

## **JOURNEES THEMATIQUES MECAMAT**

### **Groupes Approches Probabilistes en Mécanique des Milieux Hétérogènes - Rhéologie des Matériaux Hétérogènes – Traitements thermomécaniques**

**Ecole des Mines de Paris (site de Fontainebleau) les 16 et 17 avril 2008**

#### **Résumés**

##### **Statistical inference for Weibull tail-distributions**

Stéphane GIRARD, INRIA Rhône-Alpes, projet Mistis,  
Inovallée, 655, av. de l'Europe, Montbonnot, 38334 Saint-Ismier cedex  
[Stephane.Girard@inrialpes.fr](mailto:Stephane.Girard@inrialpes.fr)

Weibull tail-distributions are a generalization of Weibull distributions which play an important role in Extreme Value Theory.

Such distributions are characterized by a failure rate function supposed to be regularly varying, i.e. increasing at a polynomial rate. They include for instance gamma, Gaussian and classical Weibull distributions. They are indexed by a positive parameter called the Weibull tail-index. Several estimators of this parameter are introduced and their asymptotic properties are established. Extreme quantiles estimators are derived and their behavior is illustrated both on simulated and real data.

##### **Some generalizations of the Weibull model**

Dietrich Stoyan

Institut fuer Stochastik TU Bergakademie Freiberg, D-09596 FREIBERG Germany  
[stoyan@math.tu-freiberg.de](mailto:stoyan@math.tu-freiberg.de)

For many materials it is empirically clear that the Weibull theory is not valid, although the strength distributions can be very well approximated by Weibull distributions. In particular, the size effect does not follow the pattern of the Weibull theory. In the lecture a model is discussed which is useful for a highly porous material (aircrete), where the mean compressive strength is nearly independent of specimen size, with the exception of very small samples. The model assumes fracture of the specimen if an increasing process, the so-called inverse gamma process, crosses a level which is proportional to specimen size. The resulting strength distributions can be well approximated by Weibull distributions but they are theoretically other distributions.

By etching of sawed silicon wafers many defects disappear or become 'smaller', which is indicated by 'smaller' strength distributions. Based on the Griffith theory this procedure of modifying the defects is modelled, avoiding geometrical measurements. For the particular case of silicon wafers, the abrasion and smoothing process is described by two numerical parameters, which can be well interpreted. Also here the field of Weibull distributions is left, but again a good approximation by Weibull distributions is possible.

## **Some probabilistic models of quasi-brittle damage**

Dominique Jeulin

Centre de Morphologie Mathématique, Ecole des Mines de Paris  
35, rue St-Honoré, F77300 Fontainebleau, France

We propose models of damage for elastic media based on the initiation of damage zones on random defects in the three-dimensional space. These zones grow with the applied stress, due to the breakage of new defects, resulting in a continuous decrease of the elastic tensor. Starting from the statistics of defects, that can be estimated from micromechanical experiments, and from models of homogenization of random media, we can predict the average stress-strain relationship, the average and variance of the ultimate stress and of the proportion of damage at rupture, as a function of the size of the specimen. Depending on the type of statistics of defects, brittle or ductile macroscopic behaviors are expected from the models. This is illustrated by some examples in the case of uniform and non uniform loading conditions.

**Keyword**

Scale effect, random process, damage, homogenization, Boolean model

STATISTICAL ASPECTS OF CLEAVAGE FRACTURE IN STEELS  
A SPECIAL EMPHASIS ON DUCTILE-TO-BRITTLE TRANSITION

A.PINEAU

Centre des Matériaux.Ecole des Mines de Paris

[andre.pineau@ensmp.fr](mailto:andre.pineau@ensmp.fr)

**Abstract.** Both scientists and engineers are very much concerned with the study of ductile-to-brittle transition (DBT) in ferritic steels. For historical reasons the Charpy impact test remains widely used in the industry as a quality control tool to determine the DBT temperature. The transition between the two failure modes, i.e. brittle cleavage at low temperature and ductile fracture at the upper shelf occurs also at low loading rate in fracture toughness tests. Recent developments have been made in the understanding of the micromechanisms controlling either cleavage fracture in BCC metals or ductile rupture by cavity nucleation, growth and coalescence. Other developments have also been made in numerical tools such as the finite element (FE) method incorporating sophisticated constitutive equations and damage laws to simulate ductile crack growth and cleavage fracture. Both types of development have thus largely contributed to modeling DBT occurring either in impact tests or in fracture toughness tests. This constitutes the basis of a modern methodology to investigate fracture, which is the so-called local approach to fracture.

In this presentation the micromechanisms of brittle cleavage fracture and ductile rupture are firstly briefly reviewed. Then the transition between both failure modes is investigated. Two main sources are invoked to explain the scatter observed in cleavage fracture of ferritic steels: (i) the dispersion of the local applied stresses which can be calculated using numerical models of polycrystalline plasticity and (ii) the dispersion of the local microstructural fracture stresses which can be assessed from metallographical observations.

It is shown that the DBT behavior observed in impact tests or in fracture toughness specimens can be reasonably well predicted using recent theories on brittle and ductile fracture in conjunction with FE numerical simulations. The review includes a detailed study of a number of metallurgical parameters contributing to the variation of the DBT temperature. An attempt is also made to underline the research areas which remain to be explored for improving the strength-toughness compromise in the development of modern steels.

## **Modélisation de la rupture fragile d'un acier bainitique à partir de simulation en plasticité cristalline d'agrégat**

**Maximilien LIBERT<sup>1</sup>, Colette REY<sup>1</sup>, Bernard MARINI<sup>2</sup>, Ludovic VINCENT<sup>2</sup>**  
<sup>1</sup>Ecole Centrale Paris, <sup>1</sup>CEA, Saclay, DMN/SRMA

Le comportement d'un acier bainitique de nuance 16MND5 et son évolution a été caractérisés en traction et ténacité dans le domaine de température [25°C,-196°C].

Un modèle de comportement micromécanique décrit ce comportement en dessous de la température de transition  $T_a$ . La loi de comportement utilisée est fondée sur les mécanismes de déformation décrits dans la bibliographie et identifiée par méthode inverse à partir des essais mécaniques.

Des simulations en plasticité cristalline sont réalisées afin de modéliser les distributions de contrainte principale  $\sigma_I$  dans deux microstructures bainitiques correspondant au volume élémentaire de l'approche locale de la rupture. L'effet de la température et de la triaxialité sur l'évolution des hétérogénéités est caractérisé. Nous proposons une fonction de distribution décrivant la distribution des valeurs locales de  $\sigma_I$  en fonction des contraintes principales et équivalente  $\langle \sigma_I \rangle$  et  $\langle \sigma_{mises} \rangle$  moyennes dans la microstructure.

Cette fonction est utilisée pour formuler un modèle d'approche locale de la rupture intégrant la distribution des tailles de défauts critiques et les distributions de  $\sigma_I$ . On montre que dans certains cas, la dispersion des contraintes locales suffit à expliquer les dispersions des contraintes à rupture à l'échelle du volume élémentaire. Les dispersions de contraintes à rupture sont en accord avec celles prédites par le modèle de Beremin. La prise en compte des hétérogénéités mécaniques permet d'introduire une dépendance de la probabilité de rupture en fonction de la température, de la déformation et de la triaxialité.

# **Modélisation probabiliste de la formation de réseaux de fissures par fatigue thermique**

Nicolas MALESYS<sup>a,b</sup>, Ludovic VINCENT<sup>b</sup>, François HILD<sup>a</sup>

<sup>a</sup> LMT Cachan, 61 avenue du Président Wilson, 94235 Cachan cedex

<sup>b</sup> CEA Saclay, DEN/DANS/DMN/SRMA, 91191 Gif sur Yvette cedex

Des expertises sur des conduites de circuit de refroidissement de réacteur à l'arrêt de centrales nucléaires ont révélé la présence de réseaux superficiels de fissures obtenus par fatigue thermique. Pour s'assurer de la non-criticité d'un tel faïençage thermique, un modèle probabiliste est proposé permettant d'estimer le développement des réseaux de fissures (nombre de cycles à l'amorçage, nombre de cycles pendant la phase de propagation, saturation éventuelle, distribution de tailles de fissures, ...).

Le modèle probabiliste se base sur deux principales hypothèses que sont la germination continue et le processus d'obscurcissement. La première hypothèse permet de prendre en compte le fait que les fissures ne s'amorcent pas toutes au début du chargement mais au cours des cycles. La loi d'amorçage des fissures est construite sur une loi de type Poisson-Weibull à trois paramètres prenant en compte l'amplitude du chargement mécanique et le nombre de cycles. La seconde hypothèse du modèle se base sur la présence de zones de relaxation de contraintes de part et d'autre des lèvres d'une fissure soumise à un chargement orthogonale à sa direction. Si une fissure ou un site d'amorçage de fissure vient à se trouver dans une telle zone, la contrainte à laquelle est soumise la fissure ou le site devient trop faible pour assurer la propagation de la fissure ou l'amorçage d'une nouvelle fissure. La combinaison de ses deux principes permet de gérer les conditions d'amorçage, de propagation et d'arrêt des fissures. L'aspect probabiliste du modèle se fait uniquement en surface, là où les fissures s'amorcent. Par contre, la propagation des fissures se fait en surface ainsi qu'en profondeur, suivant une direction orthogonale à la surface. La propagation des fissures est réalisée à partir du calcul des facteurs d'intensité des contraintes en pointe et en fond de fissure couplé à une loi de type Paris.

Au final, le modèle permet de décrire la formation et la propagation de réseaux de fissures de fatigue thermique grâce à trois principales grandeurs : la probabilité d'obscurcissement, qui caractérise l'état de saturation du réseau, la densité de fissures activées, qui donne une information sur le nombre total de fissures présentes dans le domaine, et la densité de fissures actives, qui permet de connaître le nombre de fissures qui continuent de se propager dans le réseau à un instant donné. Une autre information accessible par le modèle est la distribution des tailles de fissures arrêtées dans le réseau. L'influence de différents paramètres sur les résultats du modèle a été testée.

Le modèle est appliqué à l'étude du faïençage thermique d'un acier inoxydable austénitique type 304L, dans des conditions proches de celles rencontrées sur site (essais SPLASH du CEA Saclay). Les résultats obtenus par le modèle sont qualitativement comparables aux résultats expérimentaux avec notamment une saturation du réseau de fissures au bout d'un certain nombre de cycles et un arrêt en profondeur des fissures, avec des profondeurs maximales de l'ordre de 3mm, valeurs comparables aux valeurs expérimentales.

Parmi les perspectives envisagées à ce travail, citons notamment la prise en compte de la coalescence entre fissures et la variabilité du chargement mécanique.

# **Propagation d'incertitudes par chaos polynomial dans les modèles mécaniques ; application aux analyses de sensibilité et de fiabilité des structures**

Bruno Sudret, Géraud Blatman  
EDF, Les Renardières, Moret sur Loing

La prise en compte des incertitudes sur les paramètres des modèles permet une modélisation fine des systèmes mécaniques, notamment dans le but d'augmenter leur performance et leur fiabilité. Dans ce contexte, les méthodes dites spectrales, fondées sur la représentation de la réponse aléatoire d'un modèle sur la base dite du chaos polynomial font l'objet d'intenses recherches.

Dans cet exposé, on propose une introduction pédagogique aux approches spectrales, et plus particulièrement aux méthodes de résolution dites non intrusives, qui permettent d'obtenir la représentation par chaos polynomial à partir d'un certain nombre de calculs déterministes judicieusement choisis. On montre ensuite comment post-traiter les résultats pour obtenir avec une grande précision la densité de probabilité de quantités d'intérêt (réponse du modèle), pour hiérarchiser les paramètres d'entrée selon leur poids dans la réponse (analyse de sensibilité) ou encore calculer des probabilités de dépassement par la réponse d'un seuil donné (analyse de fiabilité). Les méthodes sont illustrées sur des modèles aux éléments finis de structures.

## Rupture lente d'un matériau fragile *désordonné* : Dynamique intermittente de fissuration et morphologie des faciès de rupture

Daniel Bonamy, Elisabeth Bouchaud, Fabrice Célarié, Claudia Guerra,  
*Groupe Fracture, SPCSI, CEA Saclay, 91191 Gif sur Yvette, France*

Stéphane Santucci & Knut Jorden Maloy,  
*Fysisk Institutt, Universitetet i Oslo, P.O. Boks 1048 Blindern, N-0316 Oslo 3, Norway*

Laurent Ponson,  
*Division of Engineering and Applied Science, California Institute of Technology, Pasadena, CA 91125, USA*

D'énormes progrès ont été accomplis ces dernières décennies sur la rupture des matériaux. Il existe en particulier un cadre théorique cohérent et performant, la Mécanique Linéaire Élastique de la Rupture (MLER) qui permet de décrire précisément la rupture des matériaux fragile *homogènes*. Le cas des matériaux *hétérogènes* en revanche continue de poser problème: (i) Dans un tel milieu, la croissance d'une fissure apparaît très intermittente, avec des sauts brutaux, comme en témoigne par exemple l'émission acoustique accompagnant la rupture de matériaux divers tels le papier, les verres ou les roches par exemple, et - à une autre échelle - l'activité sismique associée aux tremblements de terre; (ii) les surfaces de rupture apparaissent rugueuses caractérisées par des propriétés d'invariance d'échelle bien particulière. A l'heure actuelle, ces observations ne peuvent pas être décrites par la MLER standard.

Nous verrons dans cette présentation comment dériver une description *stochastique* de la croissance lente d'une fissure dans un matériau élastique désordonné. Cette description permet de reproduire les dynamiques de crépitements classiquement observées. Ses prédictions sont ensuite comparées à des observations expérimentales menées à l'université d'Oslo sur la propagation d'une fissure dans un bloc de Plexiglas transparent. Toutes les propriétés statistiques spatio-temporelles sont parfaitement reproduites. Finalement, nous discuterons les implications de cette description sur la morphologie des surfaces de rupture et confronterons ces prédictions à des observations expérimentales récentes.

# Modélisation numérique de la fragmentation de particules de formes complexes avec une application au laminage des alliages d'aluminium

Nicolas Moulin

Encadrants : H. Klöcker<sup>1</sup>, D. Jeulin<sup>2</sup>,

<sup>1</sup> Microstructures et Traitements Thermomécaniques, UMR CNRS 5146 - PECM, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Saint-Etienne, 158 cours Fauriel, 42023 Saint Etienne cedex 2, France, email: nicolas.moulin@emse.fr, klocker@emse.fr

<sup>2</sup> Centre de Morphologie Mathématique, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, 35 rue Saint Honoré, 77305 Fontainebleau CEDEX, France, email: dominique.jeulin@ensmp.fr

## RESUME :

L'alliage d'aluminium AA5182, largement employé sous forme de tôles embouties pour les carrosseries, contient des particules intermétalliques  $Mg_2Si$  et  $Al_x(Fe,Mn)$ . Dans le matériau brut de coulée, ces particules (d'une taille  $> 50 \mu m$ ) présentent des formes complexes. Pendant le laminage à chaud, ces particules sont cassées et redistribuées dans le métal. Or, la taille et la distribution spatiale des particules intermétalliques contrôlent en grande partie la formabilité des tôles après transformation à froid.

Cette étude identifie les paramètres morphologiques et mécaniques contrôlant la fragmentation des particules pendant le laminage à chaud. La rupture des particules intermétalliques a été caractérisée d'une part expérimentalement à l'aide d'observations par tomographie X (sur des tôles laminées industriellement) et d'autre part mécaniquement à partir de calculs éléments-finis.

Le nouveau modèle micromécanique prédit les champs de contraintes dans les particules et à l'interface particule-matrice pendant le laminage à chaud. Ce travail contribue d'un point de vue théorique à la mise en place d'un nouveau critère de rupture pour les particules intermétalliques et pour l'interface particule-matrice.

Ce modèle a permis de mettre en avant plusieurs conclusions quand à la prédiction de la rupture des particules pendant le laminage. En effet, l'orientation, l'étendue et la ténacité des particules jouent un rôle essentiel pour la rupture des particules. En revanche, les propriétés rhéologiques de la matrice (dans la gamme de laminage à chaud) ont une influence réduite.

Enfin, l'étude a permis de confirmer, mécaniquement, l'existence de trois classes de particules obtenues par analyse morphologique (travaux d'E. Parra-Denis).

# Prévision de tenue à la fatigue à grand nombre de cycles sous chargements multiaxiaux hétérogènes à partir d'essais d'auto-échauffement

M. Poncelet<sup>a</sup>, C. Doudard<sup>b</sup>, S. Calloch<sup>b</sup>, F. Hild<sup>a</sup>, B. Weber<sup>c</sup> et A. Galtier<sup>d</sup>

<sup>a</sup>LMT-Cachan, ENS Cachan/CNRS/Université Paris 6/PRES UniverSud Paris

<sup>b</sup>LMBS, ENSIETA <sup>c</sup>ARCELOR Research <sup>d</sup>CETIM

Les essais d'auto-échauffement consistent à mesurer la température d'une éprouvette sollicitée par un chargement cyclique d'amplitude constante par palier. Cette hausse de température est due à la microplasticité qui apparaît en de multiples amas de grains, microplasticité qui a également pour conséquence l'apparition à terme de microfissures qui conduisent à la ruine de l'éprouvette. Les essais d'auto-échauffement permettent donc une estimation rapide des caractéristiques de fatigue pour certains métaux et alliages [1], et sont donc une alternative intéressante aux longs essais de fatigue multiaxiale traditionnels.

Dans le cas uniaxial homogène, une modélisation probabiliste de l'apparition de la microplasticité [2] permet de relier quantitativement essais d'auto-échauffement et dispersion en fatigue. La probabilité de trouver  $k$  "foyers de microplasticité" (amas de grains) est pilotée par un processus ponctuel de Poisson d'intensité dépendant en loi puissance de l'amplitude de contrainte. L'énergie dissipée par cycle d'un foyer  $D_{inc}$  est calculée grâce à une loi de localisation ainsi qu'une contrainte équivalente de plasticité de von Mises et une loi d'écroutissage cinématique linéaire. La dissipation totale  $D_{tot}$  est obtenue par intégration sur l'ensemble de la population de grains actifs. Sous hypothèse d'homogénéité de la température, celle-ci est obtenue par introduction de la dissipation globale de la zone utile  $D$  dans l'équation de la chaleur modélisant l'éprouvette dans son montage d'essai. La probabilité de rupture est quant-à elle obtenue en faisant l'hypothèse du maillon le plus faible, ce qui permet de retrouver le modèle de Weibull à 2 paramètres. La durée de vie est elle calculée en supposant une énergie dissipée critique.

Dans le cas multiaxial [3,4], le processus ponctuel de Poisson est piloté par une intensité à mi-chemin entre celle proposée par [5] pour des matériaux fragiles, sensibles à la contrainte normale dans toutes les directions ; et le modèle de [6] qui considère le cisaillement des plans de glissement. L'intensité dépend donc de la cission alternée et du maximum de la contrainte hydrostatique sur un cycle et ce sur l'ensemble des plans de glissement possibles. La dissipation d'un foyer est également calculée à l'échelle des plans de glissement. Afin de prendre en compte l'hétérogénéité du champ de contrainte, un facteur d'hétérogénéité de dissipation est introduit lors du calcul de la température, tandis qu'un facteur d'hétérogénéité de contrainte est utilisé lors du calcul de probabilité de rupture, ces deux facteurs étant très similaires dans leur expression.

Dans le cadre de ces journées, l'application de ce modèle au cas des chargements de traction-torsion sur tube d'acier C45 sera présenté.

[1] Luong, M. P. (1992). Infrared thermography of fatigue in metals. *SPIE*, 1682 :222–233.

[2] Doudard, C., Calloch, S., Hild, F., Cugy, P., et Galtier, A. (2004) Identification of the scatter in high cycle fatigue from temperature measurements. *C.R. Mécanique*, 332 :795–801.

[3] Doudard, C., Hild, F., et Calloch, S. (2007a). A probabilistic model for multiaxial high cycle fatigue. *Fat. Fract. Engng. Mat. Struct.*, 30 :107–114.

- [4] Poncelet, M., Doudard, C., Calloch, S., Hild, F., Weber, B., et Galtier, A. (2007). Prediction of self-heating measurements under proportional and non proportional multiaxial cyclic loadings. *C. R. Mécanique*, 335 :81–86.
- [5] Weibull, W. (1939). A statistical theory of the strength of materials. Technical Report 151, Roy. Swed. Inst. Eng. Res.
- [6] Dang Van, K. (1973). Sur la résistance à la fatigue des métaux. Technical Report 3<sup>e</sup> fascicule, Sciences et techniques de l'armement, Mémorial de l'artillerie française.

# Etude d'un élastomère chargé : de sa nano-structure à son macro-comportement

A. Jean, D. Jeulin, S. Forest, S. Cantournet, V. Mounoury, F. N'guyen  
Centre des Matériaux P.M. Fourt CNRS-UMR 7633, Evry cedex, France  
Centre de Morphologie Mathématique, Fontainebleau cedex, France  
Partenaire industriel : Michelin

Les propriétés physiques des matériaux élastomères chargés en noir de carbone sont étroitement liées à l'arrangement des particules et agrégats de noir dans la matrice élastomère et donc de la microstructure. On peut modéliser la morphologie de la microstructure des élastomère chargés par une combinaison de plusieurs schémas Booléens (Jeulin, 1991), (Jeulin and Le Coënt, 1995), (Delarue, 2001), (Moreaud, 2006) (figure 1(b)). Les paramètres de ce modèle sont identifiés selon une méthode basée sur l'exploitation d'images obtenues au microscope à transmission (Savary et al., 1999), (Jean et al., ) (figure 1(a)).

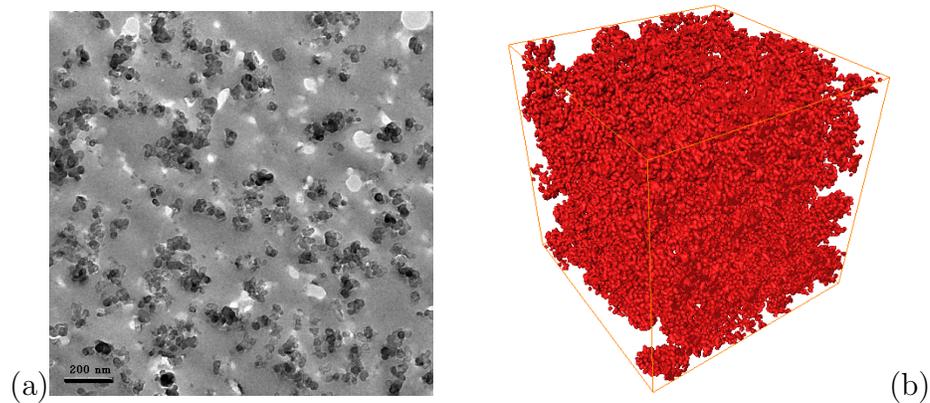


FIG. 1 – (a) : Image MET (Michelin) - (b) : Simulation  $1600^3\text{nm}^3$ , mélange chargé à 20% de Noir de Carbone  $\simeq 60000$  particules.

L'influence de la morphologie de la microstructure sur les propriétés mécaniques et électriques effectives du composite est estimée grâce à des calculs de microstructures par élément finis. On présente ici les calculs micromécaniques qui permettent d'atteindre les propriétés effectives d'un composite possédant un arrangement périodique de ses renforts (figure 2(c)). Une seconde étape s'appuiera sur la détermination des propriétés effectives de microstructures représentatives (figures 2(a) et 2(b)) par le calcul éléments finis sur des maillages de simulations de microstructures modélisées à partir d'images MET. Pour atteindre ce dernier objectif, on s'appuiera sur les méthodes statistiques de recherche de VER (Kanit et al., 2003).

## Références

Delarue, A. (2001). *Prévision du comportement électromagnétique de matériaux composites à partir de leur mode d'élaboration et de leur morphologie*. PhD thesis, École des Mines de Paris.

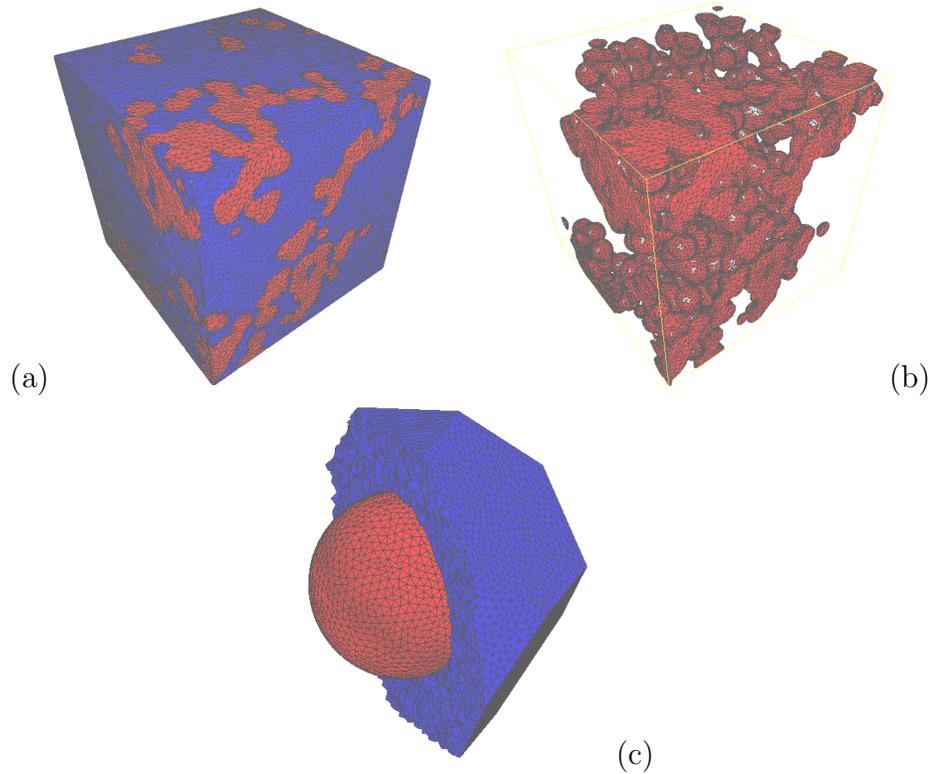


FIG. 2 – (a) : Maillage d’une microstructure simulée ( $300^3\text{nm}^3$ , 200 particules) - (b) : Maillage du réseau de Noir de carbone - (c) : Maillage d’une cellule tétrakaïdécaédrique avec inclusion sphérique (agencement périodique selon un réseau cubique centré de particules)

Jean, A., Jeulin, D., Cantournet, S., Forest, S., Mournoury, V., and N’Guyen, F. Rubber with carbon black fillers, parameters identification of multiscale nanostructure model. In *Constitutive Models for Rubber V*.

Jeulin, D. (1991). *Modèles morphologiques de structures aléatoires et de changement d’échelle*, Thèse de Doctorat d’État. PhD thesis, Université de Caen.

Jeulin, D. and Le Coënt, A., editors (1995). *Morphological Modeling of random composites in Continuum Models Discrete System*, Varna, Bulgarie. 8th International Symposium.

Kanit, T., Forest, S., Galliet, I., Mounoury, V., and 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 :3647–3679.

Moreaud, M. (2006). *Propriétés multi-échelles et prévision du comportement diélectrique de nanocomposites*. PhD thesis, École des Mines de Paris.

Savary, L., Jeulin, D., and Thorel, A. (1999). Morphological analysis of carbon-polymer composite materials from thick section. *Acta Stereologica*, 18(3) :297–303.

# **Volume élémentaire représentatif pour le comportement élastique d'un schéma booléen**

F. Willot et D. Jeulin

Centre de Morphologie Mathématique, Ecole des Mines de Paris  
35, rue St-Honoré, F77300 Fontainebleau, France

Ce travail a pour but l'estimation par des moyens numériques du volume élémentaire représentatif (V.E.R.) de matériaux composites désordonnés 3D, dans le cas d'un comportement linéaire élastique.

Le volume élémentaire représentatif est caractérisé par les propriétés statistiques des champs de contrainte et de déformation, et dépend de la microstructure considérée et du contraste entre les phases.

Nous calculons par la méthode dite de transformées de Fourier rapides les propriétés effectives et le V.E.R. correspondant dans le cas d'un schéma booléen de sphères.

Ce type de microstructure est utilisé pour la modélisation de milieux réels, notamment certains nanocomposites. Les résultats obtenus pour l'élasticité linéaire sont comparés à ceux précédemment obtenus pour la permittivité diélectrique.

# A fast algorithm for reconstructing cement paste

*V. Tariel<sup>1</sup>, E. Gallucci<sup>2</sup>, M. Stampanoni<sup>3</sup>, P. Levitz<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Ecole Polytechnique, Palaiseau, France,

<sup>2</sup>Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, Suisse,

<sup>3</sup>Paul Sherrer Institut, Suisse,

e-mail: [vincent.tariel@polytechnique.edu](mailto:vincent.tariel@polytechnique.edu)

## ABSTRACT

We propose an efficient procedure to reconstruct a three-dimensional (3D) medium using morphological information: chord length distribution and two-point correlation. At first, we have applied the algorithm of annealing simulated method (1). The difficulty of this algorithm is to reconstruct in a reasonable time a representative elementary volume (REV), such that averages of physical properties are possible and meaningful. To overcome this problem, we have localized the interchange procedure in the boundary of the phase and chosen a descent slope rather than the Metropolis method.

Since experimental 3D representations are obtained by X-ray synchrotron, we can probe our algorithm in reconstructing a 3D model from 3D representation and comparing intrinsically 3D information between both. In this study, we have reconstructed the three phases of the cement paste: anhydrous grains, hydrate and capillary porosity. At the algorithm steady state, the model has caught the two salient morphological features, chord length distribution and two-point correlation, of the reference. We are on the verge to compare the properties of diffusive transport and the topological property of the microstructure.

(1) Reconstructing random media II. Three-dimensional media from two-dimensional cuts, C. L. Y. Yeong, S. Torquato Levitz. PHYSICAL REVIEW E, 58 (1): 224-233 1998

# Macroscopic criteria of ductile porous materials: effects of voids shape

Vincent Monchiet, Eric Charkaluk, Djimédo Kondo

<sup>1</sup> *Laboratoire de Mécanique de Lille (CNRS UMR 8107), USTL, 59650 Villeneuve d'Ascq, FRANCE*  
{vincent.monchiet@ed.univ-lille1.fr, eric.charkaluk@univ-lille1.fr, djimedo.kondo@univ-lille1.fr}

Since three decades, the modeling of the behavior of ductile porous media has been the subject of important researches in nonlinear thermomechanics of materials. In his pioneering work, Gurson [3] developed a limit analysis approach of a hollow sphere which constitutes an upper bound for a composite spheres assemblage. Later, the Gurson model has been extended in order to take into account the voids shapes (see review by Gologanu et al. [2]). Alternatively, by using variational techniques (see review in Ponte Castaneda and Suquet [7]), rigorous nonlinear Hashin-Shtrikman upper bounds have been derived for porous media with various voids shapes. An important observation is that the Gurson model violates the corresponding upper bound for low values of the stress triaxiality  $T = \frac{\Sigma_h}{\Sigma_{eq}}$ . However, its predominance over the non linear Hashin-Shtrikman bound is still observed for high stress triaxialities. A possible method to improve the predictions of the original limit analysis of Gurson (and in fact the subsequent models for non spherical voids), already used by some authors, consists in considering refined trial velocity fields. Still, due to the limitation of trial velocity fields which have been explored in the past studies, it seems that there is need for new investigations in this domain.

The main objective of the present study is to develop a limit analysis approach based on Eshelby-like velocity fields and to derive new expression of the yield function of the porous medium. The calculations have been performed in the general case of prolate and oblate voids. By doing so, the new results can also be compared to those which can be found Gologanu et al. [2]. The determination of the macroscopic criterion is made by considering a spheroidal unit cell containing a (confocal) spheroidal void, as in [2]. The velocity field in the matrix,  $\underline{v}$ , is, as classically, decomposed into a first field,  $\mathbf{A}.\underline{x}$ , corresponding to uniform strain rate  $\mathbf{A}$ , and an heterogeneous field, denoted  $\underline{v}^E$ , which describes void expansion and shape changes. For  $\underline{v}^E$ , we propose to consider the exterior point Eshelby solution ([1], see also [6]) adapted here to an incompressible viscous fluid containing a spheroidal inclusion. By the consideration of these new fields which are discussed, an approximate expression of the macroscopic dissipation is obtained (see [5], [4]). Since the considered velocity field introduces some unknown kinematical parameters, a minimization procedure has to be performed in order to determine the macroscopic dissipation  $\Pi(\mathbf{D})$ ,  $\mathbf{D}$  being the macroscopic strain rate tensor.

New expressions of the macroscopic criteria of the porous medium (with prolate and oblate cavities) are derived from  $\Pi(\mathbf{D})$ . It is shown that the obtained results significantly improve existing criteria for ductile porous media. Moreover, for low stress triaxialities, these new results agree with the (non linear) Hashin-Shtrikman bound (see [7]).

For illustration purpose, consider here the particularly simple case of a porous medium with spherical cavities. In this case,  $f$  being the porosity and  $\sigma_0$  the yield stress of the solid matrix, the obtained macroscopic criterion takes the form :

$$\frac{\Sigma_{eq}^2}{\sigma_0^2} + 2f \cosh \left\{ \frac{1}{\sigma_0} \sqrt{\frac{9}{4}\Sigma_h^2 + \frac{2}{3}\Sigma_{eq}^2} \right\} - 1 - f^2 = 0 \quad (1)$$

(1) provides also the strongly remarkable property that the deviatoric equivalent stress  $\Sigma_{eq}$  enters with the hydrostatic stress  $\Sigma_h$  in the *cosh* term. For low values of  $\Sigma_h$ , the nonlinear Hashin-Shtrikman bound is recovered (see figure 1).

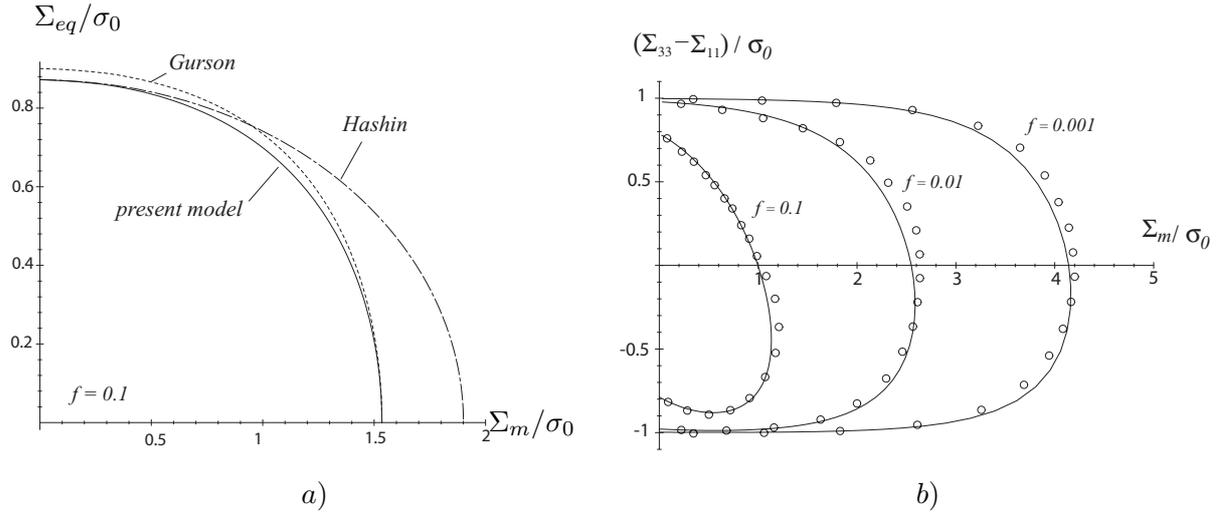


Figure 1: Yield surface of the porous material : a - case of spherical void : comparison of the proposed model (1) with the Gurson yield locus and the nonlinear Hashin-Shtrikman bound. Porosity  $f = 0.1$ . b - case of an oblate void,  $b_1/a_1 = 5$ . Comparison of the obtained results with "numerical" ones provided by Gologanu [2].

It also shown that in the general case of a spheroidal cavity, the developed approach leads also to some improvements of existing models, particularly in the case of the cracked plastic medium [4]. As an example of illustration, consider a porous medium with oblate voids subjected to an axisymmetric load. The obtained results are shown on figure 2 and are compared to numerical results provided by [2]. Current developments of the study concern the complete formulation of a ductile damage models based on the new macroscopic criteria.

## References

- [1] **J. D. Eshelby**, The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problem. *Proc. R. Soc. Lond. A* 241, 376-396, 1957.
- [2] **M. Gologanu, J.B. Leblond, G. Perrin and J. Devaux**. Recent extensions of Gurson's model for porous ductile metals. *Continuum Micromechanics*, ed. P. Suquet, Springer Verlag, 1997.
- [3] **A.L. Gurson**, Continuum theory of ductile rupture by void nucleation and growth: Part I. - Yield criterion and flow rules for porous ductile media. *J. Eng. Mat. Tech.* 99, 2-15, 1977.
- [4] **V. Monchiet**, Contributions à la modélisation micromécanique de l'endommagement et de la fatigue des métaux ductiles. *PhD Thesis, University Lille I*, 2006.
- [5] **V. Monchiet, E. Charkaluk and D. Kondo**, An improvement of Gurson-type models of porous materials by using Eshelby-like trial velocity fields. *C.R. Mécanique*, to be published, 2007.
- [6] **T. Mura**. *Micromechanics of Defects in Solids*. Martinus Nijhoff, Dordrecht. 1987.
- [7] **P. Ponte-Castañeda, P. Suquet**. Nonlinear composites. *Adv. Appl. Mech*, 34 : 171-302, 1998.

## Transformation de phase $\beta \rightarrow \alpha$ dans le zirconium : sélection des variants par minimisation de l'énergie de distorsion

Frank Montheillet\* et Pierre Barberis\*\*

\*Ecole des Mines de Saint-Etienne (SMS), CNRS UMR 5146

\*\*Centre de Recherche Areva/Cezus, UGINE

Lors de la transformation de phase  $\beta$  (cc)  $\rightarrow$   $\alpha$  (hc) des alliages de zirconium ou de titane, chaque grain  $\beta$  parent peut donner naissance à 12 "variants" cristallographiquement équivalents, définis par les relations de Burgers  $\{0001\}_{\alpha} // \{110\}_{\beta}$  et  $\{11\bar{2}0\}_{\alpha} // \{111\}_{\beta}$ . Par ailleurs, le changement de phase induit une déformation  $\boldsymbol{\varepsilon}^*$  (distorsion de Bain) correspondant à une énergie élastique stockée dans le matériau. En pratique, seul un petit nombre de variants est observé. Le critère de sélection proposé consiste à rechercher les combinaisons de N variants minimisant l'énergie élastique de distorsion. On montre que si l'on considère plus de 6 variants différents, le problème admet une infinité de solutions. Avec 6 variants, on obtient exactement 4 solutions distinctes. Si l'on ne dispose que de 5 variants ou moins, le minimum d'énergie ne peut pas être atteint, mais on peut s'en approcher de près en combinant seulement 3 variants. Dans ce cas, la solution optimale est obtenue quand les angles de désorientation minimale (parmi les 12 angles de rotation possibles) entre les trois variants pris deux à deux sont voisins de 60 degrés, ce qui semble en accord avec les observations expérimentales. Les limitations de cette approche, qui se situe dans le cadre de l'hypothèse des petites perturbations, seront également discutées.

# Hétérogénéités de déformation dans le Zircaloy-4 trempé bêta

N. Vanderesse, F. Montheillet, M. Darrieulat  
*Ecole des Mines de Saint-Etienne, Centre SMS, UMR CNRS 5146,  
158 cours Fauriel F-42023 Saint-Etienne cedex 2*

Le Zircaloy-4 est un alliage de zirconium utilisé dans l'industrie nucléaire comme élément de gainage du combustible. Il existe sous deux formes allotropiques, la phase bêta à haute température et la phase alpha à température ambiante. Une étape essentielle du procédé de mise en forme de ce matériau consiste à effectuer une trempe depuis le domaine bêta. Les relations cristallographiques gouvernant la transformation bêta  $\rightarrow$  alpha sont à l'origine d'une microstructure fortement anisotrope, dite de Widmanstätten. Elle se compose de lamelles de phase alpha, regroupées en paquets appelés colonies. Chaque ancien grain bêta est partitionné en plusieurs colonies, arrangées de manière complexe. Une nécessité du procédé industriel consiste à faire recristalliser cette microstructure par déformation dans le domaine alpha, de manière à obtenir une microstructure équiaxe dans le produit fini. L'évolution de la microstructure avec la déformation s'accompagne de fortes hétérogénéités qui compliquent les opérations de mise en forme.

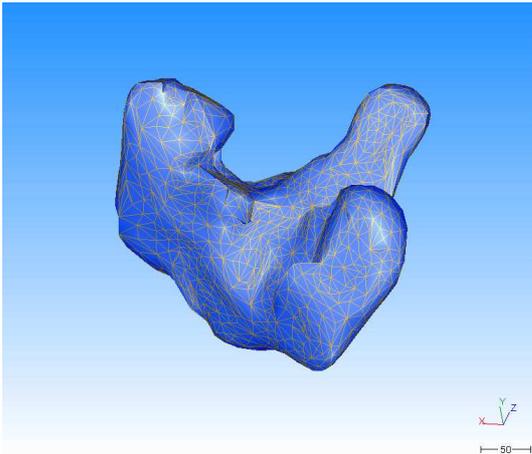


Figure 1 : reconstruction tridimensionnelle d'une colonie (TA6V).

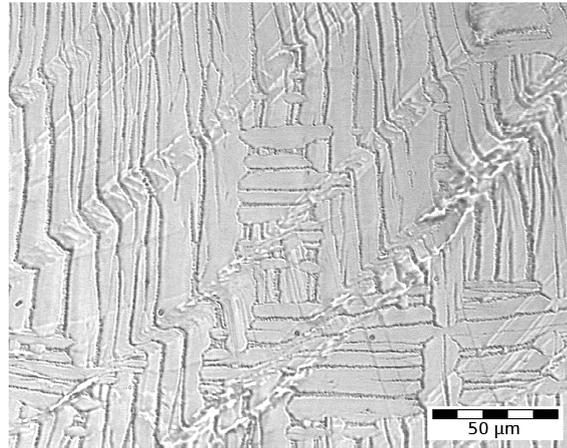


Figure 2 : bandes de cisaillement (Zircaloy-4).

Après avoir précisé l'organisation tridimensionnelle de la microstructure formée à la trempe (figure 1), sont présentés quelques types courants d'hétérogénéités de déformation et de recristallisation (figure 2). Leur influence sur l'évolution globale de la microstructure est ensuite discutée.