)}{\exp(Y) - 1} \right), \end{cases} \quad (9.2.6)$$

où X est la solution principale de la fonction de Lambert inverse pour $-\frac{1}{1-p} \exp\left(-\frac{1}{1-p}\right)$.

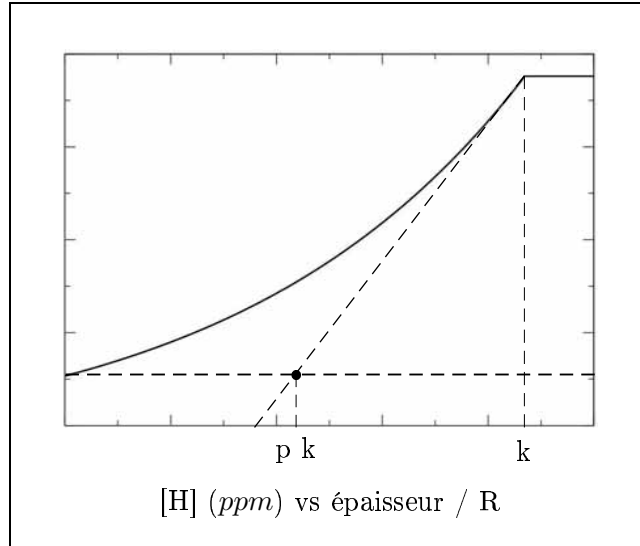


FIG. 9.1 – Gradient d'hydrogène en fonction du taux moyen et d'un paramètre décrivant le gradient

Le paramètre p permet de décrire, pour un taux moyen d'hydrogène donné, le profil du gradient. Pour p petit (FIG. 9.2 (a)), la concentration d'hydrogène reste proche de la moyenne et pour p grand (FIG. 9.2 (b)), le taux d'hydrogène reste faible dans l'épaisseur et une zone de très forte concentration d'hydrogène apparaît dans la périphérie externe de la gaine. La largeur du "palier" dépend de p et est d'autant plus large que p est petit.

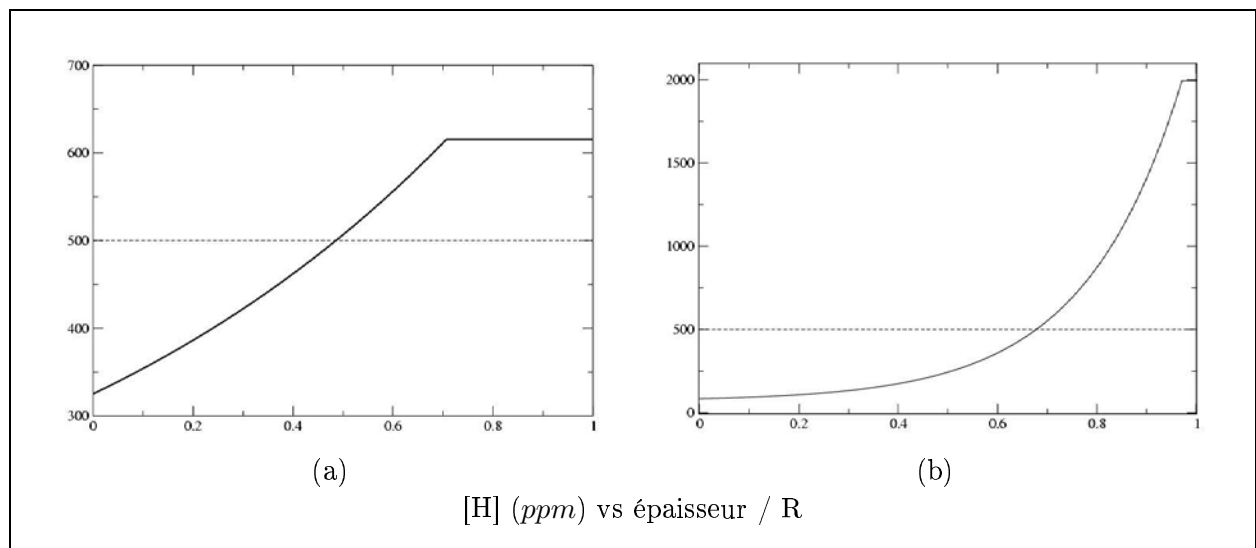


FIG. 9.2 – Profil du gradient d'hydrogène pour $\bar{[H]} = 500ppm$ et (a) $p = 0.3$ et (b) $p = 0.5$

Les différents profils de gradient d'hydrogène pour $\bar{[H]} = 100ppm$, $\bar{[H]} = 200ppm$, $\bar{[H]} = 300ppm$, $\bar{[H]} = 500ppm$ et $\bar{[H]} = 700ppm$ sont regroupés en Annexe D.

9.3 Portion de gaine de combustible

9.3.1 Description des calculs numériques paramétrés

La FIG. 9.3 décrit les paramètres choisis pour les calculs de structure. La structure considérée est une portion de gaine de combustible (angle 6°). Le diamètre de la gaine est de 9.5mm et l'épaisseur est de 0.57mm .

Le maillage est composé de 34×58 mailles carrées coupées en mailles triangulaires (§ 7.4) soit 7888 mailles.

La microstructure, représentative d'une gaine après plusieurs cycles en réacteur (à haut burnup), est composée d'un matériau à gradient de propriétés dans l'épaisseur (Zircaloy hydruré) et d'une couche de zircone à l'extérieur de la gaine (la couche est représentée ici par une maille soit $17\mu\text{m}$ (Desquines et al., 2005)). Le gradient d'hydrogène est un paramètre des simulations (voir § 9.2). Le comportement est découpé en un comportement volumique et un comportement surfacique afin de simuler la fissuration (§ 2.1). Le comportement volumique du Zircaloy hydruré est obtenu par homogénéisation analytique (Monerie et al., 2004; Vincent et al., 2005) (voir § 2.2.2.a) et le comportement surfacique du Zircaloy hydruré est celui obtenu par homogénéisation numérique au Chapitre 8 (Eq. (9.1.5) et (9.1.6)). Les lois volumiques et surfaciques dépendent du taux d'hydrogène local. Pour la couche de zircone, les données matériaux sont rassemblées dans les TAB. 7.1 et 7.2.

Dans la couche de zircone, 5 préfissures sont disposées régulièrement (espacées de $200\mu\text{m}$). Ce nombre est représentatif pour des gaines de combustible 5 cycles (Desquines et al., 2005) (le nombre de fissures apparaissant dans la couche de zircone après un essai en réacteur dépend de l'épaisseur de zircone, lui-même dépendant du nombre de cycles en réacteur).

La vitesse radiale est imposée à l'intérieur de la portion de la gaine représentant une sollicitation de la pastille de combustible durant un accident RIA. La vitesse radiale imposée est $v_r = 20\text{ms}^{-1}$.

Les simulations numériques sont effectuées pour différentes fractions volumiques et plusieurs gradients d'hydrogène. Les taux d'hydrogène moyens pris en compte sont : 100ppm , 200ppm , 300ppm , 500ppm et 700ppm soit 0.55% , 1.1% , 1.6% , 2.74% et 3.8% ; ce qui correspond respectivement à environ 1, 2, 3, 5 et 7 cycles en réacteur (le taux d'hydrogène moyen est relié au nombre de cycles en réacteur par la formule : $[\text{H}] \simeq 1.1N$, où N est le nombre de cycles).

9.3.2 Résultats des essais numériques

Les résultats des calculs macroscopiques pour différents profils d'hydrogène sont rassemblés par taux moyen d'hydrogène en Annexe E.

Les résultats peuvent se mettre sous la forme d'une nappe représentant l'énergie de fissuration en fonction du taux d'hydrogène et du profil de gradient (FIG. 9.4). Cette nappe est ensuite interpolée pour obtenir l'énergie en fonction du profil de gradient pour différents taux d'hydrogène moyens (FIG. 9.5) et l'énergie en fonction du taux d'hydrogène moyen pour différents profils de gradient (FIG. 9.6).

Sur la FIG. 9.6, une fragilisation en fonction du taux d'hydrogène est observée. Ce résultat est conforme avec les observations expérimentales (Arsène, 1997; Grange, 1998).

9.3. PORTION DE GAINÉ DE COMBUSTIBLE

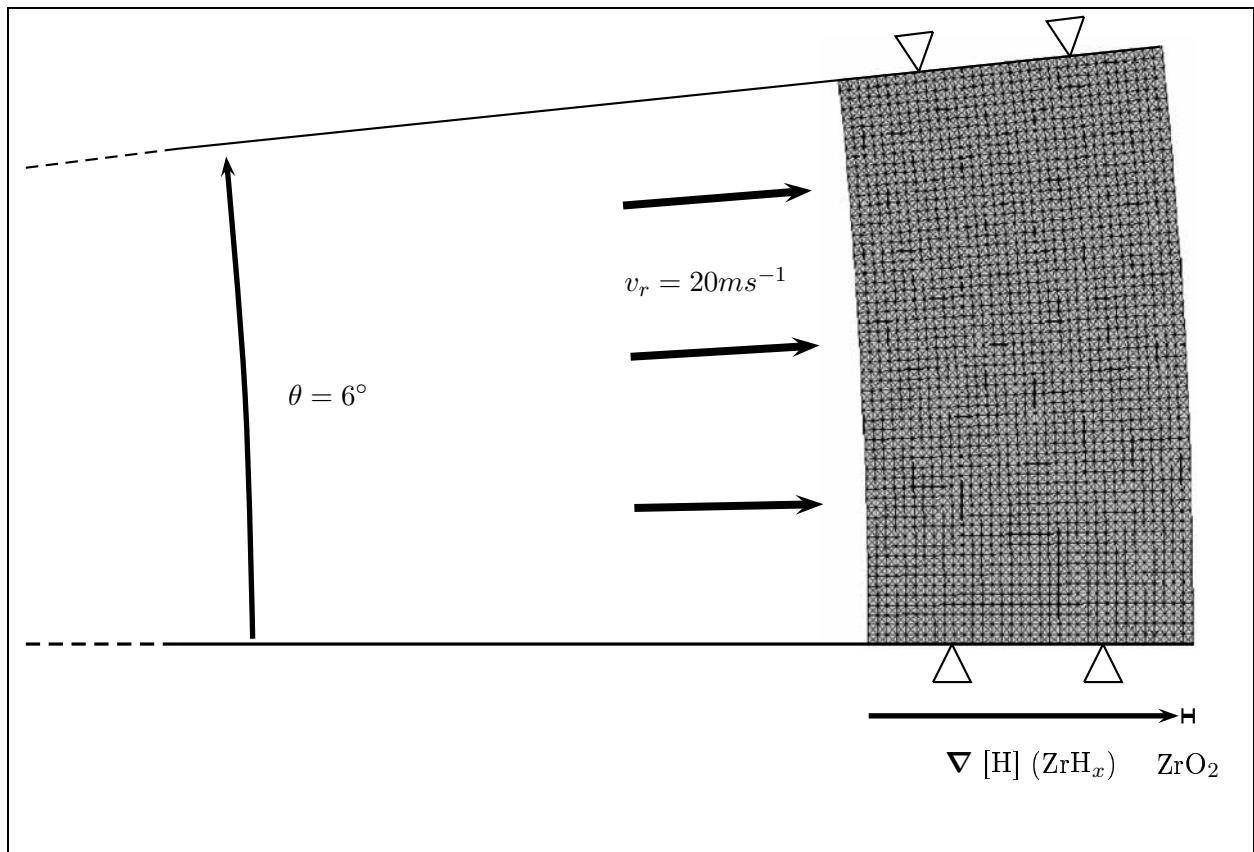


FIG. 9.3 – Description des calculs à l'échelle macroscopique : portion de gaine de combustible

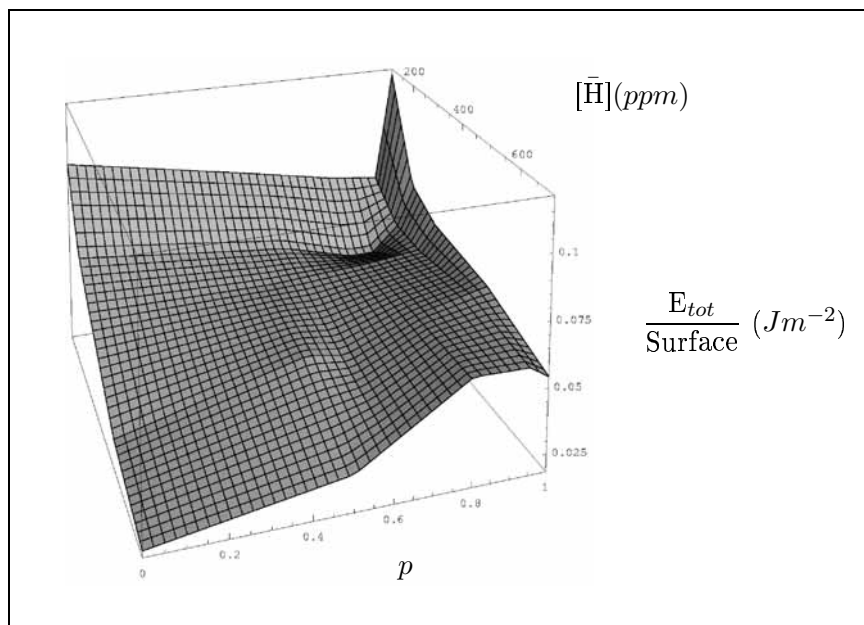


FIG. 9.4 – Nappe représentant l'énergie de fissuration en fonction du taux moyen d'hydrogène et du profil de gradient.

A faible taux d'hydrogène ($[\bar{H}] < 300\text{ppm}$) (voir par exemple les faciès de rupture sur la FIG. 9.7

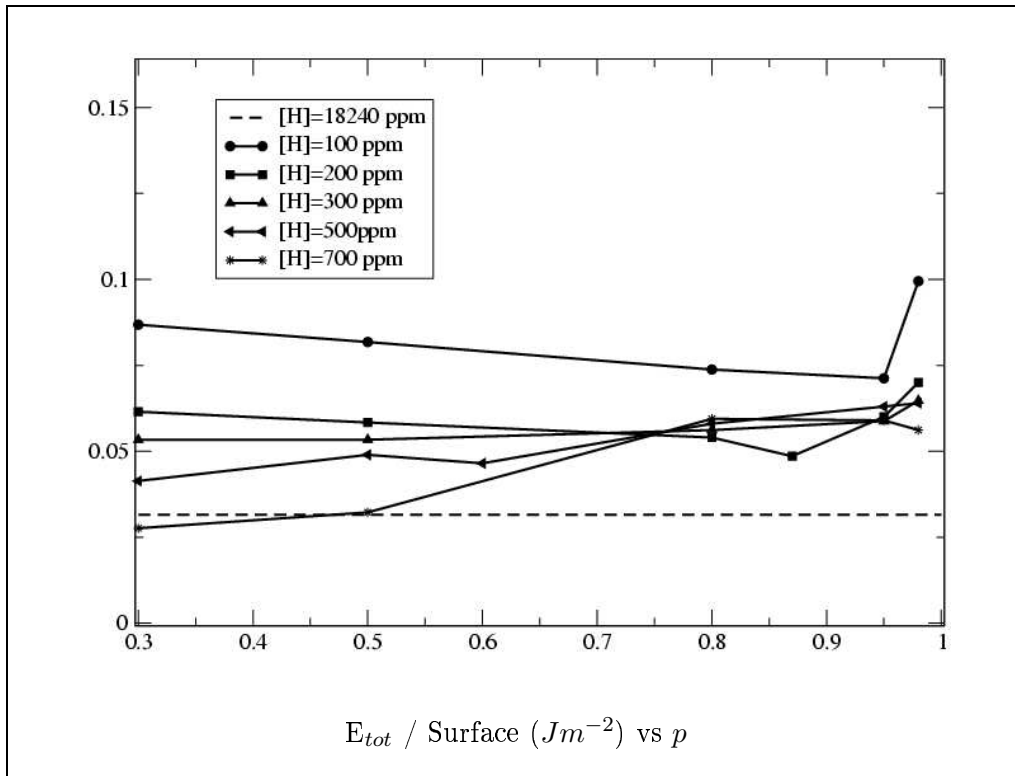


FIG. 9.5 – Energies en fonction du profil de gradient pour plusieurs taux moyens d'hydrogène.

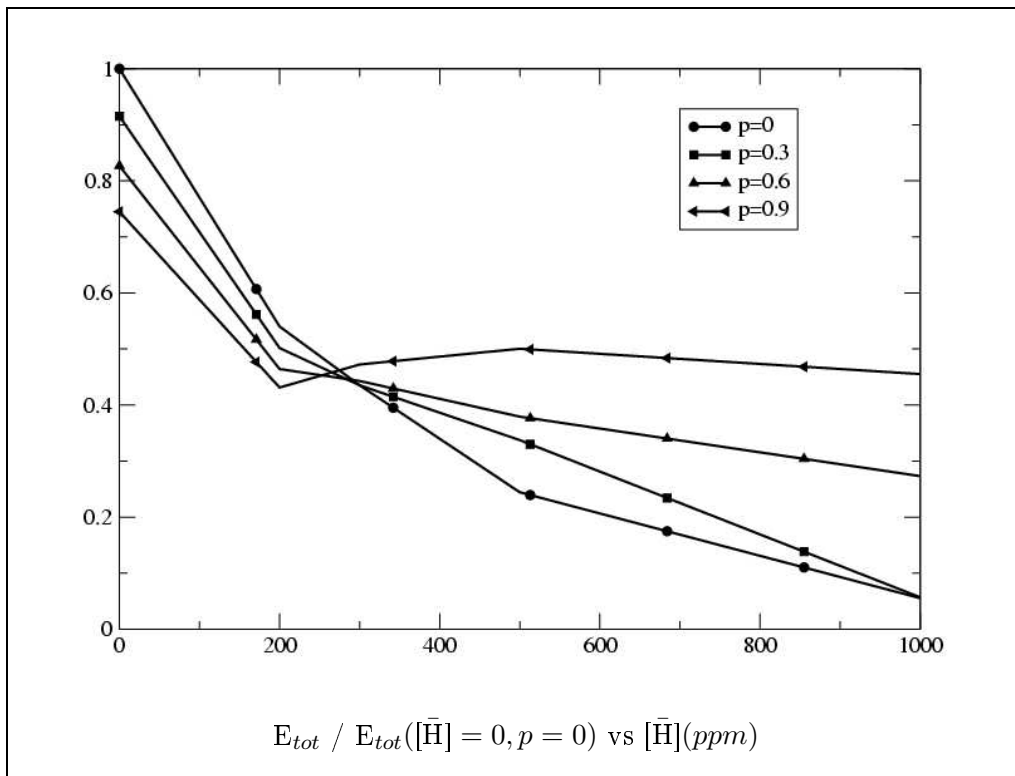


FIG. 9.6 – Energies en fonction du taux moyen d'hydrogène pour plusieurs profils de gradient.

pour $[\bar{H}] = 200ppm$ et deux gradients), l'augmentation du gradient (augmentation de p) est pénalisante pour la tenue du composite. Cette augmentation correspond à la création d'un rim d'hydrure en périphérie externe de la gaine. La propagation rapide des fissures dans le rim, puis l'arrêt par la matrice hydrurée, forme ainsi des préfissures de longueurs critiques. Par analogie avec la mécanique linéaire de la rupture (facteur d'intensité de contrainte), ces longueurs pilotent la fragilité du matériau.

A fort taux ($[\bar{H}] > 300ppm$) (voir par exemple les faciès de rupture sur la FIG. 9.8 pour $[\bar{H}] = 500ppm$ et deux gradients), le gradient d'hydrogène devient bénéfique. En effet :

- pour tous les gradients d'hydrogène, il existe un rim d'hydrure en périphérie et ainsi une préfissure critique,
- si le gradient d'hydrogène tend vers 1, le composite tend vers un bimatériau (matrice très peu hydrurée et forte concentration dans une zone en périphérie externe). Le bimatériau est le cas le plus favorable à l'arrêt de la fissure par relaxation d'une partie de la concentration de contrainte en pointe de fissure. Cette relaxation est due au cisaillement de l'interface dans le cas d'un bimatériau et de sa rupture en mode II.

La distribution d'hydrogène dans le matériau joue donc un rôle prépondérant dans la tenue des gaines lors d'un accident RIA. De plus, l'influence du gradient dépend du taux moyen d'hydrogène considéré. Une inversion des effets du gradient est notamment observée aux alentours de $300ppm$ (environ 3 cycles en réacteur). Ce résultat pourrait expliquer l'observation expérimentale d'un comportement plutôt "ductile" avant $300ppm$ et d'une fragilisation rapide après $300ppm$ d'hydrogène (base PROMETRA). Du point de vue de la sûreté nucléaire et des approches conservatives dans ce domaine, ce résultat offre l'avantage d'indiquer qu'à fort taux de combustion la situation la plus pénalisante peut être étudiée au travers du cas homogène (pas de gradient).

9.4 Gaine de combustible

L'étude s'arrête ici. Pour aller plus loin dans le calcul de structure, une simulation sur une section complète de gaine de combustible est effectuée. Cette simulation offre une illustration des potentialités de la démarche et de l'outil numérique associé.

9.4.1 Description de la simulation numérique

La FIG. 9.9 donne une représentation schématique du calcul de structure. Le calcul est effectué sur une gaine de combustible en 2D déformation plane. Le diamètre de la gaine est $9.5mm$ pour une épaisseur de $0.57mm$. La gaine en Zircaloy possède un blister d'hydrure (100% d'hydrogène) sur la peau externe (voir FIG. 9.9). La largeur du blister est $60\mu m$.

La gaine est découpée en 9600 mailles : 16 mailles dans l'épaisseur et 150 mailles circonférentielles, découpées en triangles.

La structure est soumise à une pression interne radiale de $100MPa$, représentant la contrainte imposée par le combustible en situation accidentelle.

9.4.2 Résultats

La FIG. 9.10 donne le faciès de rupture de la gaine déformée. Une fissure s'initie dans le blister d'hydrure qui constitue la zone fragile de la structure. Ce résultat est en accord avec les observations expérimentales.

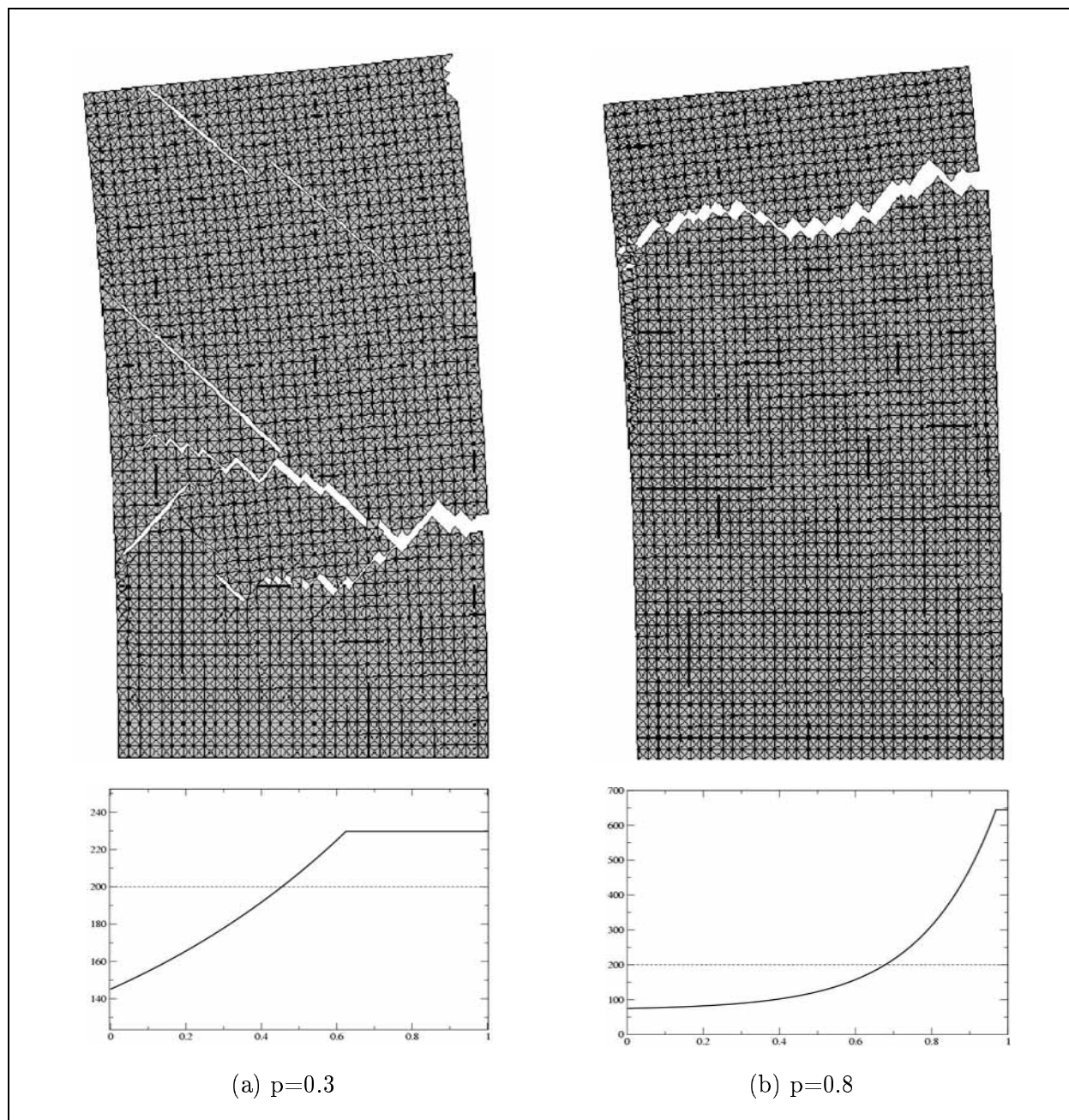


FIG. 9.7 - $[\bar{H}] = 200ppm$: faciès de rupture pour (a) $p=0.3$ et (b) $p=0.8$.

La fissure se propage ensuite dans la matrice pour conduire finalement à la rupture de la gaine. La pression interne imposée entraîne finalement la séparation des deux parties de la gaine.

En particulier, les déplacements radiaux d'un point sur le blister d'hydrure, appelé $P1$ et du point diamétralement opposé, appelé $P2$, sont représentés sur la FIG. 9.11. Avant la rupture, les déplacements radiaux sont égaux. Après la rupture, le point $P1$ se déplace plus rapidement que le point $P2$.

Le calcul de structure met en évidence la faisabilité d'essais numériques sur une gaine de combustible avec une pression interne imposée.

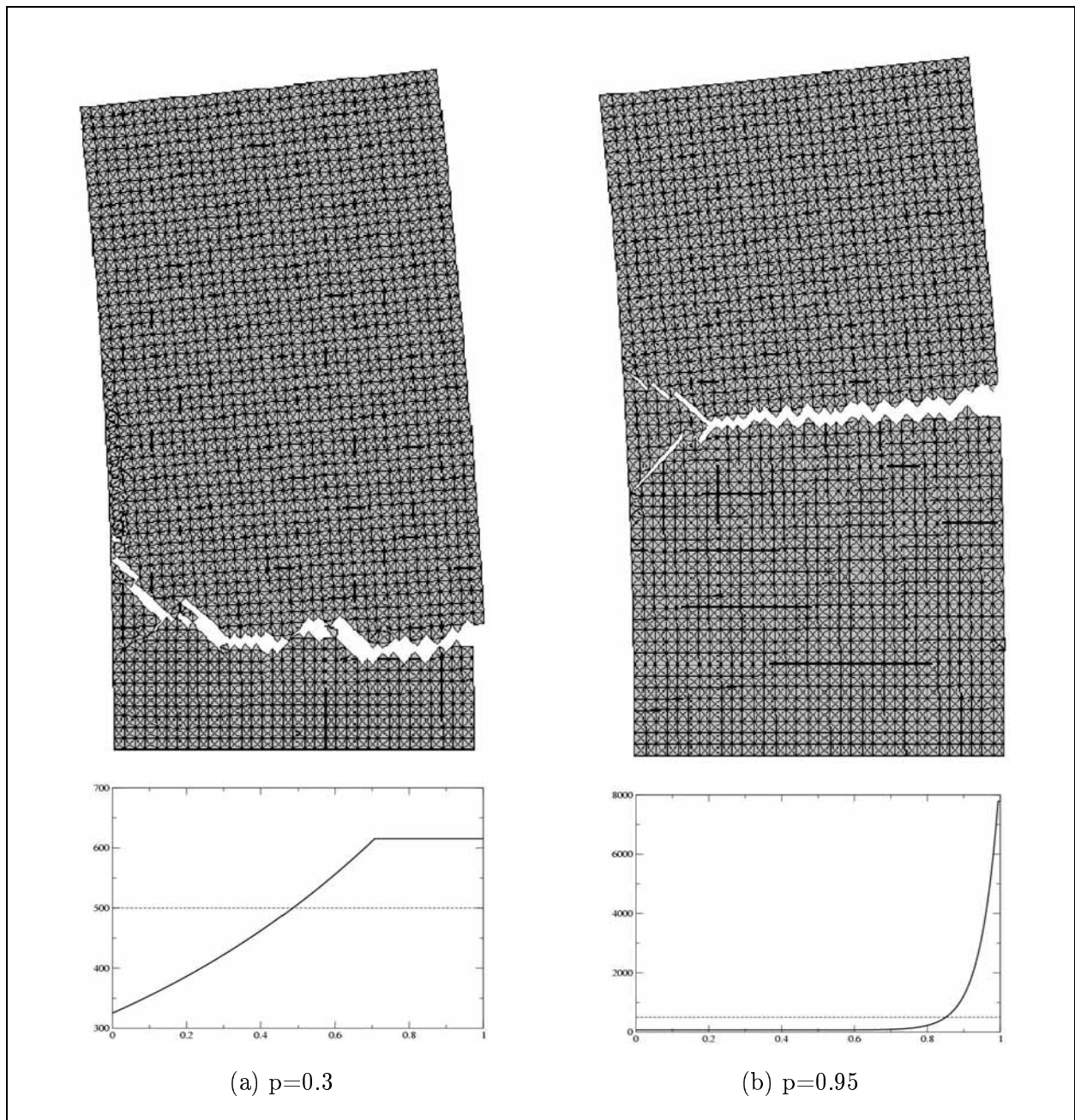


FIG. 9.8 - $[\bar{H}] = 500ppm$: faciès de rupture pour (a) $p=0.3$ et (b) $p=0.95$

De plus, aucun mouvement de solide rigide n'est observé bien que la structure ne contienne aucun point imposé. Cela permet, en particulier, de valider la robustesse de l'algorithme utilisé et son implémentation dans la plateforme numérique.

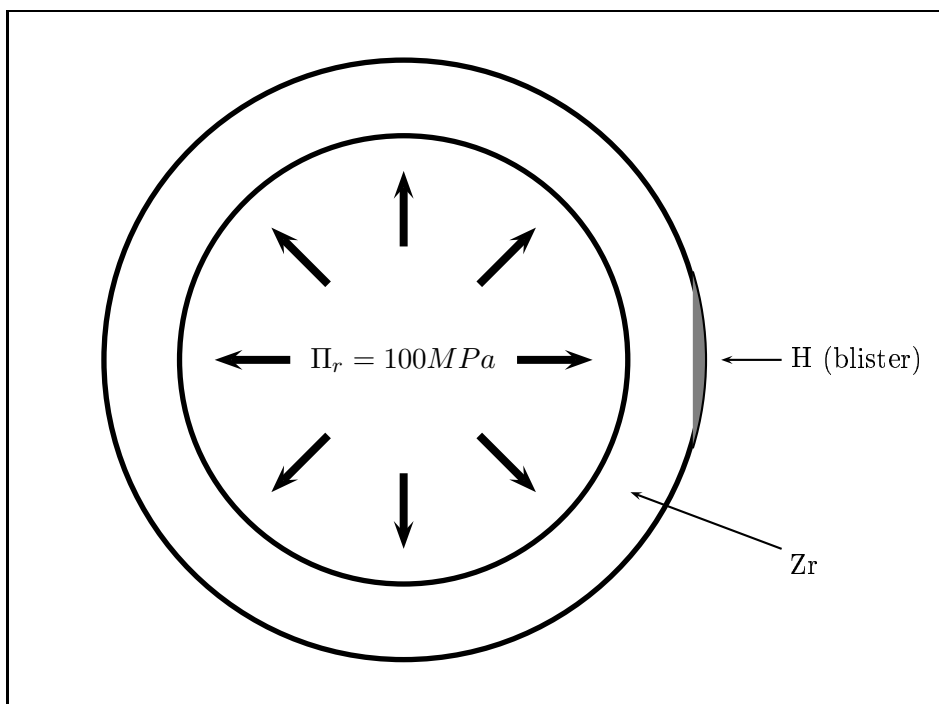


FIG. 9.9 – Description schématique de la simulation numérique sur une gaine de combustible

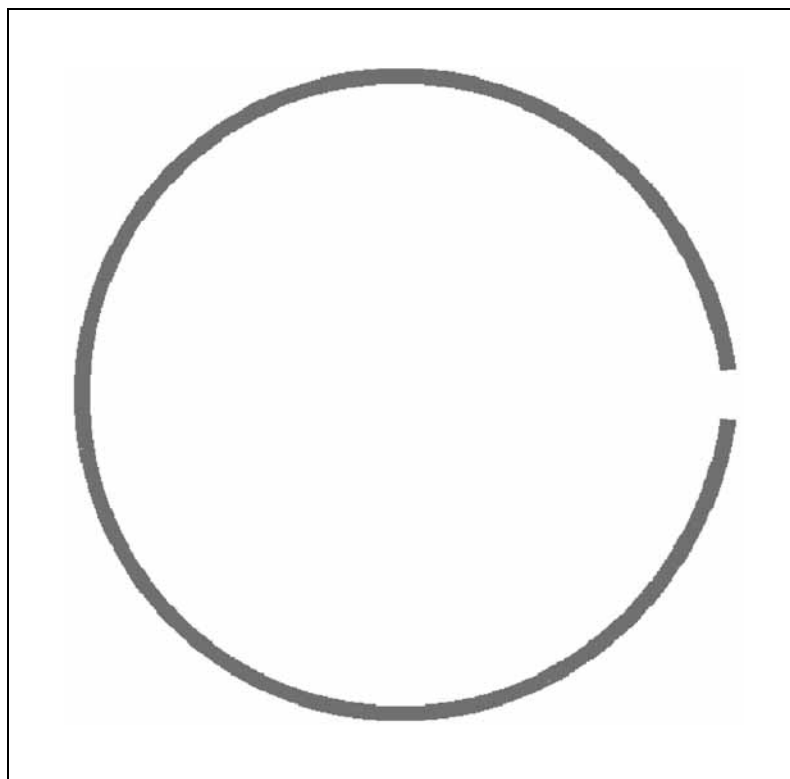


FIG. 9.10 – Faciès de rupture de la gaine déformée.

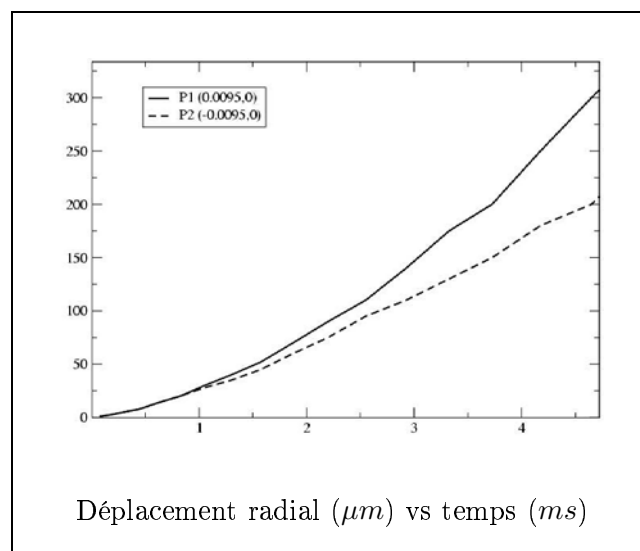


FIG. 9.11 – Déplacement radial d'un point sur le blister d'hydrure (P1) et du point diamétralement opposé (P2).

9.5 Bilan du chapitre

Les calculs de structure à l'échelle macroscopique ont permis de mettre en évidence :

- la fragilisation de la structure par les hydrures,
- à faible taux moyen d'hydrogène ($[\bar{H}] < 300$), l'augmentation du gradient, correspondant à la création d'une préfissure de longueur critique dans le rim externe, est pénalisante,
- à fort taux moyen d'hydrogène ($[\bar{H}] > 300$), l'augmentation du gradient est bénéfique. En effet :
 - pour tous les gradients d'hydrogène, il existe un rim d'hydrure externe. Dans ce rim, une préfissure critique est créée dès les premiers instants de l'essai numérique,
 - pour un gradient d'hydrogène élevé, la microstructure tend vers un bimatérial avec un rim composé d'un taux élevé d'hydrogène et d'une matrice faiblement hydrurée. Le cas d'un bimatérial est le plus favorable à l'arrêt de fissure, du fait de la relaxation des contraintes par cisaillement à l'interface.

Le gradient d'hydrogène joue donc un rôle prépondérant dans la fissuration des gaines de combustible à fort taux de combustion.

Un calcul sur une section complète de gaine de combustible a illustré d'une part les potentialités de la démarche et du logiciel associé et d'autre part la robustesse des algorithmes.

Conclusion et perspectives

Ce travail est une contribution à l'analyse de la tenue mécanique de matériaux hétérogènes soumis à un chargement dynamique rapide. Cette étude est appliquée à la fissuration de matériaux hétérogènes utilisés dans l'industrie nucléaire, les gaines de combustible à fort taux de combustion.

Après plusieurs cycles en réacteur, les gaines de combustible, tubes minces et élancés, sont qualifiées de matériaux à gradient de propriétés. La microstructure correspond à un biphasé composé d'une matrice métallique contenant des inclusions d'hydruure.

L'approche retenue pour l'étude de la fissuration de ces matériaux hétérogènes est une approche multicorps. Les interfaces entre chaque corps définissent un chemin de fissuration possible. Sur les interfaces, des conditions mixtes s'appliquent (modèles de zone cohésive) permettant de décrire des phénomènes complexes sur les lèvres de la fissure (adhésion, contact, frottement). Le modèle de zone cohésive utilisé ici prend en compte les problèmes de saut de solution en retardant les potentielles instabilités vers les derniers moments de la rupture.

La démarche multiéchelle a consisté à identifier, à l'échelle microscopique, une loi surfacique homogénéisée à partir de technique d'homogénéisation numérique périodique. La mise en œuvre numérique a conduit à une formulation Eléments Finis multicorps périodique à deux champs et à l'extension de la méthode Non-Smooth Contact Dynamics. L'introduction de cette loi homogène dans des calculs de structure paramétrés à l'échelle macroscopique a permis de mettre en évidence les paramètres importants (concentration moyenne d'hydrogène, gradient d'hydrogène) de la fragilisation du matériau à gradient de propriétés.

Dans le cadre de cette étude, un outil numérique, appelé X-per, permettant la simulation en grandes déformations de la fissuration dynamique de matériaux hétérogènes de l'amorçage de multifissure jusqu'à la ruine du matériau a été développé.

Résultats mécaniques

Ce travail consiste à étudier l'influence d'inclusions fragiles dans un matériau élastoplastique.

Dans un premier temps, un résultat fort des simulations numériques est l'obtention d'un comportement élastoplastique endommageable de la structure à partir de l'introduction de comportements volumiques élastoplastiques par corps et de comportements surfaciques adoucissants (MZCF) entre les corps.

A l'échelle microscopique, nous avons considéré deux types d'inclusions : fragilisantes et fragilisantes-durcissantes.

Dans le cas d'inclusions fragilisantes :

- une fragilisation de la structure dans le sens d'une diminution de la contrainte maximale et de la déformation à rupture est observée. Le composite passe ainsi très rapidement d'un comportement ductile vers un comportement fragile,
- sur la courbe énergie de fissuration en fonction du taux d'inclusions, on observe un palier. A partir d'un certain taux, l'introduction d'inclusions fragiles n'a plus d'effet sur la fragilisation du composite.

Dans le cas d'inclusions fragilisantes-durcissantes :

- une fragilisation de la structure est également observée dans le sens d'une augmentation de la contrainte cohésive maximale et d'une diminution de la déformation à rupture. Le composite passe progressivement d'un comportement ductile vers un comportement fragile,
- un palier est observé sur la courbe énergie de fissuration en fonction du taux d'hydrogène,
- un minimum est présent sur cette courbe traduisant la compétition entre une diminution de la ductilité du composite et une augmentation de sa ténacité apparente.

A l'échelle macroscopique, des calculs de portion de tube à gradient de propriétés ont été effectués. Plusieurs gradients d'hydrogène sont choisis, passant d'un cas "faible" (répartition proche de la moyenne de la fraction volumique) à un cas "fort" (zone très dense en phase fragile dans la périphérie externe du tube). Les calculs ont mis en évidence :

- à faible taux, l'augmentation du gradient est pénalisante pour la tenue du composite. Ce résultat est dû à une préfissure de longueur critique apparaissant rapidement dans la zone dense en hydrogène,
- à fort taux, le gradient d'hydrogène devient bénéfique. Ce résultat est dû d'une part à l'existence d'une préfissure critique pour tous les taux considérés et d'autre part à une microstructure qui tend vers un bimatériau lorsque le gradient d'hydrogène moyen augmente. Ce cas est le plus favorable à la tenue du matériau (relaxation des contraintes à l'interface).

Résultats pour le Zircaloy hydruré

A l'échelle microscopique, le caractère très fragilisant des inclusions d'hydrures dans une matrice en Zircaloy est mis en évidence. Cependant, en considérant les hydrures élastiques, il est impossible de retrouver les résultats de la littérature, i.e. une ductilité plus élevée. La prise en compte d'un comportement ductile pour les hydrures semble ainsi être nécessaire afin de reproduire les résultats expérimentaux. Ce cas n'a pas été étudié ici. Dans le cadre de la sûreté, le cas d'hydrure fragile plutôt que ductile fournit un résultat conservatif.

A l'échelle macroscopique, l'influence du gradient joue un rôle prépondérant dans la fragilisation de la gaine de combustible. Une inversion des effets du gradient est notamment observée aux alentours de 300ppm d'hydrogène. En deçà de cette valeur, le gradient a un effet néfaste sur le matériau. Au delà, un effet bénéfique est observé. Expérimentalement, un comportement plutôt ductile avant 300ppm et un comportement très fragile après 300ppm sont observés.

D'un point de vue de la sûreté nucléaire, la situation la plus pénalisante pour les forts taux de combustion (taux moyen d'hydrogène élevé) est celle d'un matériau sans gradient. Ce résultat

indique que des études sur des matériaux hydrurés homogènes offrent une démarche conservatrice du point de vue de la fragilisation par les hydrures.

Les calculs à l'échelle microscopique et macroscopique ont été effectués à température ambiante. Les résultats obtenus, bien que cohérents avec une démarche conservatrice dans le cadre de la sûreté, sont plus néfastes que la fragilisation réelle observée en réacteur.

Dans la suite, plusieurs pistes peuvent être envisagées pour se rapprocher de la physique d'un accident réel de réactivité :

- effectuer une étude similaire à la température de fonctionnement d'un réacteur nucléaire ($\simeq 573K$). Cette étude permettra d'obtenir un comportement plus ductile du composite, se rapprochant ainsi des résultats observés en température,
- prendre en compte un comportement élastoplastique des hydrures. Compte tenu de la forte dispersion des résultats, la difficulté reste dans le choix des paramètres plastiques,
- effectuer une étude suivant l'orientation des hydrures. Les hydrures radiaux sont les plus néfastes pour la tenue de la gaine. Ces hydrures sont notamment présents dans le Zircaloy recristallisé,
- étendre le logiciel afin de prendre en compte les variations de température dans le matériau. Dans un premier temps, une dépendance à la température et au chargement thermomécanique pourrait être introduite dans les coefficients matériaux (couplage faible) puis une extension vers un couplage des effets croisés mécanique/thermique (échauffement local de la matière dû à une dissipation plastique) pourrait être envisagée,
- prendre en compte la formation des hydrures dans le matériau au cours du temps. La diffusion d'hydrogène s'effectue vers les zones de fortes contraintes (on pourrait par exemple envisager une précipitation en pointe de fissure) ou dans les zones les plus froides (peau externe de la gaine et zones desquamées),
- étendre l'étude au cas tridimensionnel,
- simuler le comportement de la pastille de combustible et effectuer des calculs couplés pastille/gaine de combustible.

Bibliographie

- Abraham, F. F., 2001. The atomic dynamics of fracture. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 49.
- Abraham, F. F., Brodbeck, D., Rudge, W. E., 1997. A molecular dynamics investigation of rapid fracture mechanics. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 45 (9), 1595–1619.
- Acary, V., jan 2001. Contribution à la modélisation mécanique et numérique des édifices maçonnés. Thèse, Université Aix-Marseille II.
- Alart, P., Curnier, A., 1988. A generalized newton method for contact problems with friction. *Journal de Mécanique Théorique et Appliquée* 7, 67–82.
- Armand, M., Givord, J. P., Tortil, P., Trolliet, G., 1965. Influence de la teneur en oxygène et de la teneur en azote sur les caractéristiques du zircaloy-2. *Mémoires et études scientifiques de la Revue de métallurgie* 62, 275–283.
- Arsène, S., dec 1997. Effet de la microstructure et de la température sur la transition ductile-fragile des Zircaloy hydrurés. Thèse, Ecole Centrale Paris.
- Bai, J. B., Prioul, C., François, D., 1994. Hydride embrittlement in Zircaloy-4 plate : Part I. Influence of microstructure on the hydride embrittlement in Zircaloy-4 at 20 °C and 350 °C. *Metallurgical and Materials Transactions A* 25A, 1185–1197.
- Balourdet, M., Bernaudat, C., Basini, V., Hourdequin, N., August 15-20 1999. The PROMETRA program : Assessment of mechanical properties of Zircaloy-4 fuel properties during a RIA. In : *Transactions of the 15th International Conference on Structural Mechanics in Reactor Technology*. Seoul, Korea, pp. II-485–492.
- Barenblatt, G. I., 1962. The mathematical theory of equilibrium cracks in brittle fracture. *Advances in Applied Mechanics* 7, 55–129.
- Baron, D., Motir, A., 1992-1993. Notions de physiques nucléaire et application aux réacteurs. Cours 2ème année. Ecole Centrale Nantes.
- Barracough, K., Beevers, C., 1969a. Some observations on the deformation characteristics of bulk polycrystalline zirconium hydrides. I The deformation and fracture of hydrides based on the δ -phase. *Journal of Materials Science* 4 (6), 518–525.
- Barracough, K., Beevers, C., 1969b. Some observations on the deformation characteristics of bulk polycrystalline zirconium hydrides. II. the deformation of ϵ hydrides. *Journal of Materials Science* 4 (9), 802–808.

- Beltz, G. E., Rice, J. R., Shih, C. F., Xia, L., 1996. A self-consistent model for cleavage in the presence of plastic flow. *Acta Metallurgica* 44, 3943–3954.
- Belytschko, T., Krongauz, Y., Organ, D., Fleming, M., Krysl, P., 1996. Meshless methods : An overview and recent developments. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 139, 3–47.
- Bertolino, G., Meyer, G., Perez Ipina, J., 2003. Effect of hydrogen content and temperature on fracture toughness of Zircaloy-4. *Journal of Nuclear Materials* 320, 272–279.
- Bjerke, T. W., Lambros, J., 2003. Theoretical development and experimental validation of a thermally dissipative cohesive zone model for dynamic fracture of amorphous polymers. *Journal of Mechanics and Physics of Solids* 51, 1147–1170.
- Bornert, B., Bretheau, T., Gilormini, P. (Eds.), 2001a. Homogénéisation en mécanique des matériaux 1. Vol. 1. Hermes Science Publications.
- Bornert, B., Bretheau, T., Gilormini, P. (Eds.), 2001b. Homogénéisation en mécanique des matériaux 2. Vol. 2. Hermes Science Publications.
- Bretelle, A.-S., Cocu, M., Monerie, Y., 2000. Formulation du contact avec adhérence en élasticité non linéaire entre deux solides déformables. *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences Paris* 328 (II b), 1–6.
- Bérand, N., Catalette, H., Chevarier, N., Faust, H., Moncoffre, N., 2002. Zirconium surface modification under fission product irradiation. application to nuclear fuel cladding tubes. *Surface & Coatings technology* 158–159, 473–476.
- Camacho, G., Ortiz, M., 1996. Computational modelling of impact damage in brittle materials. *International Journal of Solids and Structures* 33, 2899–2938.
- Cazalis, B., Bernaudat, C., Yvon, P., Desquines, J., Poussard, C., Averty, X., August 7-12 2005. The PROMETRA program : a reliable material database for highly irradiated Zircaloy-4, Zirlo™ and M5™ fuel claddings. In : 18th International Conference on Structural Mechanics in Reactor Technology. Beijing, China, SMiRT18 - C02_1.
- Chaboche, J. L., Feyel, F., Monerie, Y., 2001. Interface debonding models : a viscous regularization with a limited rate dependency. *International Journal of Solids and Structures* 38, 3127–3160.
- Charnoz, M., 2005. Contribution à la détermination expérimentale de modèles de zone cohésive pour le Zircaloy. Master's thesis, Polytech'Montpellier.
- Chen, J., Wu, L., Du, S., 2000. A modified J integral for functionally graded materials. *Mechanics Research Communications* 27 (3), 301–306.
- Choubey, R., Puls, M., 1994. Crack initiation at long radial hydrides in zr-2.5nb pressure tube material at elevated temperatures. *Metallurgical and materials transactions A* 25A (5), 993–1004.
- Coleman, C., Hardie, D., 1966. The hydrogen embrittlement of α -zirconium - a review. *Journal of the Less-Common Metals* 11, 168–185.
- Comninou, M., 1977. The interface crack. *ASME Journal of Applied Mechanics* 44, 631–636.

- Daux, C., Moës, N., Dolbow, J., Sukumar, N., Belytschko, T., 2000. Arbitrary branched and intersecting cracks with the extended finite element method. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 48, 1741–1760.
- De Borst, R., 2003. Numerical aspects of cohesive-zone models. *Engineering Fracture Mechanics* 70, 1743–1757.
- Debordes, O., Licht, C., Marigo, J., Mialon, P., Michel, J., Suquet, P., 1985. Calcul de charges limites de structures fortement hétérogènes. In : Grellier, J. (Ed.), *Tendances actuelles en calcul des structures*. Pluralis, pp. 56–70.
- Desquines, J., Cazalis, B., Bernaudat, C., Poussard, C., Averty, X., Yvon, P., June 2004. Zircaloy-4 fuel cladding mechanical behavior in the field of RIA transients through the PROMETRA program. In : *Proceedings of the ASTM conference on zirconium in the nuclear industry*. Stockholm, Sweden.
- Desquines, J., Georgenthum, V., Lemoine, F., Cazalis, B., August 7-12 2005. The fracture and spallation of zirconia layers in high burnup PWR fuel cladding submitted to RIA transients. In : *18th International Conference on Structural Mechanics in Reactor Technology*. Beijing, China, SMiRT18 - C03_1.
- Dhatt, G., Touzot, G., 1984. Une présentation de la méthode des éléments finis. Deuxième édition. Collection Université de Compiègne.
- Duarte, C. A., Hamzeh, O. N., Liszka, T. J., Tworzydło, W. W., 2001. A generalized finite element method for the simulation of three-dimensional dynamic crack propagation. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 190, 2227–2262.
- Dubois, F., 1994. Contact, frottement, grandes déformations. Application à l'emboutissage. Thèse, Université de la Méditerranée.
- Dubois, F., Jean, M., 2003. Une plateforme de développement dédiée à la modélisation des problèmes d'interaction. In : *Actes du sixième colloque national en calcul de structures - CSMA-AFM-LMS*. Vol. 1. Giens, pp. 111–118.
- Dugdale, D. S., 1960. Yielding of steel sheets containing slits. *Journal of Mechanics and Physics of Solids* 8, 100–104.
- Ells, C. E., 1968. Hydride precipitates in zirconium alloys. *Journal of Nuclear Materials* 28, 129–151.
- Espinosa, H. D., Dwivedi, S., Lu, H.-C., 2000. Modeling impact induced delamination of woven fiber reinforced composites with contact/cohesive laws. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 183, 259–290.
- Falk, M. L., Needleman, A., Rice, J. R., 2001. A critical evaluation of dynamic fracture simulations using cohesive surfaces. *Journal de Physique IV* 11, 43–52.
- Fandeur, O., dec 2001. Etude expérimentale et modélisation de la mécanique de la corrosion sous contrainte des gaines en Zircaloy-4. Thèse, Ecole Centrale Paris.
- Forest, S., 2004. Milieux Continus Généralisés et Matériaux Hétérogènes. Habilitation à diriger des recherches.

- Fouk, J. W., Allen, D. H., Helms, K. L. E., 2000. Formulation of a three-dimensional cohesive zone model for application to a finite element algorithm. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 183, 51–66.
- Francfort, G. A., Marigo, J.-J., 1998. Revisiting brittle fracture as an energy minimization problem. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 46 (8), 1319–1342.
- Fremont, M., 1982. Adhésion et contact unilatéral. In : *Contact mechanics and wear of rail/wheel systems*. University of Waterloo Press, Vancouver British Columbia, pp. 63–77.
- Fremont, M., 1985. Contact unilatéral avec adhérence, une théorie du premier gradient. In : Piero, G. D., Maceri, F. (Eds.), *Unilatéral problems in structural analysis*. Vol. 304 de CISM - Courses and Lectures. Prescudin, pp. 117–137, proceedings of the 2nd meeting on unilatéral problems in structural analysis.
- Fremont, M., 1987. Adhérence des solides. *Journal de Mécanique Théorique et Appliquée* 6 (3), 383–407.
- Gao, H., 1996. A theory of local limiting speed in dynamic fracture. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 44 (9), 1453–1474.
- Gao, H., Klein, P., 1998. Numerical simulation of crack growth in an isotropic solid with randomized internal cohesive bonds. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 46, 187–218.
- Garde, A. M., 1989. Effects of irradiation and hydriding on the mechanical properties of zircaloy-4 at high fluence. In : Swam, L. F. P. V., Eucken, C. M. (Eds.), *Zirconium in the Nuclear Industry : Eighth International Symposium*, ASTM STP 1023. American Society for Testing and Materials, pp. 548–569.
- Garde, A. M., Smith, G. P., Pirek, R. C., 1996. Effects of hydride precipitate localization and neutron fluence on the ductility of irradiated Zircaloy-4. In : Bradley, E. R., Sabol, G. P. (Eds.), *Zirconium in the Nuclear Industry : Eleventh International Symposium*, ASTM STP 1295. American Society for Testing and Materials, pp. 407–430.
- Gatt, J.-M., Monerie, Y., Laux, D., Baron, D., 2005. Elastic behavior of porous ceramics : application to nuclear fuel materials. *Journal of Nuclear Materials* 336, 145–155.
- Grange, M., dec 1998. Fragilisation du Zircaloy-4 par l'hydrogene : Comportement, mécanismes d'endommagement, interaction avec la couche d'oxyde, simulation numérique. Thèse, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.
- Grange, M., Besson, J., Andrieu, E., 2000. An anisotropic guron type model to represent the ductile rupture of hydrided Zircaloy-4 sheets. *Metallurgical and Materials Transactions A* 31, 679–690.
- Griffith, A., 1920. The phenomenon of rupture and flow in solids. *Philosophical Transaction of the Royal Society A* 221, 163–198.
- Griffiths, M., 1988. A review of microstructure evolution in zirconium alloys during irradiation. *Journal of nuclear materials* 159, 190–218.
- Gu, P., Dao, M., Asaro, R. J., 1999. A simplified method for calculating the crack-tip field of functionally graded materials using the domain integral. *ASME Journal of Applied Mechanics* 66, 101–108.

- Gurson, A. L., 1977. Continuum theory of ductile rupture by void nucleation and growth : Part I - Yield criteria and flow rules for porous ductile media. *Journal of Engineering Materials and Technology* 99, 2–15.
- Hao, S., Liu, W. K., Chang, C. T., 2000. Computer implementation of damage models by finite element and meshfree methods. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 187, 401–440.
- Hashin, Z., Shtrikman, S., 1963. A variational approach to the theory of the elastic behaviour of multiphase materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 11, 127–140.
- He, M. Y., Evans, A. G., Hutchinson, J. W., 1994. Crack deflection at an interface between dissimilar elastic materials : role of residual stresses. *International Journal of Solids and Structures* 31, 3443–3455.
- He, M. Y., Hutchinson, J. W., 1989. Crack deflection at an interface between dissimilar elastic materials. *International Journal of Solids and Structures* 25, 1053–1067.
- Hillner, E., Kass, J. N., Kearns, J. J., 1972-1973. Hydrogen supercharging during corrosion of Zircaloy. *Journal of Nuclear Materials* 45, 175–178.
- Hong, S. I., Lee, K. W., Kim, K. T., 2002. Effect of the circumferential hydrides on the deformation and fracture of Zircaloy cladding tubes. *Journal of nuclear materials* 303, 169–176.
- Ida, Y., 1972. Cohesive force across the tip of a longitudinal shear crack and griffith's specific surface energy. *Journal of Geophysical Research* 77, 3796–3805.
- Irwin, G., 1957. Anaxlysis of stresses and strains near the end of a crack traversing a plate. *Journal of Applied Mechanics* 79, 361–164.
- Irwin, G., 1960. Fracture mechanics. In : Goodier, J., Hoff, N. (Eds.), *Structural mechanics*. Pergamon, Elmsford, pp. 557–591.
- Jean, M., 1999. The non-smooth contact dynamics method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 177, 235–257.
- Jin, Z.-H., Paulino, G. H., Dodds Jr., R. H., 2002. Finite element investigation of quasi-static crack growth in functionally graded materials using a novel cohesive zone fracture model. *Journal of Applied Mechanics* 69, 370–379.
- Jostsons, A., Kelly, P. M., Blake, R. G., 1977. The nature of dislocation loops in neutron irradiated zirconium. *Journal of Nuclear Materials* 66, 236–256.
- Kanit, T., Forest, S., Galliet, I., Mounoury, V., Jeulin, D., 2003. Determination of the size of the representative volume element for random composites : statistical and numerical approach. *International Journal of Solids and Structures* 40.
- Karray, M. A., Barbarin, S., Raous, M., 2004. Traitement de la liaison béton-acier par un modèle d'interface couplant adhésion et frottement. *Annales Maghrébines de l'Ingénieur* 18 (2).
- Klein, P. A., Gao, H., 1998. Crack nucleation and growth as strain localization in a virtual-bond continuum. *Engineering Fracture Mechanics* 61.

- Krysl, P., Belytschko, T., 1997. Element-free Galerkin method : Convergence of the continuum and discontinuous shape functions. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 148.
- Kubair, D. V., Geubelle, P. H., 2003. Comparative analysis of extrinsic and intrinsic cohesive models of dynamic fracture. *International Journal of Solids and Structures* 40.
- Kuroda, M., Yamanaka, S., Nagase, F., Uetsuka, H., 2001. Analysis of the fracture behavior of hydrided fuel cladding by fracture mechanics. *Nuclear Engineering and Design* 203.
- Lefebvre, f., Lemaignan, C., 1997. Irradiation effects on corrosion of zirconium alloy claddings. *Journal of Nuclear Materials* 248, 268–274.
- Liu, Y., Murakami, S., Kanagawa, Y., 1994. Mesh-dependence and stress singularity in finite element analysis of creep crack growth by continuum damage mechanics approach. *European Journal of Mechanics A/Solids* 13, 395–417.
- Lufrano, J., Sofronis, P., Birnbaum, H. K., 1996. Modeling of hydrogen transport and elastically accomodated hydride formation near a crack tip. *Journal of Mechanics and Physics of Solids* 44, 179–205.
- Lufrano, J., Sofronis, P., Birnbaum, H. K., 1998. Elastoplasticly accomodated hydride formation and embrittlement. *Journal of Mechanics and Physics of Solids* 46, 1497–1520.
- Luton, M. J., Jonas, J., 1972. Solute strengthening at high temperature in zirconium-tin alloys. *Canadian Metallurgical Quaterly* 11, 79–90.
- Léné, F., 1984. Contribution à l'étude des matériaux composites et de leur endommagement. Thèse, Université de Paris VI.
- Marino, G. P., 1971. Hydrogen Supercharging in Zircaloy. *Material Science and Engineering* 7, 335.
- Marino, G. P., 1972. A numerical calculation of the redistribution of an interstitial solute in a thermal gradient. *Nuclear Science and Engineering* 49, 93.
- Martin, E., 1996a. Interaction fissure interface dans les matériaux fragiles. Application à l'étude du comportement à la rupture de matériaux composites à matrice non organique. Master's thesis, Université de Bordeaux I.
- Martin, E., Peters, P., Leguillon, D., Quenisset, J., 1998. Conditions for matrix crack deflection at an interface in ceramic matrix composites. *Materials Science and Engineering A250*, 291–302.
- Martin, R. C., 1996b. The Liskov substitution principle. C++ Report .
- Martin, R. C., 2003. *Agile Software Development. Principles, Patterns and Practices*. Alan Apt Series. Prentice Hall, Pearson Education, Inc. Upper Saddle Reaver, New Jersey 07458.
- Melenk, J. M., Babuska, I., 1996. The partition of unity finite element method : Basic theory and applications. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 139.
- Meyer, B., 1997. *Object-Oriented Software Construction*, 2nd Edition. Prentice Hall PTR.
- Michel, J. C., 2001. *Homogénéisation en mécanique des matériaux*. Vol. 1. Hermès Science, Ch. 2 : "Théories des modules effectifs. Approximations de Voigt et de Reuss.", pp. 41–56.

- Michel, J.-C., Moulinec, H., Suquet, P., 1999. Effective properties of composite materials with periodic microstructure : a computational approach. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 172.
- Michel, J.-C., Suquet, P., 1994. An analytical and numerical study of the overall behaviour of metal-matrix composites. *Modelling Simulation in Materials Science and Engineering* 2.
- Michel, J.-C., Suquet, P., Thébaud, F., 1994. Une modélisation du rôle des interfaces dans le comportement des composites à matrice métallique. *Revue Européenne des Elements Finis* 3.
- Moës, N., Belytschko, T., 2002. X-FEM, de nouvelles frontières pour les éléments finis. *Revue Européenne des Elements Finis* 1.
- Monerie, Y., 2000. Fissuration des matériaux composites : rôle de l'interface fibre/matrice. Thèse, Université Aix-Marseille II.
- Monerie, Y., 2005. Communication personnelle.
- Monerie, Y., Acary, V., 2001. Formulation dynamique d'un modèle de zone cohésive tridimensionnel couplant endommagement et frottement. *Revue Européenne des Elements Finis* 10, 489–503.
- Monerie, Y., Bourgeois, S., Ait Ahmad, H., 2004. Un modèle micromécanique pour le comportement élastoplastique du Zircaloy hydruré. Note Technique DPAM/SEMCA 2004/12, IRSN.
- Monerie, Y., Raous, M., Leroy, F., Sudre, O., Feyel, F., Chaboche, J., 18-20 Novembre 1998. Comparaison de lois d'interface fibre/matrice sur la base d'un modèle uniaxial d'expérience de micro-indentation. In : Lamon, J., Baptiste, D. (Eds.), *Comptes Rendus des Onzièmes Journées Nationales sur les Composites*. Vol. II. AMAC, Arcachon, pp. 565–574.
- Moreau, J., 1974. On unilateral constraints, friction and plasticity. In : Capriz, G., Stampacchia, G. (Eds.), *New variational techniques in mathematical physics*. CIME II ciclo 1973, Edizioni Cremonese, pp. 175–322.
- Moreau, J., Mai 1985. Dynamique des systèmes à liaisons unilatérales avec frottement sec éventuel. Tech. Rep. 85-1, Laboratoire de Mécanique et Génie Civil, Université Montpellier II, Montpellier.
- Moreau, J.-J., 1988. Unilateral contact and dry friction in finite freedom dynamics. In : Moreau, J.-J., Panagiotopoulos, P. (Eds.), *Non Smooth Mechanics and Applications*. Vol. 302 de CISM - Courses and Lectures. Springer, Vienna, pp. 1–82.
- Moulinec, H., Suquet, P., 1998. A numerical method for computing the overall response of non-linear composites with complex microstructure. *Computer methods in applied mechanics and engineering* 157, 69–94.
- Mulot, S., 1997. Etude théorique et expérimentale du laminage à pas de pèlerin de tubes en Zircaloy-4. Thèse, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.
- Mura, T., 1982. *Micromechanics of defects in solids*. Martinus Nijhoff.
- Nakatsuka, M., Nagai, M., 1987. Reduction of Plastic Anisotropy of Zircaloy Cladding by Neutron Irradiation. *Journal of Nuclear Science and Technology* 24, 832–838.
- Needleman, A., 1987. A continuum model for void nucleation by inclusion debonding. *Journal of Applied Mechanics* 54, 525–531.

- Needleman, A., 1990. An analysis of tensile decohesion along an interface. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 38 (3), 289–324.
- Needleman, A., 1992. Micromechanical modeling of interfacial decohesion. *Ultramicroscopy* 40, 203–214.
- Needleman, A., Rosakis, A. J., 1999. The effect of bond strength and loading rate on the conditions governing the attainment of intersonic crack growth along interfaces. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 47, 2411–2449.
- Nguyen, T. D., Govindjee, S., Klein, P. A., Gao, H., 2004. A rate-dependent cohesive continuum model for the study of crack dynamics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 193, 3239–3265.
- Northwood, D. O., Kosasih, U., 1983. Hydrides and delayed hydrogen cracking in Zirconium and its alloys. *International Metals Reviews* 28, 92–121.
- Onimus, F., 2003. Approche Expérimentale et Modélisation Micromécanique du Comportement des Alliages de Zirconium Irradiés. Thèse, Ecole Centrale Paris.
- Ortiz, M., Pandolfi, A., 1999. Finite-deformation irreversible cohesive elements for three-dimensional crack-propagation analysis. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 44, 1267–1282.
- Ortiz, M., Stainier, L., 1999. The variational formulation of viscoplastic constitutive updates. *Computer methods in applied mechanics and engineering* 171, 419–444.
- Palmer, A. C., Rice, J. R., 1973. The growth of slip surfaces in the progressive failure of over-consolidated clay. *Proc. Roy. Soc. Lond. A.* 332, 527–548.
- Pandolfi, A., Guduru, P. R., Ortiz, M., Rosakis, A. J., 2000. Three dimensional cohesive-element analysis and experiments of dynamic fracture in c300 steel. *International Journal of Solids and Structures* 37, 3733–3760.
- Papin, J., Balourdet, M., Lemoine, F., Lamare, F., Frizonnet, J., Schmitz, F., 1996. French studies on high-burnup fuel transient behavior under RIA conditions. *Technical Progress Journal, Nuclear Safety* 37, 289–327.
- Piar, B., oct 2003. Object oriented methodology for software development with PELICANS. Note Technique SEMAR 03/93, IRSN.
- Piar, B., Chailan, L., Vola, D., 2003. Scientific software architectures designed to survive change. In : *Trend in Physical and Numerical of Multiphase Industrial Flows*. Cargèse.
- Pierron, O., 2002. Influence of hydride "blisters" on failure of Zircaloy-4 sheet. Master's thesis, The Pennsylvania State University.
- Pierron, O. N., Koss, D. A., Motta, A. T., Chan, K. S., 2003. The influence of hydride blisters on the fracture of Zircaloy-4. *Journal of Nuclear Materials* 322, 21–35.
- Ponte Castañeda, P., Suquet, P., 1998. Nonlinear composites. *Advances in Applied Mechanics* 34, 171–302.

- Ponte Castañeda, P., Willis, J. R., 1995. The effect of spatial distribution on the effective behavior of composite materials and cracked media. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 43 (12), 1919–1951.
- Ponthot, J.-P., 1995. *Mécanique des Milieux Continus solides en grandes transformations et traitement unifié par la méthode des Eléments Finis*. Rapport TF-38, ULg-LTAS, Liège, Belgium.
- Prat, F., Grange, M., Besson, J., Andrieu, E., 1998. Behaviour and rupture of hydrided Zircaloy-4 tubes and sheets. *Metallurgical and Materials Transactions A* 29A, 1643–1651.
- Puls, M. P., 1991. Fracture initiation at hydrides in zirconium. *Metallurgical Transactions A* 22, 2327–2337.
- Puls, M. P., Shi, S.-Q., Rabier, J., 2005. Experimental studies of mechanical properties of solid zirconium hydrides. *Journal of Nuclear Materials* 336, 73–80.
- Raous, M., Cangémi, L., Cocu, M., 1999. A consistent model coupling adhesion, friction and unilateral contact. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 177 (3–4), 383–399.
- Raous, M., Monerie, Y., 17-21 june 2001. Unilateral contact, friction and adhesion : 3D crack in composite material. In : Martins, J., M.D.P, M. M. (Eds.), *3d Contact Mechanics International Symposium*. Collection Solid Mechanics and its Applications. Kluwer, Peniche (Portugal), pp. 333–346.
- Rashid, J., August 11 2004. Material properties needs for spent fuel subjected to transportation accidents. In : NRC-ANL-EPRI Meeting.
- Rice, J. R., 1968. A path independance integral and the approximate analysis of strain concentration by notches and cracks. *ASME Journal of Applied Mechanics* 35, 379–386.
- Robert-Berat, L., 2001. Influence d'une couche de zircone sur le comportement mécanique des tubes en Zircloy-4. Thèse, Ecole Centrale Paris.
- Romeo, A., Ballarini, R., 1997. A cohesive zone model for cracks terminating at a bimaterial interface. *International Journal of Solids and Structures* 34, 1307–1326.
- Rose, J. H., Ferrante, J., Smith, J. R., 1981. Universal binding energy curves for metals and bimetallic interfaces. *Physical Review Letters* 47, 675–678.
- Rupa, N., 2000. Effet de l'hydrogène et des hydrures sur le comportement viscoplastique du Zircaloy-4 recristallisé. Thèse, Université de Technologie de Compiègne.
- Saint-Paul, P., 1993. Corrosion dans les centrales nucléaires à eau pressurisée. *Journal de Physique IV*, 707–717.
- Sanchez-Palencia, E., 1974. Comportement local et macroscopique d'un type de milieux physiques hétérogènes. *International Journal of Engineering Science* 12, 331–351.
- Sauter, F., 2000. Modélisation du comportement viscoplastique du dioxyde d'uranium. Thèse, Institut National Polytechnique de Lorraine.
- Schaffler, I., 1997. Modélisation du comportement élasto-viscoplastique anisotrope des tubes de gaine du crayon combustible entre zero et quatre cycles de fonctionnement en réacteur à eau pressurisée. Thèse, Université de Franche-Comté.

- Siegmund, T., Brocks, W., 2000. A numerical study on the correlation between the work of separation and the dissipation rate in ductile fracture. *Engineering Fracture Mechanics* 67, 139–154.
- Siegmund, T., Fleck, N. A., Needleman, A., 1997. Dynamic crack growth across an interface. *International Journal of Fracture* 85, 381–402.
- Siegmund, T., Needleman, A., 1997. A numerical study of dynamic crack growth in elastic-viscoplastic solids. *International Journal of Solids and Structures* 34 (7), 769–787.
- Stainier, L., Dubois, F., Peyroux, R., 2003. MatLib, une bibliothèque portable de modèles constitutifs pour la mécanique non-linéaire des solides : concepts et implémentation. In : 6ème Colloque National en Calcul des Structures.
- Sukumar, N., Prévost, J.-H., 2003. Modeling quasi-static crack growth with extended finite element method. part I : Computer implementation. *International Journal of Solids and Structures* 40, 7513–7537.
- Suo, Z., Shih, C. F., Varias, A. G., 1993. A theory for cleavage cracking in the presence of plastic flow. *Acta Metallurgica et Materialia* 41, 1551–1557.
- Suquet, P., 1987. Elements of homogenization for inelastic solid mechanics. In : Sanchez-Palencia, E., Zaoui, A. (Eds.), *Homogenization Techniques for Composite Media*. Vol. 272 de Lecture Notes in Physics. Springer, Berlin, pp. 193–278.
- Tassot, P., 1988. Introduction sur les céramiques - techniques modernes - propriétés - stabilité. La revue de métallurgie, C.I.T. Grenoble.
- Thiagarajan, G., Misra, A., 2004. Fracture simulation for anisotropic materials using a virtual internal bond model. *International Journal of Solids and Structures* 41, 2919–2938.
- Tijssens, M. G. A., Sluys, L. J., van der Giessen, E., 2000. Numerical simulation of quasi-brittle fracture using damaging cohesive surface. *European Journal of Mechanics A/Solids* 19, 761–779.
- Tvergaard, V., 1990. Effect of fibre debonding in a whisker-reinforced metal. *Materials Science and Engineering A125*, 203–213.
- Tvergaard, V., Hutchinson, J. W., 1992. The relation between crack growth resistance and fracture process parameters in elastic-plastic solids. *Journal of Mechanics and Physics of Solids* 40, 1377–1397.
- Tvergaard, V., Hutchinson, J. W., 1996. Effect of strain-dependent cohesive zone model on predictions of crack growth resistance. *International Journal of Solids and Structures* 33 (20–22), 3297–3308.
- Tvergaard, V., Needleman, A., 1984. Analysis of the cup-cone fracture in a round tensile bar. *Acta metallurgica* 32, 157–169.
- Varias, A., Massih, A., 2002. Hydride-induced embrittlement and fracture in metals - effect of stress and temperature distribution. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 50, 1469–1510.
- Vincent, P.-G., Monerie, Y., Bourgeois, S., 29 août - 2 septembre 2005. Homogénéisation du comportement élastoplastique des gainages de crayons combustibles. In : Congrès Français de Mécanique CFM'2005. Vol. XVII. Troyes.

- Vola, D., 1998. Frottement et instabilité en dynamique : bruits de crissement. Thèse, Université de la Méditerranée.
- Vola, D., Pratt, E., Jean, M., Raous, M., 1998. Consistent time discretization for a dynamical frictional contact problem and complementarity techniques. *Revue Européenne des Elements Finis* 7, 149–162.
- Wang, Z., Nakamura, T., 2004. Simulation of crack propagation in elastic-plastic graded materials. *Mechanics of Materials* 36 (7), 601–622.
- Wappling, D., Massih, A., Stahle, P., 1997. A model for hydride-induced embrittlement in zirconium-based alloys. *Journal of Nuclear Materials* 249, 231–238.
- Wattrisse, B., Chrysochoos, A., Muracciole, J.-M., Némoz-Gaillard, M., 2001. Kinematic manifestations of localisation phenomena in steels by digital image correlation. *European Journal of Mechanics - A/Solids* 20, 189–211.
- Wei, Y., Hutchinson, J. W., 1999. Models of interface separation accompanied by plastic dissipation at multiples scales. *International Journal of Fracture* 95, 1–17.
- Wells, G. N., Sluys, L. J., 2001. A new method for modelling cohesive cracks using finite elements. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 50, 2667–2682.
- Williams, M. L., 1957. On the stress distribution at the base of a stationary crack. *Journal of Applied Mechanics* 79, 109–144.
- Willis, J. R., 1967. A comparison of the fracture criteria of Griffith and Barenblatt. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 15, 151–162.
- Xu, G., Bower, A. F., Ortiz, M., 1998. The influence of crack trapping on the toughness of fiber reinforced composites. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 46 (10), 1815–1833.
- Xu, X.-P., Needleman, A., 1994. Numerical simulations of fast crack growth in brittle solids. *Journal of Mechanics and Physics of Solids* 42 (9), 1397–1434.
- Yamanaka, S., Kuroda, M., Setoyama, D., Uno, M., Takeda, K., Anada, H., Nagase, F., Uetsuka, H., 2002. Analysis of the fracture behavior of a hydrided cladding tube at elevated temperatures by fracture mechanics. *Journal of Alloys and Compounds* 330–332.
- Yamanaka, S., Yamada, K., Kurosaki, K., Uno, M., Takeda, K., Anada, H., Matsuda, T., Kobayashi, S., 2001. Thermal properties of zirconium hydride. *Journal of Nuclear Materials* 294, 94–98.
- Yamanaka, S., Yoshioka, K., Uno, M., Katsura, M., Anada, H., Matsuda, T., Kobayashi, S., 1999. Thermal and mechanical properties of zirconium hydride. *Journal of Alloys and Compounds* 293–295, 23–29.
- Yang, B., Mall, S., Ravi-Chandar, K., 2001. A cohesive zone model for fatigue crack growth in quasibrittle materials. *International Journal of Solids and Structures* 38.
- Yu, C., Pandolfi, A., Ortiz, M., Coker, D., Rosakis, A. J., 2002. Three-dimensional modeling of intersonic shear-crack growth in asymmetrically loaded unidirectional composite plates. *International Journal of Solids and Structures* 39.

Yunchang, F., Koss, D. A., 1985. The influence of multiaxial states of stress on the hydrogen embrittlement of zirconium alloy sheet. Metallurgical Transactions A 16.

Zhang, J.-H., oct 1992. Hydruration du Zircaloy-4 et étude de la distribution de l'hydrogène dans une gaine de combustible rep. Thèse, ECP.

Quatrième partie

Annexes

Annexe A

Nomenclature

Symbole	Nom	Unités
b	Coefficient de viscosité	$[N][s][m]^{-1}$
\mathbf{B}	Tenseur de Cauchy-Green gauche	-
\mathcal{C}	Configuration courante	-
\mathbf{C}	Matrice d'amortissement (ou de viscosité) tangente	$[N][s][m]^{-1}$
\mathbf{C}	Tenseur de Cauchy-Green droit	-
C_N	Raideur linéique initiale normale de la zone cohésive	$[Pa][m]^{-1}$
C_T	Raideur linéique initiale tangente de la zone cohésive	$[Pa][m]^{-1}$
\mathbb{C}	Tenseur d'ordre 4 de Hooke	$[Pa]$
$\bar{\mathbf{d}}$	Vecteur moyen du gradient de la transformation discrétisé en espace	-
e	Energie interne spécifique	$[J][kg]^{-1}$
E	Module d'Young	$[Pa]$
E	Face	-
E_{cin}	Energie cinétique	$[J]$
E_{ext}	Energie efforts externes hors décohésion	$[J]$
E_{coh}	Energie de décohésion	$[J]$
E_{ela}	Energie élastique	$[J]$
E_{pla}	Energie plastique	$[J]$
E_{pot}	Energie potentielle mécanique	$[J]$
E_{tot}	Energie totale	$[J]$
E_{vol}	Energie externe volumique	$[J]$
\mathbf{E}^{GL}	Tenseur de Green-Lagrange	-
\mathbf{E}^{EA}	Tenseur d'Euler-Almansi	-
f	Fraction volumique	-
\mathbf{f}	Vecteur force interne	$[N]$
\mathbf{F}	Tenseur gradient de la transformation	-
\mathbf{F}	Vecteur forces internes et externes discrétisées en espace	$[N]$
G	Taux de restitution d'énergie	$[J][m]^{-2}$
\mathbf{G}	Vecteur moyenne des contraintes microscopiques discrétisée en espace	$[N]$
h_i	Intervalle de temps $[t_i, t_{i+1}]$	$[s]$
\mathbf{H}	Vecteur contrainte macroscopique imposée discrétisée en espace	$[N]$

Symbole	Nom	Unités
I	Matrice identité	-
II	Tenseur identité d'ordre 4	-
I_K	Fonction indicatrice de l'ensemble K	-
J	Intégrale de Rice	$[J][m]^{-2}$
J	Jacobien des gradients de la transformation	-
L_{mesh}	Taille de maille	$[m]$
K	Matrice de rigidité tangente	$[N][m]^{-1}$
k	Module de compressibilité hydrostatique	$[Pa]$
K^e	Sous domaine de $\tilde{\Omega}_0$	-
K_α	Facteur d'intensité de contrainte en mode α , $\alpha = \text{I, II ou III}$	$[Pa][m]^{\frac{1}{2}}$
H_Y	Coefficient d'écrouissage	$[Pa]$
m	Dimension de l'espace	-
M	Matrice de masse	$[kg].m^2$
M^{tg}	Matrice tangente	$[N][m]^{-1}$
\mathbf{n}	Vecteur normal unitaire sortant	-
\mathbf{N}	Vecteur normal unitaire sortant dans la configuration initiale	-
N	Matrice de masse concentrée	$[kg].m^2$
N^{noeuds}	Nombre de noeuds	-
$N_{\mathbf{u}}^{\text{dof}}$	Nombre de degrés de liberté relatifs au déplacements	-
$N_{\mathbf{F}}^{\text{dof}}$	Nombre de degrés de liberté relatifs au gradient de la transformation macroscopique	-
p	Pression interne post-décohésion	$[Pa]$
P	Vecteur force externe	$[N]$
\mathcal{P}	Puissance virtuelle	$[N][m][s]^2$
\mathbf{q}	Vecteur déplacement discrétisé en espace	$[m]$
$\dot{\mathbf{q}}_{lib}$	Vecteur vitesse libre	$[m][s]^{-1}$
$\mathbf{q}^\#$	Vecteur déplacement périodique discrétisé en espace	$[m]$
\mathbf{r}	Vecteur réaction nodale discrétisée en espace	$[N]$
R	Vecteur réaction locale discrétisée en espace	$[Pa]$
R_N	Contrainte cohésive normale	$[Pa]$
\mathbf{R}_T	Vecteur contrainte cohésive tangentielle	$[Pa]$
$\hat{\mathbf{R}}$	Vecteur contrainte cohésive max	$[Pa]$
s	Entropie massique	$[J][kg]^{-1}[K]^{-1}$
S	Surface de fissure	$[m]^2$
S	Tenseur de Piola-Kirchhoff de seconde espèce	$[Pa]$
\mathcal{T}^h	Triangulation	-
T	Température	$[K]$
T	Vecteur force	$[N]$
\mathbf{u}	Vecteur déplacement	$[m]$
u_N	Saut de déplacement normal	$[m]$
\mathbf{u}_T	Vecteur saut de déplacement tangent	$[m]$
\mathbf{v}^*	Vecteur vitesse virtuelle	$[m][s]^{-1}$
$\dot{\mathbf{U}}$	Vecteur vitesse locale discrétisée en espace	$[m][s]^{-1}$
\mathbf{w}	Inverse de la matrice des itérations	$[kg]$
w_{ela}	Densité d'énergie élastique	$[J][m]^{-3}$

Symbole	Nom	Unités
<i>Lettres grecques</i>		
α	Contact courant	-
β	Variable d'endommagement	-
β_0	Niveau d'endommagement surfacique initial	-
χ	Nombre de contacts	-
δ	Vecteur saut de déplacement à rupture	$[m]$
δ_c	Vecteur saut de déplacement correspondant à $\hat{\mathbf{R}}$	$[m]$
ϵ	Tenseur des déformations linéarisées	-
γ	Energie surfacique de liaison	$[J][m]^{-2}$
μ	Module de cisaillement	$[Pa]$
μ_{frot}	Coefficient de frottement de Coulomb	-
ν	Coefficient de Poisson	-
Ω	Domaine matériel courant	-
$\tilde{\Omega}_0$	Domaine polygonal	-
$\partial\Omega$	Frontière de Ω	-
ω	Energie de référence surfacique	$[J][m]^{-2}$
Φ	Application de la configuration de référence sur la configuration actuelle	-
Φ	Potentiel de Helmholtz	$[J][kg]^{-1}$
$\mathbf{\Pi}$	Tenseur de Piola-Kirchhoff de première espèce	$[Pa]$
ρ	Masse volumique	$[kg][m]^{-3}$
τ	Nombre de mailles	-
σ	Tenseur contrainte de Cauchy	$[Pa]$
σ_0	Contrainte limite élastique	$[Pa]$
σ_H	Contrainte équivalente au sens de Hill	$[Pa]$

Symbole	Nom	Unités
<i>Indices</i>		
0	Valeur initiale	-
c	Valeur critique	-
i	Valeur au temps t_i	-
$i + 1$	Valeur au temps t_{i+1}	-
imp	Valeur imposée	-
max	Valeur maximale	-
N	Partie normale	-
T	Partie tangente	-
R	Valeur à rupture	-
<i>Exposants</i>		
adh	Adhésion	-
α	Valeur au contact α	-
k	Exposant d'itération de Newton-Raphson	-
r	Partie réversible	-
cer	Céramique	-
H	Hydrures de zirconium	-
I	Inclusions	-
Int	Interface matrice/inclusion	-
M	Matrice	-
met	Métal	-
P	Pores	-
T	Transposée	-
Zr	Zircaloy	-
ZrH	Zircaloy hydruré	-
ZrO ₂	Zircone	-
*	Virtuelle	-
#	Periodique	-
-	Partie négative	-
\dot{x}	Dérivée de x par rapport au temps	-
\ddot{x}	Dérivée seconde de x par rapport au temps	-
\bar{x}	Valeur moyenne de x	-
$\ \cdot\ $	Norme euclidienne	-
[.]	Concentration	[ppm]
[.]	Saut	-
$\langle \cdot \rangle$	Moyenne	-
∇	Operateur nabla	-
∇_s	Gradient symétrisé	-

Symbole	Nom	Unités
<i>Acronymes</i>		
CZM	Cohesive Zone Model	-
EdF	Electricité de France	-
HPP	Hypothèse des Petites Perturbations	-
IRSN	Intitut de Raprotection et de Sûreté Nucléaire	-
LMGC	Laboratoire de Mécanique et Génie Civil	-
LMGC90	Logiciel de Mécanique Gérant le Contact	-
MATLIB	Material Library	-
MZCF	Modèle de Zone Cohésive Frottante	-
NSCD	Non Smooth Contact Dynamics	-
PELICANS	Plateforme Evolutive de Librairies de Composants pour l'Analyse Numérique et Statistique	-
PROMETRA	PROpriétés MEcaniques en TRansitoire	-
REP	Réacteur à Eau sous Pression	-
VER	Volume Elémentaire Représentatif	-

Certaines notations sont volontairement redondantes pour conserver des notations classiques, le contexte ne prêtant généralement pas à confusion. Dans le cas contraire, la notation utilisée est précisée dans le texte.

Vecteurs et tenseurs (d'ordre > 1) sont désignés en gras. On utilise la notation d'Einstein c'est-à-dire on effectue la somme sur les indices répétés.

Annexe B

Microstructures

Les choix des différents paramètres de tirages des microstructures sont décrits dans le § 7.3.

Les cellules de base sont rectangulaires de dimension : $88 \times 20 \mu m^2$. Les cellules sont découpées en 7040 ($88 \times 20 \times 4$) mailles triangulaires (maillage carré découpé en triangles, voir § 7.4).

Les inclusions d'hydrures sont rectangulaires de taille : $14 \times 2 \mu m^2$. Les inclusions peuvent percoler suivant x (direction circonférentielle dans la gaine) mais pas suivant y (direction radiale). Cette condition est obtenue numériquement en imposant un espace d'une maille minimum, c'est-à-dire $1 \mu m$, suivant y entre les inclusions. A partir de 50% d'hydrogène, cette condition ne peut plus être remplie et la percolation suivant y est donc autorisée.

Notons qu'il existe une relation entre la teneur en hydrogène (en *ppm*) et la fraction volumique d'hydrures notée f^H :

$$[H] = \frac{1.66 \times 10^6}{91} f^H \quad (\text{B.0.1})$$

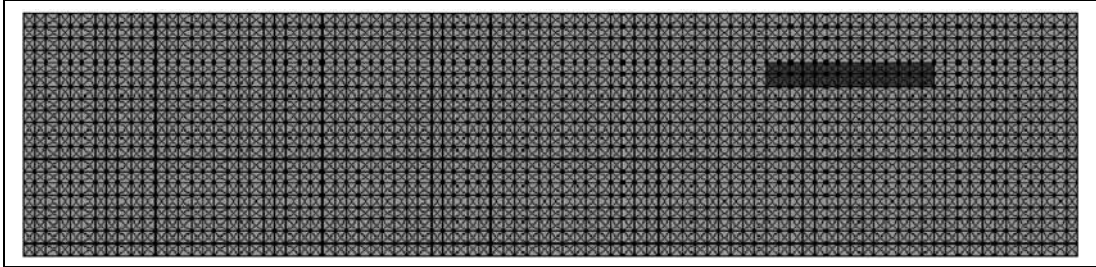
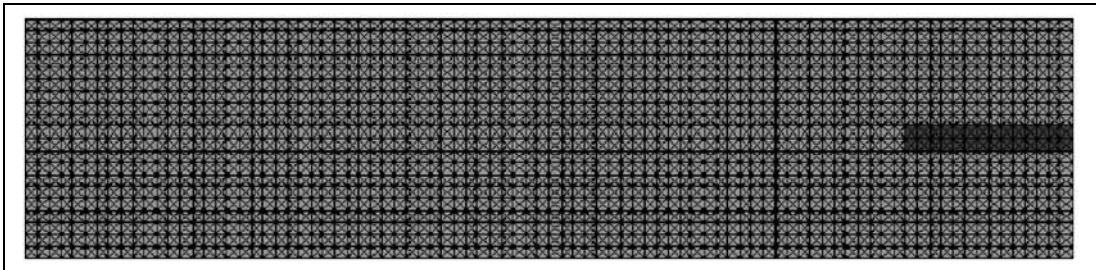
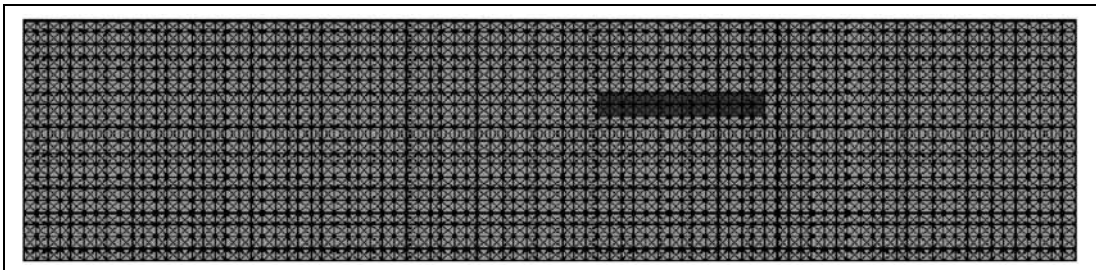
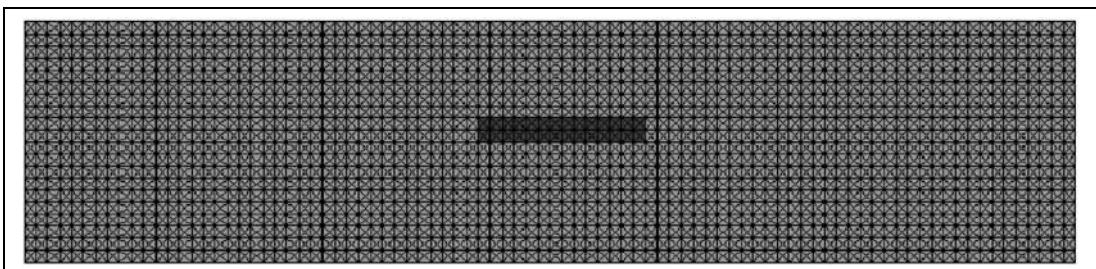
Pour chaque taux d'hydrogène, des tirages aléatoires¹ de microstructures sont effectués. Ces tirages sont périodiques².

Dans chaque cas, l'initiateur utilisé, permettant notamment de repérer le tirage, est précisé.

¹la série de nombres produits par une fonction génératrice en informatique est toujours pseudo-aléatoire. Si une grande quantité de nombres sont générés, le système boucle et revient à la valeur de départ. Le système doit donc être initialisé par un nombre qui est appelé initiateur. Deux initialisations semblables produiront la même séquence de nombres. Ce résultat permet notamment de reproduire les simulations numériques.

²une inclusion peut notamment être partagée pour prendre en compte les conditions de périodicité de la microstructure sur les bords (par exemple voir FIG. B.19)

B.1 1.6%

FIG. B.1 – Tirage aléatoire périodique : $f=1.6\%$, initiateur=1FIG. B.2 – Tirage aléatoire périodique : $f=1.6\%$, initiateur=2FIG. B.3 – Tirage aléatoire périodique : $f=1.6\%$, initiateur=8FIG. B.4 – Tirage aléatoire périodique : $f=1.6\%$, initiateur=10

B.2 3.2%

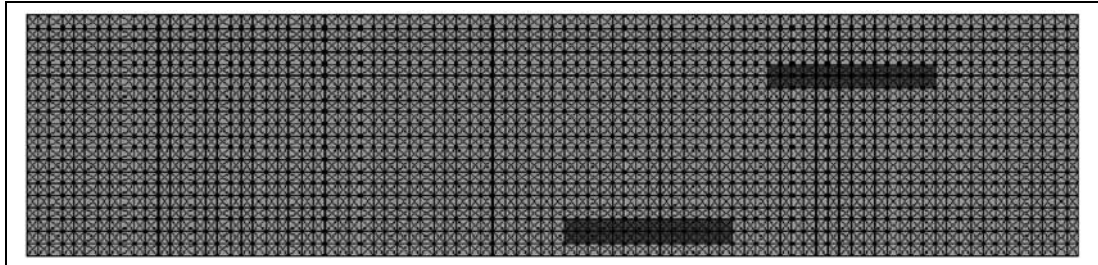


FIG. B.5 – Tirage aléatoire périodique : $f=3.2\%$, initateur=1

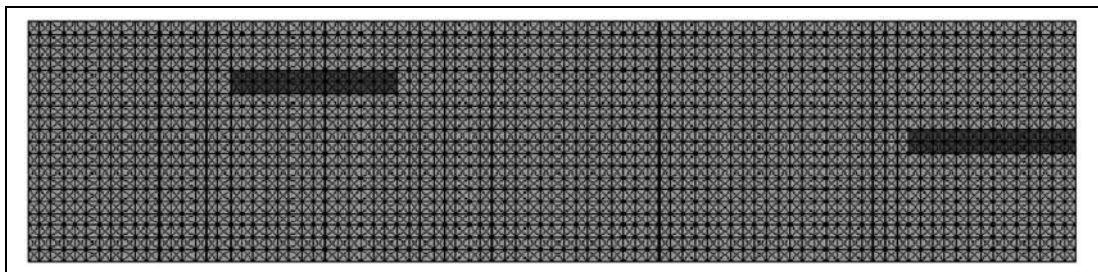


FIG. B.6 – Tirage aléatoire périodique : $f=3.2\%$, initateur=2

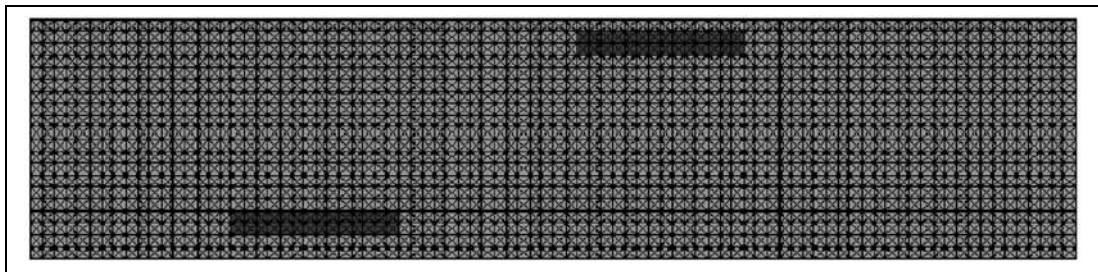


FIG. B.7 – Tirage aléatoire périodique : $f=3.2\%$, initateur=3

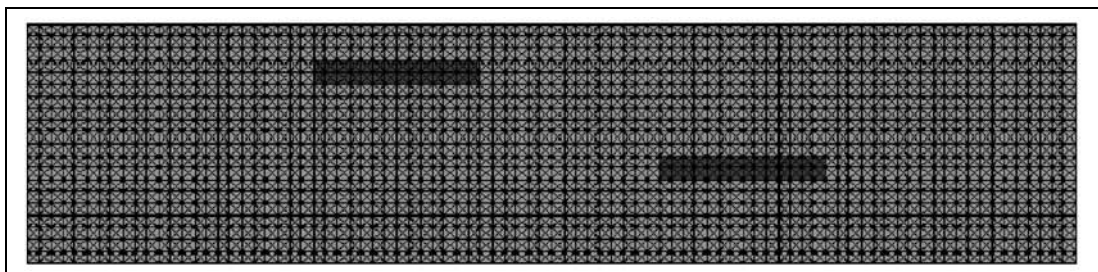


FIG. B.8 – Tirage aléatoire périodique : $f=3.2\%$, initateur=4

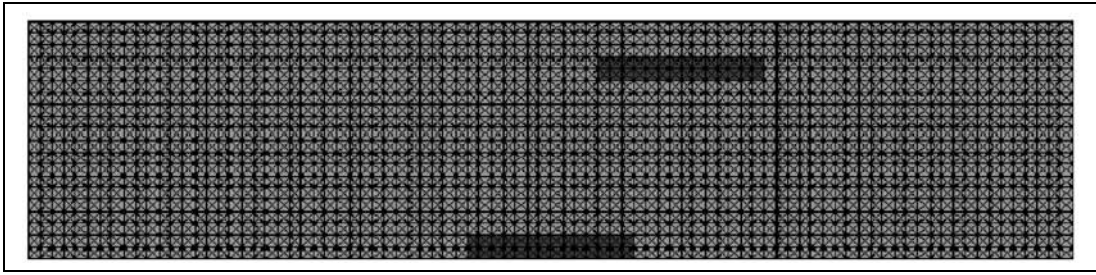


FIG. B.9 – Tirage aléatoire périodique : $f=3.2\%$, initiateur=5

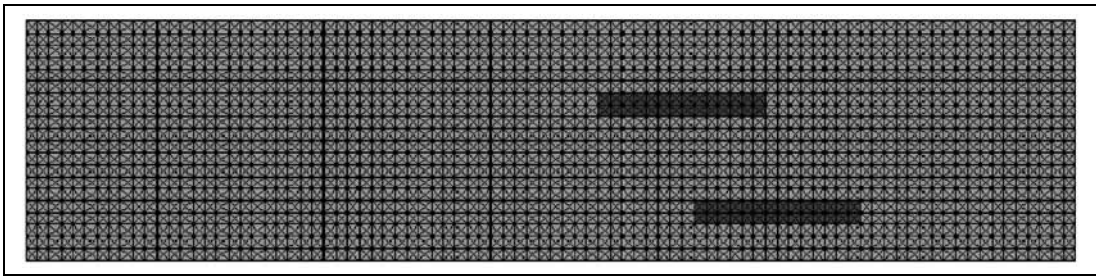


FIG. B.10 – Tirage aléatoire périodique : $f=3.2\%$, initiateur=8

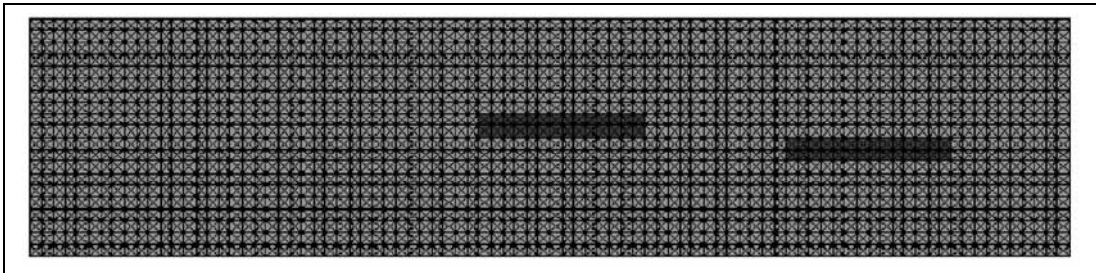


FIG. B.11 – Tirage aléatoire périodique : $f=3.2\%$, initiateur=10

B.3 4.8%

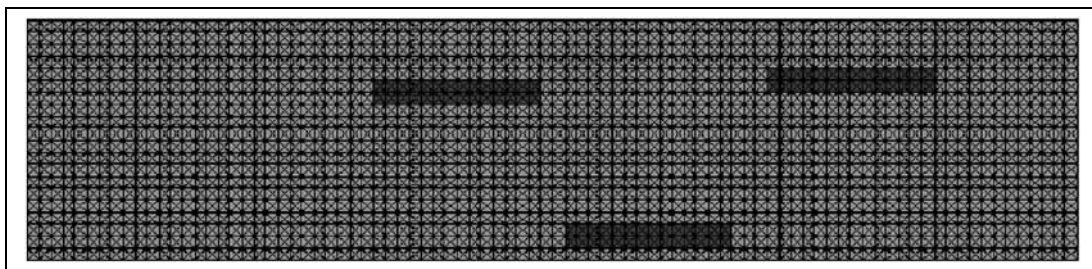


FIG. B.12 – Tirage aléatoire périodique : $f=4.8\%$, initiateur=1

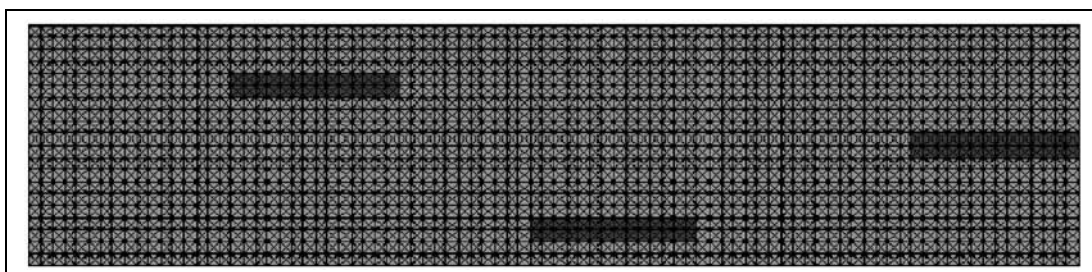


FIG. B.13 – Tirage aléatoire périodique : $f=4.8\%$, initiateur=2

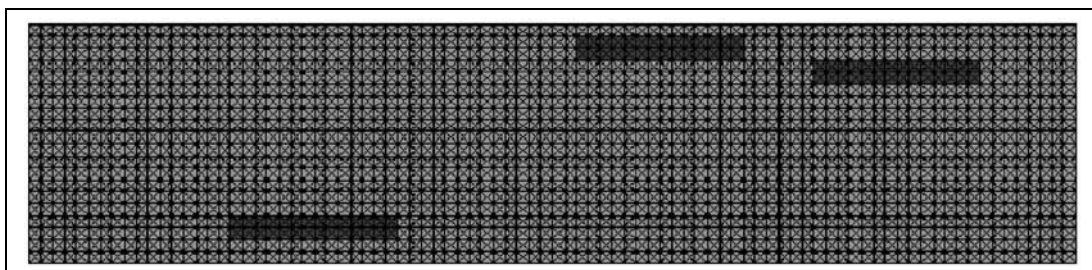


FIG. B.14 – Tirage aléatoire périodique : $f=4.8\%$, initiateur=3

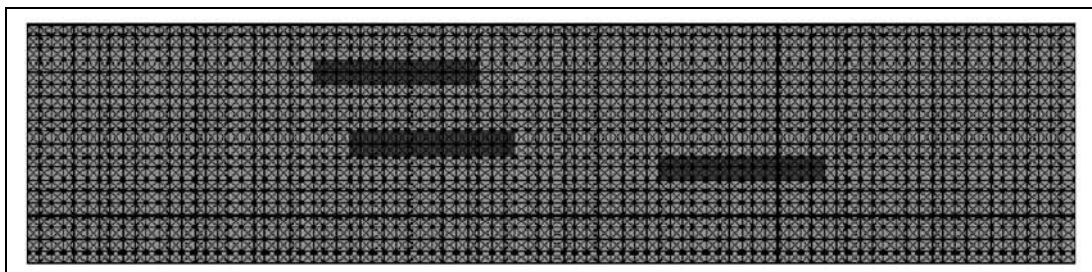


FIG. B.15 – Tirage aléatoire périodique : $f=4.8\%$, initiateur=4

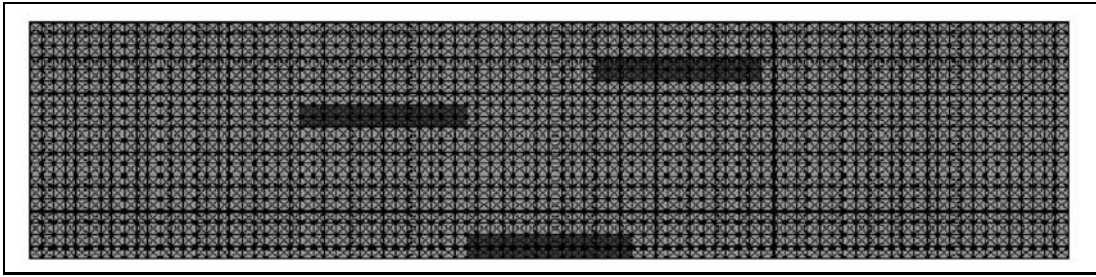


FIG. B.16 – Tirage aléatoire périodique : $f=4.8\%$, initiateur=5

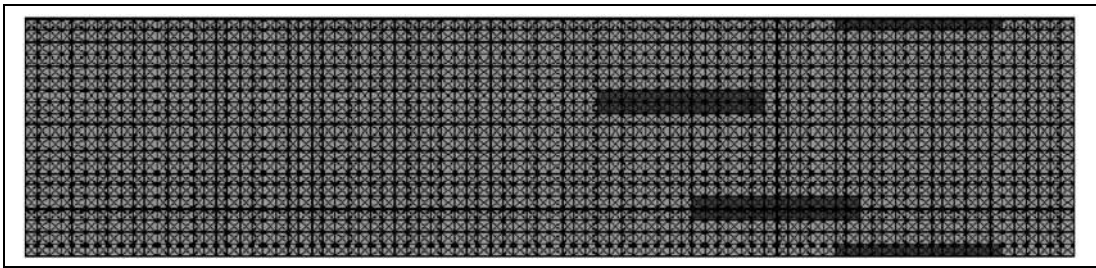


FIG. B.17 – Tirage aléatoire périodique : $f=4.8\%$, initiateur=8

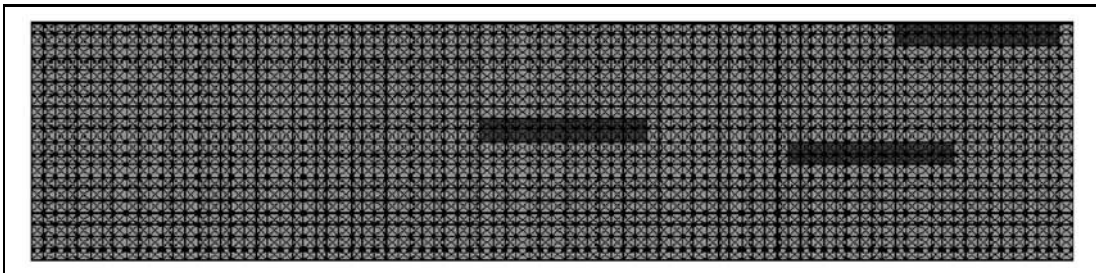


FIG. B.18 – Tirage aléatoire périodique : $f=4.8\%$, initiateur=10

B.4 9.5%

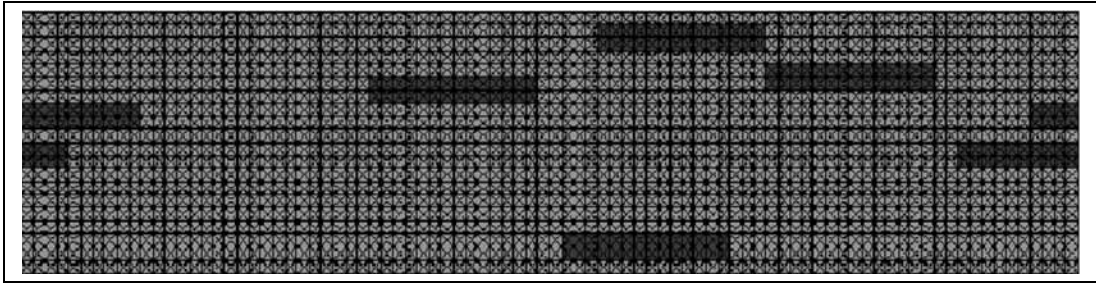


FIG. B.19 – Tirage aléatoire périodique : $f=9.5\%$, initiateur=1

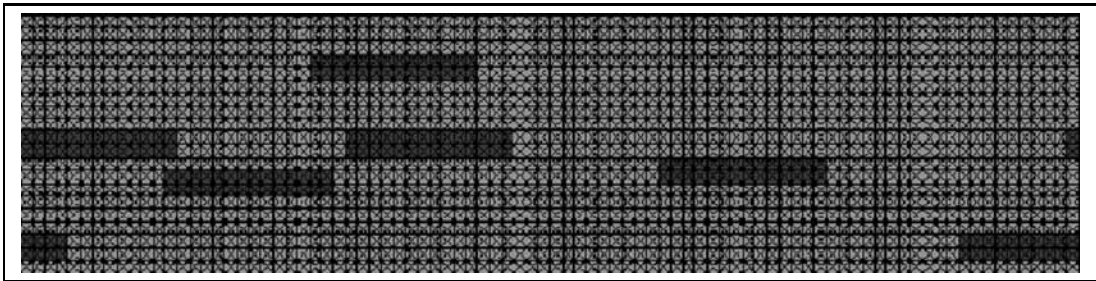


FIG. B.20 – Tirage aléatoire périodique : $f=9.5\%$, initiateur=4

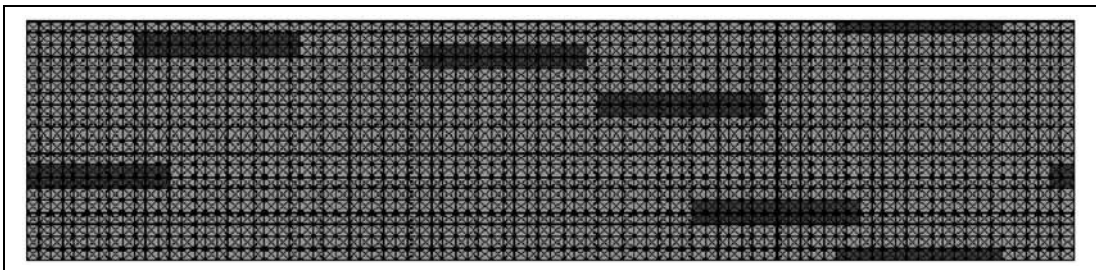


FIG. B.21 – Tirage aléatoire périodique : $f=9.5\%$, initiateur=8

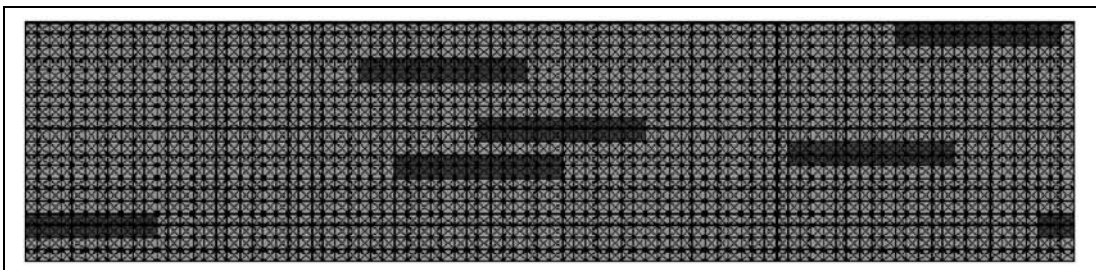
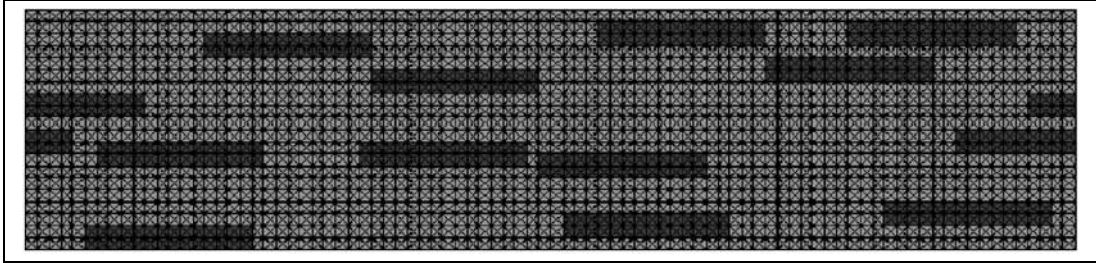
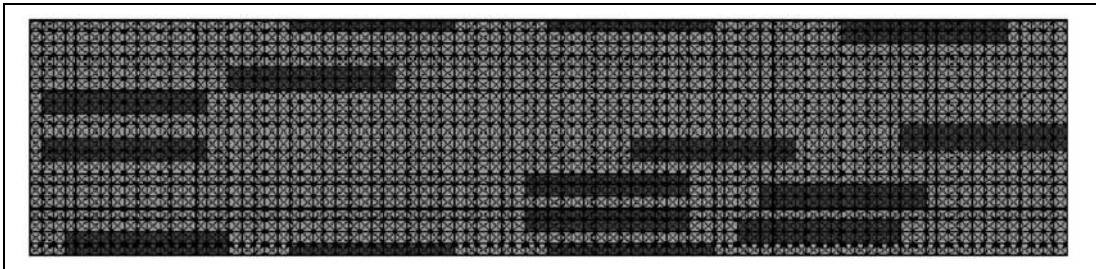
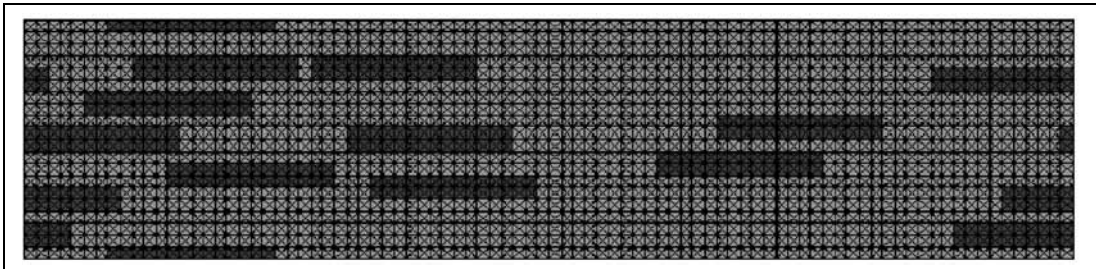


FIG. B.22 – Tirage aléatoire périodique : $f=9.5\%$, initiateur=10

B.5 20.7%

FIG. B.23 – Tirage aléatoire périodique : $f=20.7\%$, initiateur=1FIG. B.24 – Tirage aléatoire périodique : $f=20.7\%$, initiateur=2FIG. B.25 – Tirage aléatoire périodique : $f=20.7\%$, initiateur=4

B.6 30.2%

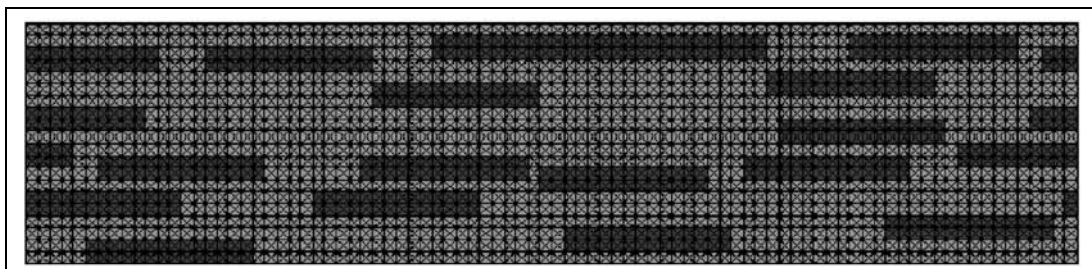


FIG. B.26 – Tirage aléatoire périodique : $f=30.2\%$, initiateur=1

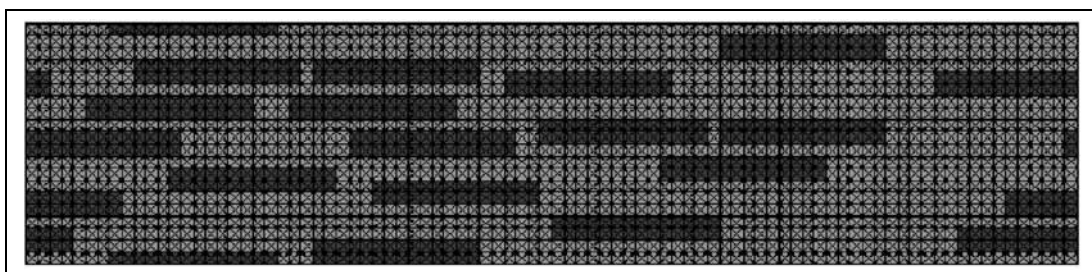


FIG. B.27 – Tirage aléatoire périodique : $f=30.2\%$, initiateur=4

B.7 39.7%

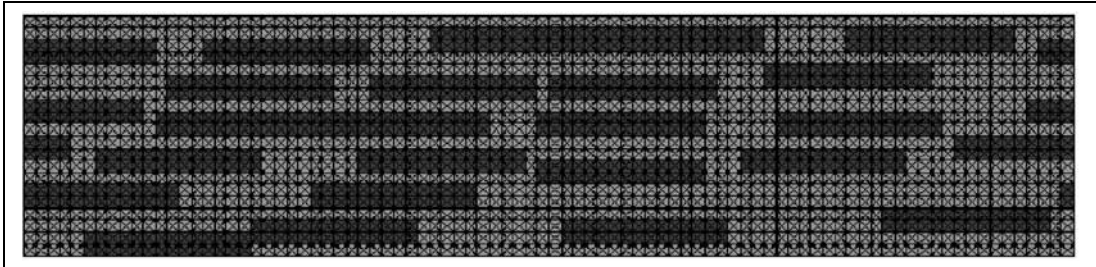


FIG. B.28 – Tirage aléatoire périodique : $f=39.7\%$, initiateur=1

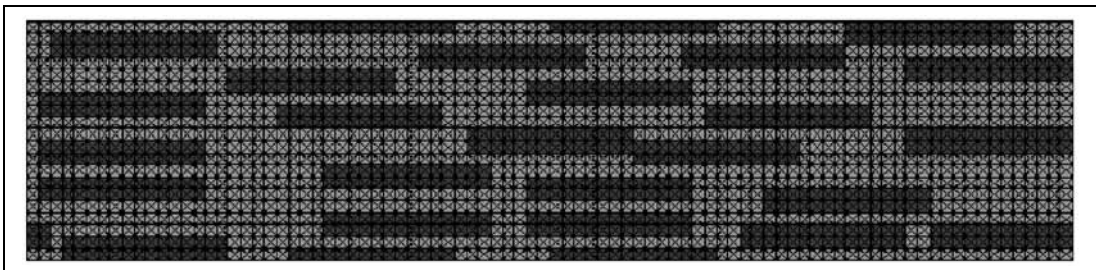


FIG. B.29 – Tirage aléatoire périodique : $f=39.7\%$, initiateur=2

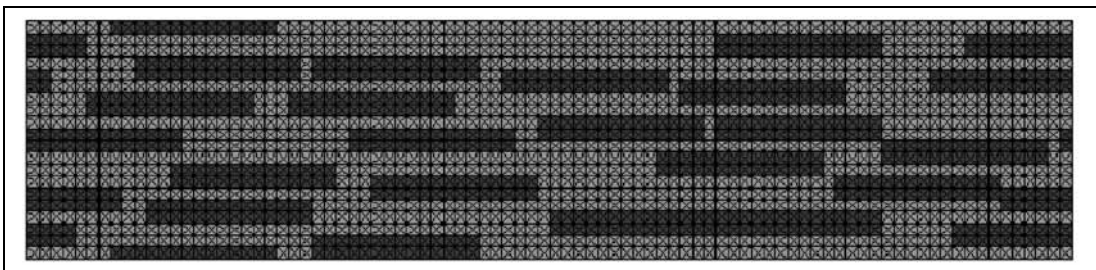


FIG. B.30 – Tirage aléatoire périodique : $f=39.7\%$, initiateur=4

B.8 49.3%

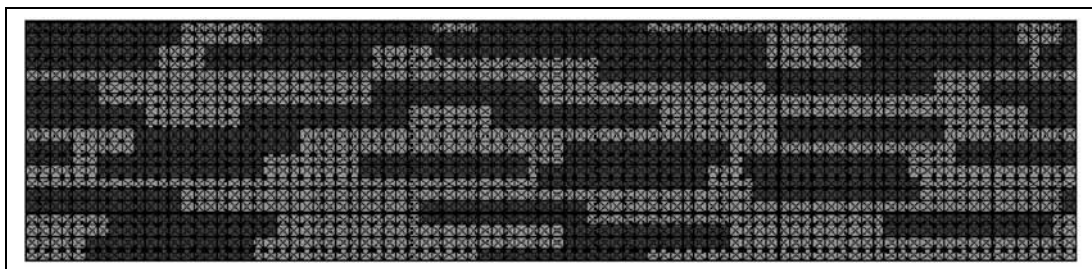


FIG. B.31 – Tirage aléatoire périodique : $f=49.3\%$, initiateur=1

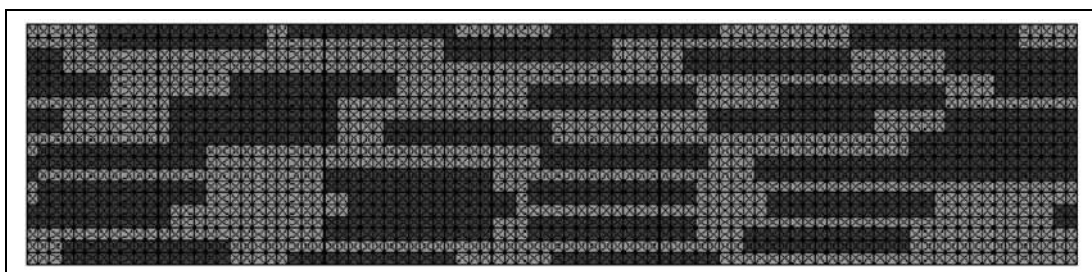
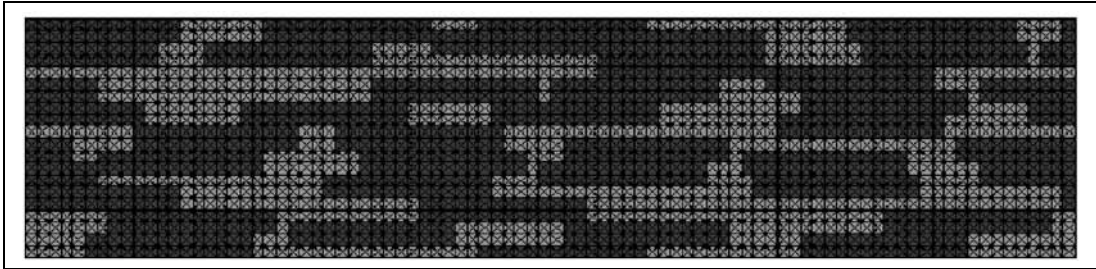
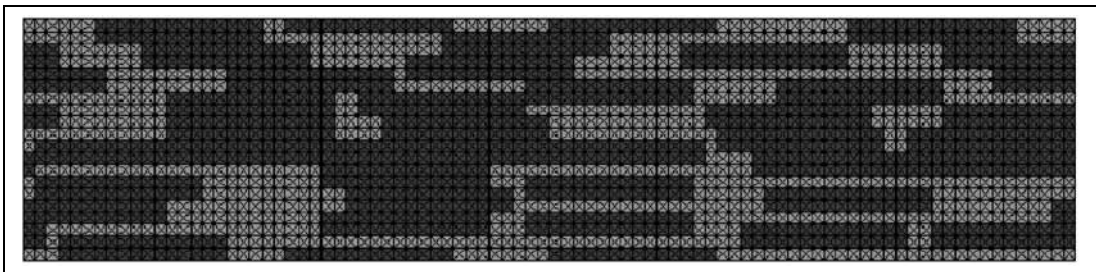
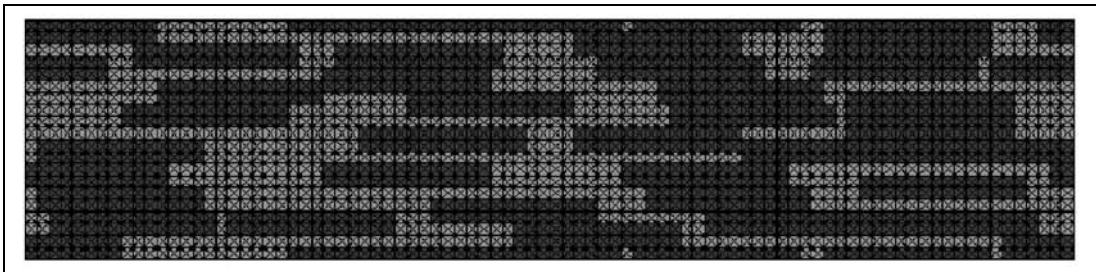
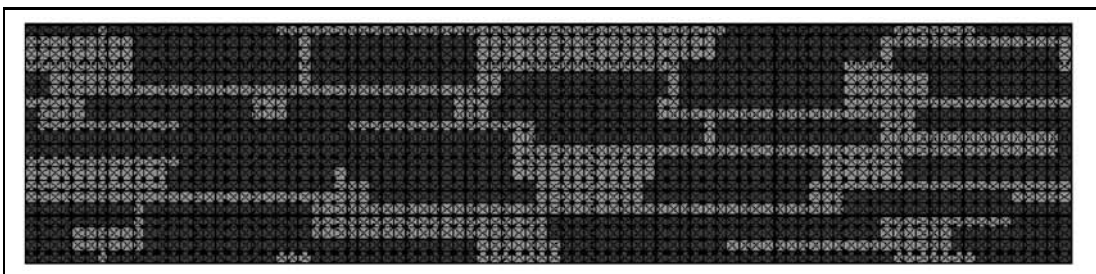


FIG. B.32 – Tirage aléatoire périodique : $f=49.3\%$, initiateur=2

B.9 60.5%

FIG. B.33 – Tirage aléatoire périodique : $f=60.5\%$, initiateur=1FIG. B.34 – Tirage aléatoire périodique : $f=60.5\%$, initiateur=2FIG. B.35 – Tirage aléatoire périodique : $f=60.5\%$, initiateur=3FIG. B.36 – Tirage aléatoire périodique : $f=60.5\%$, initiateur=4

Annexe C

Echelle microscopique : résultantes vs déformation

C.1 Zircaloy

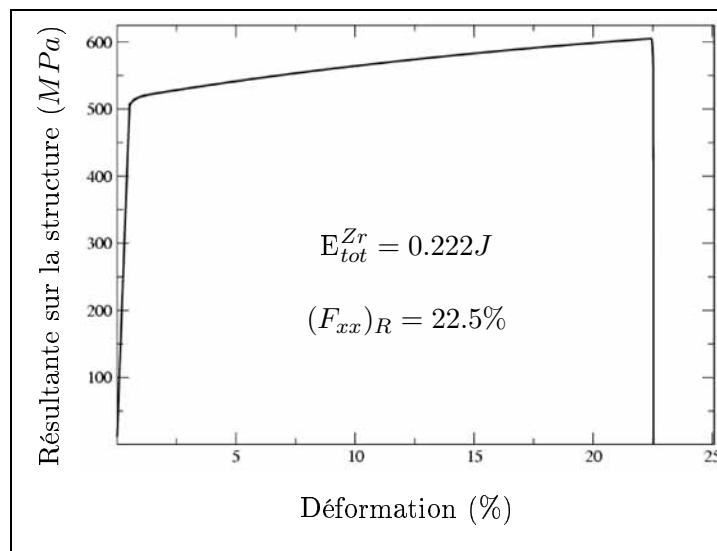
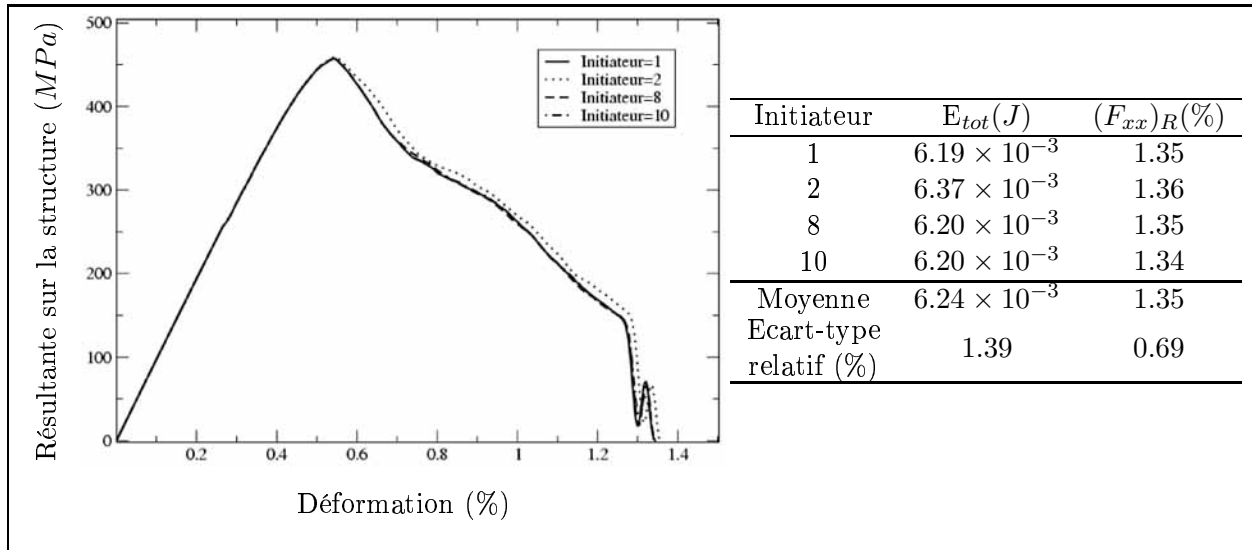
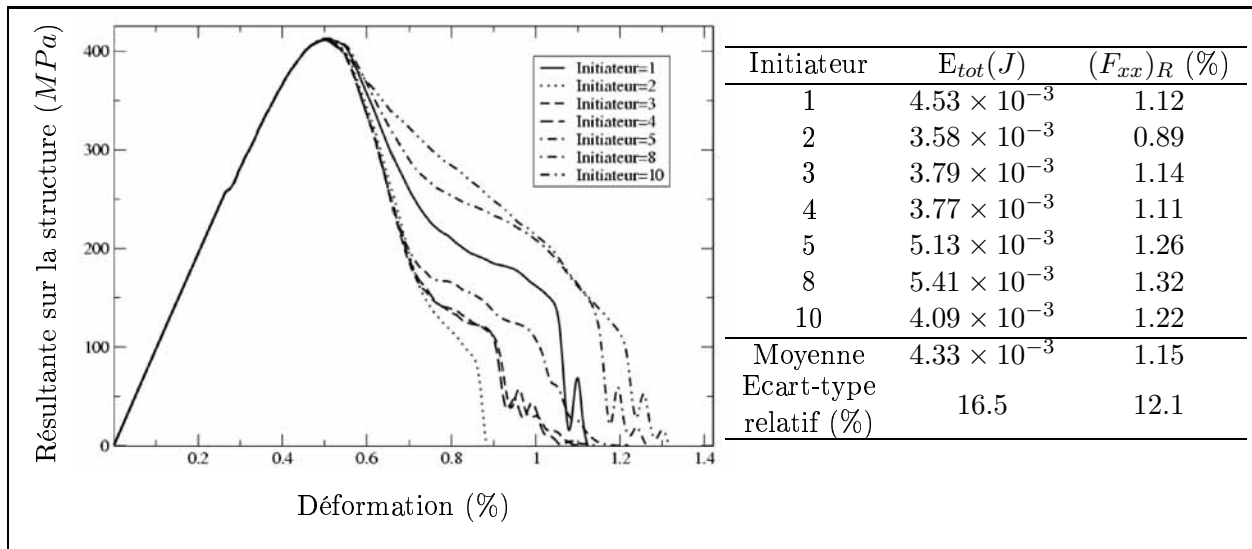


FIG. C.1 – Résultante sur la structure (MPa) en fonction de la déformation (%) pour le Zircaloy vierge.

C.2 $\hat{R}^H = 0.45 \hat{R}^{Zr}$

 FIG. C.2 – $\hat{R}^H = 0.45 \hat{R}^{Zr}$, $f^H = 1.6\%$: résultantes (MPa) en fonction de la déformation (%), énergies (J) et déformations à rupture (%) pour différents tirages.

 FIG. C.3 – $\hat{R}^H = 0.45 \hat{R}^{Zr}$, $f^H = 3.2\%$: résultantes (MPa) en fonction de la déformation (%), énergies (J) et déformations à rupture (%) pour différents tirages.

C.2. $\hat{R}^H = 0.45 \hat{R}^{Zr}$

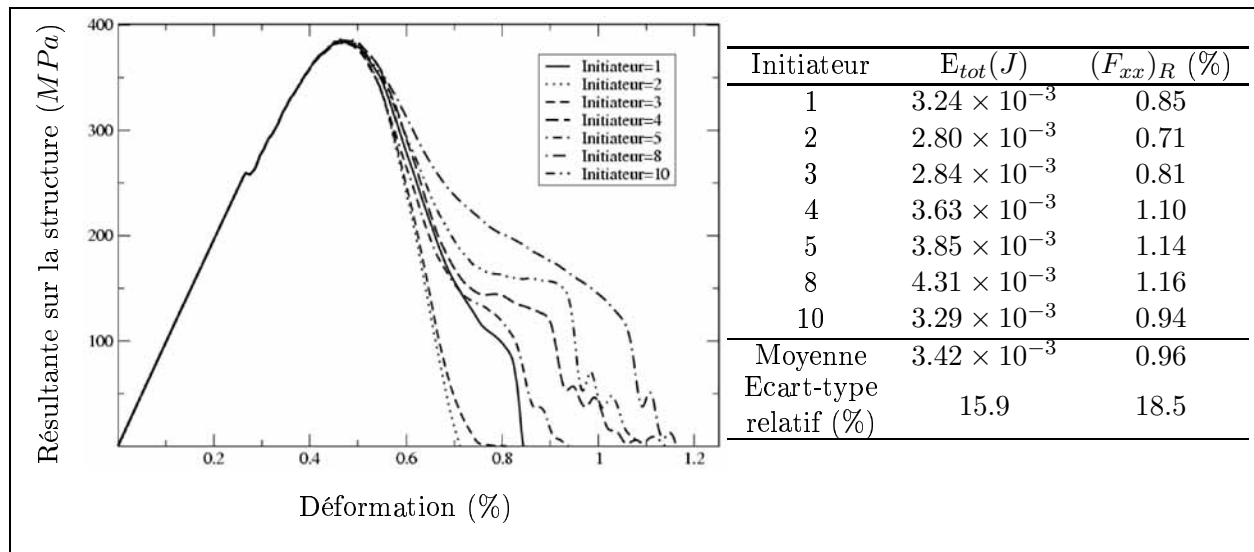


FIG. C.4 – $\hat{R}^H = 0.45 \hat{R}^{Zr}$, $f^H = 4.8\%$: résultantes (MPa) en fonction de la déformation (%), énergies (J) et déformations à rupture (%) pour différents tirages.

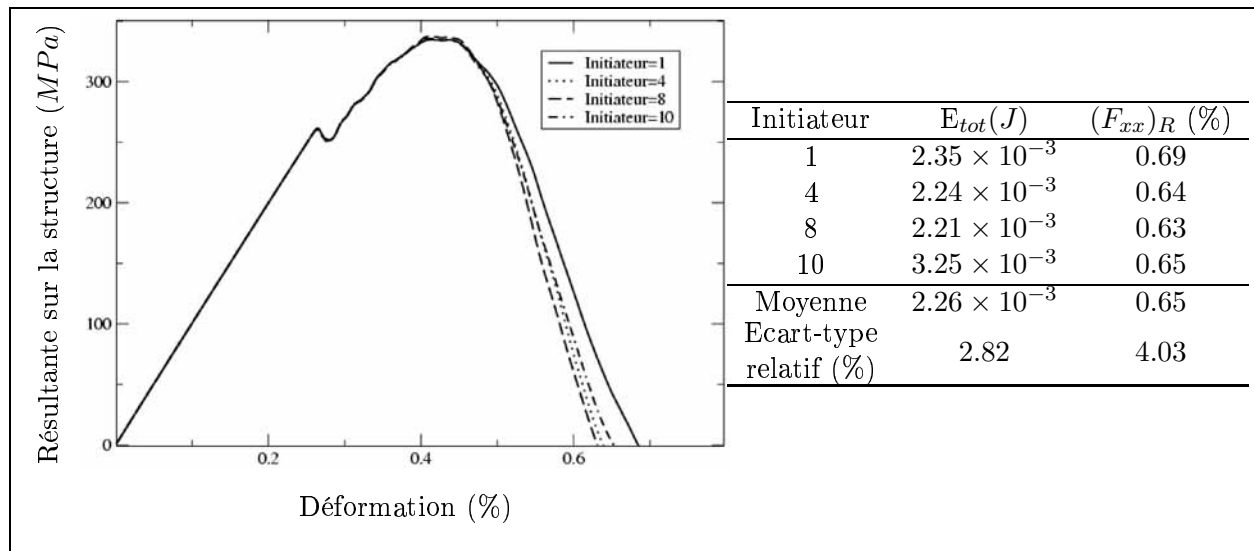


FIG. C.5 – $\hat{R}^H = 0.45 \hat{R}^{Zr}$, $f^H = 9.5\%$: résultantes (MPa) en fonction de la déformation (%), énergies (J) et déformations à rupture (%) pour différents tirages.

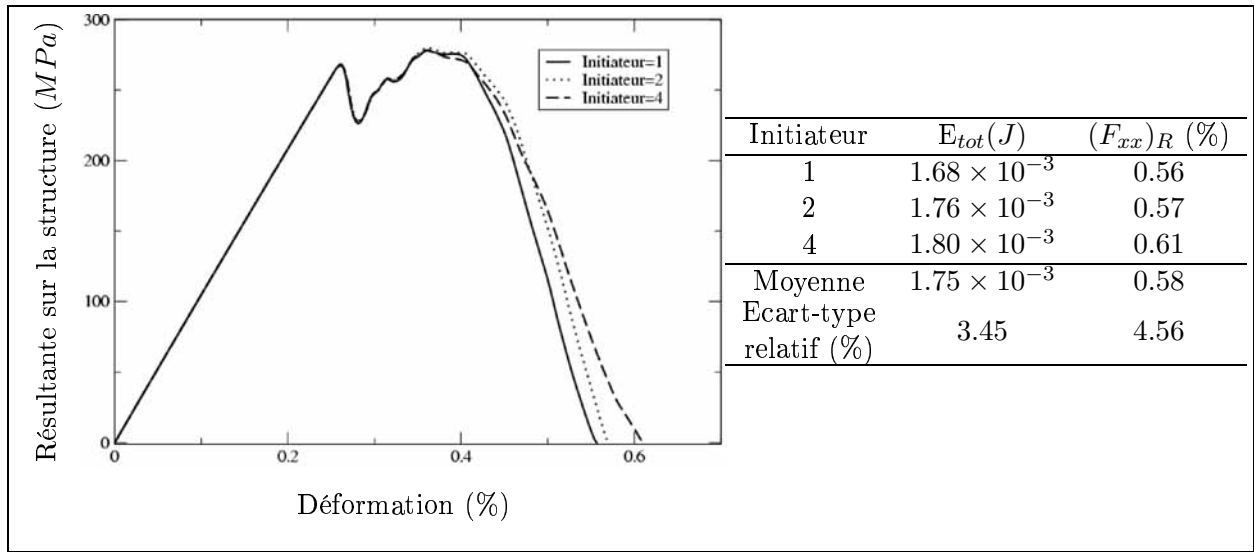


FIG. C.6 – $\hat{R}^H = 0.45 \hat{R}^{Zr}$, $f^H = 20.7\%$: résultantes (MPa) en fonction de la déformation (%), énergies (J) et déformations à rupture (%) pour différents tirages.

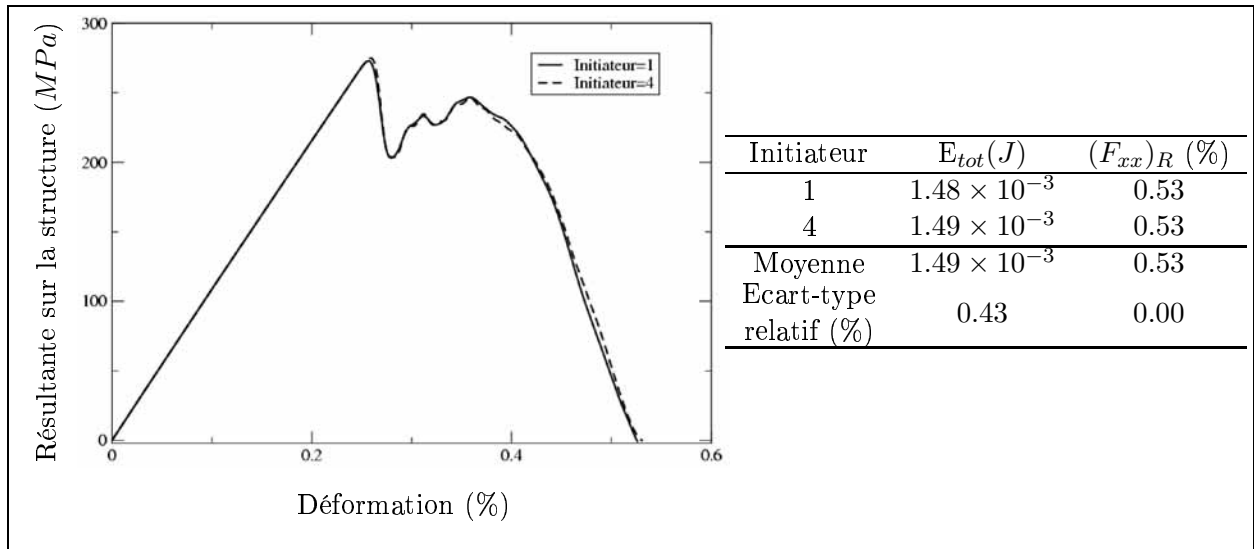


FIG. C.7 – $\hat{R}^H = 0.45 \hat{R}^{Zr}$, $f^H = 30.2\%$: résultantes (MPa) en fonction de la déformation (%), énergies (J) et déformations à rupture (%) pour différents tirages.

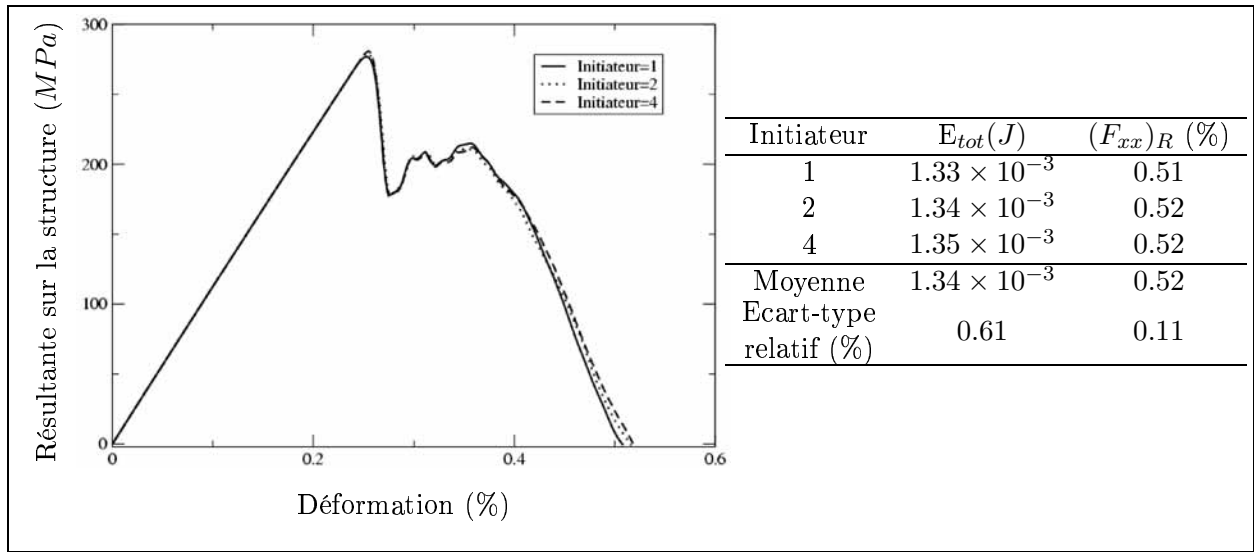


FIG. C.8 – $\hat{R}^H = 0.45 \hat{R}^{Zr}$, $f^H = 39.7\%$: résultantes (MPa) en fonction de la déformation (%), énergies (J) et déformations à rupture (%) pour différents tirages.

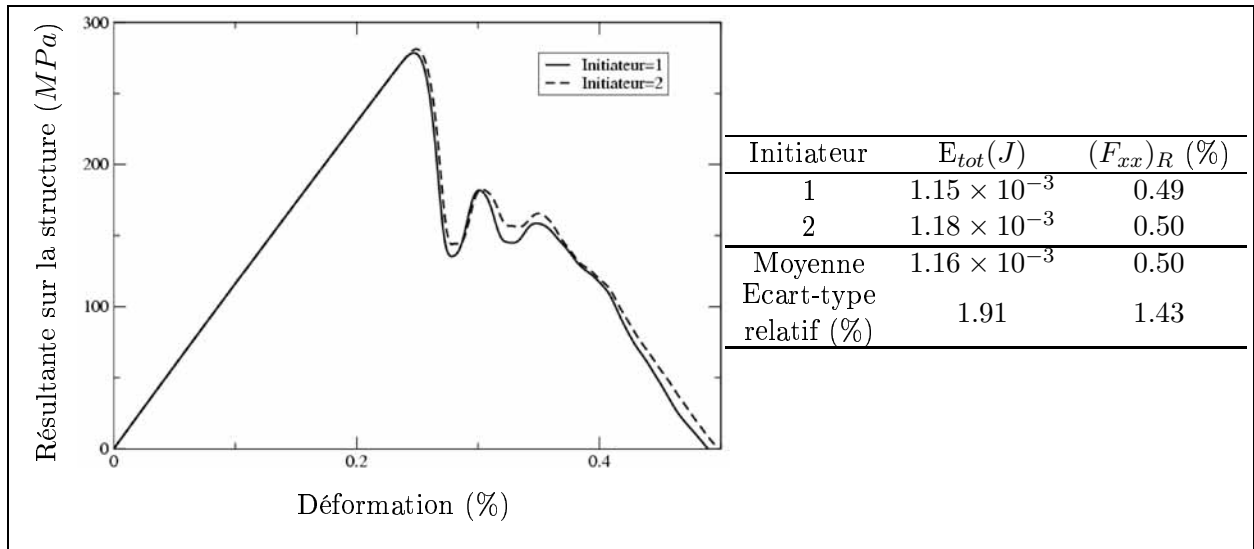


FIG. C.9 – $\hat{R}^H = 0.45 \hat{R}^{Zr}$, $f^H = 49.3\%$: résultantes (MPa) en fonction de la déformation (%), énergies (J) et déformations à rupture (%) pour différents tirages.

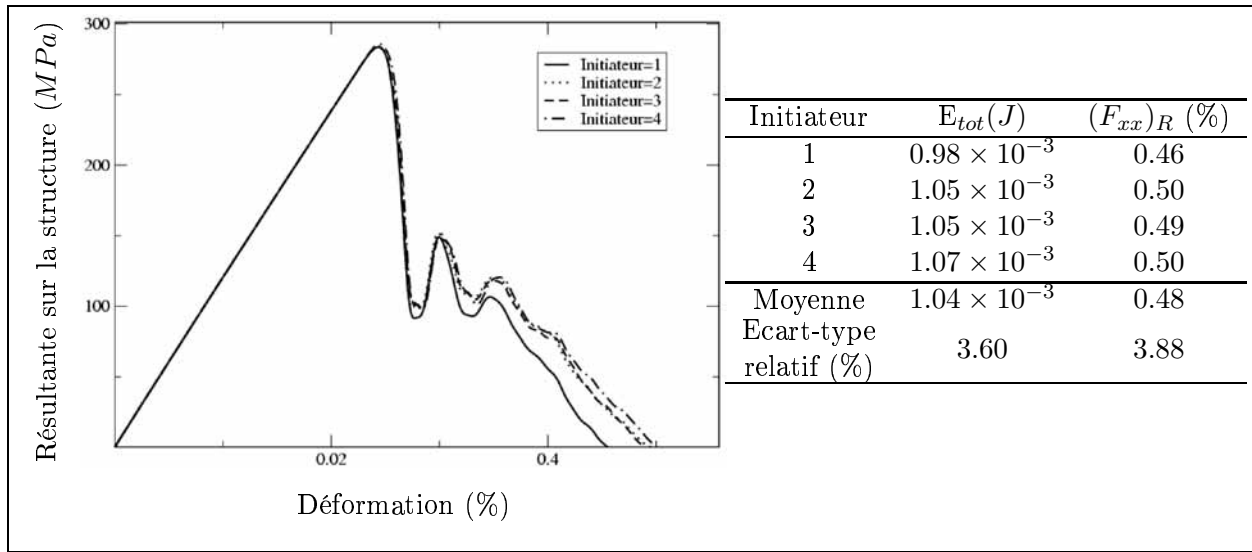


FIG. C.10 - $\hat{R}^H = 0.45 \hat{R}^{Zr}$, $f^H = 60.5\%$: résultantes (MPa) en fonction de la déformation (%), énergies (J) et déformations à rupture (%) pour différents tirages.

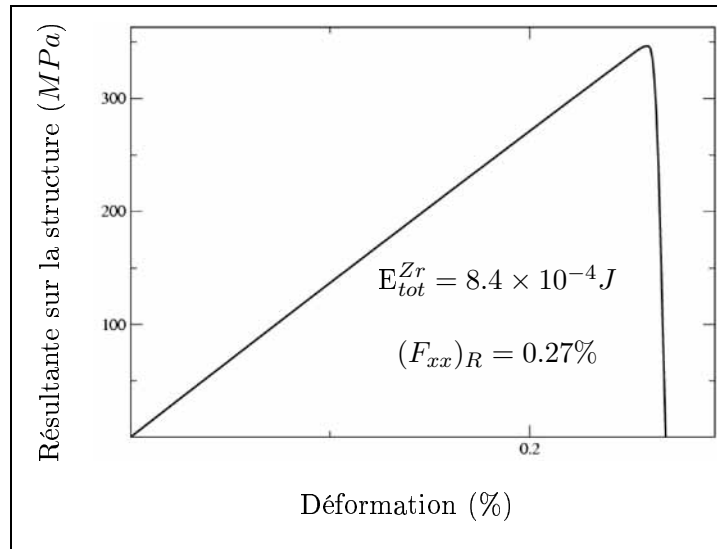


FIG. C.11 - $\hat{R}^H = 0.45 \hat{R}^{Zr}$, $f^H = 100\%$: résultante sur la structure (MPa) en fonction de la déformation (%).

C.3 $\hat{R}^H = 1.3 \hat{R}^{Zr}$

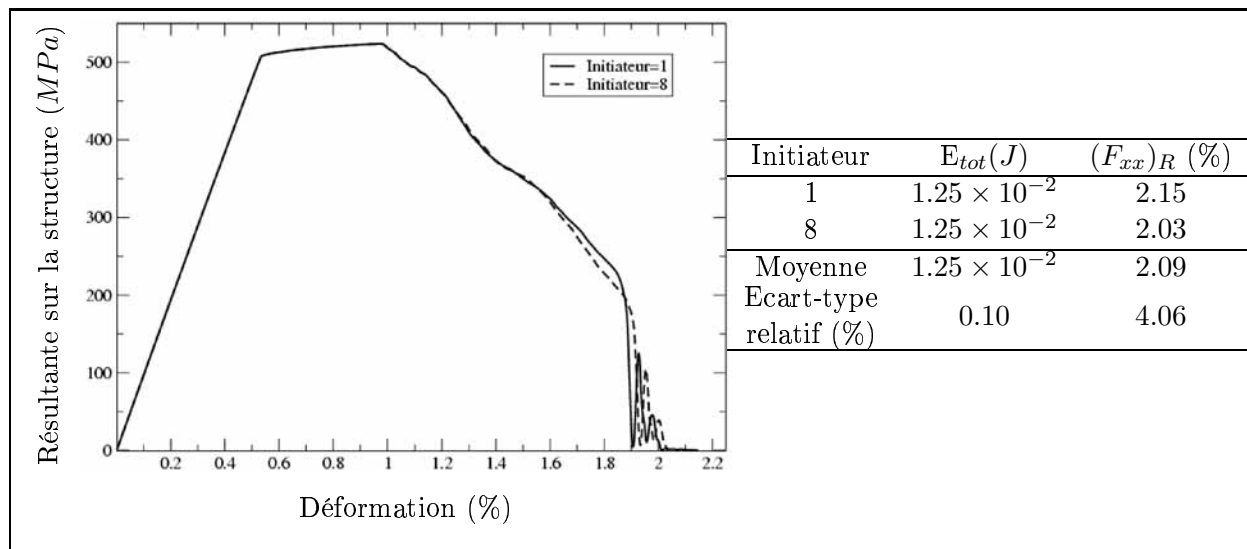


FIG. C.12 – $\hat{R}^H = 1.3 \hat{R}^{Zr}$, $f^H = 1.6\%$: résultantes (MPa) en fonction de la déformation (%), énergies (J) et déformations à rupture (%) pour différents tirages.

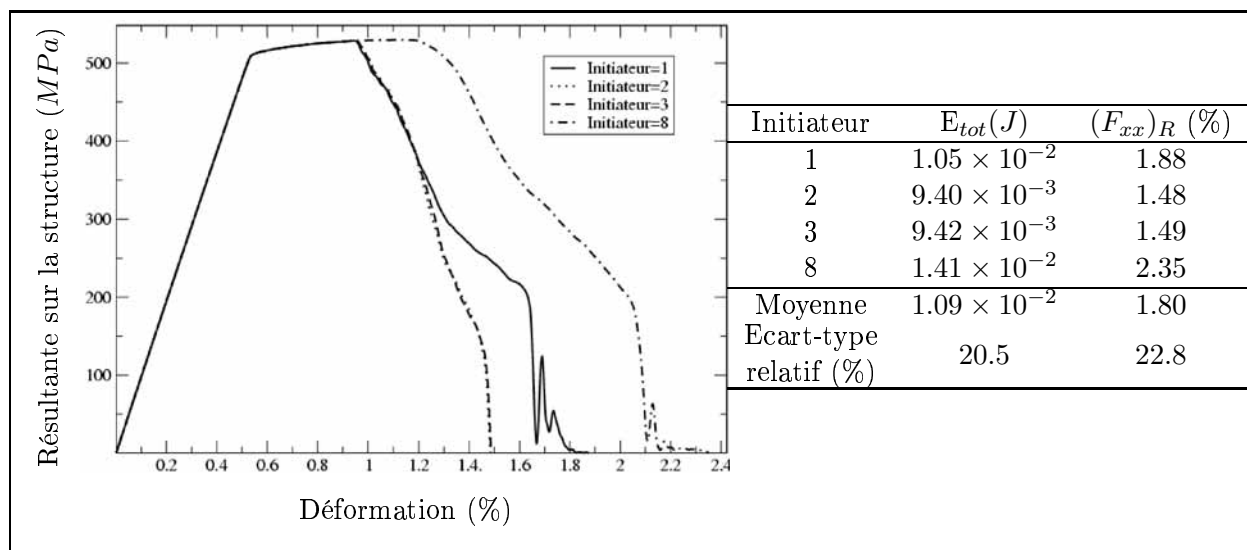


FIG. C.13 – $\hat{R}^H = 1.3 \hat{R}^{Zr}$, $f^H = 3.2\%$: résultantes (MPa) en fonction de la déformation (%), énergies (J) et déformations à rupture (%) pour différents tirages.

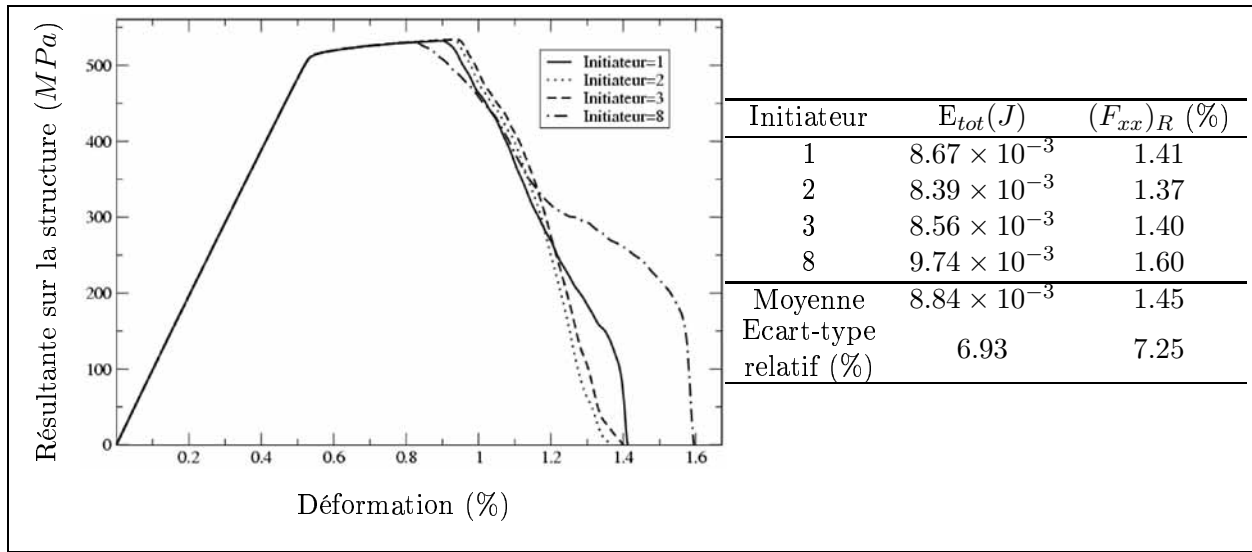


FIG. C.14 – $\hat{R}^H = 1.3 \hat{R}^{Zr}$, $f^H = 4.8\%$: résultantes (MPa) en fonction de la déformation (%), énergies (J) et déformations à rupture (%) pour différents tirages.

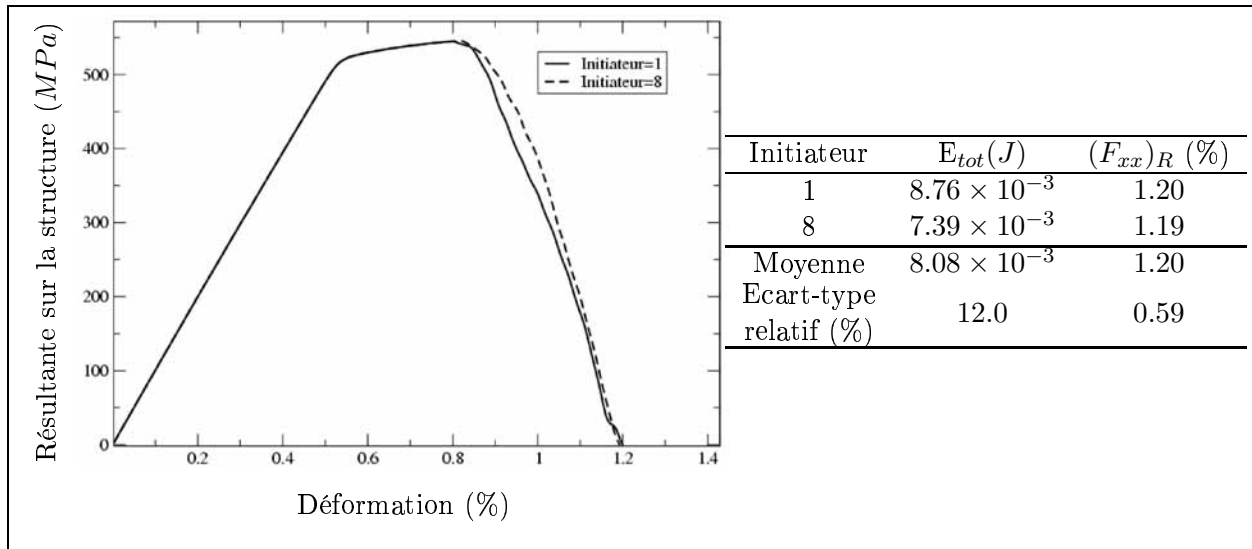


FIG. C.15 – $\hat{R}^H = 1.3 \hat{R}^{Zr}$, $f^H = 9.5\%$: résultantes (MPa) en fonction de la déformation (%), énergies (J) et déformations à rupture (%) pour différents tirages.

C.3. $\hat{R}^H = 1.3 \hat{R}^{Z_R}$

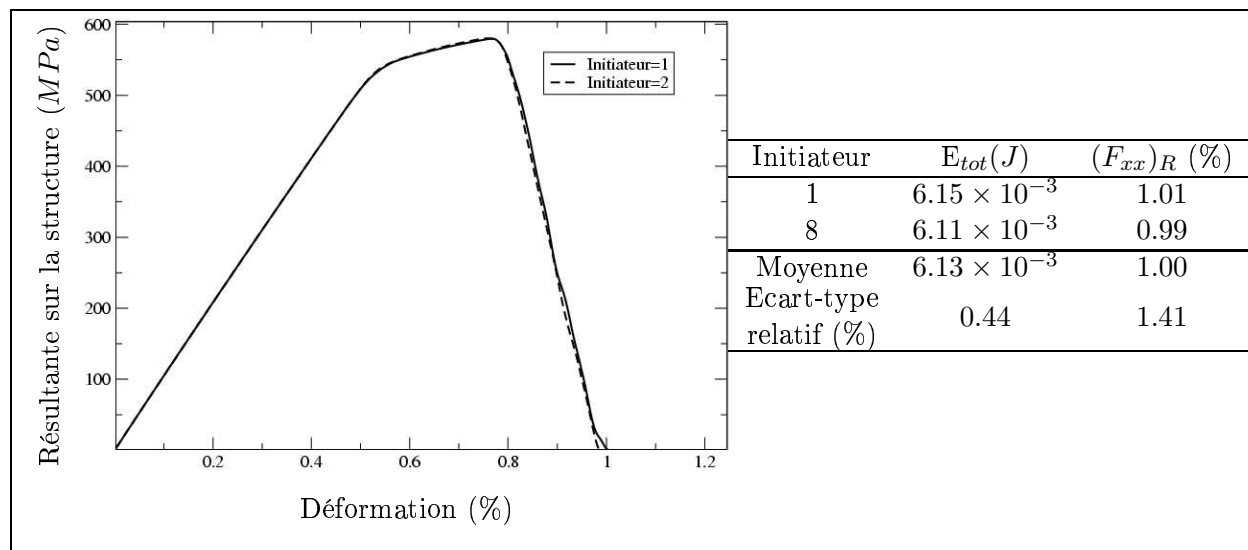


FIG. C.16 – $\hat{R}^H = 1.3 \hat{R}^{Z_r}$, $f^H = 20.7\%$: résultantes (MPa) en fonction de la déformation (%), énergies (J) et déformations à rupture (%) pour différents tirages.

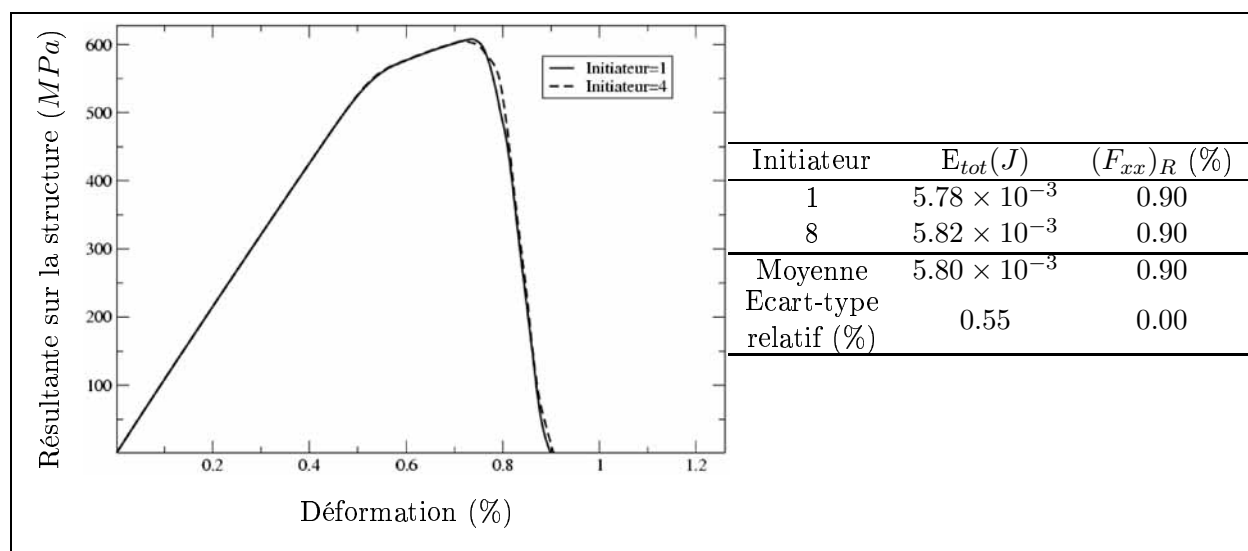


FIG. C.17 – $\hat{R}^H = 1.3 \hat{R}^{Z_r}$, $f^H = 30.2\%$: résultantes (MPa) en fonction de la déformation (%), énergies (J) et déformations à rupture (%) pour différents tirages.

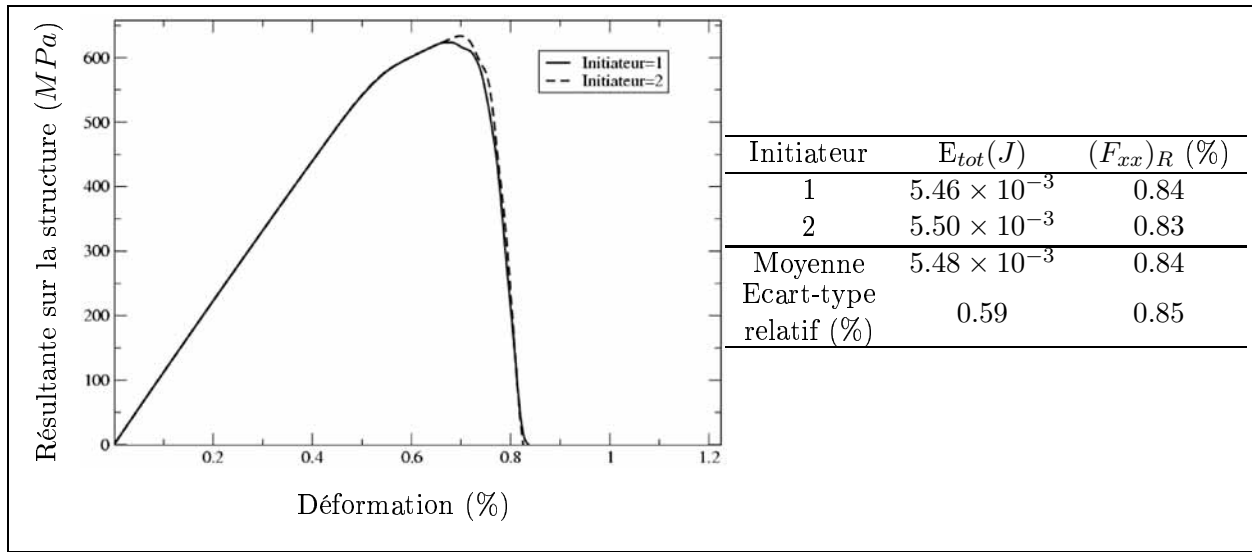


FIG. C.18 – $\hat{R}^H = 1.3 \hat{R}^{Zr}$, $f^H = 39.7\%$: résultantes (MPa) en fonction de la déformation (%), énergies (J) et déformations à rupture (%) pour différents tirages.

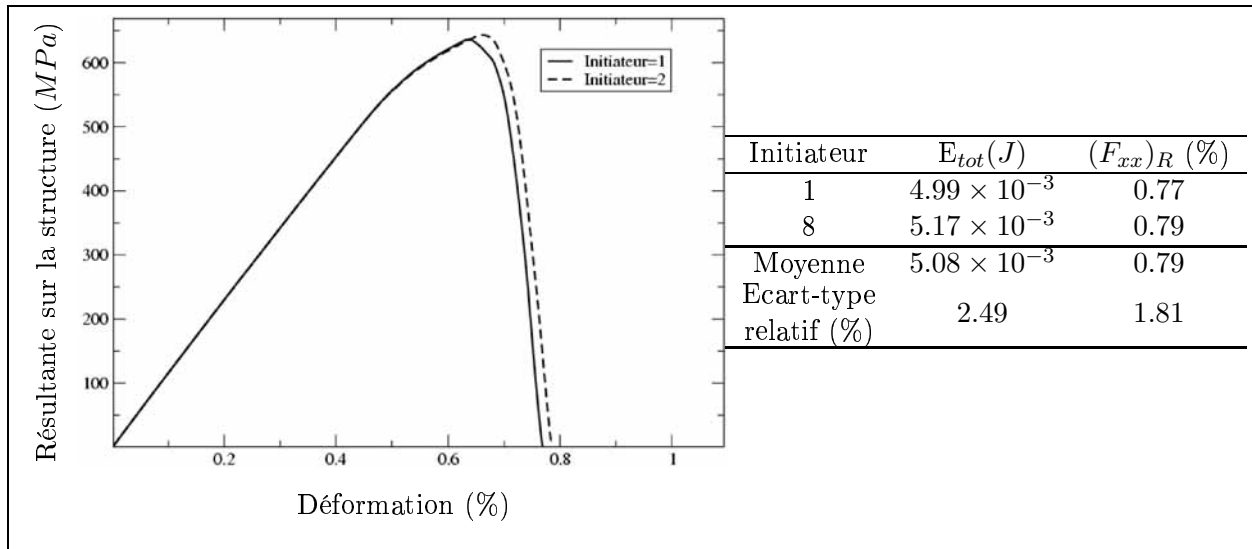


FIG. C.19 – $\hat{R}^H = 1.3 \hat{R}^{Zr}$, $f^H = 49.3\%$: résultantes (MPa) en fonction de la déformation (%), énergies (J) et déformations à rupture (%) pour différents tirages.

C.3. $\hat{R}^H = 1.3 \hat{R}^{Zr}$

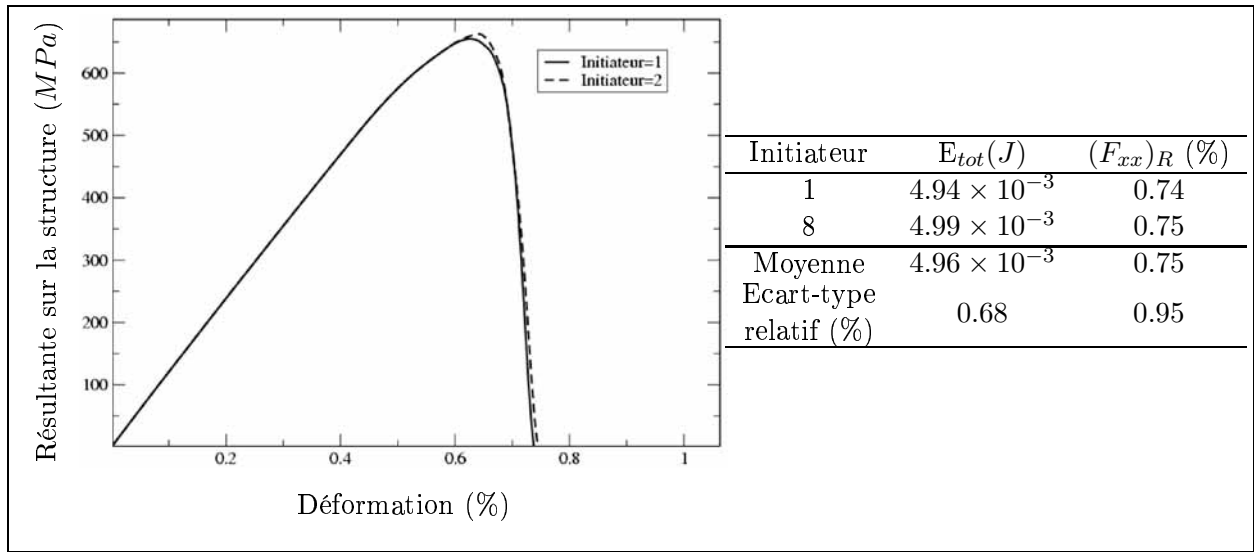


FIG. C.20 - $\hat{R}^H = 1.3 \hat{R}^{Zr}$, $f^H = 60.5\%$: résultantes (MPa) en fonction de la déformation (%), énergies (J) et déformations à rupture (%) pour différents tirages.

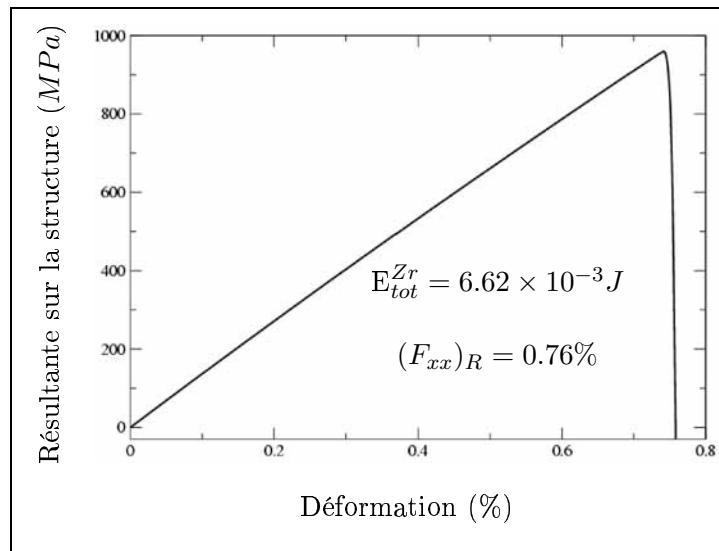


FIG. C.21 - $\hat{R}^H = 1.3 \hat{R}^{Zr}$, $f^H = 100\%$: résultante sur la structure (MPa) en fonction de la déformation (%).

Annexe D

Profils du gradient d'hydrogène

Cette Annexe regroupe les profils de gradient, classés par taux moyen d'hydrogène, utilisés dans les calculs de structure (Chapitre 9). La loi décrivant le gradient d'hydrogène est définie par l'Eq. 9.2.4.

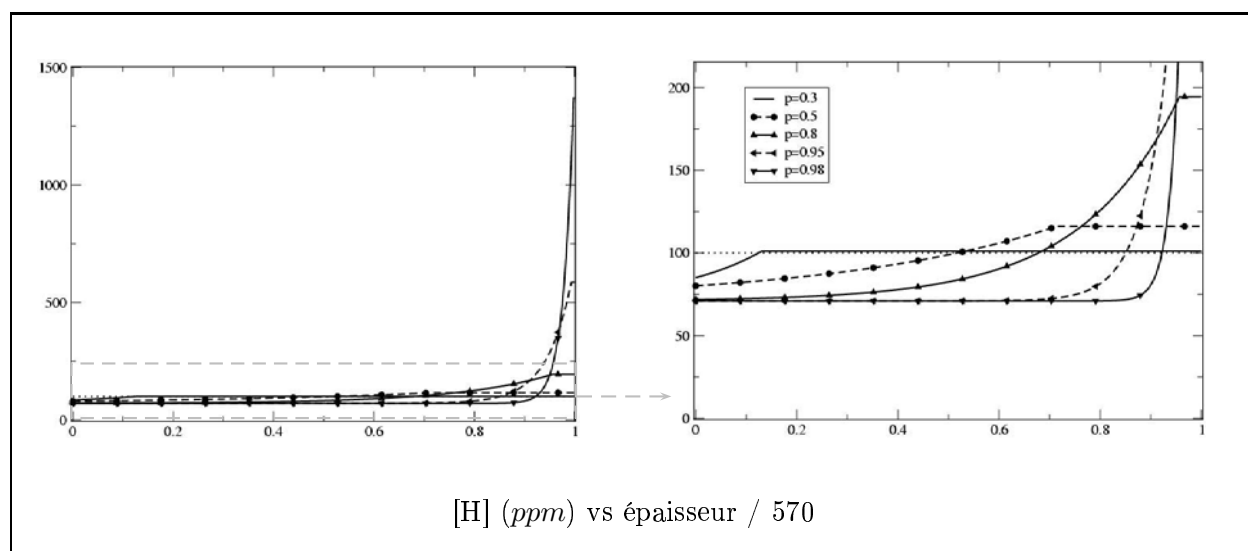


FIG. D.1 – $[\bar{H}] = 100\text{ppm}$: différents gradients

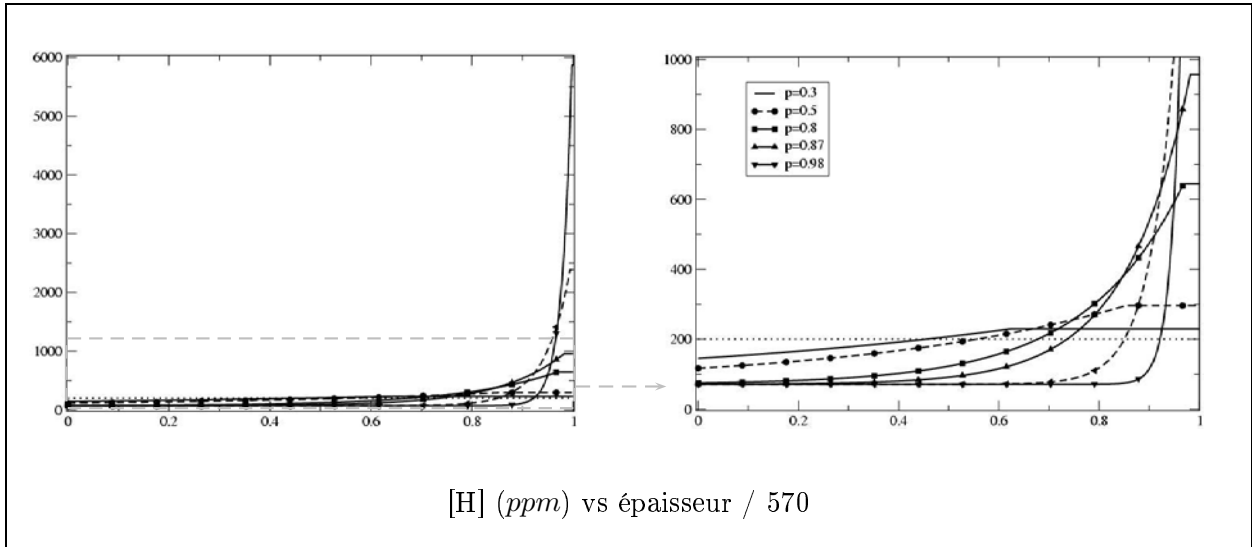


FIG. D.2 - $[\bar{H}] = 200\text{ppm}$: différents gradients

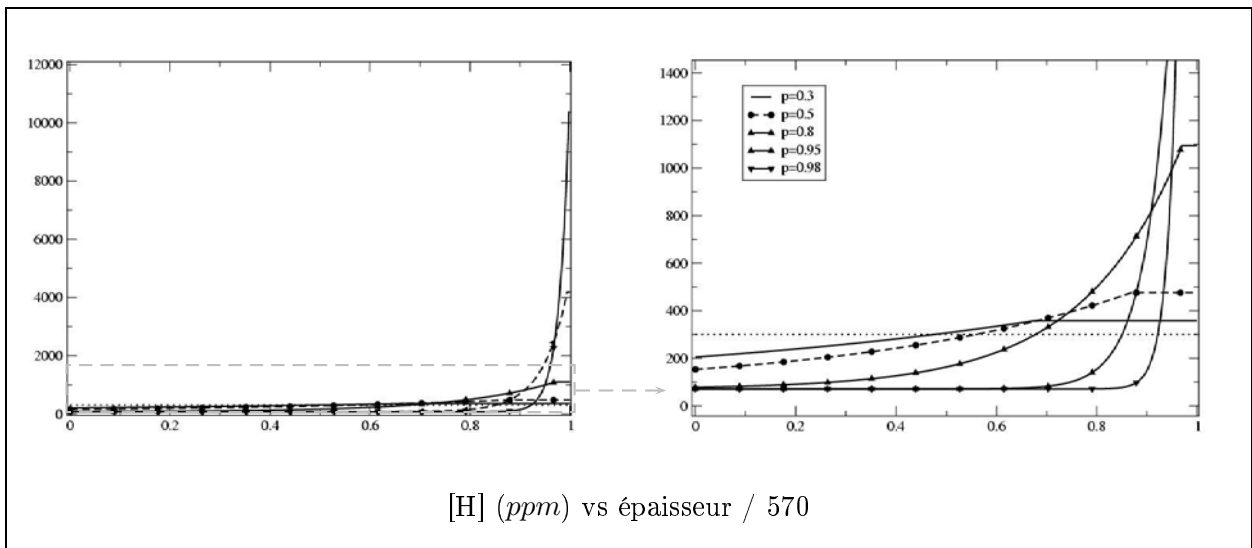


FIG. D.3 - $[\bar{H}] = 300\text{ppm}$: différents gradients

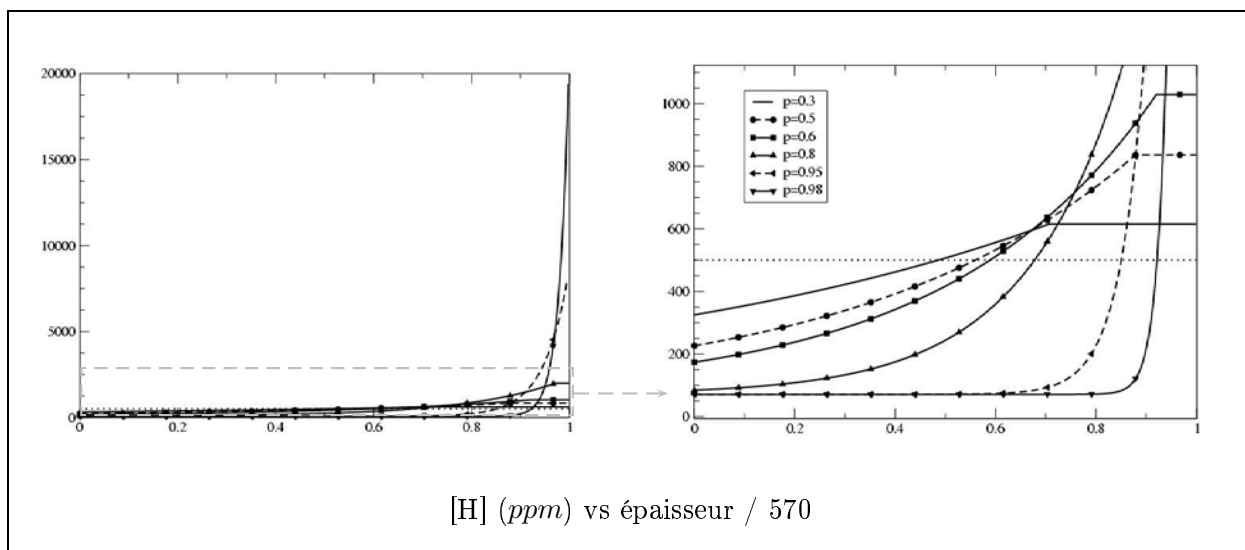


FIG. D.4 - $[\bar{H}] = 500\text{ppm}$: différents gradients

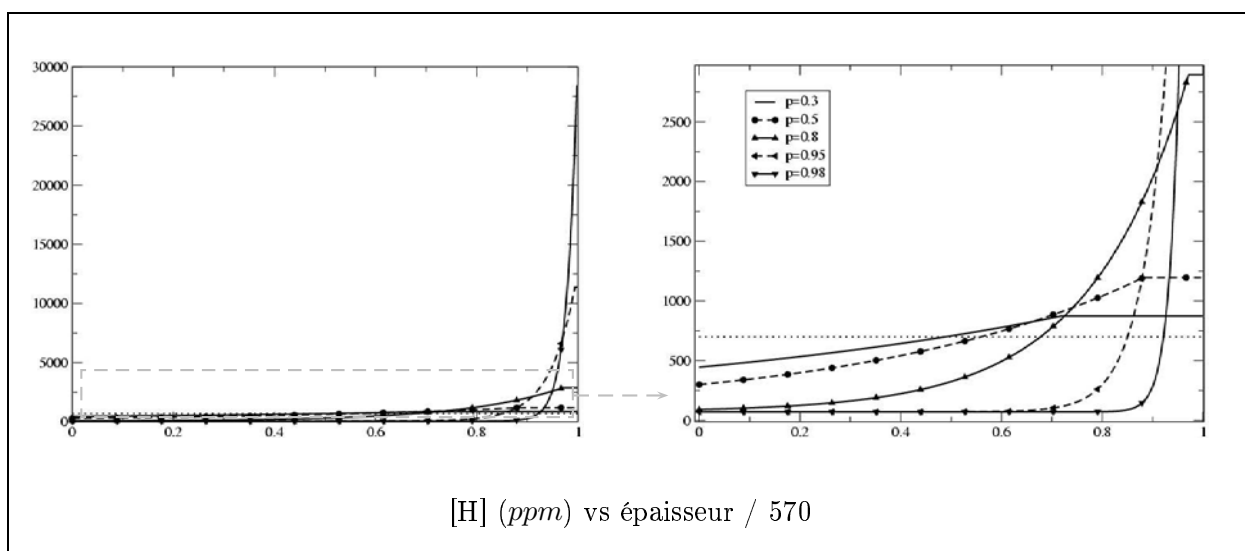


FIG. D.5 - $[\bar{H}] = 700\text{ppm}$: différents gradients

Annexe E

Echelle macroscopique : résultats

E.1 $[\bar{H}] = 100ppm$

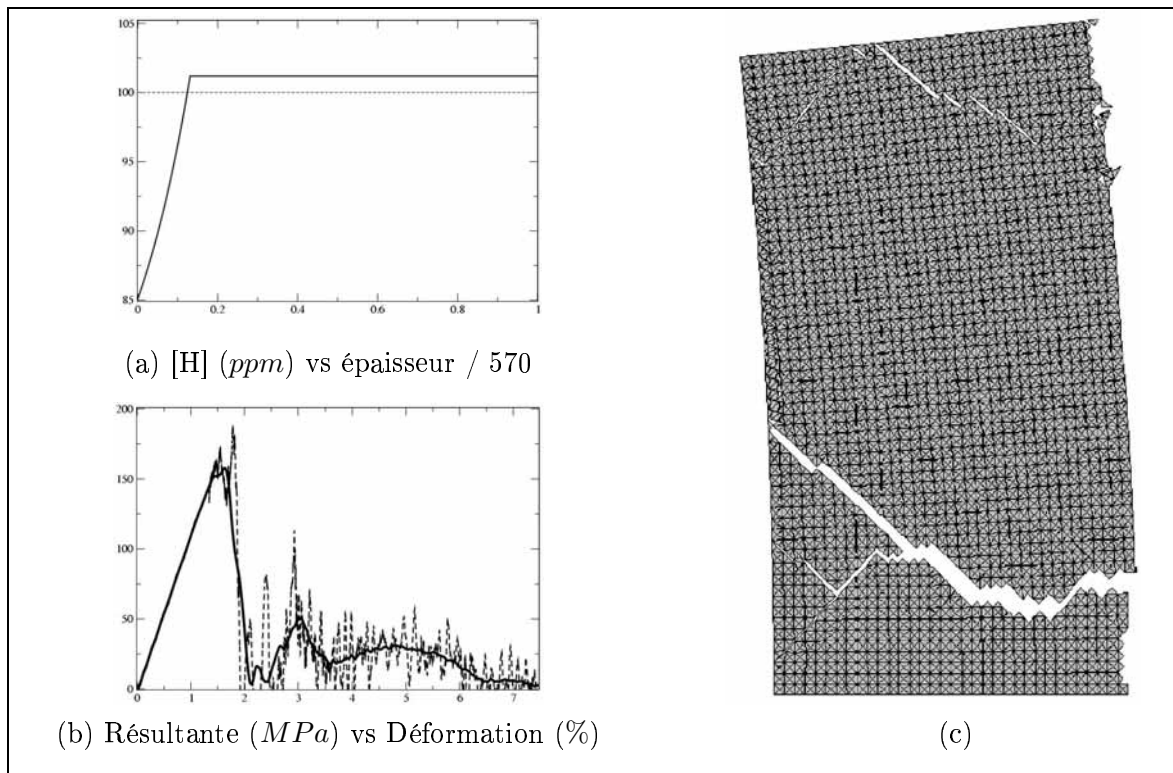


FIG. E.1 - $[\bar{H}] = 100ppm$, $p= 0.3$: (a) Profil du gradient d'hydrogène, (b) Resultante sur la structure et (c) Faciès de rupture.

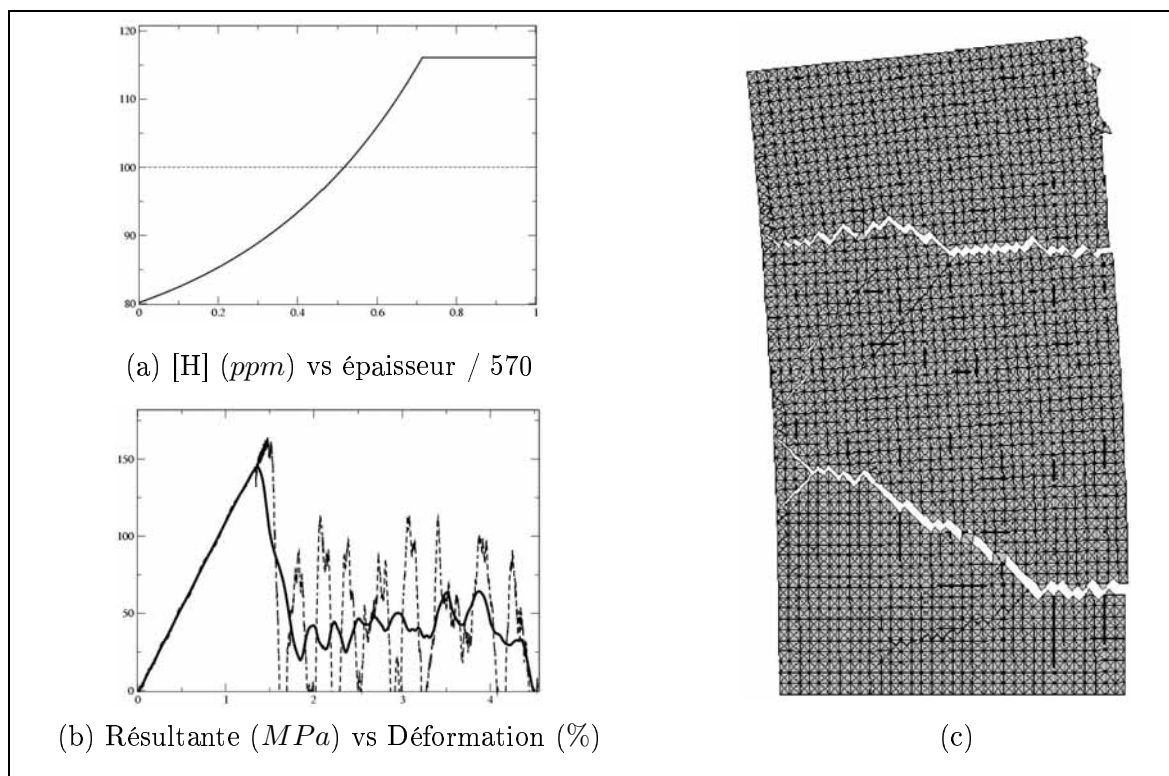


FIG. E.2 – $[\bar{H}] = 100ppm$, $p = 0.5$: (a) Profil du gradient d'hydrogène, (b) Resultante sur la structure et (c) Faciès de rupture.

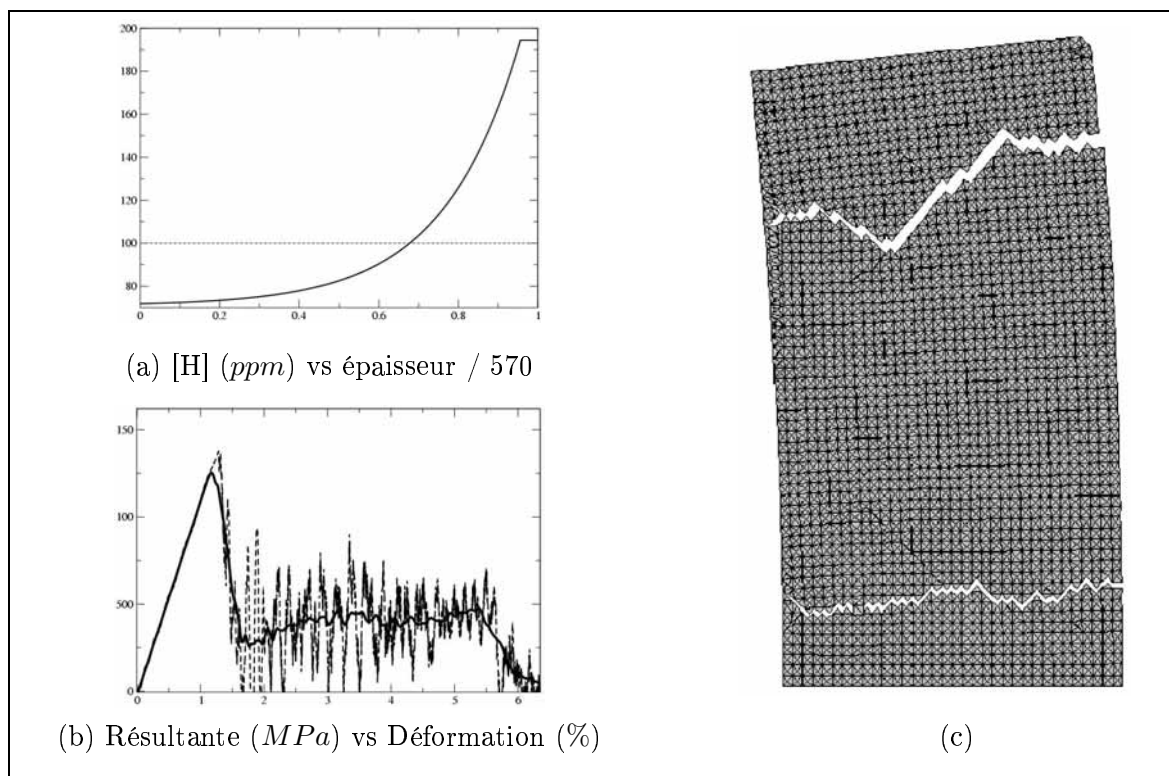


FIG. E.3 – $[\bar{H}] = 100ppm$, $p = 0.8$: (a) Profil du gradient d'hydrogène, (b) Resultante sur la structure et (c) Faciès de rupture.

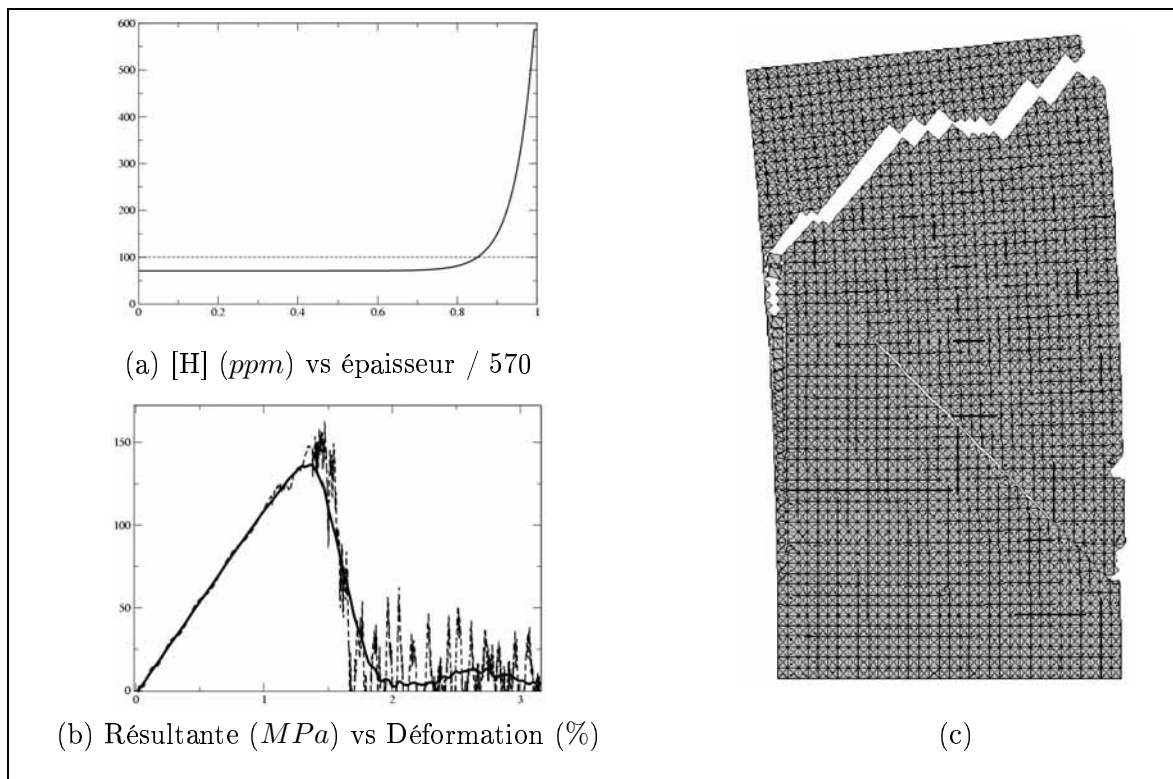


FIG. E.4 – $[\bar{H}] = 100ppm$, $p = 0.95$: (a) Profil du gradient d'hydrogène, (b) Resultante sur la structure et (c) Faciès de rupture.

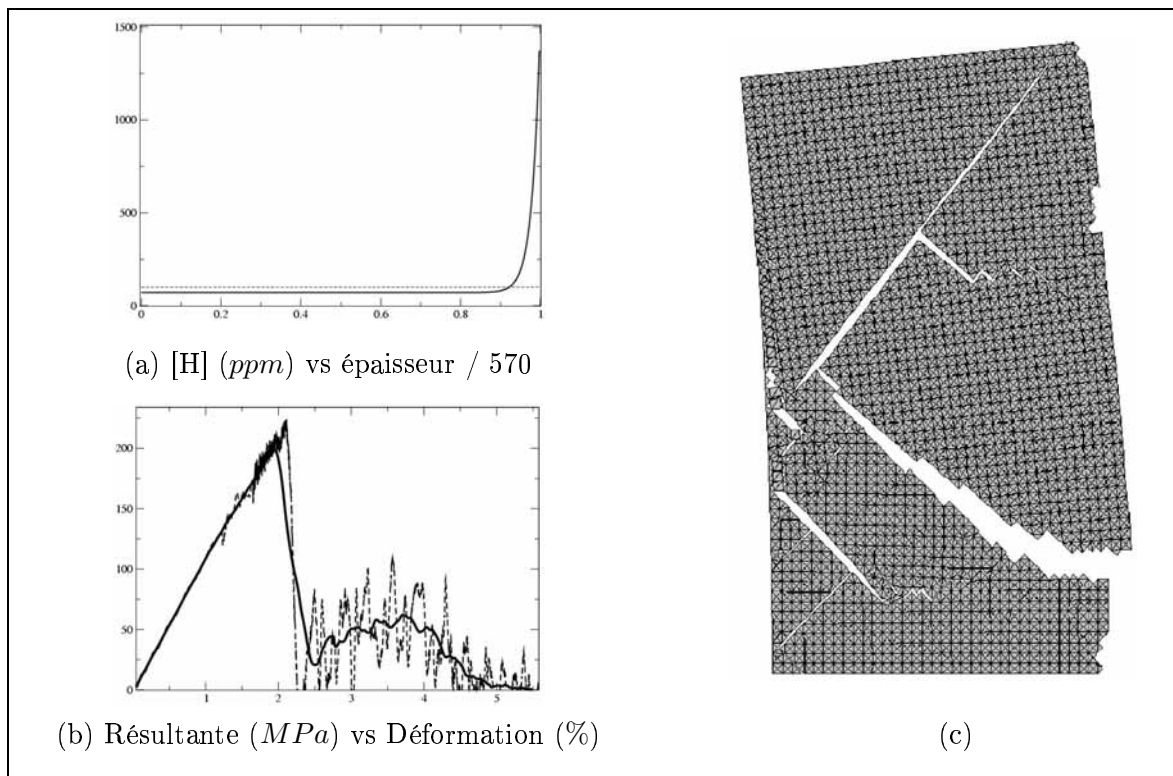


FIG. E.5 – $[\bar{H}] = 100ppm$, $p = 0.98$: (a) Profil du gradient d'hydrogène, (b) Resultante sur la structure et (c) Faciès de rupture.

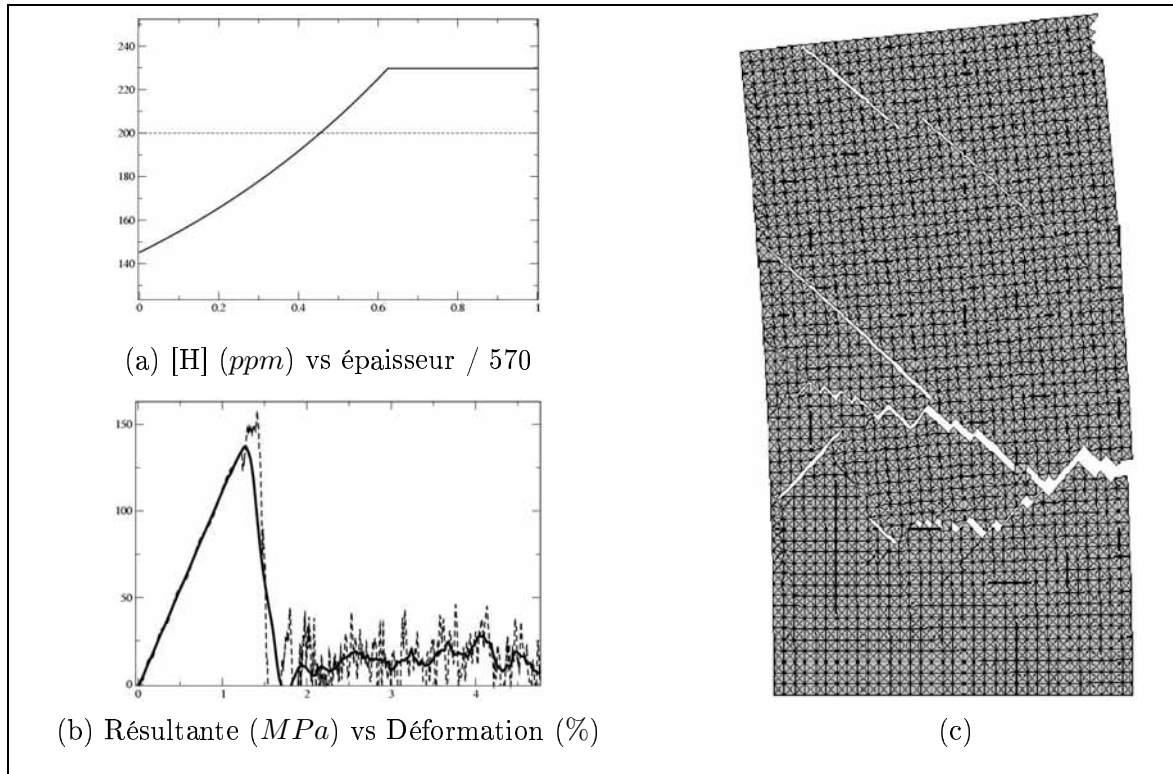
E.2 $[\bar{H}] = 200ppm$ 

FIG. E.6 – $[\bar{H}] = 200ppm$, $p= 0.3$: (a) Profil du gradient d'hydrogène, (b) Resultante sur la structure et (c) Faciès de rupture.

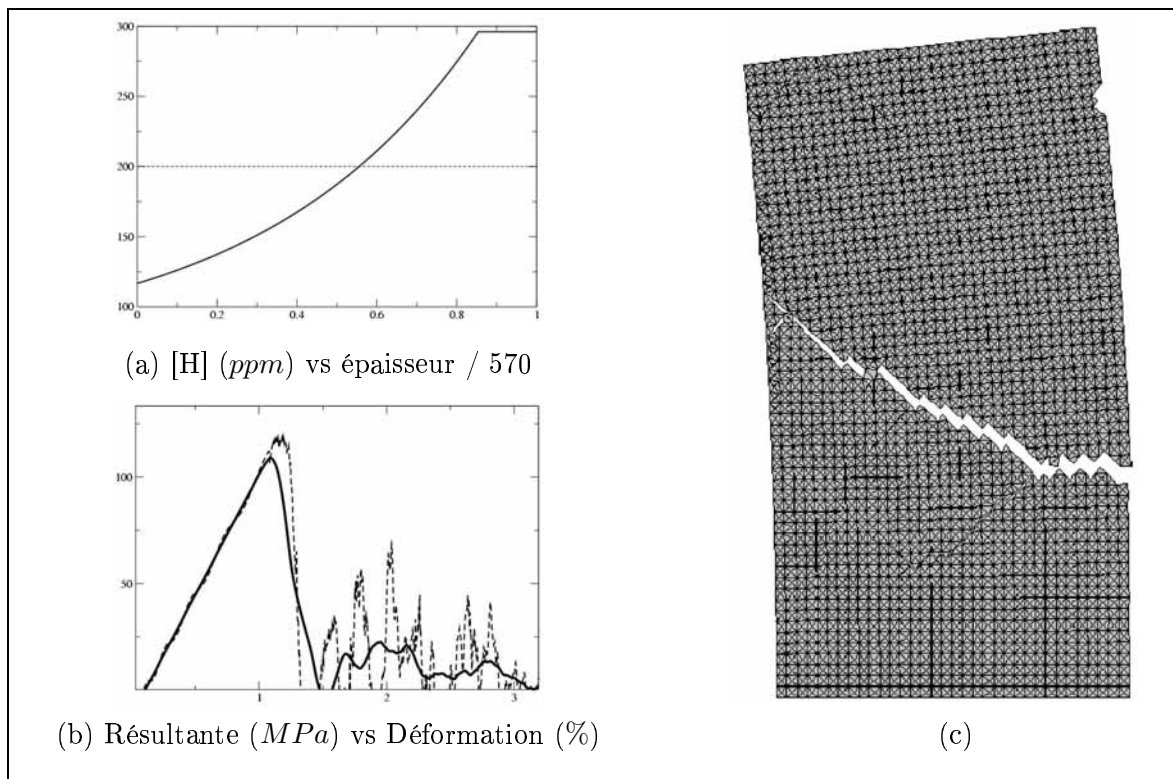


FIG. E.7 – $[\bar{H}] = 200ppm$, $p = 0.5$: (a) Profil du gradient d'hydrogène, (b) Resultante sur la structure et (c) Faciès de rupture.

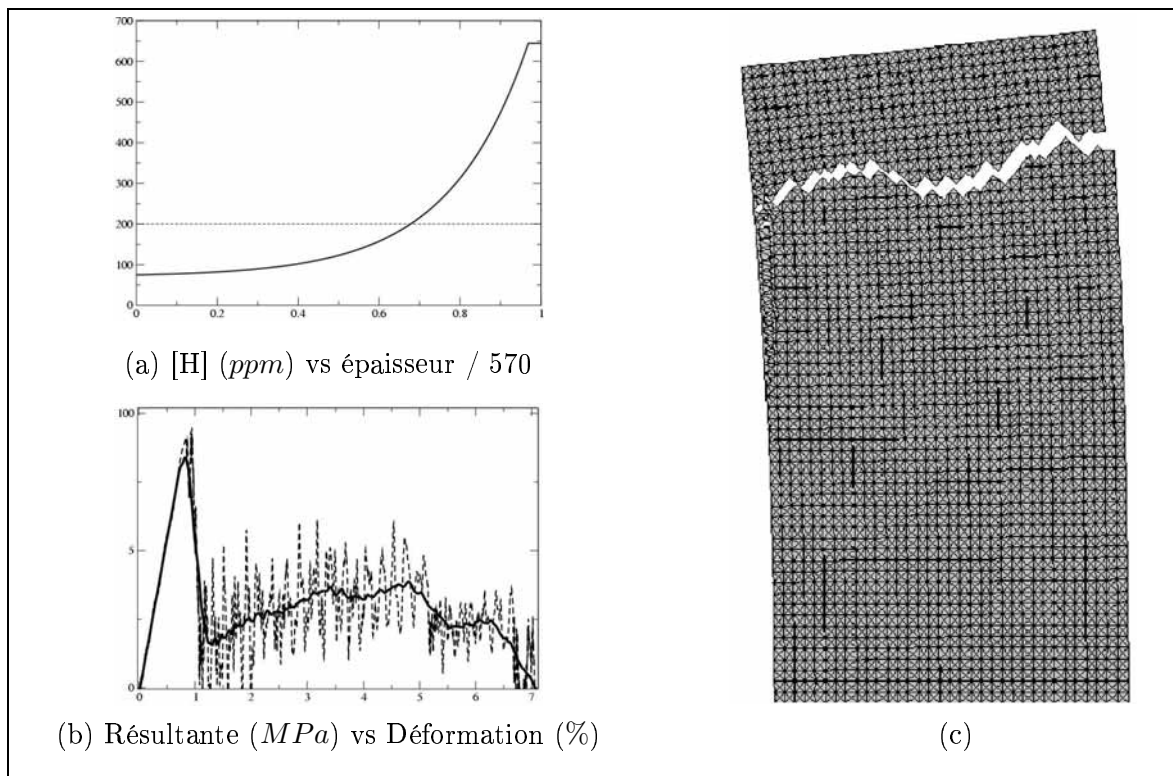


FIG. E.8 – $[\bar{H}] = 200ppm$, $p = 0.8$: (a) Profil du gradient d'hydrogène, (b) Resultante sur la structure et (c) Faciès de rupture.

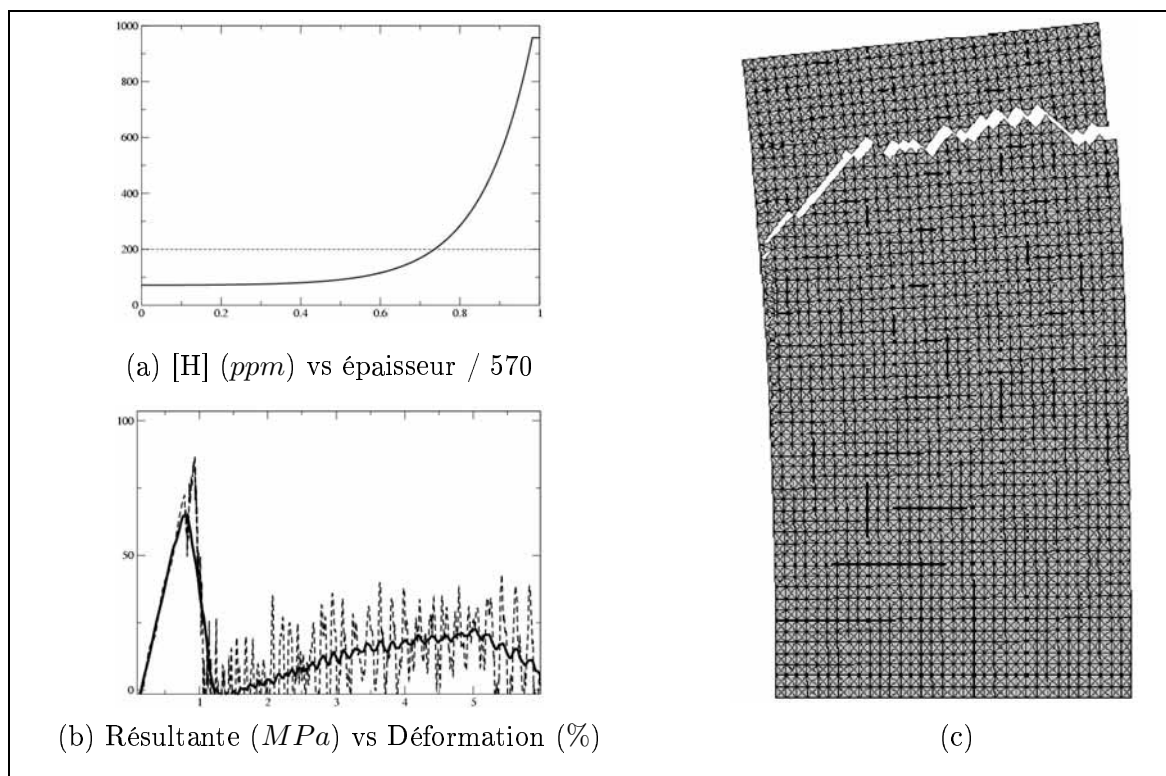


FIG. E.9 – $[\bar{H}] = 200\text{ppm}$, $p = 0.87$: (a) Profil du gradient d'hydrogène, (b) Resultante sur la structure et (c) Faciès de rupture.

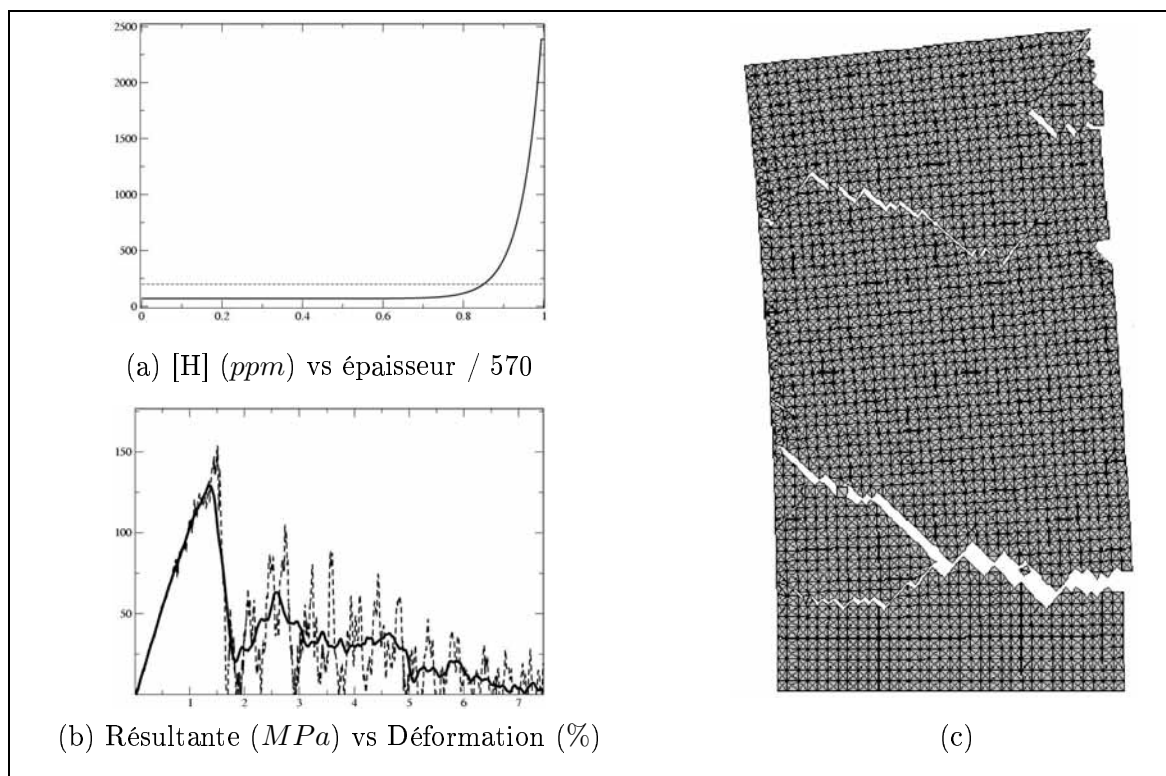


FIG. E.10 – $[\bar{H}] = 200\text{ppm}$, $p = 0.95$: (a) Profil du gradient d'hydrogène, (b) Resultante sur la structure et (c) Faciès de rupture.

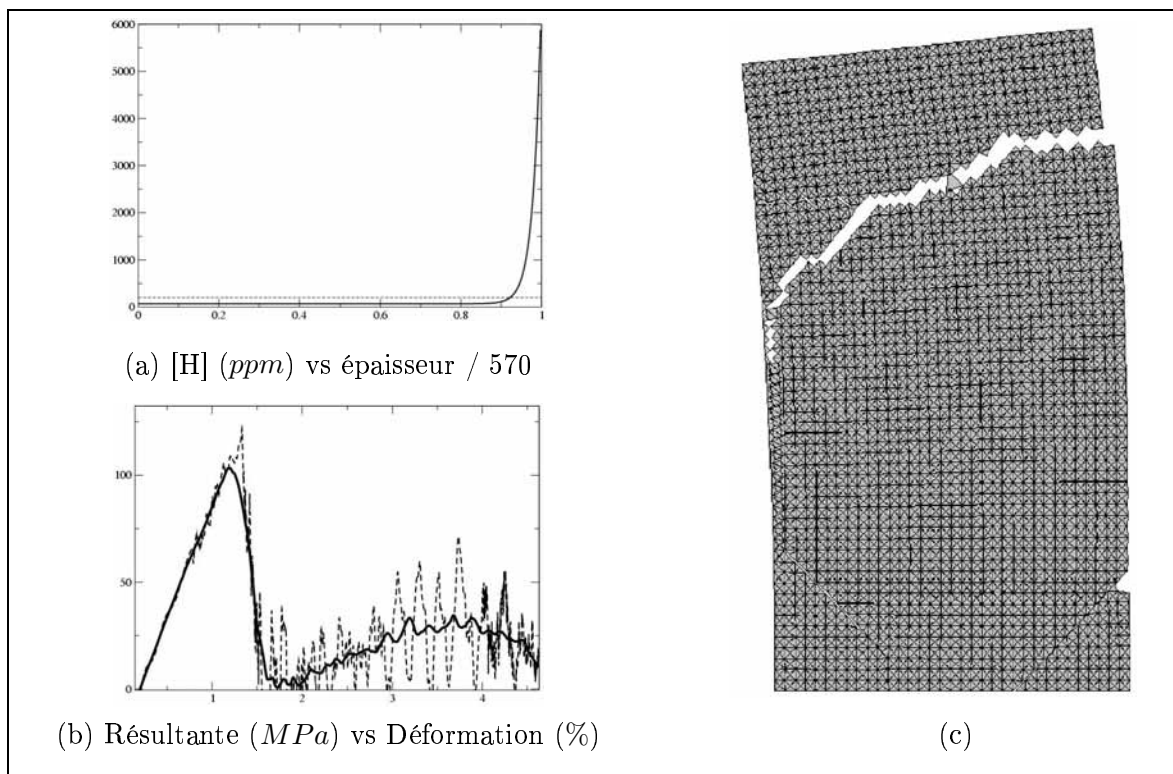


FIG. E.11 – $[\bar{H}] = 200ppm$, $p= 0.98$: (a) Profil du gradient d'hydrogène, (b) Resultante sur la structure et (c) Faciès de rupture.

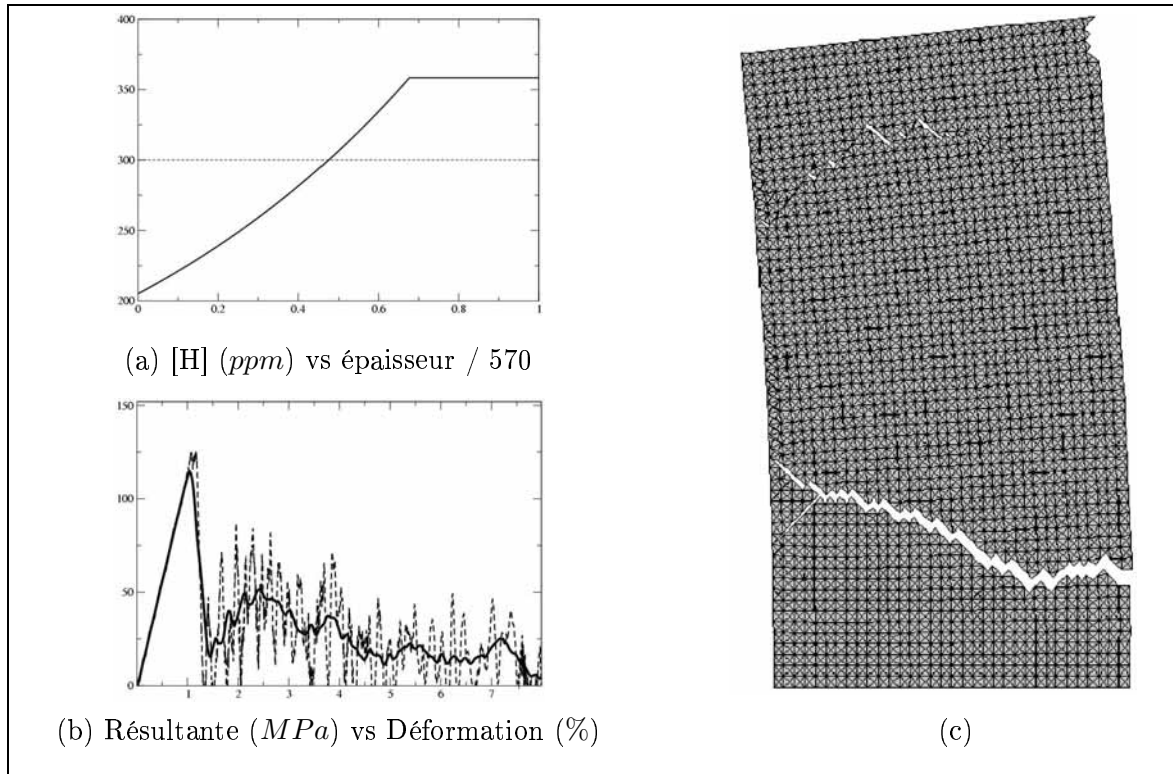
E.3 $[\bar{H}] = 300ppm$ 

FIG. E.12 - $[\bar{H}] = 300ppm$, $p = 0.3$: (a) Profil du gradient d'hydrogène, (b) Resultante sur la structure et (c) Faciès de rupture.

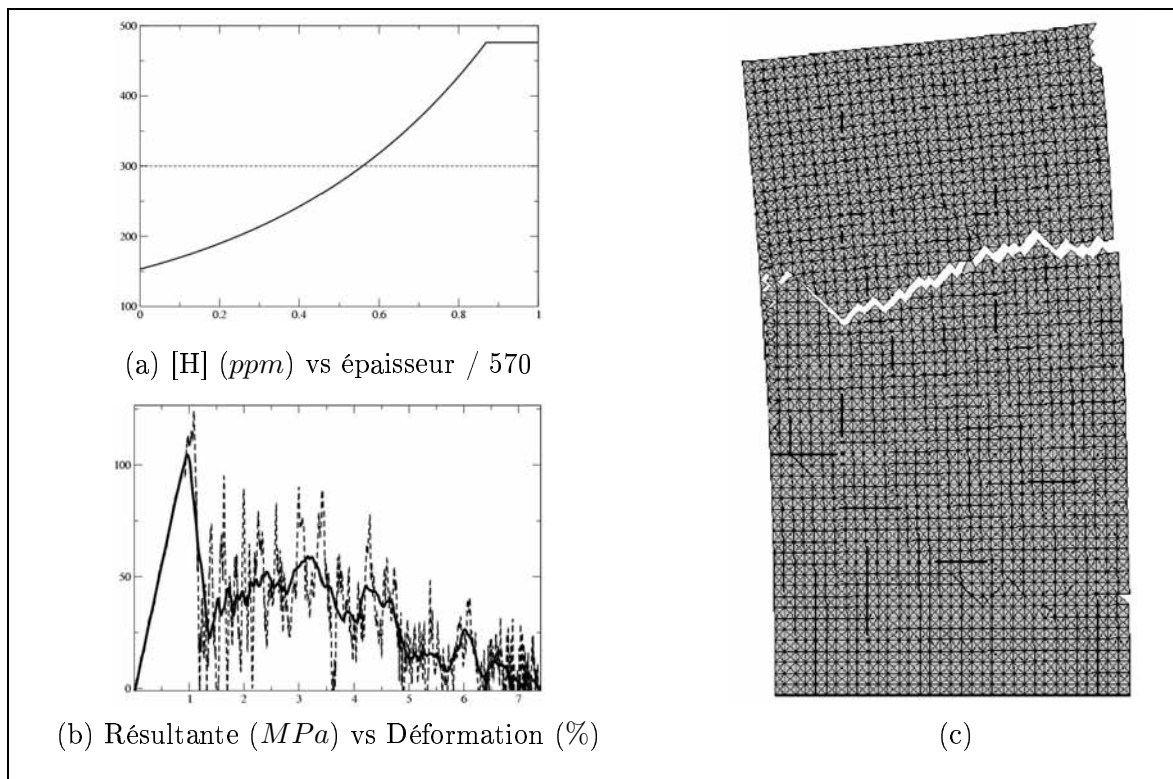


FIG. E.13 – $[\bar{H}] = 300ppm$, $p= 0.5$: (a) Profil du gradient d'hydrogène, (b) Resultante sur la structure et (c) Faciès de rupture.

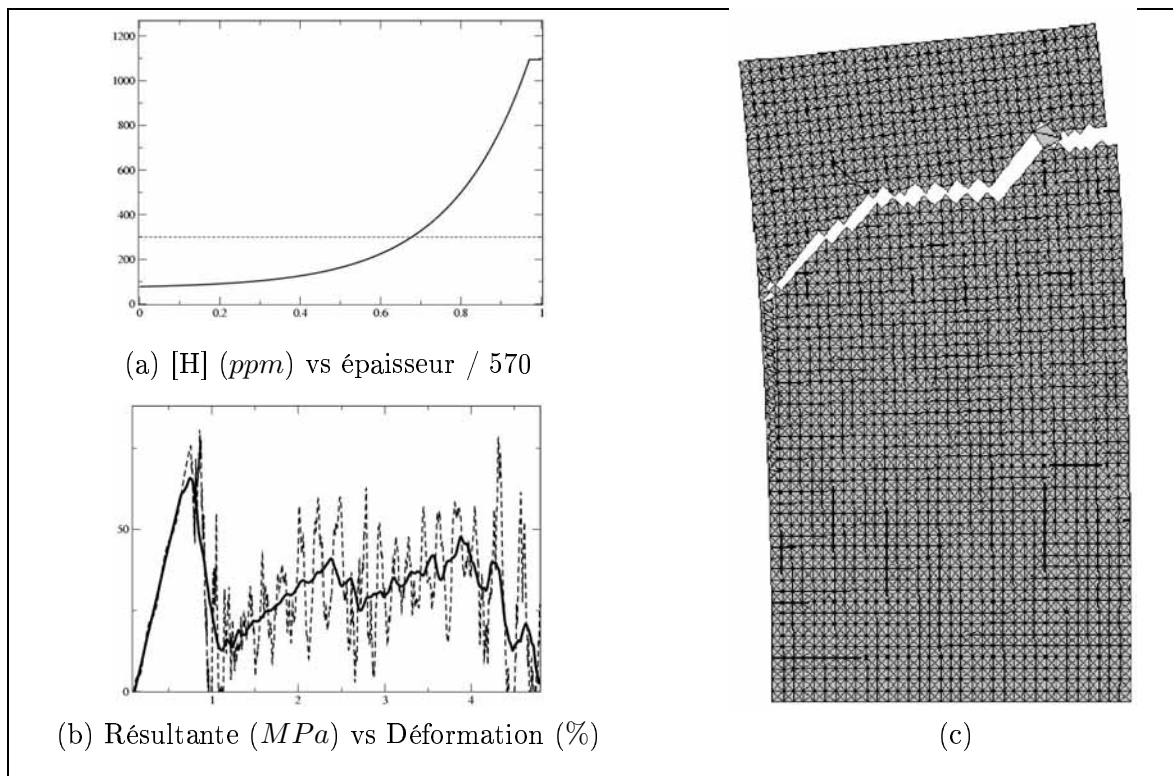


FIG. E.14 – $[\bar{H}] = 300ppm$, $p= 0.8$: (a) Profil du gradient d'hydrogène, (b) Resultante sur la structure et (c) Faciès de rupture.

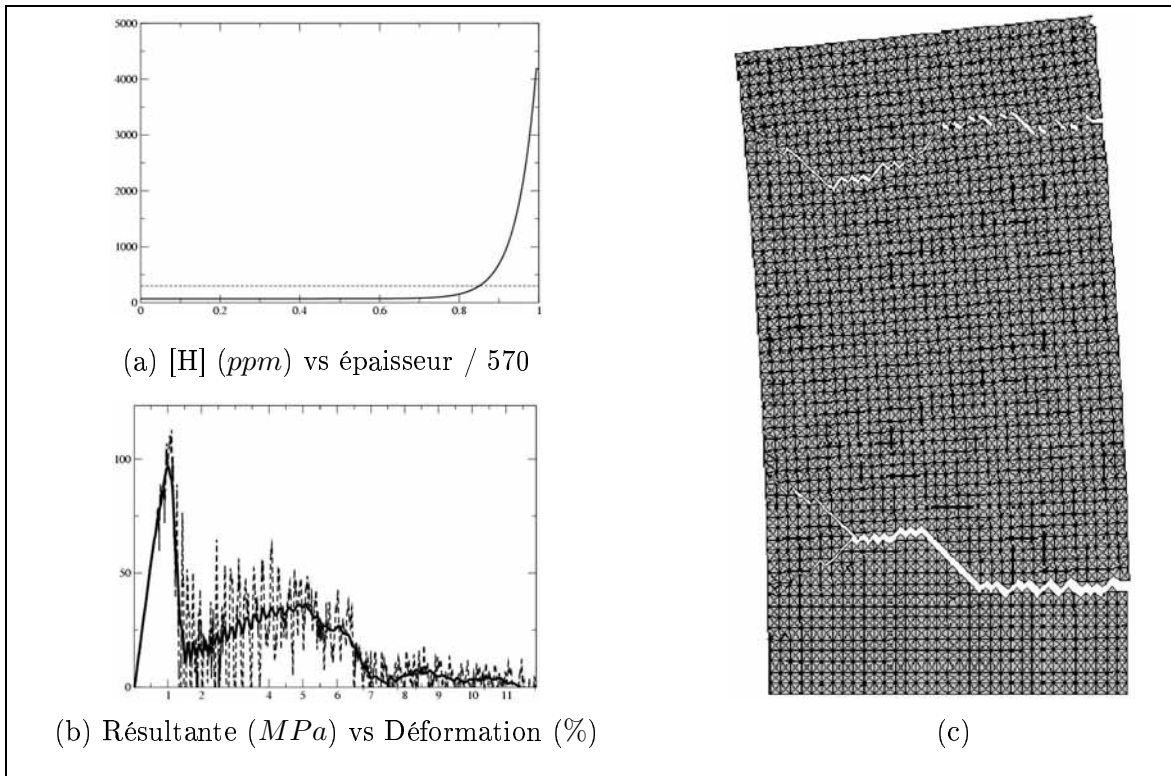


FIG. E.15 – $[\bar{H}] = 300\text{ppm}$, $p = 0.95$: (a) Profil du gradient d'hydrogène, (b) Resultante sur la structure et (c) Faciès de rupture.

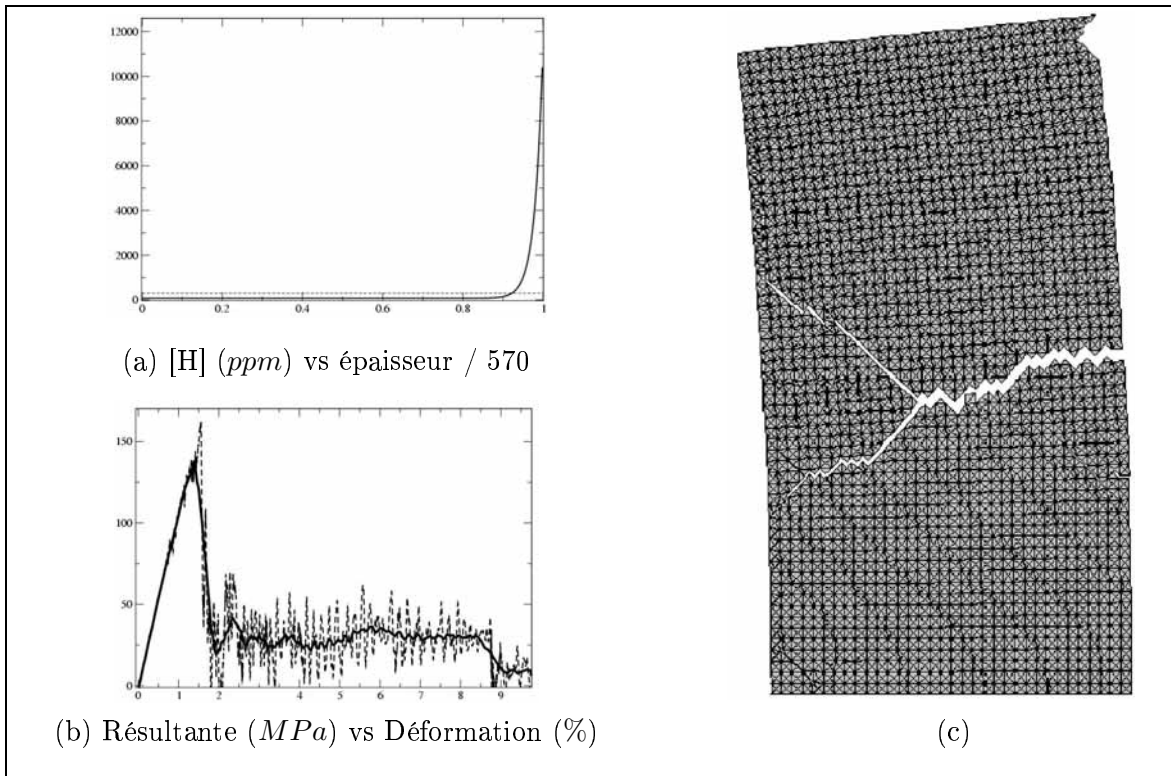


FIG. E.16 – $[\bar{H}] = 300\text{ppm}$, $p = 0.98$: (a) Profil du gradient d'hydrogène, (b) Resultante sur la structure et (c) Faciès de rupture.

E.4 $[\bar{H}] = 500ppm$

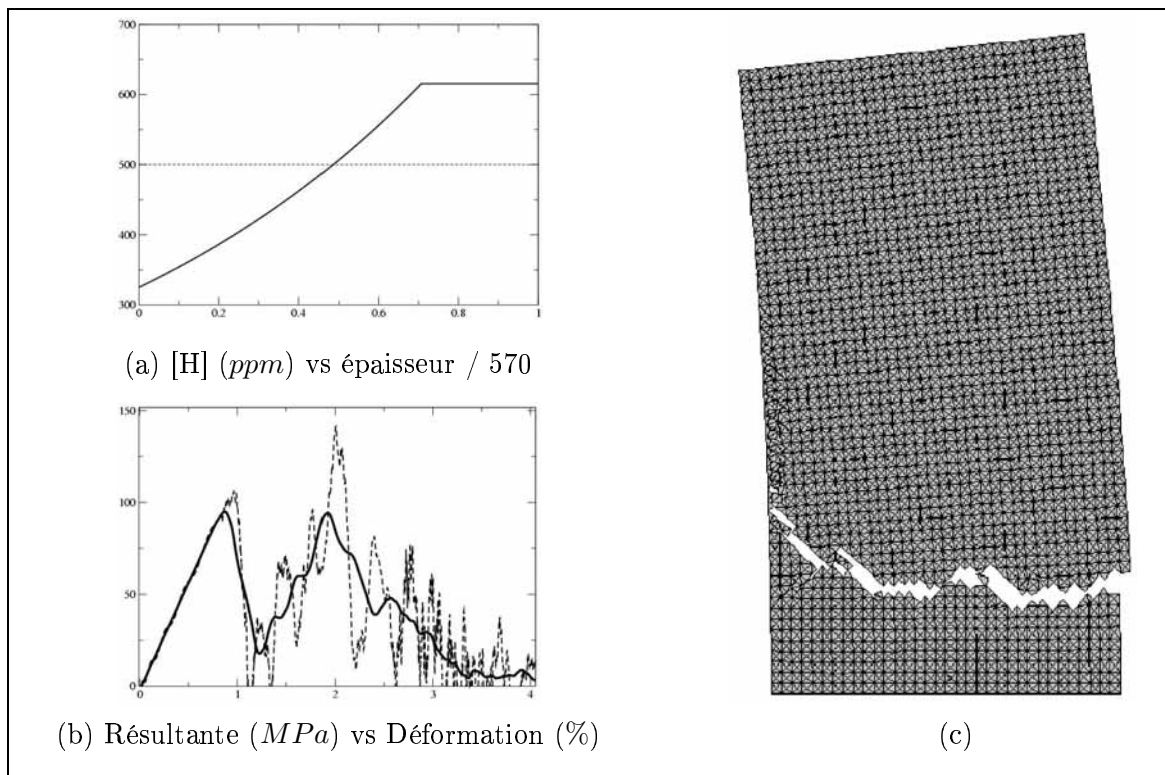


FIG. E.17 - $[\bar{H}] = 500ppm$, $p= 0.3$: (a) Profil du gradient d'hydrogène, (b) Resultante sur la structure et (c) Faciès de rupture.

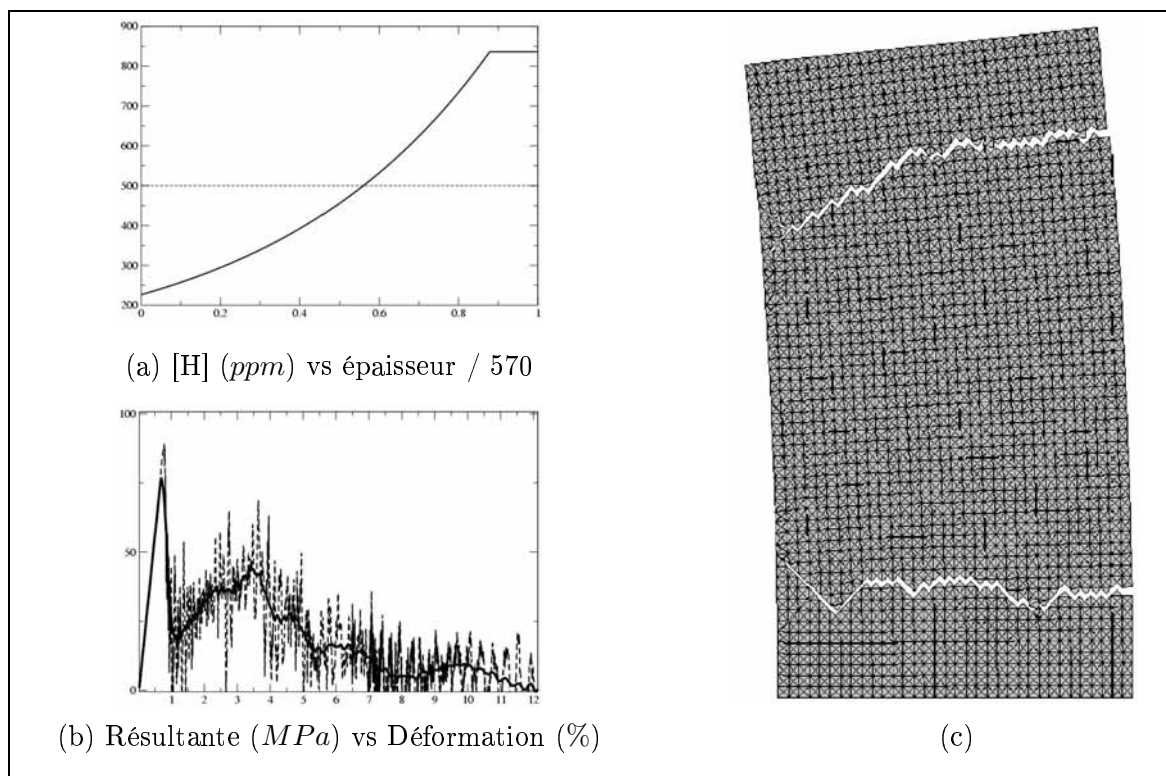


FIG. E.18 – $[\bar{H}] = 500ppm$, $p = 0.5$: (a) Profil du gradient d'hydrogène, (b) Resultante sur la structure et (c) Faciès de rupture.

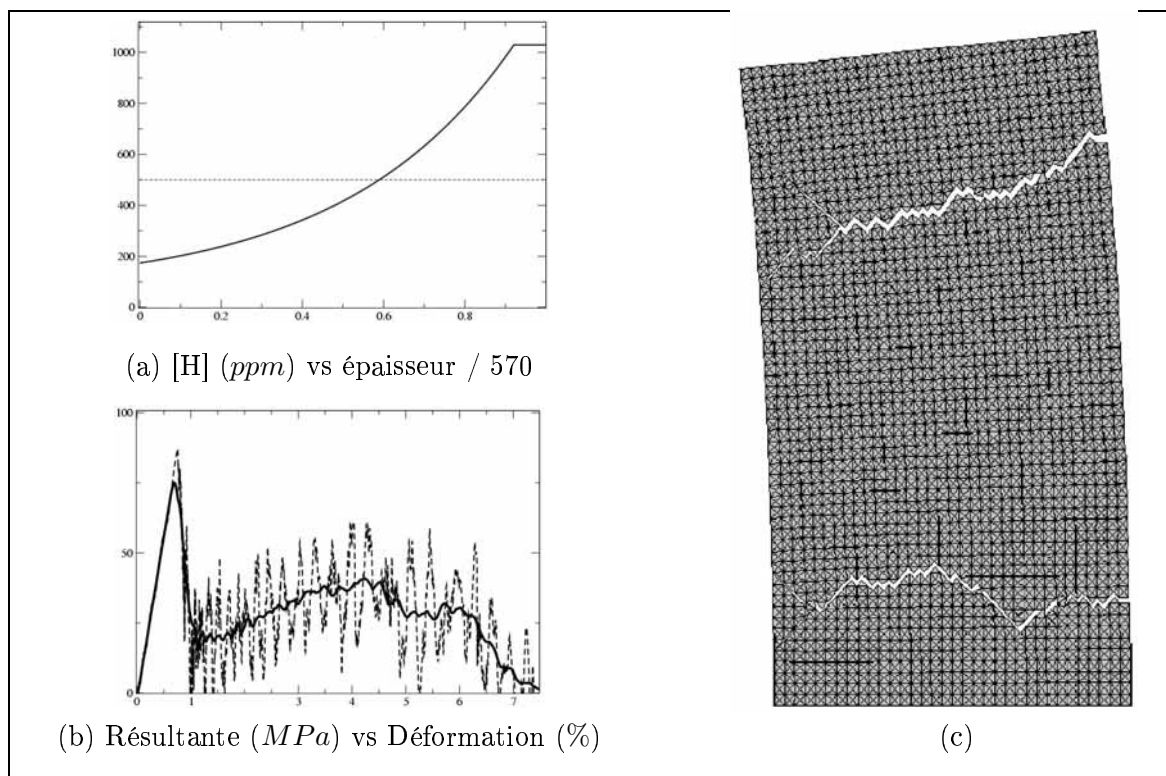


FIG. E.19 – $[\bar{H}] = 500ppm$, $p = 0.6$: (a) Profil du gradient d'hydrogène, (b) Resultante sur la structure et (c) Faciès de rupture.

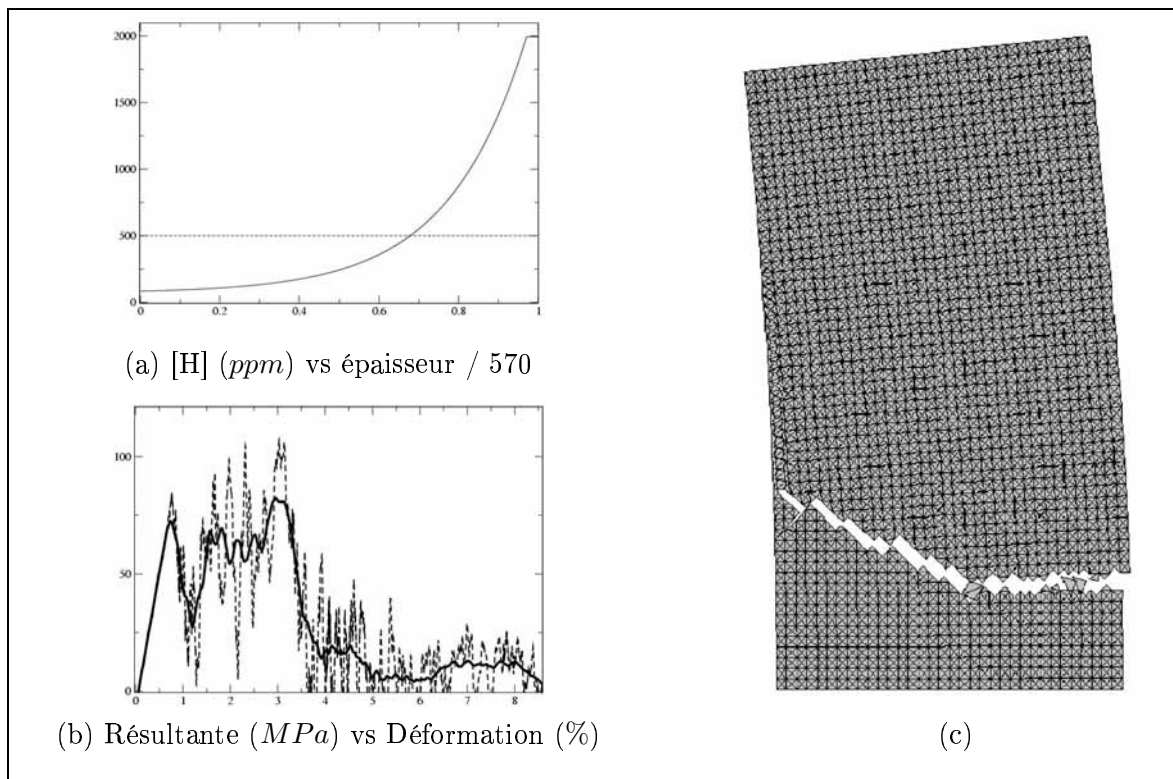


FIG. E.20 – $[\bar{H}] = 500ppm$, $p= 0.8$: (a) Profil du gradient d'hydrogène, (b) Resultante sur la structure et (c) Faciès de rupture.

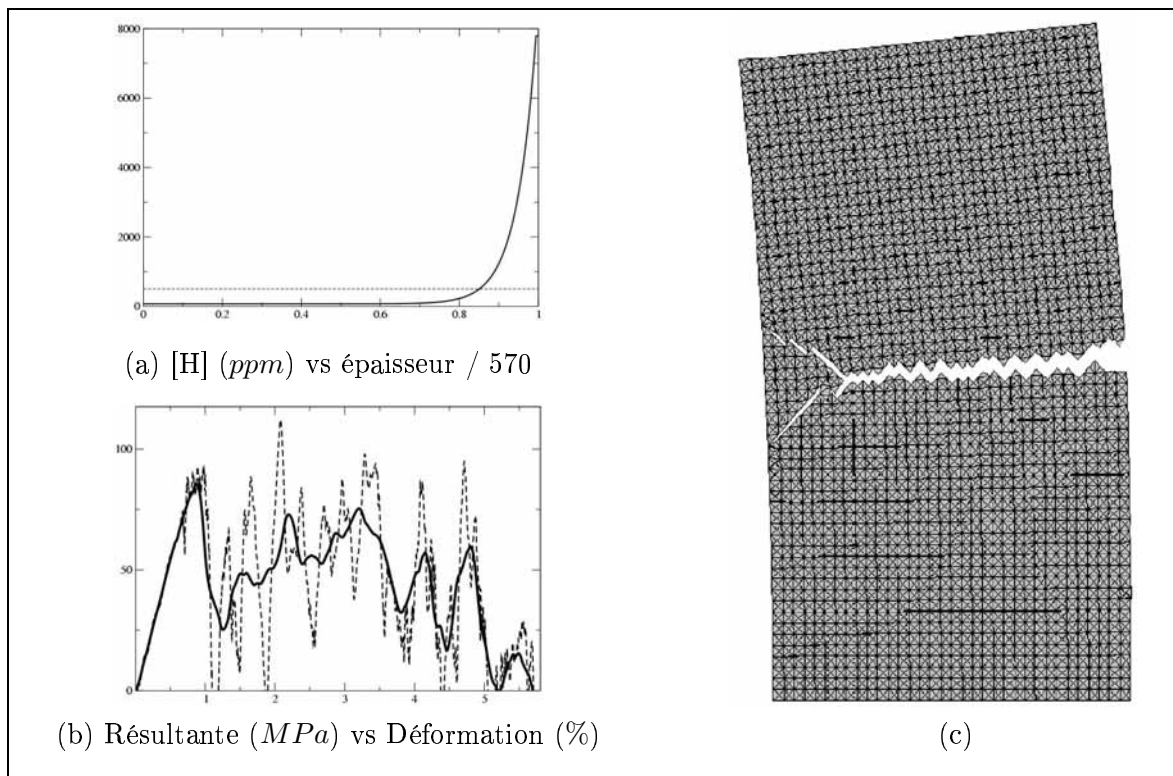


FIG. E.21 – $[\bar{H}] = 500ppm$, $p= 0.95$: (a) Profil du gradient d'hydrogène, (b) Resultante sur la structure et (c) Faciès de rupture.

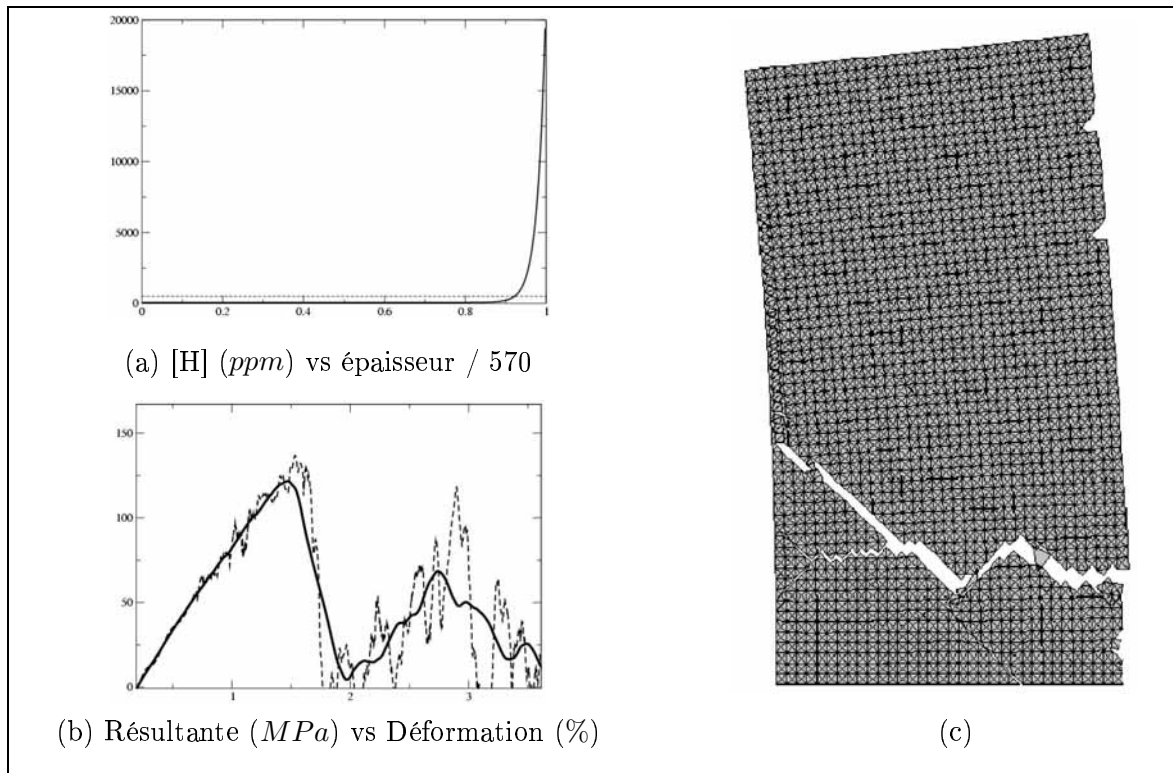


FIG. E.22 – $[\bar{H}] = 500ppm$, $p = 0.98$: (a) Profil du gradient d'hydrogène, (b) Resultante sur la structure et (c) Faciès de rupture.

E.5 $[\bar{H}] = 700ppm$

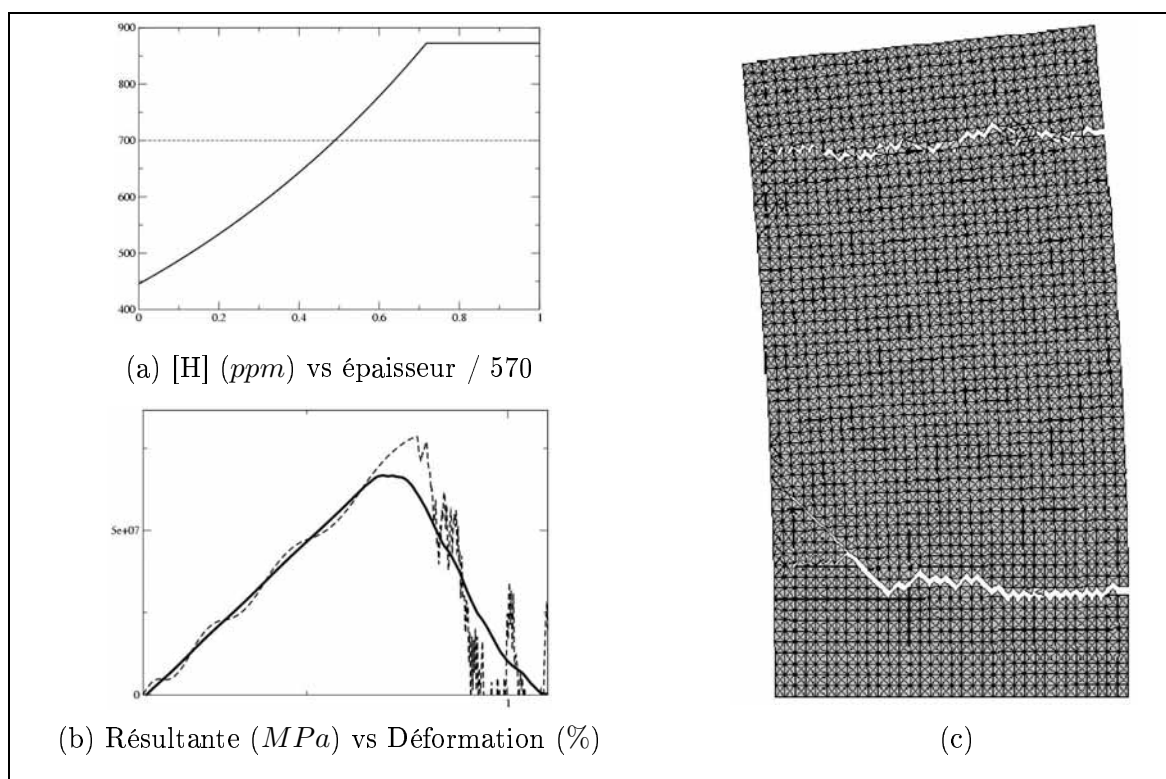


FIG. E.23 – $[\bar{H}] = 700ppm$, $p= 0.3$: (a) Profil du gradient d'hydrogène, (b) Resultante sur la structure et (c) Faciès de rupture.

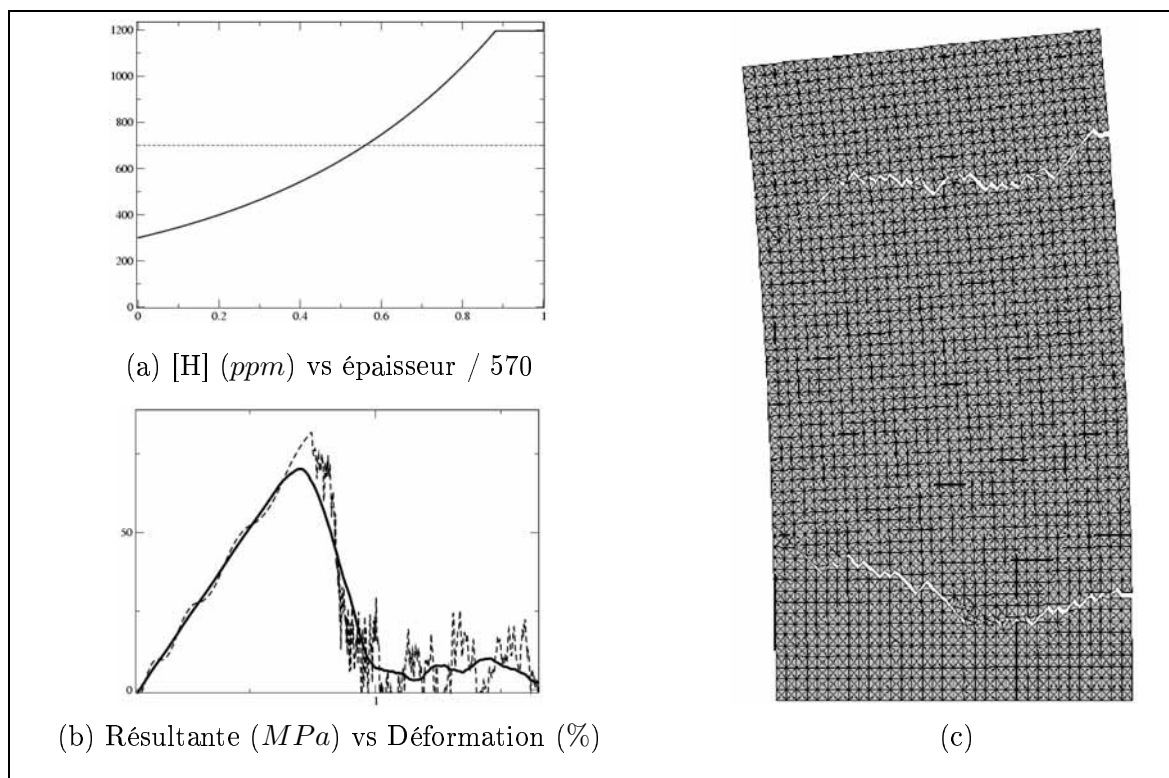


FIG. E.24 – $[\bar{H}] = 700ppm$, $p = 0.5$: (a) Profil du gradient d'hydrogène, (b) Resultante sur la structure et (c) Faciès de rupture.

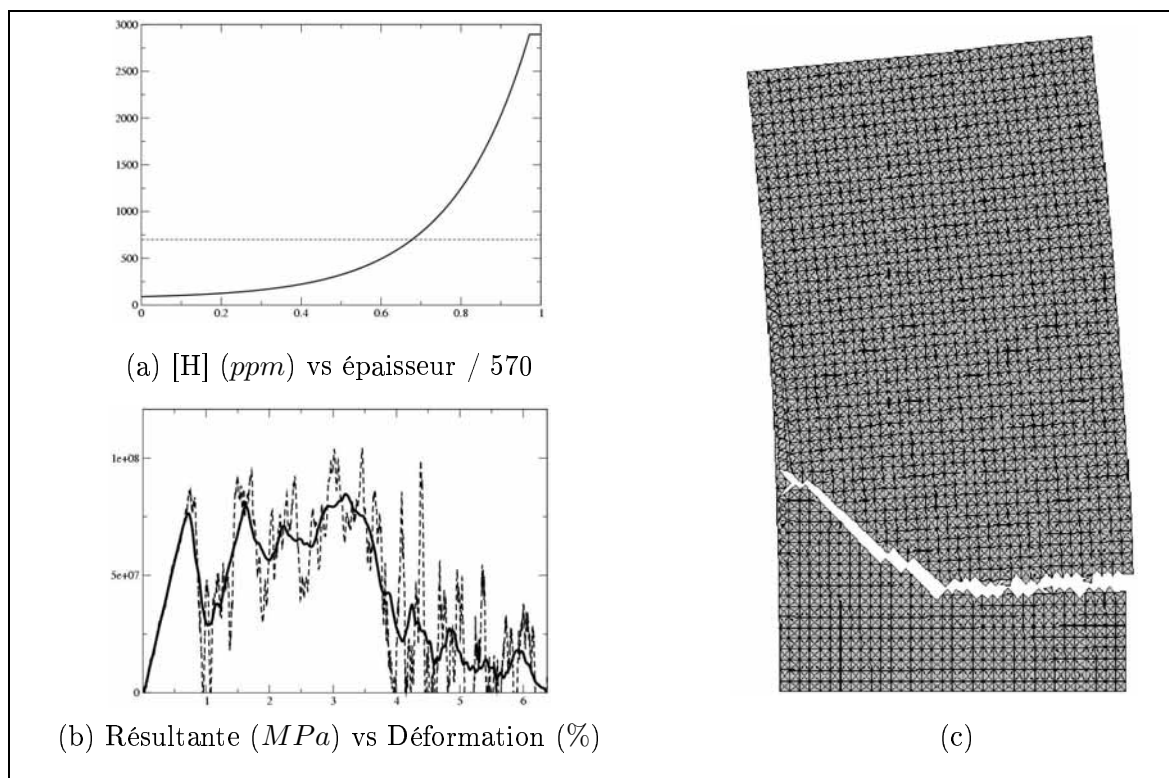


FIG. E.25 – $[\bar{H}] = 700ppm$, $p = 0.8$: (a) Profil du gradient d'hydrogène, (b) Resultante sur la structure et (c) Faciès de rupture.

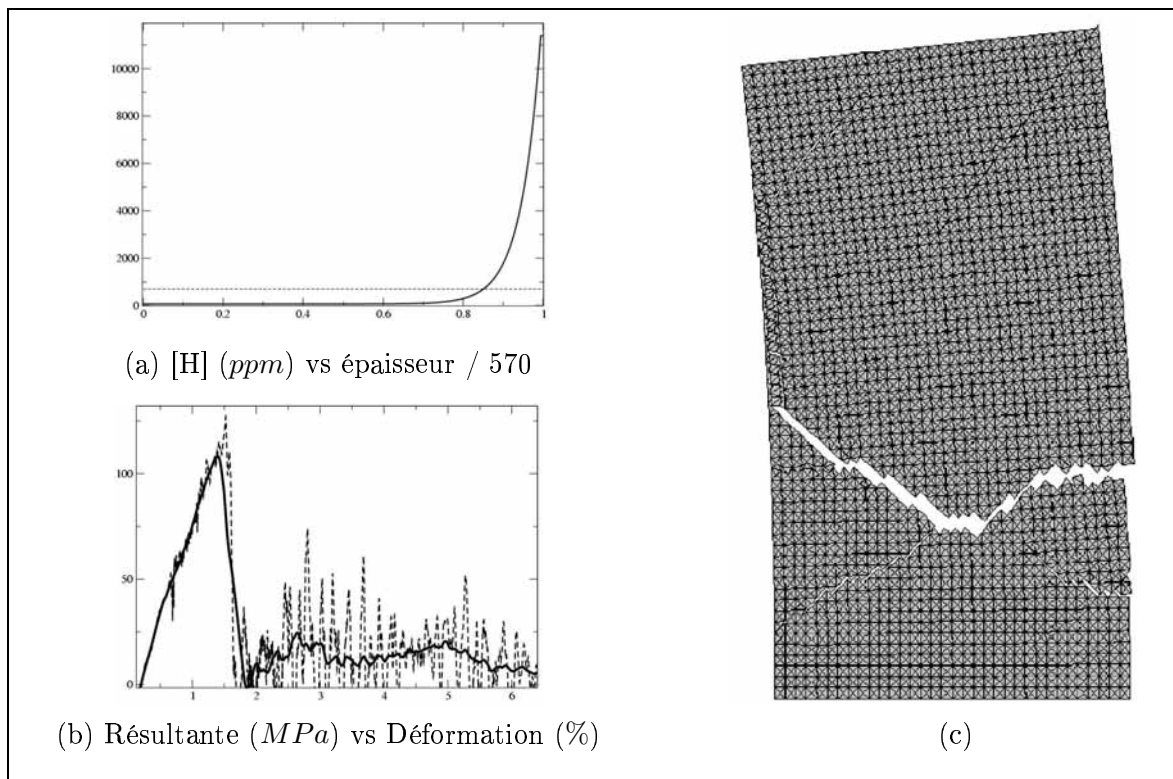


FIG. E.26 – $[\bar{H}] = 700ppm$, $p= 0.95$: (a) Profil du gradient d'hydrogène, (b) Resultante sur la structure et (c) Faciès de rupture.

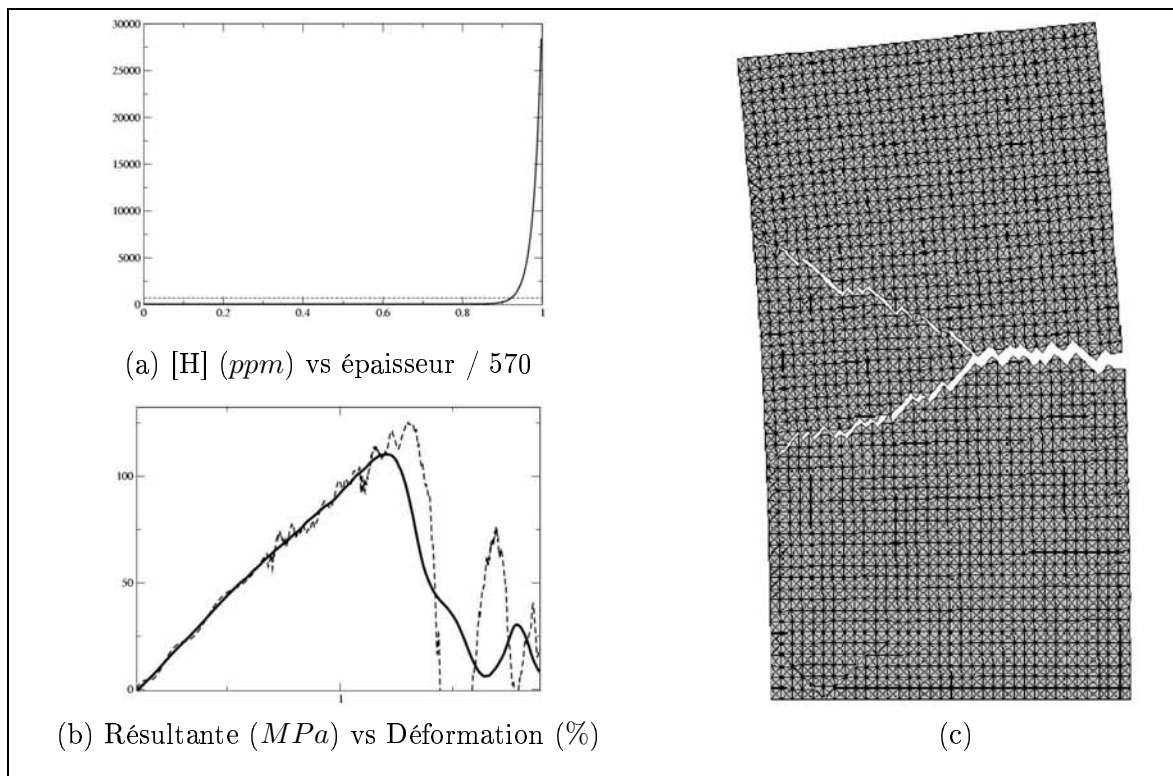
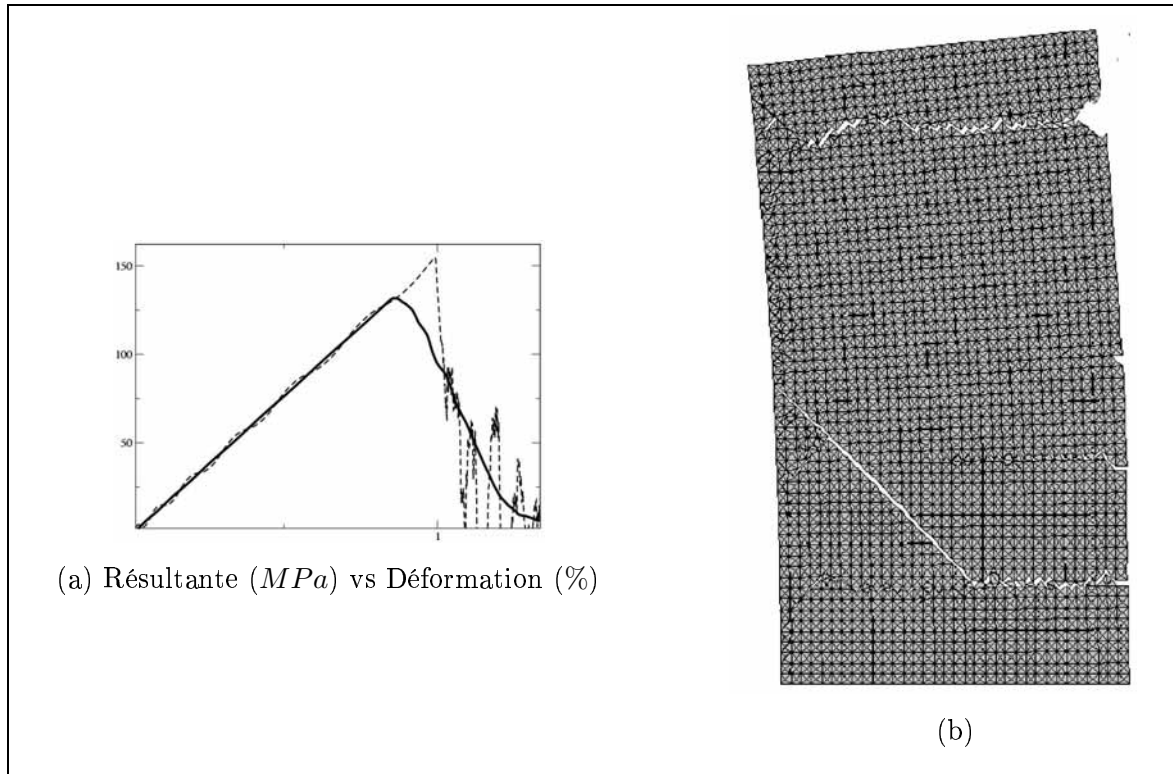


FIG. E.27 – $[\bar{H}] = 700ppm$, $p= 0.98$: (a) Profil du gradient d'hydrogène, (b) Resultante sur la structure et (c) Faciès de rupture.

E.6 $[\bar{H}] = 18242ppm$ FIG. E.28 – $[\bar{H}] = 18242ppm$: (a) Resultante sur la structure et (b) Faciès de rupture.

Annexe F

Rappels et notations en grandes transformations

Cette section est consacrée au rappel de quelques éléments de mécanique des milieux continus en grandes transformations.

Lors d'une déformation d'un solide en grandes transformations, les configurations successives sont distinctes et, contrairement aux théories linéaires (par exemple HPP), il n'est plus équivalent de travailler dans la configuration de référence ou déformée. La présentation des principales notions s'inspire de la synthèse effectuée dans ce domaine par Ponthot (1995).

Dans la suite, le cadre adopté est le cadre de la mécanique des milieux continus.

Remarque F.1. *Rappelons que l'approche retenue est une approche multicorps (§ 2.1), chaque corps est considéré comme un milieu continu.*

F.1 Configurations du système et formulations

La configuration est l'ensemble des positions des points matériels qui constituent le solide à un instant donné. Nous distinguons deux configurations (FIG. F.1), la configuration à l'instant initiale notée \mathcal{C}_0 occupant le domaine Ω_0 et la configuration à l'instant courant notée \mathcal{C} occupant le domaine Ω . Les domaines Ω_0 et Ω sont des espaces ouverts et bornés de \mathbb{R}^m , $m \in \{2, 3\}$, où \mathbb{R}^m est muni d'une base orthornormée directe $\{e_i\}_{i=1,2,3}$.

Le choix d'une configuration pour identifier les points matériels détermine la formulation adoptée. Une formulation lagrangienne, couramment adoptée en mécanique des solides, représente le mouvement du corps considéré dans une configuration connue. Cette formulation est dite totale lorsque la configuration de référence est la configuration initiale. Une formulation eulérienne représente les points matériels dans la configuration actuelle.

La formulation lagrangienne totale est adoptée dans le cadre de l'étude. Les grandeurs sont représentées dans la configuration initiale.

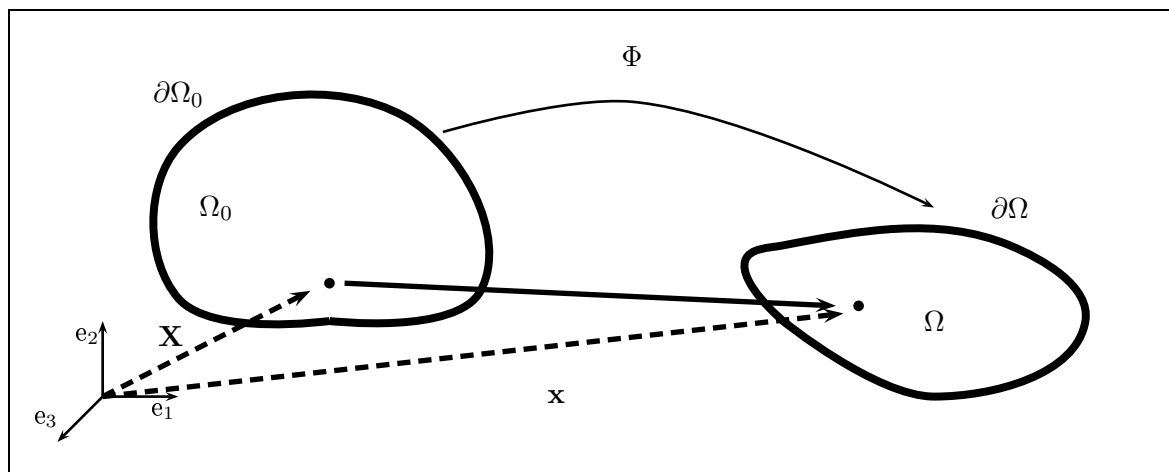


FIG. F.1 – Configuration initiale et actuelle d'un corps

F.2 Cinématique

F.2.1 Déplacement, vitesse et accélération

Soient un point matériel dans la configuration de référence repéré par sa position \mathbf{X} . Au cours de l'évolution, ce point passe à une position \mathbf{x} (FIG. F.1). La configuration déformée \mathcal{C} est entièrement défini par l'application Φ de la manière suivante :

$$\begin{aligned} \Phi : \Omega_0 \times T &\longrightarrow \Omega \\ (\mathbf{X}, t) &\longmapsto \Phi(\mathbf{X}, t) := \mathbf{x}. \end{aligned} \quad (\text{F.2.1})$$

Remarque F.2. *L'hypothèse de continuité des transformations d'un milieu continu entraîne des propriétés de régularités de Φ . En particulier, la relation inverse a un sens.*

L'application Φ permet de définir le déplacement \mathbf{u} entre un point de la configuration initiale et le même point dans la configuration courante :

$$\mathbf{u}(\mathbf{X}, t) := \Phi(\mathbf{X}, t) - \Phi(\mathbf{X}, 0) = \mathbf{x} - \mathbf{X}. \quad (\text{F.2.2})$$

La vitesse matérielle $\dot{\mathbf{u}}(\mathbf{X}, t)$ est définie par :

$$\dot{\mathbf{u}}(\mathbf{X}, t) := \frac{d\Phi(\mathbf{X}, t)}{dt} = \dot{\Phi}(\mathbf{X}, t), \quad (\text{F.2.3})$$

et l'accélération par :

$$\ddot{\mathbf{u}}(\mathbf{X}, t) := \frac{d^2\Phi(\mathbf{X}, t)}{dt^2} = \ddot{\Phi}(\mathbf{X}, t). \quad (\text{F.2.4})$$

Remarque F.3. *Dans les définitions suivantes, on omettra de préciser le point transporté de la configuration de référence. Ainsi, \mathbf{u} signifie $\mathbf{u}(\mathbf{X}, t)$.*

F.2.2 Tenseur gradient de la transformation

La transformation homogène tangente de l'application de référence sur la configuration actuelle s'écrit :

$$\mathbf{F} := \frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{X}} = \nabla \Phi = \mathbf{I} + \nabla \mathbf{u}. \quad (\text{F.2.5})$$

Le tenseur \mathbf{F} apparaît comme le gradient du champs de vecteur Φ et est appelé le tenseur du gradient de la transformation¹.

Remarque F.4. *Le tenseur des déformations représente l'approximation linéaire de la transformation (F.2.1).*

Remarque F.5. *Sous l'hypothèse de transformations infinitésimales², le tenseur des déformations linéarisé conserve la même définition (F.2.5).*

Le déterminant de \mathbf{F} est appelé jacobien et noté J :

$$J := \det \mathbf{F}. \quad (\text{F.2.6})$$

F.2.3 Tenseur de Cauchy-Green

Le tenseur de Cauchy-Green à droite³ est défini sur la configuration de référence par :

$$\mathbf{C} := \mathbf{F}^T \mathbf{F} = \mathbf{I} + \nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T + \nabla \mathbf{u} \nabla \mathbf{u}^T. \quad (\text{F.2.7})$$

De manière analogue, le tenseur de Cauchy-Green⁴ à gauche est défini sur la configuration courante par :

$$\mathbf{B} := \mathbf{F} \mathbf{F}^T = \mathbf{I} + \nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T + \nabla \mathbf{u}^T \nabla \mathbf{u}. \quad (\text{F.2.8})$$

Ces tenseurs permettent de calculer la variation de longueur d'un segment.

Remarque F.6. *Pour de transformations infinitésimales, les tenseurs de Cauchy-Green droit et Cauchy-green gauche linéarisés sont égaux. Ils s'écrivent :*

$$\mathbf{C}_{lin} = \mathbf{B}_{lin} := \mathbf{I} + \nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T. \quad (\text{F.2.9})$$

F.2.4 Tenseur des déformations

Les tenseurs de Cauchy-Green droit et gauche caractérisent mal la déformation. En effet, en l'absence de mouvement (ou, plus généralement, lors d'un mouvement de corps rigide), ces tenseurs se réduisent à la matrice identité. Des tenseurs de déformations ont ainsi été construits de manière à s'annuler dans le cas d'un mouvement de corps rigide.

★ *Tenseur de Green-Lagrange*

Le tenseur de Green-Lagrange \mathbf{E}^{GL} est un tenseur lagrangien défini comme la variation du carré des longueurs d'un segment :

$$\mathbf{E}^{GL} := \frac{1}{2} (\mathbf{C} - \mathbf{I}) = \frac{1}{2} (\mathbf{F}^T \mathbf{F} - \mathbf{I}). \quad (\text{F.2.10})$$

¹appelé aussi matrice Jacobienne

²on dira qu'une transformation est infinitésimale si pour tout point de la configuration de référence, $\|\nabla \mathbf{u}(\mathbf{X}, t)\| \ll 1$

³appelé tenseur des dilatations ou tenseur de Cauchy

⁴appelé tenseur de Finger

★ *Tenseur d'Euler-Almansi*

Le tenseur d'Euler-Almansi est le pendant du tenseur de Green-Lagrange dans la configuration courante :

$$\mathbf{E}^{\text{EA}} := \frac{1}{2} (\mathbf{I} - \mathbf{B}) = \frac{1}{2} (\mathbf{I} - \mathbf{F}^{-T} \mathbf{F}^{-1}) = \mathbf{F}^{-T} \mathbf{E}^{\text{GL}} \mathbf{F}^{-1}. \quad (\text{F.2.11})$$

★ *Tenseur des déformations linéarisées*

Une linéarisation du tenseur de Green-Lagrange (ou du tenseur d'Euler-Almansi) donne le tenseur des déformations linéarisés :

$$\boldsymbol{\epsilon} := \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T). \quad (\text{F.2.12})$$

F.3 Tenseur des contraintes

F.3.1 Contraintes de Cauchy

Le tenseur des contraintes de Cauchy $\boldsymbol{\sigma}$ permet de mesurer l'effort $d\mathbf{f}_{ele}$ actuel mesuré sur un élément d'aire ds de la configuration actuelle \mathcal{C} :

$$d\mathbf{f}_{ele} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} ds. \quad (\text{F.3.1})$$

Remarque F.7. *Les contraintes de Cauchy sont souvent appelées contraintes "vraies" car définies sur une surface relative à la configuration courante. Les contraintes "nominales" ou "ingénieurs" sont quant à elles définies par unité de surface de la configuration initiale.*

Remarque F.8. *Le tenseur des contraintes de Cauchy est généralement associé au tenseur des déformations d'Euler-Almansi.*

F.3.2 Contraintes de Piola-Kirchhoff de première espèce

Lorsque l'élément d'aire ds est considéré dans la configuration initiale, le tenseur des contraintes de Piola-Kirchhoff de première espèce⁵ $\boldsymbol{\Pi}$, appelé PK1, est défini par :

$$d\mathbf{f}_{ele} = \boldsymbol{\Pi} \cdot \mathbf{N} ds, \quad (\text{F.3.2})$$

où la normale unitaire \mathbf{N} est défini dans la configuration de référence.

Remarque F.9. *Le tenseur des contraintes de Piola-Kirchhoff 1 est non-symétrique. Il n'est ni lagrangien ni eulérien.*

Remarque F.10. *La formulation adoptée dans cette étude est une formulation lagrangienne totale. Nous utiliserons donc le tenseur des contraintes de Piola-Kirchhoff 1 pour décrire l'état de contraintes dans le matériau.*

Le tenseur de Piola-Kirchhoff 1 est relié au tenseur des contraintes de Cauchy par la relation suivante :

$$\boldsymbol{\Pi} = J \boldsymbol{\sigma} \mathbf{F}^{-T}, \quad (\text{F.3.3})$$

⁵appelées aussi contraintes de Boussinesq

qui peut se réécrire :

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{1}{J} \mathbf{I} \mathbf{F}^T. \quad (\text{F.3.4})$$

F.3.3 Contraintes de Piola-Kirchhoff de seconde espèce

Les contraintes de Piola-Kirchhoff 1 ont deux inconvénients (voir remarque F.9) : c'est un champ tensoriel ni lagrangien ni eulérien et non symétrique. Pour obtenir un champ de contraintes lagrangien et symétrique, il suffit de transporter la force élémentaire $d\mathbf{f}_{ele}$ dans la configuration de référence. Le tenseur des contraintes de Piola-Kirchhoff de seconde espèce⁶ \mathbf{S} , ou PK2, est ainsi obtenu :

$$d\mathbf{f}_{ele} = \mathbf{S} \cdot \mathbf{N} ds. \quad (\text{F.3.5})$$

La relation entre le tenseur des contraintes de Cauchy et le tenseur des contraintes de Piola-Kirchhoff 2 s'écrit :

$$\mathbf{S} = J \mathbf{F}^{-1} \boldsymbol{\sigma} \mathbf{F}^{-T}. \quad (\text{F.3.6})$$

Remarque F.11. *Le tenseur des contraintes de Piola-Kirchhoff 2 est généralement associé au tenseur des déformations de Green-Lagrange.*

Remarque F.12. *Bien qu'ayant une signification mathématique claire, le tenseur des contraintes PK2 n'a aucune signification physique. Lorsque les déformations sont grandes, ces contraintes sont difficilement interprétables.*

⁶appelées aussi contraintes de Kirchhoff-Trefftz

Annexe G

Bilan d'énergie

L'objectif de cette section est de faire le bilan des énergies mises en jeu dans la structure durant le processus de fissuration.

Le bilan des puissances mécaniques et calorifiques mises en jeu dans la structure est donné par le premier principe de la thermodynamique exprimé en termes de dérivées par rapport au temps. Ce principe s'écrit pour chaque corps $K_0^e \in \mathcal{T}_0^h$:

$$\frac{d\mathcal{E}_{K_0^e}}{dt} = \mathcal{P}_{K_0^e}^{mec\ ext} + \mathcal{P}_{K_0^e}^{cal\ ext} \quad \forall K_0^e, \quad (\text{G.0.1})$$

où $\mathcal{E}_{K_0^e}$ est l'énergie totale du corps K_0^e c'est-à-dire la somme de l'énergie interne et de l'énergie cinétique, $\mathcal{P}_{K_0^e}^{mec\ ext}$ est la puissance mécanique reçue de l'extérieur et $\mathcal{P}_{K_0^e}^{cal\ ext}$ est la puissance calorifique reçue de l'extérieur.

En considérant une évolution isotherme, on a :

$$\mathcal{P}_{K_0^e}^{cal\ ext} = 0 \quad \forall K_0^e. \quad (\text{G.0.2})$$

L'énergie $\mathcal{E}_{K_0^e}$ est composée de la somme de l'énergie interne et de l'énergie cinétique du corps K_0^e :

$$\mathcal{E}_{K_0^e} = \int_{K_0^e} \rho e\ dx + \int_{K_0^e} \frac{1}{2} \rho \|\dot{\mathbf{u}}\|^2\ dx \quad \forall K_0^e, \quad (\text{G.0.3})$$

où e est l'énergie interne spécifique.

La puissance mécanique externe $\mathcal{P}_{K_0^e}^{mec\ ext}$ s'écrit :

$$\mathcal{P}_{K_0^e}^{mec\ ext} = \int_{K_0^e} \mathbf{f} \cdot \dot{\mathbf{u}}\ dx + \int_{\partial K_0^e \setminus \partial \Omega_0} \mathbf{T}([\mathbf{u}]) \cdot \dot{\mathbf{u}}\ ds + \int_{\partial K_0^e \cap \partial \Omega_0} \mathbf{P} \cdot \dot{\mathbf{u}}\ ds \quad \forall K_0^e, \quad (\text{G.0.4})$$

où \mathbf{f} est une force externe volumique, \mathbf{T} est une force externe de liaison appliquée sur les faces internes (zones cohésives) et \mathbf{P} est une force externe appliquée sur les faces externes.

La relation (G.0.1) peut donc se réécrire :

$$\frac{d}{dt} \int_{K_0^e} \frac{1}{2} \rho \|\dot{\mathbf{u}}\|^2\ dx + \frac{d}{dt} \int_{K_0^e} \rho e\ dx = \int_{K_0^e} \mathbf{f} \cdot \dot{\mathbf{u}}\ dx + \int_{\partial K_0^e \setminus \partial \Omega_0} \mathbf{T}([\mathbf{u}]) \cdot \dot{\mathbf{u}}\ ds + \int_{\partial K_0^e \cap \partial \Omega_0} \mathbf{P} \cdot \dot{\mathbf{u}}\ ds \quad \forall K_0^e. \quad (\text{G.0.5})$$

L'introduction de la dérivée temporelle du potentiel d'helmoltz dans le cas isotherme :

$$\dot{\Phi} = \dot{e} - \dot{T}s = \dot{e}, \quad (\text{G.0.6})$$

où T est la température et s l'entropie,

permet de réécrire le terme $\frac{d}{dt} \int_{K_0^e} \rho e \, dx$ sous la forme :

$$\frac{d}{dt} \int_{K_0^e} \rho e \, dx = \int_{K_0^e} \rho \dot{e} \, dx = \int_{K_0^e} \rho \dot{\Phi} \, dx = \int_{K_0^e} \mathbf{\Pi} : \mathbf{F}(\dot{\mathbf{u}}) \, dx \quad \forall K_0^e. \quad (\text{G.0.7})$$

Effectuons la somme sur tous les corps $K_0^e \in \mathcal{T}_0^h$:

$$\begin{aligned} \sum_{e=1}^{\tau} \frac{d}{dt} \int_{K_0^e} \frac{1}{2} \rho \|\dot{\mathbf{u}}\|^2 \, dx + \sum_{e=1}^{\tau} \int_{K_0^e} \mathbf{\Pi} : \mathbf{F}(\dot{\mathbf{u}}) \, dx = \\ \sum_{e=1}^{\tau} \int_{K_0^e} \mathbf{f} \cdot \dot{\mathbf{u}} \, dx + \sum_{e=1}^{\tau} \int_{\partial K_0^e \setminus \partial \Omega_0} \mathbf{T}([\mathbf{u}]) \cdot \dot{\mathbf{u}} \, ds + \sum_{e=1}^{\tau} \int_{\partial K_0^e \cap \partial \Omega_0} \mathbf{P} \cdot \dot{\mathbf{u}} \, ds \quad \forall K_0^e. \end{aligned} \quad (\text{G.0.8})$$

Enfin, précisons l'écriture de l'énergie de cohésion mise en jeu :

$$\begin{aligned} & \sum_{e=1}^{\tau} \int_{\partial K_0^e \setminus \partial \Omega_0} \mathbf{T}([\mathbf{u}]) \cdot \dot{\mathbf{u}} \, ds \\ &= \sum_E \int_E \mathbf{T}([\mathbf{u}]) \cdot (\dot{\mathbf{u}}_E^- - \dot{\mathbf{u}}_E^+) \, ds \\ &= - \sum_E \int_E \mathbf{T}([\mathbf{u}]) \cdot [\dot{\mathbf{u}}] \, ds, \end{aligned} \quad (\text{G.0.9})$$

où E désigne une face interne de Ω_0 .

La puissance étant la dérivée temporelle de l'énergie, intégrons les termes par rapport au temps :

$$\left\{ \begin{aligned} \sum_{e=1}^{\tau} \int_0^T \int_{K_0^e} \mathbf{\Pi} : \mathbf{F}(\dot{\mathbf{u}}) \, dx dt &= \sum_{e=1}^{\tau} \int_{K_0^e} \int_0^T \mathbf{\Pi} : \frac{d\mathbf{F}(\mathbf{u})}{dt} dt dx = \sum_{e=1}^{\tau} \int_{K_0^e} \int_0^T \mathbf{\Pi} : d\mathbf{F}(\mathbf{u}) \, dx, \\ \sum_{e=1}^{\tau} \int_0^T \frac{d}{dt} \int_{K_0^e} \frac{1}{2} \rho \|\dot{\mathbf{u}}\|^2 \, dx dt &= \sum_{e=1}^{\tau} \int_{K_0^e} \frac{1}{2} \rho \|\dot{\mathbf{u}}\|^2 \, dx, \\ - \sum_E \int_0^T \int_E \mathbf{T}([\mathbf{u}]) \cdot [\dot{\mathbf{u}}] \, ds dt &= - \sum_E \int_E \int_0^T \mathbf{T}([\mathbf{u}]) \cdot \frac{d[\mathbf{u}]}{dt} dt ds = - \sum_E \int_E \int_0^T \mathbf{T}([\mathbf{u}]) \cdot d[\mathbf{u}] \, ds, \\ \sum_{e=1}^{\tau} \int_0^T \int_{\partial K_0^e \cap \partial \Omega_0} \mathbf{P} \cdot \dot{\mathbf{u}} \, ds dt &= \sum_{e=1}^{\tau} \int_{\partial K_0^e \cap \partial \Omega_0} \int_0^T \mathbf{P} \cdot \frac{d\mathbf{u}}{dt} dt ds = \sum_{e=1}^{\tau} \int_{\partial K_0^e \cap \partial \Omega_0} \int_0^T \mathbf{P} \cdot d\mathbf{u} \, ds, \\ \sum_{e=1}^{\tau} \int_0^T \int_{K_0^e} \mathbf{f} \cdot \dot{\mathbf{u}} \, dx dt &= \sum_{e=1}^{\tau} \int_{K_0^e} \int_0^T \mathbf{f} \cdot \frac{d\mathbf{u}}{dt} dt dx = \sum_{e=1}^{\tau} \int_{K_0^e} \int_0^T \mathbf{f} \cdot d\mathbf{u} \, dx. \end{aligned} \right. \quad (\text{G.0.10})$$

Introduisons les notations suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{ll}
 \mathbf{E}_{cin} = \sum_{e=1}^{\tau} \int_{K_0^e} \frac{1}{2} \rho \|\dot{\mathbf{u}}\|^2 dx & \text{Energie cinétique,} \\
 \mathbf{E}_{ela} + \mathbf{E}_{pla} = \sum_{e=1}^{\tau} \int_{K_0^e} \int_0^T \mathbf{\Pi} : d\mathbf{F}(\mathbf{u}) dx & \text{Energie élastique + énergie plastique,} \\
 \mathbf{E}_{coh} = - \sum_E \int_E \int_0^T \mathbf{T}([\mathbf{u}]) \cdot d[\mathbf{u}] ds & \text{Energie de cohésion,} \\
 \mathbf{E}_{ext} = \sum_{e=1}^{\tau} \int_{\partial K_0^e \cap \partial \Omega_0} \int_0^T \mathbf{P} \cdot d\mathbf{u} ds & \text{Energie extérieure à } \Omega_0, \\
 \mathbf{E}_{vol} = \sum_{e=1}^{\tau} \int_{K_0^e} \int_0^T \mathbf{f} \cdot d\mathbf{u} dx & \text{Energie volumique.}
 \end{array} \right. \quad (\text{G.0.11})$$

Le bilan d'énergies s'écrit :

$$\begin{aligned}
 \sum_{e=1}^{\tau} \int_{K_0^e} \int_0^T \mathbf{\Pi} : d\mathbf{F}(\mathbf{u}) dx + \sum_{e=1}^{\tau} \int_{K_0^e} \frac{1}{2} \rho \|\dot{\mathbf{u}}\|^2 dx - \sum_E \int_E \int_0^T \mathbf{T}([\mathbf{u}]) \cdot d[\mathbf{u}] ds = \\
 \sum_{e=1}^{\tau} \int_{\partial K_0^e \cap \partial \Omega_0} \int_0^T \mathbf{P} \cdot d\mathbf{u} ds + \sum_{e=1}^{\tau} \int_{K_0^e} \int_0^T \mathbf{f} \cdot d\mathbf{u} dx,
 \end{aligned} \quad (\text{G.0.12})$$

c'est-à-dire :

$$\mathbf{E}_{ela} + \mathbf{E}_{pla} + \mathbf{E}_{cin} + \mathbf{E}_{coh} = \mathbf{E}_{ext} + \mathbf{E}_{vol}. \quad (\text{G.0.13})$$

Les intégrales temporelles sont calculés numériquement par la méthode des trapèzes. Cette méthode consiste à remplacer la courbe $f(x)$ par une ligne brisée, à calculer l'aire de chaque trapèze et enfin à faire la somme des aires sur l'intervalle sur lequel la fonction est définie.

Pour une fonction $f(x)$ et un intervalle $[x_i, x_{i+1}]$, on a :

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx \approx \frac{1}{2} (f_i + f_{i+1}) (x_{i+1} - x_i). \quad (\text{G.0.14})$$

Annexe H

Algorithme : passage de déformation plane en contrainte plane

La loi de comportement utilisée est formulée en déformation plane. L'objectif est d'obtenir numériquement les valeurs de la loi de comportement en contrainte plane à partir d'une loi de comportement formulée en déformation plane.

A l'aide d'un point fixe, nous cherchons le gradient de la transformation F_{33} pour laquelle la contrainte Π_{33} s'annule.

La contrainte Π_{33} nulle implique :

$$\begin{aligned}\Pi_{33} = 0 &\implies \frac{\partial \Pi_{33}}{\partial F_{33}} \frac{F_{33}}{\partial F_{ij}} + \frac{\partial \Pi_{33}}{\partial F_{ij}} = 0 \quad \forall i, j \in \{1, 2\} \\ &\implies \frac{\partial F_{33}}{\partial F_{i,j}} = - \frac{1}{\frac{\partial \Pi_{33}}{\partial F_{33}}} \frac{\partial \Pi_{33}}{\partial F_{ij}} \quad \forall i, j \in \{1, 2\} \\ &\implies \frac{\partial F_{33}}{\partial F_{i,j}} = - \frac{1}{M_{3333}^{tg}} \frac{\partial \Pi_{33}}{\partial F_{ij}} \quad \forall i, j \in \{1, 2\}\end{aligned}\tag{H.0.1}$$

avec M^{tg} la matrice tangente.

Dérivons la partie 2D de la contrainte $\mathbf{\Pi}$ par rapport à la partie 2D du gradient de la transformation \mathbf{F} :

$$\begin{aligned}M_{ijkl}^{tg} &= \frac{d\Pi_{ij}}{dF_{kl}} = \frac{\partial \Pi_{ij}}{\partial F_{kl}} + \frac{\partial \Pi_{ij}}{\partial F_{33}} \frac{\partial F_{33}}{\partial F_{kl}} \quad \forall i, j, k, l \in \{1, 2\} \\ &= \frac{\partial \Pi_{ij}}{\partial F_{kl}} - \frac{1}{M_{3333}^{tg}} \frac{\partial \Pi_{ij}}{\partial F_{33}} \frac{\partial \Pi_{33}}{\partial F_{kl}} \quad \forall i, j, k, l \in \{1, 2\}\end{aligned}\tag{H.0.2}$$

A l'itération $k + 1$, l'écriture de la contrainte dans la direction 33 :

$$\Pi_{33}^{k+1} = \Pi_{33}^k + \frac{\partial \Pi_{33}}{\partial F_{33}} \Delta F_{33}^{k+1}\tag{H.0.3}$$

et la condition $\Pi_{33}^{k+1} = 0$ entraînent :

$$\Delta F_{33}^{k+1} = - \frac{1}{M_{3333}^{tg}} \Pi_{33}^k\tag{H.0.4}$$

Ainsi l'algorithme du point fixe s'écrit :

$$\left[\begin{array}{l} \text{conditions initiales : } F_{33}^0 = 0, \Pi_{33}^0 \\ \text{à l'itération } k \text{ on a : } F_{33}^k, \Pi_{33}^k \\ \\ \text{à l'itération } k + 1 \text{ on calcule :} \end{array} \right. \left. \begin{array}{l} \text{si } \Pi_{33}^k = 0 \text{ alors } F_{33} = F_{33}^k \text{ est solution} \\ \\ \text{sinon} \left[\begin{array}{l} F_{33}^{k+1} = F_{33}^k - \frac{1}{\left(M_{3333}^{tg}\right)^k} \Pi_{33}^k \\ \\ \left(M_{ijkl}^{tg}\right)^{k+1} = \left(M_{ijkl}^{tg}\right)^k - \frac{1}{M_{3333}^{tg}} M_{ij33}^{tg} M_{33kl}^{tg} \\ \\ i, j, k, l \in \{1, 2\} \end{array} \right. \end{array} \right. \quad (\text{H.0.5})$$

Annexe I

Contributions élémentaires éléments finis

L'objectif de cette Annexe est d'explicitier les termes élémentaires à assembler.

I.1 Problème standard

Le problème discrétisé en espace et en temps à l'itération $k+1$ de l'algorithme de Newton-Raphson s'écrit :

$$\begin{cases} (\mathbf{w}^k)^{-1} \cdot (\dot{\mathbf{q}}_{i+1}^{k+1} - \dot{\mathbf{q}}_{lib}^{k+1}) = h_i \mathbf{r}_{i+1}^{k+1} \\ (\mathbf{w}^k)^{-1} \cdot (\dot{\mathbf{q}}_{lib}^{k+1} - \dot{\mathbf{q}}_{i+1}^k) = \{-\mathbf{M}(\mathbf{q}_{i+1}^k, t_{i+1}) \cdot (\dot{\mathbf{q}}_{i+1}^k - \dot{\mathbf{q}}_i) + h_i((1-\theta)\mathbf{F}_i + \theta\mathbf{F}_{i+1}^k)\} \end{cases} \quad (\text{I.1.1})$$

avec :

$$\begin{cases} \mathbf{M}^k & = \mathbf{M}(\mathbf{q}_{i+1}^k, t_{i+1}) \\ \mathbf{K}^k & = - \left. \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t)}{\partial \mathbf{q}} \right|_{\mathbf{q}_{i+1}^k} \\ \mathbf{C}^k & = - \left. \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t)}{\partial \dot{\mathbf{q}}} \right|_{\dot{\mathbf{q}}_{i+1}^k} \\ (\mathbf{w}^k)^{-1} & = \mathbf{M}^k + h_i \theta \mathbf{C}^k + h_i^2 \theta^2 \mathbf{K}^k \end{cases} \quad (\text{I.1.2})$$

et :

$$\begin{cases} M_{IJ}^k = \sum_{e=1}^{\tau} \int_{K_0^e} \rho \varphi_I \cdot \varphi_J dx & 0 \leq I, J \leq N_{\mathbf{u}}^{dof} \\ F_I = - \sum_{e=1}^{\tau} \int_{K_0^e} \mathbf{\Pi}(\mathbf{q}_{i+1}^k) : \nabla \varphi_I dx & 0 \leq I \leq N_{\mathbf{u}}^{dof} \\ \quad + \sum_{e=1}^{\tau} \int_{\partial K_0^e \cup \partial_N \Omega_0} \mathbf{P} \cdot \varphi_I dS + \sum_{e=1}^{\tau} \int_{K_0^e} \mathbf{f} \cdot \varphi_I dx & \end{cases} \quad (\text{I.1.3})$$

Les impulsions $h_i \mathbf{r}_{i+1}^{k+1}$ font l'objet d'un traitement particulier (§ 5.3).

Explicitons les termes \mathbf{K}^k et \mathbf{C}^k .

$$\begin{aligned}
 - \left. \frac{\partial F_I(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t)}{\partial \mathbf{q}} \right|_{\mathbf{q}_{i+1}^k} &= \left. \frac{\partial \left(\sum_{e=1}^{\tau} \int_{K_0^e} \boldsymbol{\Pi}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t) : \nabla \varphi_I dx \right)}{\partial \mathbf{q}} \right|_{\mathbf{q}_{i+1}^k} & 0 \leq I \leq N_{\mathbf{u}}^{dof} & \quad (I.1.4) \\
 &= \sum_{e=1}^{\tau} \int_{K_0^e} \left. \frac{\partial \boldsymbol{\Pi}^k(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t)}{\partial \mathbf{q}} \right|_{\mathbf{q}_{i+1}^k} : \nabla \varphi_I dx
 \end{aligned}$$

A l'itération $k + 1$, l'écriture de la contrainte $\boldsymbol{\Pi}$ en fonction des matrices de rigidité \mathbf{M}_{rig}^{tg} et d'amortissement \mathbf{M}_{amort}^{tg} tangentes au comportement :

$$\boldsymbol{\Pi}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t) = \mathbf{M}_{rig}^{tg}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t) : \nabla \left(\sum_{0 \leq J \leq N_{\mathbf{u}}^{dof}} q_J \varphi_J \right) + h_i \mathbf{M}_{amort}^{tg}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t) : \nabla \left(\sum_{0 \leq J \leq N_{\mathbf{u}}^{dof}} \dot{q}_J \varphi_J \right) \quad (I.1.5)$$

entraîne :

$$- \left. \frac{\partial F_I(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t)}{\partial \mathbf{q}} \right|_{\mathbf{q}_{i+1}^k} = \sum_{e=1}^{\tau} \int_{K_0^e} \sum_{0 \leq J \leq N_{\mathbf{u}}^{dof}} \left(\mathbf{M}_{rig}^{tg}(\mathbf{q}_{i+1}^k, \dot{\mathbf{q}}_{i+1}^k, t_{i+1}) : \nabla \varphi_J \right) : \nabla \varphi_I \quad 0 \leq I \leq N_{\mathbf{u}}^{dof} \quad (I.1.6)$$

et :

$$K_{IJ}^k = \sum_{e=1}^{\tau} \int_{K_0^e} \left(\mathbf{M}_{rig}^{tg}(\mathbf{q}_{i+1}^k, \dot{\mathbf{q}}_{i+1}^k, t_{i+1}) : \nabla \varphi_J \right) : \nabla \varphi_I \quad 0 \leq I, J \leq N_{\mathbf{u}}^{dof} \quad (I.1.7)$$

Un raisonnement analogue donne :

$$C_{IJ}^k = \sum_{e=1}^{\tau} \int_{K_0^e} h_i \left(\mathbf{M}_{amort}^{tg}(\mathbf{q}_{i+1}^k, \dot{\mathbf{q}}_{i+1}^k, t_{i+1}) : \nabla \varphi_J \right) : \nabla \varphi_I \quad 0 \leq I, J \leq N_{\mathbf{u}}^{dof} \quad (I.1.8)$$

Remarque I.1. La librairie `MATLIB` fournit la contrainte $\boldsymbol{\Pi}^k$ et les matrices tangentes \mathbf{M}_{rig}^{tg} et $h_i \mathbf{M}_{amort}^{tg}$.

I.2 Problème périodique

Le système discrétisé en espace et en temps à l'itération $k + 1$ de l'algorithme de Newton-Raphson s'écrit (voir Eq. (5.1.21)-(5.1.22)) :

$$\begin{pmatrix} \left(\mathbf{w}_{\mathbf{q}^{\#} \mathbf{q}^{\#}}^k \right)^{-1} & \left(\mathbf{w}_{\mathbf{q}^{\#} \dot{\mathbf{d}}}^k \right)^{-1} \\ \left(\mathbf{w}_{\dot{\mathbf{d}} \mathbf{q}^{\#}}^k \right)^{-1} & \left(\mathbf{w}_{\dot{\mathbf{d}} \dot{\mathbf{d}}}^k \right)^{-1} \end{pmatrix} \cdot \begin{Bmatrix} (\dot{\mathbf{q}}_{i+1}^{\#})^{k+1} - (\dot{\mathbf{q}}_{lib}^{\#})^{k+1} \\ \dot{\mathbf{d}}_{i+1}^{k+1} - \dot{\mathbf{d}}_{lib}^{k+1} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} h_i \mathbf{r}_{i+1}^{k+1} \\ 0 \end{Bmatrix} \quad (I.2.1)$$

où le couple $(\dot{\mathbf{q}}_{lib}^{\#}, \dot{\mathbf{d}}_{lib})$ est solution de :

$$\begin{aligned}
 & \begin{pmatrix} \left(\mathbf{w}_{\mathbf{q}^\# \mathbf{q}^\#}^k \right)^{-1} & \left(\mathbf{w}_{\mathbf{q}^\# \dot{\mathbf{d}}}^k \right)^{-1} \\ \left(\mathbf{w}_{\dot{\mathbf{d}} \mathbf{q}^\#}^k \right)^{-1} & \left(\mathbf{w}_{\dot{\mathbf{d}} \dot{\mathbf{d}}}^k \right)^{-1} \end{pmatrix} \cdot \begin{Bmatrix} (\dot{\mathbf{q}}_{lib}^\#)^{k+1} - (\dot{\mathbf{q}}_{i+1}^\#)^k \\ \dot{\mathbf{d}}_{lib}^{k+1} - \dot{\mathbf{d}}_{i+1}^k \end{Bmatrix} \\
 &= \begin{Bmatrix} -\mathbf{M}(\mathbf{q}_{i+1}^\#, t_{i+1}) \cdot ((\dot{\mathbf{q}}_{i+1}^\#)^k) - \dot{\mathbf{q}}_i^\# - \mathbf{N}(\mathbf{q}_{i+1}^\#, t_{i+1}) \cdot (\dot{\mathbf{d}}_{i+1}^k - \dot{\mathbf{d}}_i) + h_i \{ (1-\theta) \mathbf{F}_i + \theta \mathbf{F}_{i+1}^k \} \\ -h_i \{ (1-\theta) \mathbf{G}_i + \theta \mathbf{G}_{i+1} \} + h_i \{ (1-\theta) \mathbf{H}_i + \theta \mathbf{H}_{i+1} \} \end{Bmatrix} \quad (I.2.2)
 \end{aligned}$$

avec :

$$\begin{cases} \left. \begin{aligned} \mathbf{M}^k &= \mathbf{M}((\mathbf{q}_{i+1}^\#)^k, t_{i+1}) & \mathbf{N}^k &= \mathbf{N}((\mathbf{q}_{i+1}^\#)^k, t_{i+1}) \\ \mathbf{K}_F^k &= - \left. \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{q}^\#} \right|_{(\mathbf{q}_{i+1}^\#)^k} & \mathbf{K}_G^k &= - \left. \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{q}^\#} \right|_{(\mathbf{q}_{i+1}^\#)^k} \\ \mathbf{C}_F^k &= - \left. \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \dot{\mathbf{q}}^\#} \right|_{(\dot{\mathbf{q}}_{i+1}^\#)^k} & \mathbf{C}_G^k &= - \left. \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \dot{\mathbf{q}}^\#} \right|_{(\dot{\mathbf{q}}_{i+1}^\#)^k} \\ \mathbf{D}_F^k &= - \left. \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \dot{\mathbf{d}}} \right|_{\dot{\mathbf{d}}_{i+1}^k} & \mathbf{D}_G^k &= - \left. \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \dot{\mathbf{d}}} \right|_{\dot{\mathbf{d}}_{i+1}^k} \\ \mathbf{L}_F^k &= - \left. \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \dot{\mathbf{d}}} \right|_{\dot{\mathbf{d}}_{i+1}^k} & \mathbf{L}_G^k &= - \left. \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \dot{\mathbf{d}}} \right|_{\dot{\mathbf{d}}_{i+1}^k} \end{aligned} \right\} \quad (I.2.3) \\
 \mathbf{w}_{\mathbf{q}^\# \mathbf{q}^\#}^k &= \left(\mathbf{M}^k + h_i \theta \mathbf{C}_F^k + h_i^2 \theta^2 \mathbf{K}_F^k \right)^{-1} & \mathbf{w}_{\mathbf{q}^\# \dot{\mathbf{d}}}^k &= \left(\mathbf{N}^k + h_i \theta \mathbf{L}_F^k + h_i^2 \theta^2 \mathbf{D}_F^k \right)^{-1} \\
 \mathbf{w}_{\dot{\mathbf{d}} \mathbf{q}^\#}^k &= \left(h_i \theta \mathbf{C}_G^k + h_i^2 \theta^2 \mathbf{K}_G^k \right)^{-1} & \mathbf{w}_{\dot{\mathbf{d}} \dot{\mathbf{d}}}^k &= \left(h_i \theta \mathbf{L}_G^k + h_i^2 \theta^2 \mathbf{D}_G^k \right)^{-1} \end{cases}$$

et (Eq. (4.3.40)) :

$$\begin{cases} \left. \begin{aligned} M_{IJ} &= \sum_{e=1}^{\tau} \int_{K_0^e} \rho \varphi_I \cdot \varphi_J dx & 0 \leq I, J \leq N_{\mathbf{u}}^{dof} \\ F_I &= - \sum_{e=1}^{\tau} \int_{K_0^e} \Pi(\mathbf{q}^\#, \bar{\mathbf{d}}) : \nabla \varphi_I dx & 0 \leq I \leq N_{\mathbf{u}}^{dof} \\ N_{IJ} &= \sum_{e=1}^{\tau} \int_{K_0^e} \rho \varphi_I \cdot (\pi_J \cdot \mathbf{X}) dx & 0 \leq I \leq N_{\mathbf{u}}^{dof} \quad 0 \leq J \leq N_{\mathbf{F}}^{dof} \\ G_I &= \sum_{e=1}^{\tau} \int_{K_0^e} \Pi(\mathbf{q}^\#, \bar{\mathbf{d}}) : \pi_I & 0 \leq I \leq N_{\mathbf{F}}^{dof} \\ H_I &= |\Omega_0| \bar{\Pi} : \pi_I & 0 \leq I \leq N_{\mathbf{F}}^{dof} \end{aligned} \right\} \quad (I.2.4)
 \end{cases}$$

Explicitons les termes \mathbf{K}_F^k , \mathbf{K}_G^k , \mathbf{C}_F^k , \mathbf{C}_G^k , \mathbf{D}_F^k , \mathbf{D}_G^k , \mathbf{L}_F^k et \mathbf{L}_G^k .

$$-\frac{\partial F_I}{\partial \mathbf{q}^\#} \Big|_{(\mathbf{q}_{i+1}^\#)^k} = -\frac{\partial F_I}{\partial \mathbf{q}} \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial \mathbf{q}^\#} \Big|_{(\mathbf{q}_{i+1}^\#)^k} \quad 0 \leq I \leq N_{\mathbf{u}}^{dof} \quad (\text{I.2.5})$$

D'après l'Eq. (5.1.23), on peut écrire :

$$\mathbf{q} = \mathbf{q}^\# + \mathbf{Rel}(\bar{\mathbf{d}}) \cdot \mathbf{X}_d \quad (\text{I.2.6})$$

où $\mathbf{Rel} \in \mathbb{R}^{N_{\mathbf{u}}^{dof}} \times \mathbb{R}^m$ une matrice de relèvement, \mathbf{X}_d le vecteur position discrétisé.

Ainsi, après une dérivation de \mathbf{q} par rapport à $\mathbf{q}^\#$ et l'utilisation de la décomposition de la contrainte $\mathbf{\Pi}$ en matrices tangentes (Eq. (I.1.5)), on obtient :

$$\begin{aligned} -\frac{\partial F_I}{\partial \mathbf{q}} \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial \mathbf{q}^\#} \Big|_{(\mathbf{q}_{i+1}^\#)^k} &= -\frac{\partial F_I}{\partial \mathbf{q}} \Big|_{(\mathbf{q}_{i+1}^\#)^k} \\ &= \sum_{e=1}^{\tau} \int_{K_0^e} \sum_{0 \leq J \leq N_{\mathbf{u}}^{dof}} \left(\mathbf{M}_{rig}^{tg} : \nabla \varphi_J \right) : \nabla \varphi_I \quad 0 \leq I \leq N_{\mathbf{u}}^{dof} \end{aligned} \quad (\text{I.2.7})$$

et :

$$\left(K_{\mathbf{F}}^k \right)_{IJ} = \sum_{e=1}^{\tau} \int_{K_0^e} \left(\mathbf{M}_{rig}^{tg} : \nabla \varphi_J \right) : \nabla \varphi_I \quad 0 \leq I, J \leq N_{\mathbf{u}}^{dof} \quad (\text{I.2.8})$$

Un raisonnement analogue donne :

$$\begin{aligned} \left(C_{\mathbf{F}}^k \right)_{IJ} &= \sum_{e=1}^{\tau} \int_{K_0^e} \left(\mathbf{M}_{amort}^{tg} : \nabla \varphi_J \right) : \nabla \varphi_I \quad 0 \leq I, J \leq N_{\mathbf{u}}^{dof} \\ \left(K_{\mathbf{G}}^k \right)_{IJ} &= -\sum_{e=1}^{\tau} \int_{K_0^e} \left(\mathbf{M}_{rig}^{tg} : \nabla \varphi_J \right) : \pi_I \quad 0 \leq J \leq N_{\mathbf{u}}^{dof} \quad 0 \leq I \leq N_{\mathbf{F}}^{dof} \\ \left(C_{\mathbf{G}}^k \right)_{IJ} &= -\sum_{e=1}^{\tau} \int_{K_0^e} \left(\mathbf{M}_{amort}^{tg} : \nabla \varphi_J \right) : \pi_I \quad 0 \leq J \leq N_{\mathbf{u}}^{dof} \quad 0 \leq I \leq N_{\mathbf{F}}^{dof} \end{aligned} \quad (\text{I.2.9})$$

Le terme $\mathbf{D}_{\mathbf{F}}^k$ s'écrit :

$$\begin{aligned} -\frac{\partial F_I}{\partial \bar{\mathbf{d}}} \Big|_{\bar{\mathbf{d}}_{i+1}^k} &= -\sum_{e=1}^{\tau} \int_{K_0^e} \frac{\partial F_I}{\partial \mathbf{q}} \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial \bar{\mathbf{d}}} \Big|_{\bar{\mathbf{d}}_{i+1}^k} \\ &= \sum_{e=1}^{\tau} \int_{K_0^e} \sum_{0 \leq J \leq N_{\mathbf{F}}^{dof}} \left(\mathbf{M}_{rig}^{tg} : \nabla (\pi_J \cdot \mathbf{X}) \right) : \nabla \varphi_I \quad 0 \leq I \leq N_{\mathbf{u}}^{dof} \\ &= \sum_{e=1}^{\tau} \int_{K_0^e} \sum_{0 \leq J \leq N_{\mathbf{F}}^{dof}} \left(\mathbf{M}_{rig}^{tg} : \pi_J \right) : \nabla \varphi_I \end{aligned} \quad (\text{I.2.10})$$

et on a :

$$\begin{aligned}
 \left(D_{\mathbf{F}}^k\right)_{IJ} &= \sum_{e=1}^{\tau} \int_{K_0^e} \left(M_{rig}^{tg} : \pi_J\right) : \nabla \varphi_I & 0 \leq I \leq N_{\mathbf{u}}^{dof} & \quad 0 \leq J \leq N_{\mathbf{F}}^{dof} \\
 \left(L_{\mathbf{F}}^k\right)_{IJ} &= \sum_{e=1}^{\tau} \int_{K_0^e} \left(M_{amort}^{tg} : \pi_J\right) : \nabla \varphi_I & 0 \leq I \leq N_{\mathbf{u}}^{dof} & \quad 0 \leq J \leq N_{\mathbf{F}}^{dof} \\
 \left(D_{\mathbf{G}}^k\right)_{IJ} &= - \sum_{e=1}^{\tau} \int_{K_0^e} \left(M_{rig}^{tg} : \pi_J\right) : \pi_I & 0 \leq I, J \leq N_{\mathbf{F}}^{dof} \\
 \left(L_{\mathbf{G}}^k\right)_{IJ} &= - \sum_{e=1}^{\tau} \int_{K_0^e} \left(M_{amort}^{tg} : \pi_J\right) : \pi_I & 0 \leq I, J \leq N_{\mathbf{F}}^{dof}
 \end{aligned} \tag{I.2.11}$$

Remarque I.2. Dans l'hypothèse des petites perturbations, on a les relations suivantes :

$$\mathbf{L}_{\mathbf{F}}^k = \mathbf{C}_{\mathbf{G}}^k \quad \mathbf{D}_{\mathbf{F}}^k = \mathbf{K}_{\mathbf{G}}^k \tag{I.2.12}$$

ce qui entraîne la symétrie de la matrice des itérations

$$\begin{pmatrix} \left(\mathbf{w}_{\mathbf{q}\#\mathbf{q}\#}^k\right)^{-1} & \left(\mathbf{w}_{\mathbf{q}\#\dot{\mathbf{d}}}\right)^{-1} \\ \left(\mathbf{w}_{\dot{\mathbf{d}}\mathbf{q}\#}^k\right)^{-1} & \left(\mathbf{w}_{\dot{\mathbf{d}}\dot{\mathbf{d}}}\right)^{-1} \end{pmatrix}.$$

Fissuration des matériaux à gradient de propriétés. Application au Zircaloy hydruré.

Cette thèse concerne la fissuration dynamique des matériaux à gradient de propriétés. Plus particulièrement, elle traite de la tenue des gaines de combustible, tubes minces et élan-cées, à fort taux de combustion lors de transitoires accidentels. La fissuration est étudiée à l'échelle locale et basée sur la notion de zone cohésive, laquelle est mise en œuvre à l'aide d'une approche multicorps. Afin de prendre en compte une fissuration en mode mixte, les modèles de zone cohésive considérés sont couplés à du contact frottant. L'approche Non-Smooth Contact Dynamics est mise en œuvre pour le traitement dynamique des problèmes de contact frottant non réguliers. Compte tenu des dimensions mises en jeu, une démarche multiéchelle permet de prendre en compte la microstructure dans un calcul de structure. A l'échelle microscopique, les propriétés effectives surfaciques, entre les corps, sont obtenues par homogénéisation numérique périodique. Une formulation à deux champs du problème Eléments Finis multicorps est ainsi obtenu. La méthode NSCD est alors étendue à cette formulation. L'outil de simulation numérique développé permet des simulations dynamiques en grandes transformations depuis l'amorçage de fissures jusqu'à la ruine du matériau. La mise en œuvre à l'échelle microscopique est effectuée par calcul sur des cellules de bases pour plusieurs tirages de microstructures aléatoires. A l'échelle macroscopique, des calculs dynamiques de structures sur des portions de gaine en fonction du taux moyen et du gradient d'hydrogène mettent en évidence le rôle prépondérant de ces deux paramètres dans la tenue de la gaine sous chargement dynamique rapide.

Fracture of functionally graded materials. Application to hydrided Zircaloy.

This thesis is devoted to the dynamic fracture of functionally graded materials. More particularly, it deals with the toughness of nuclear cladding at high burnup submitted to transient loading. The fracture is studied at local scale using cohesive zone model in a multibody approach. Cohesive zone models include frictional contact to take into account mixed mode fracture. Non smooth dynamics problems are treated within the Non-Smooth Contact Dynamics framework. A multiscale study is necessary because of the dimension of the clad. At microscopic scale, the effective properties of surfacic law, between each body, are obtained by periodic numerical homogenization. A two fields Finite Element formulation is so written. An extended formulation of the NSCD framework is obtained. The associated software allows to simulate, in finite deformation, from the crack initiation to post-fracture behavior in heterogeneous materials. At microscopic scale, random RVE calculations are made to determine effective properties. At macroscopic scale, calculations of part of clad are made to determine the role of the mean hydrogen concentration and gradient of hydrogen parameters in the toughness of the clad under dynamic loading.

Discipline : Mécanique

Mots-clés : Fissuration, dynamique non régulière, matériaux hétérogènes, Eléments Finis périodiques, simulation numérique, Modèles de Zone Cohésive, Zircaloy.

L.M.G.C. UMR-5508

Université Montpellier II, place Eugène Bataillon, 34095 Montpellier