

#### Journée thématique MECAMAT organisées par les Groupes de Travail :

#### " APPROCHES PROBABILISTES EN MÉCANIQUE DES MILIEUX HÉTÉROGÈNES - RHÉOLOGIE DES MATÉRIAUX HÉTÉROGÈNES – TRAITEMENTS THERMOMÉCANIQUES "

3 et 4 mai 2010

**Université Paris-Est** 

PROGRAMME

	3 mai 2010
	Auditorium (Bâtiment Copernic)
9h00	Accueil (Bâtiment Copernic)
10h00	
10h00	Introduction
10h20	
10h20	<u>F. Hild et al. (</u> p5)
11h00	Modélisation probabiliste de l'amorçage de fissures en fatigue thermique et mécanique
11h00	A. Tanguy, T. Albaret, C. Fusco, B. Mantisi et Michel Tsamados (p8)
11h20	Analyse de la réponse mécanique à petite échelle de verres modèles: simulations de
	Dynamique Moléculaire et analyse statistique
11H20	L. Gélébart, JP Crocombette (p35)
11h40	Modélisation des joints de grain : de l'échelle atomique au comportement thermo-élastique
	polycristallin
11h40	<u>L. LE, G. Monnet, P. Franciosi (</u> p9)
12h00	Effet de la taille et de la densité des précipités sur le durcissement d'Orowan (simulations
	DDD).
	Déjeuner
14h00	F. Montheillet, D. Piot et G. Damamme (p10)
14h20	Modélisation de l'effet adoucissant de la migration des joints de grains pendant la
	recristallisation dynamique
14h20	<u>R. Logé, M. Houillon, V. Llorca, E. Massoni (</u> p13)
14h40	Mesure de densité de dislocations à partir d'essais de micro-dureté. Application au tantale
	déformé à froid.
14h40	M. Bernacki, R.E. Logé, P.O. Bouchard, T. Coupez (p14)
15h00	Utilisation de l'approche level-set pour la modélisation d'évolutions microstructurales dans
	les métaux
15h00	<u>S. Guessasma, S. Rjafiallah, N. Benseddiq, A. Frachon, M. Gratton (p16)</u>
15h20	Analyse multi-échelle du comportement mécanique des composites biopolymères
15h20	Pause café
15h50	
15h50	J. Escoda, F. Willot, D. Jeulin, J. Sanahuja, C. Toulemonde (p17)
16h10	Etude numérique des comportements mécaniques linéaires moyens et locaux d'une
	microstructure réelle de mortier à l'aide de la FFT
16h10	<u>P. Franciosi, R. Brenner, A. El Omri (</u> p18)
16h30	Estimation des propriétés élastiques de matériaux hétérogènes à phases co-continues à
	partir de structures fibrees et de structures laminees: comparaisons pour deux phases a
16h30	Y. Ben Ammar. A. Aoufi. M. Darrieulat (p19)
16h50	Micromécanique des colonies stratifiées dans le Zircalov-4 trempé bêta
16h50	<u>M. Priser, T. Parenteau, S. Pascal, P. Pilvin (p21)</u>
17h10	Simulations par EF d'agrégats polycristallins pour un analyse statistique de modèles à
	champ moyen

	4 mai 2010
	Auditorium (Bâtiment Copernic)
8h30	Accueil (Bâtiment Copernic)
9h00	
9h00	<u>K. Sab (</u> p22)
9h40	Homogénéisation des plaques aléatoires
9h40	<u>S. Pascal, F. Di Paola, C. Berdin (</u> p23)
10h00	Analyse de VER : une idée pour s'affranchir des effets de bords
10h00	<u>J. Yvonnet, Q. C. He (</u> p25)
10h20	Une approche par potentiels numériques pour le calcul des structures hétérogènes non
	linéaires
10h20	<u>C. Guerra, J. Scheibert, D. Bonamy, D. Dalmas (</u> p26)
10h40	Reconstruction expérimentale de la dynamique d'endommagement microscopique
	accompagnant la rupture dynamique des matériaux fragiles
10h40	Pause café
11h10	
11h10	É. Castelier, L. Gélébart, C. Lacour et C. Lantuéjoul
11h30	Modélisation de la fissuration dans les composites 1D : Comparaison de différentes
	approches.
11H30	L. Dormieux, D. Kondo
11h50	Une extension du modèle de Gurson incorporant les effets de contraintes interfaciales
11h50	V. monchiet, G. Bonnet
12h10	Effets de surfaces dans les milieux heterogenes non lineaires et
14600	V Maurel M Harvey L Rémy
14620	Ovide snallation on aluminide coatings for turbine blades
14h20	E Di Paola S Pascal C Berdin (n27)
14h20	Simulation du comportement thermo-élastique d'échantillons d'un, combustible nucléaire
141140	à particules
14h40	N. Billon, J. Bikard, E. Baguet (p29)
15h00	Modélisation thermomecanique visco hyperelastique des polymères amorphe a partir des
	théorie de réseau
15h00	S. Brissard, L. Dormieux et D. Kondo
15h20	Bornes d'Hashin-Shtrikman pour l'élasticité macroscopique des nanocomposites avec
	renforts sphériques et effets d'interface
15h20	Pause café
15h50	
15h50	<u>QС. Не</u>
16h10	Une approche simple, rigoureuse et unifiée pour modéliser les interfaces imparfaites
	linéaires
16h10	G. Marque, D. Pitard, N. Largenton, C. Toulemonde (p30)
16h30	De la RMN à la courbe de traction d'un élastomère
16h30	M. Salmi, F. Auslender, M. Bornert, M. Fogli (p32)
16h50	Encadrements améliorés des propriétés effectives d'un composite linéaire à fort contraste

**Résumés des présentations** 

#### Modélisation probabiliste de l'amorçage de fissures en fatigue thermique et mécanique

#### J. RUPIL<sup>a-b</sup>, L. VINCENT<sup>a</sup>, F. HILD<sup>b</sup>, S. ROUX<sup>b</sup>

#### a. CEA Saclay, DEN-DANS/DMN/SRMA/LC2M 91191 Gif sur Yvette cedex, France

## b. LMT-Cachan, ENS Cachan / CNRS / UPMC / PRES UniverSud Paris 61 avenue du Président Wilson, 94235 Cachan cedex, France

#### Résumé

Dans les centrales nucléaires, les canalisations sont des organes particuliers qui contribuent à la fois au fonctionnement de la centrale (transport du fluide modérateur et caloporteur) et à sa sécurité (refroidissement du cœur en cas d'arrêt volontaire ou d'incident). Or ces canalisations sont soumises à des sollicitations diverses : thermique, mécanique ou de corrosion. La fatigue thermique en particulier est une cause possible de fissuration. Ainsi, plusieurs incidents ont été rencontrés dans des circuits de centrales nucléaires imputables au problème de la fatigue thermique (Malésys, 2007).

Dans les canalisations, des zones de mélanges de fluides chaud et froid existent. Dans ces zones, localement, la paroi interne est soumise à des sollicitations thermiques hétérogènes répétées. Le chargement thermique appliqué en surface des canalisations par le fluide induit un gradient de température dans l'épaisseur d'autant plus important que la conductivité thermique du matériau est faible. C'est ce gradient couplé à la dilatation thermique du matériau qui est à l'origine des contraintes mécaniques qui vont entraîner l'endommagement de la structure. L'aspect cyclique du chargement d'origine thermique conduit alors naturellement à nommer ce phénomène « fatigue thermique ». Contrairement à un endommagement par fatigue thermique se traduit généralement par l'apparition d'un réseau de fissures surfaciques (en dehors des zones de concentrations de contrainte et/ou d'hétérogénéité de matériau comme les cordons de soudure par exemple). En effet, les sollicitations thermiques hétérogènes induisent un champ de contraintes également hétérogène avec notamment un fort gradient dans l'épaisseur de la tuyauterie. Ce gradient de contraintes dans l'épaisseur favorise l'arrêt de fissures et le multi-amorçage en surface, d'où la présence de réseaux de fissures ou « faïençage thermique ».

Récemment, un modèle a été proposé (Malésys et al., 2009) pour modéliser ce phénomène de multi-amorçage. Ce modèle est basé sur une approche probabiliste macroscopique de l'amorçage de microfissures de type Weibull (1951) ainsi que sur une modélisation probabiliste des interactions de type écrantage entre fissures (Denoual et al., 1997). Il fait suite d'une part, aux travaux expérimentaux (Maillot, 2004) menés sur la machine d'essai de fatigue thermique SPLASH (pour obtenir le nombre de cycles à l'amorçage en conditions de fatigue thermique) et une estimation du chargement thermomécanique à l'origine de cet endommagement par simulation (Amiable, 2005) et, d'autre part, aux travaux plus théoriques sur la modélisation probabiliste (Seyedi, 2004).

Une série d'essais de fatigue mécanique uniaxiaux a été menée sur l'acier inoxydable 304L. Lors de ces essais, l'évolution de l'endommagement par microfissuration est relevée par l'utilisation d'une technique global de corrélation d'images numériques (Besnard et al., 2006). Les résultats obtenus ont montré que la stratégie utilisée pour l'amorçage dans le modèle (Malésys et al., 2009) ne permettait pas d'obtenir des densités de fissures amorcées proches des résultats expérimentaux (Rupil et al., 2009). Une partie de ces résultats est alors utilisée pour identifier une nouvelle loi probabiliste fondée sur l'amorçage aléatoire de microfissures dans un ensemble de grains et la propagation de ces microfissures par coalescence entre les différentes microfissures amorcées.

Plusieurs auteurs (Hoshide et Socie, 1988, Bataille et Magnin, 1994, Osterstock, 2008) ont déjà montré à travers des simulations de type Monte Carlo que ce type de stratégie permettait de modéliser efficacement le multi-amorçage en surface en fatigue mécanique. Comme pour le modèle d'Osterstock (2008), une loi d'amorçage issue de simulations de dynamique des dislocations discrètes (Depres et al., 2004) est utilisée. Cette loi permettant d'obtenir le nombre de cycles à l'amorçage d'une fissure dans un grain pour un chargement uniaxial ou biaxial est probabilisée par l'utilisation de résultats de calculs polycristallins (Li et al., 2009, Sauzay, 2009) et par la prise en compte la variabilité de la profondeur des grains. Enfin, un critère de coalescence de type Lindborg (1969) est utilisé. L'évolution des densités de fissures pour plusieurs tailles de fissures peut alors être calculée. Il est possible de retrouver pour différents cas de chargements testés des densités de microfissures calculées proches des densités expérimentales (Figure 1). De plus, ce modèle simplifié permet également de retrouver qualitativement les résultats expérimentaux de Magnin et al. (1985) qui montrent l'évolution de fissures de plusieurs tailles lors d'un même essai (Figure 2).



Figure 1 : Comparaison modèle/essais sur l'évolution de la densité de fissures amorcées



Figure 2a : Relevés expérimentaux de densités de fissures amorcées en fatigue par Magnin (1985) pour un chargement macroscopique appliqué de  $\Delta \varepsilon_p = 0.8\%$ ,  $N_R = 7500$  cycles



Figure 2b : Densités de fissures amorcées obtenues par la loi probabiliste proposée pour un chargement macroscopique appliqué de  $\Delta \varepsilon_p$ = 0,8% et avec N<sub>R</sub> = 12750 cycles

#### Références

- AMIABLE, S. 2005. *Prediction de durée de vie de structures sous chargement de fatigue thermique*. Thèse de doctorat. Université de Versailles Saint Quentin.
- BATAILLE, A. & MAGNIN, T. 1994. Surface damage accumulation in low-cycle fatigue physical analysis and numerical modeling. *Acta Metallurgica et Materialia*, 42, 3817-3825.
- BESNARD, G., HILD, F. & ROUX, S. 2006. "Finite-Element" displacement fields analysis from digital images: Application to Portevin-Le Chatelier bands. *Experimental Mechanics*, 46, 789-803.
- DENOUAL, C., BARBIER, G. & HILD, F. 1997. A probabilistic approach for fragmentation of brittle materials under dynamic loading. *Comptes Rendus De l'Academie des Sciences, Série IIB*, 325, 685-691.
- DEPRES, C., ROBERTSON, C. F. & FIVEL, M. C. 2004. Crack initiation in fatigue: experiments and threedimensional dislocation simulations. *Materials Science and Engineering a-Structural Materials Properties Microstructure and Processing*, 387, 288-291.
- HOSHIDE, T. & SOCIE, D. F. 1988. Crack nucleation and growth modeling in biaxial fatigue. *Engineering Fracture Mechanics*, 29, 287-&.
- LI, Y. & BOMPARD, P. 2009. Communication personnelle.
- LINDBORG, U. 1969. A statistical model for linking of microcracks. Acta Metallurgica, 17, 521-&.
- MAGNIN, T., COUDREUSE, L. & LARDON, J. M. 1985. A quantitative approach to fatigue damage evolution in FCC and BCC stainless-steels. *Scripta Metallurgica*, 19, 1487-1490.
- MAILLOT, V. 2004. amorçage et propagation de reseaux de fissures de fatigue thermique dans un acier inoxydable austénitique de type X2 CrNi 18-09 (AISI 304L). Thèse de doctorat. Ecole Centrale de Lille.
- MALÉSYS, N. 2007. *Modélisation probabiliste de formation de réseaux de fissure de fatigue thermique*. Thèse de doctorat. Ecole Normale Supérieure de Cachan.
- MALÉSYS, N., VINCENT, L. & HILD, F. 2009. A probabilistic model to predict the formation and propagation of crack networks in thermal fatigue. *International Journal of Fatigue*, 31, 565-574.
- OSTERSTOCK, S. 2008. Vers la prédiction de l'apparition de réseaux de fissures : influence des paramètres microstructuraux sur la dispersion à l'amorçage, Thèse de doctorat, Ecole Centrale de Lille.
- RUPIL, J., MALÉSYS, N., VINCENT, L. & HILD, F. 2009. Contribution of mechanical fatigue experiments to the improvement of a probabilistic model for the formation of crack networks in thermal fatigue. *In: Proc.* 7<sup>th</sup> European Solid Mechanics Conference, Lisbonne, Portugal.
- SAUZAY, M. 2009. Communication personnelle.
- SEYEDI, S. M. 2004. formation, propagation et coalescence dns un reseau de fissures en fatigue thermique. Thèse de doctorat. Ecole Normale supérieure de Cachan.
- WEIBULL, W. 1951. A statistical distribution function of wide applicability. *Journal of Applied Mechanics-Transactions of the Asme*, 18, 293-297.

#### Analyse de la réponse mécanique à petite échelle de verres modèles:

#### simulations de Dynamique Moléculaire et analyse statistique

Anne Tanguy, Tristan Albaret, Claudio Fusco, Boris Mantisi et Michel Tsamados. Laboratoire LPMCN, université Lyon 1, 69622 Villeurbanne.

#### Résumé

Les simulations de Dynamique Moléculaire Classique permettent une analyse à l'échelle nanométrique de la dynamique locale dans un matériau soumis par exemple à une sollicitation mécanique. Nous présenterons dans cet exposé des résultats obtenus sur le réponse mécanique quasi-statique de matériaux désordonnés modèles (Verres de Lennard-Jones et modèles de silicium amorphe).

Nous montrerons que dans ces matériaux, le comportement élastique converge à l'échelle de la dizaine de nanomètres vers un comportement continu classique. Nous montrerons que la réponse plastique peut être appréhendée par une analyse ad hoc des modes propres de vibration, et des modules d'élasticité locaux. Enfin, nous discuterons l'influence de la directionalité des liaisons interatomiques sur la dynamique locale sous déformation mécanique.

## Effet de la taille et de la densité des précipités sur le durcissement d'Orowan (simulations DD)

#### LE Lu Tuan, FRANCIOSI Patrick

#### LPMTM CNRS UP13, MONNET Ghiath (EDF R&D, les Renardieres)

Résumé

A partir de calcul de Dynamique des Dislocation (DD), la contrainte nécessaire au franchissement de précipités incohérents par les dislocations est calculée, et comparée aux prédictions des modèles théoriques. Si la contrainte associée à une distribution régulière et périodique est relativement bien capté par ces modèles, l'effet de la distribution aléatoire reste difficile à incorporer dans ces modèles, d'où l'intérêt de faire appel à la DD pour déceler les domaines d'application des différents approches théoriques. Nous montrons que le problème du durcissement d'Orowan est à deux degrés de liberté : taille et espacement moyen des précipités. Nous étudions l'effet de chacun des paramètres sur le durcissement ainsi que sur la fiabilité des prédictions théoriques.

## Modélisation de l'effet adoucissant de la migration des joints de grains pendant la recristallisation dynamique

F. Montheillet\*, D. Piot\* et G. Damamme\*\*

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

\*\* CEA-DAM, Centre Ile de France, Bruyères-le-Châtel

#### Résumé

La recristallisation dynamique "discontinue" se produit au cours de la déformation plastique à chaud de nombreux métaux et alliages, tels que le cuivre, le nickel ou les aciers austénitiques. De nouveaux grains contenant une faible densité de dislocations germent et croissent au détriment des grains plus anciens et contenant des densités de dislocations plus élevées, ce qui produit une diminution de la contrainte d'écoulement du matériau. En outre, la migration des joints de grains conduit à l'annihilation des dislocations rencontrées, ce qui produit un adoucissement supplémentaire qui contrebalance en partie l'écrouissage du grain en cours de croissance. Ce mécanisme sera dénommé BMIS (boundary migration induced softening).

Un modèle de recristallisation dynamique a été développé sur la base de trois équations décrivant (i) la croissance (et décroissance) des grains, (ii) l'écrouissage et la restauration dynamique et (iii) la germination des nouveaux grains. Lorsque la relation (ii) a la forme d'une loi puissance  $d\rho/dt = H^{\nu+1}/\rho^{\nu}$  (où  $\rho$  désigne la densité de dislocations, et H et  $\nu$  sont deux paramètres), le régime stationnaire de la recristallisation dynamique peut être analysé de manière quasi-analytique, ce qui permet une étude détaillée de l'effet de la migration des joints de grains. De sa germination à sa disparition, l'histoire de chaque grain de l'agrégat polycristallin est décrite par les figures 1a (sans BMIS) et 1b (avec BMIS). Dans ces deux figures, on a porté en abscisse la densité de dislocations normalisée  $x = \rho/\overline{\rho}$ , où  $\overline{\rho}$  désigne la densité de dislocations moyenne du matériau au régime stationnaire (constante), et en ordonnée le diamètre du grain normalisé  $y = D/D^*$ , avec  $D^* = (2M\tau/\epsilon)\overline{\rho}^{\nu+2}/H^{\nu+1}$ , où M désigne la mobilité des joints de grains,  $\tau$  l'énergie de ligne des dislocations et  $\dot{\epsilon}$  la vitesse de déformation imposée.

La condition de stationnarité permet alors de déterminer la densité de dislocations moyenne sous la forme :

$$\overline{\rho} = \left[\frac{\left(\mathrm{H}^{\nu+1}\dot{\varepsilon}\right)^{3}}{4\mathrm{k}_{\mathrm{N}}\left(\mathrm{M}\tau\right)^{2}\mathrm{J}}\right]^{1/(3\nu+8)}$$
(1)

où k<sub>N</sub> est un paramètre caractérisant la cinétique de germination. On en déduit la contrainte d'écoulement stationnaire  $\sigma_s = \alpha \mu b \sqrt{\overline{\rho}}$  ( $\alpha \approx 1$ ,  $\mu$  est le module élastique de cisaillement, b le vecteur de Burgers). De même, la taille moyenne des grains s'exprime par :

$$D_{s} = \frac{2M\tau}{\dot{\epsilon}} \frac{\bar{\rho}^{\nu+2}}{H^{\nu+1}} \frac{K}{L}$$
(2)

Dans les relations (1) et (2), les facteurs J, K et L sont des fonctions du seul exposant v, dont l'expression est analytique en l'absence de BMIS.

Ces résultats peuvent être illustrés dans un diagramme log  $D_s - \log \sigma_s$  ("diagramme de Derby") qui montre que la contrainte d'écoulement stationnaire est une fonction puissance inverse de la taille de grain moyenne (figure 2). Le mécanisme de BMIS induit d'une part une décroissance de la contrainte (flèche verticale), d'autre part une augmentation de la taille de grain (flèche horizontale), mais ne modifie pas la pente de la courbe.



Figure 1. Evolution d'un grain au régime stationnaire sans BMIS (a) et avec BMIS (b)



Figure 2. Diagramme de Derby illustrant l'effet du mécanisme de BMIS

## Mesure de densité de dislocations à partir d'essais de micro-dureté. Application au tantale déformé à froid

R. Logé, M. Houillon, V. Llorca, E. Massoni

MINES ParisTech, CEMEF - Center for Materials Forming, CNRS UMR 7635, BP 207, 06904 Sophia Antipolis Cedex, France, <u>Roland.Loge@mines-paristech.fr</u>

Résumé

Parmi les différentes méthodes utilisées pour identifier les densités de dislocation totales, la mesure de micro-dureté apparaît comme une des plus simples d'un point de vue expérimental. Néanmoins, pour exploiter ces mesures, plusieurs ingrédients sont nécessaires : (a) une équation d'évolution de densité de dislocation totale en fonction de la déformation, (b) une loi de comportement reliée à cette densité de dislocations, et (c) une description de la vitesse de déformation moyenne lors d'un essai de microdureté. En combinant les relations, on arrive à exprimer la densité de dislocations initiale dans le matériau en fonction de l'indice de dureté Vickers du matériau, et d'un certain nombre de paramètres. La relation obtenue est appelée relation HDD (Hardness Dislocation Density).

L'astuce proposée pour identifier les paramètres de la relation HDD consiste à utiliser une simulation numérique de l'indentation par la méthode des éléments finis, en utilisant les équations d'évolution de densité de dislocations pour décrire la loi constitutive du matériau. Les simulations sont effectuées pour différentes valeurs de densité de dislocations initiales, ces valeurs étant normalisées par rapport à la densité de dislocations minimale d'un matériau recristallisé.

La loi HDD est calibrée par la méthode ci-dessus pour le tantale. On compare ensuite la distribution des duretés Vickers prédite par la simulation numérique d'un essais de compression avec celle mesurée expérimentalement suite à un essai de compression réel. L'accord obtenu entre prédiction et mesure est tout à fait raisonnable, étant donné le nombre d'approximations faites, la nature 'statistique' des mesures de microdureté, et les incertitudes liées au frottement avec les outils au cours de l'essai de compression réalisé expérimentalement.

## Level Set framework for the numerical modelling of microstructural evolutions in metals

M. Bernacki, R.E. Logé, P.O. Bouchard, T. Coupez

Mines ParisTech, CEMEF - Centre de Mise en Forme des Matériaux, CNRS UMR 7635, BP 207, 1 rue Claude Daunesse, 06904 Sophia Antipolis Cedex, France Marc.Bernacki@mines-paristech.fr

#### Résumé

Efforts aiming at improving the accuracy of the numerical predictions are now focusing on the modelling of microstructural phenomena that occur during the thermo-mechanical processing of metals and on the multi-scale coupling. The variety and complexity of these microstructural events render this modelling extremely challenging. Of course, the examples of such microstructural modelling could be multiply, but the essential steps of these microstructure scale approaches, in a FE context, are recurrent: the generation of a Representative Volume Element (RVE) of the considered microstructure, the generation of a finite element mesh adapted to this microstructure, the effect of the microstructure heterogeneities but also the topological evolution of this microstructure during the process and the improvement of macroscopic models resulting of this microscopic modelling.

The basic ingredients of the general micro model for metals developed at CEMEF are described in [1-5]. In this work, a new level set framework is proposed. It is shown that the proposed formulation, associated to adaptive anisotropic automatic remeshing, is an efficient and accurate tool to aboard the different steps described previously for several microstructural phenomena such as the recrystallization for polycristal (see Fig. 1), the zener pinning for polycristal with inclusions (see Fig. 2) or the modelling of ductile damage coming from the stages of nucleation, growth and coalescence of micro-voids.

#### Références

Bernacki M., Chastel Y., Coupez T. and Logé R.E., 2008, *Level set method for the numerical modelling of primary recrystallization in the polycrystalline materials*, Scripta Mater. 58, 12, pp. 1129-1132.
 Logé R.E., Bernacki M., Resk H., Delannay L., Digonnet H., Chastel Y., Coupez T., 2008, *Linking plastic deformation to recrystallization in metals, using digital microstructures*, Philosophical Magazine B, Vol. 88, Nos. 30–32, pp. 3691–3712.

[3] Bernacki M., Resk H., Coupez T., Logé R.E., 2009, *Finite element model of primary recrystallization in polycrystalline aggregates using a level set framework*, Modelling Simul. Mater. Sci. Eng., 17, 064006.
[4] Resk H., Delannay L., Bernacki M., Coupez T., Logé R.E., 2009, *Adaptive mesh refinement and automatic remeshing in crystal plasticity finite element simulations*. Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 17, 075012.
[5] Bouchard P.O., Bernacki M., Khaoulani R.E., Milesi M., 2009, *On the role of particles distribution on damage and fatigue mechanisms*. Int. J. Mater. Form., Vol. 2, Supp. 1, pp. 935-938.



Figure 1: A 3D ten grains microstructure after plastic deformation: (a) external surface view of stored energy; (b) anisotropic meshing in white, grain boundaries in black; external surface view of the stored energy for recrystallized volume fractions of (c) 1%, (d) 15%, (e) 58%, (f) 80%, (g) 95% and corresponding recrystallized front (hl).



Figure 2: Breaking effect, due to the presence of two spherical inclusions, on the growth of one spherical grain: (a) velocity magnitude on the grain surface (b) mesh on a cutting plane.

#### Analyse multi-échelle du comportement mécanique des composites biopolymères

S. Guessasma<sup>1</sup>, S. Rjafiallah<sup>1</sup>, N. Benseddiq<sup>2</sup>, A. Frachon<sup>3</sup>, M. Gratton<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Unité de recherche BIA, INRA, rue de la géraudière, 44316 Nantes, France

<sup>2</sup>Laboratoire de mécanique de Lille (UMR CNRS 8107), Université de Lille 1, BP179 59653 Villeneuve d'Ascq, France.

<sup>3</sup>LMR, ENIVL, rue de la chocolaterie, F-41034 Blois cedex, France

#### Résumé

L'étude du comportement mécanique des composites biopolymères renseigne sur les propriétés fonctionnelles des matrices alimentaires mais permet aussi de mieux comprendre l'usage nonalimentaire de matériaux biodégradables. Dans ce travail, nous démontrons que l'analyse du comportement élastique du composite amidon/zéine nécessite une démarche multi-échelle. En effet, l'identification du comportement des constituants par simulation éléments finis du test de nanoindentation révèle un comportement imparfait de l'interface amidon – zéine. A l'échelle de la microstructure, le comportement effectif est prédit grâce à l'implementation d'éléments 1D d'interface dans des microstructures réelles acquises par imagerie confocale. La loi effectif est ensuite implémentée à l'échelle d'éléments composants un modèle macroscopique pour simuler la flexion d'échantillons centimétriques. Le comportement mécanique du matériau hétérogène caractérisé par une viabilité macroscopique de la distribution des phases est donc prédit et discuté.

#### Homogénéisation par FFT et étude locale des champs élastiques d'une microstructure réelle de mortier

J. ESCODA<sup>1;2</sup>, F. WILLOT<sup>1</sup>, D. JEULIN<sup>1</sup>, J. SANAHUJA<sup>2</sup>, C. TOULEMONDE<sup>2</sup>

1 Centre de Morphologie Mathématique, Mathématiques et Systèmes, Mines Paristech, Fontainebleau, France 2 Département Matériaux et Mécanique des Composants, Électricité de France, Moret-sur-Loing,France julie.escoda@ensmp.fr

#### Résumé

La maîtrise des propriétés mécaniques des bétons est un point crucial dans l'établissement des dossiers de sûreté et de durée de vie des installations pour EDF. La diversité des béton rendant l'expérimentation illusoire, la modélisation est indispensable pour estimer le comportement à long terme, notamment en fluage. Ce travail a pour but de calculer, par des techniques d'homogénéisation numérique, les propriétés effectives de matériaux cimentaires multi-échelles comme le béton. Les matériaux considérés ici, de morphologie quelconque, sont formés de trois phases élastiques : granulats, pores, matrice. Les champs numériques locaux, pour des chargements en compression isotrope et en cisaillement, sont calculés par l'algorithme dit de "transformées de Fourier rapide", ou FFT ([1, 2]), qui permet de simuler le comportement de microstructures fortement résolues. La microstructure utilisée est obtenue par segmentation en trois phases d'une image 3D de mortier (réalisée par microtomographie). Nous considérons, pour des raisons méthodologiques, différents contrastes entre les modules d'Young des granulats et de la matrice (3, 100, 1000, 10000) ; le coefficient de Poisson vaut 0.2 dans ces deux phases. Le contraste le plus faible correspond à l'ordre de grandeur réel du contraste entre les propriétés élastiques des phases, et les autres contrastes permettent d'anticiper les besoins pour des calculs en fluage. Le champ de contraintes est ensuite caractérisé de manière statistique, par l'étude d'histogrammes d'invariants et de critères (Von Mises. critère d'endommagement), ainsi que par sa cartographie ; l'étude statistique des champs locaux permet par ailleurs de déterminer le Volume Élémentaire Représentatif du matériau ([3]).

#### Références

[1] MOULINEC, H., AND SUQUET, P. (1994). A fast numerical method for computing the linear and nonlinear mechanical properties of composites. Comptes rendus de l'Académies des sciences. Série II. 318, 1417–1423.

[2] MICHEL, J.-C., MOULINEC, H., AND SUQUET, P. (2001). A computational scheme for linear and nonlinear composites with arbitrary phase contrast. International Journal for Numerical Methods in Engineering. 52, 139–160.

[3] 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.

## Estimation des propriétés élastiques de matériaux hétérogènes à phases co-continues à partir de structures fibrées et de structures laminées: comparaison à résultats expérimentaux, numériques et calculs FFT

#### FRANCIOSI Patrick, BRENNER Renald

#### LPMTM CNRS UP13, ELOMRI Abderrahim, FST Tanger Maroc

#### Résumé

Les propriétés effectives de matériaux hétérogènes sont assez bien modélisées quand l'organisation spatiale des phases est de type matrice renforcée ou de type agrégat. C'est moins vrai pour les structures de type mousse, éponge, os, où deux (voire plusieurs) phases peuvent être co-continues sur un intervalle plus ou moins large de concentration. Des structures dites fibrées ou laminées particulières ont été proposées pour rendre compte de cette co-continuité. Nous proposons une modélisation fondée sur ces structures qui permette d'estimer les propriétés élastiques de divers matériaux biphasés en tenant compte de caractéristiques de co-continuité (totale, partielle ou nulle, symétrique ou non) des phases. Les estimations obtenues pour diverses structures, sont comparées à des estimations expérimentales, numériques, et par calculs FFT.

#### Micromécanique des colonies stratifiées dans le Zircaloy-4 trempé bêta

Yamen Ben Ammar, Asdin Aoufi, Michel Darrieulat

Ecole des Mines de Saint-Etienne, centre 'Sciences des Matériaux et des Structures', UMR CNRS n°5146 'Plasticité, Endommagement et Corrosion des Matériaux'

158, cours Fauriel 42023 Saint-Etienne cedex 02 tél : 04 77 42 02 00 mail : benammar@emse.fr

#### Résumé

Sous l'effet de la trempe depuis le domaine bêta, les grains de Zircaloy-4 se divisent en colonies dont certaines présentent une structure stratifiée [1]. Sous l'effet d'efforts compressifs apparaissent des phénomènes analogues aux plissements géologiques, quoiqu'à des échelles d'espace et de temps fort différentes : groupes de lamelles affectés par un cisaillement global et un glissement interlamellaire (voir Fig. 1).

Pour l'étude micromécanique, une colonie a été assimilée à une inclusion d'Eshelby [2] qui se déforme dans une matrice isotrope. Plusieurs géométries de déformation, correspondant à diverses hypothèses de la mécanique des plaques, sont possibles : ici c'est l'hypothèse d'un cisaillement qui a été retenue. La déformation a lieu dans le domaine plastique, aussi l'énergie emmagasinée dépend-elle à la fois du module d'Young et du coefficient d'écrouissage  $\mu^p$  du matériau. La résistance au glissement interlamellaire est assimilée à un frottement de Tresca : elle correspond à des zones de moindre résistance du matériau, crées par le dépôt de précipités de fer et de chrome lors de la transition bêta / alpha.

En soumettant l'ensemble à une compression uniaxiale il est possible d'écrire les variations de l'énergie globale du système. Un calcul par approximation de Galerkine montre que pour des lamelles parfaitement rectilignes, cette énergie ne peut que croître. Mais les lamelles naturelles présentent des défauts de courbure. Dans certaines conditions d'écrouissage ( $\mu^p$ ) et d'inclinaison ( $\psi$ ) entre la lamelle et la direction de la contrainte, ce défaut peut croître (Fig. 2) et entraîner le plissement qui conduit ultérieurement, avec l'entrée en jeu de la recristallisation, à la globulisation de la microstructure.



sous l'effet de la compression

à l'effort appliqué dans différentes conditions d'écrouissage

#### Références

[1] C. Chauvy, P. Barberis, F. Montheillet, 'Microstructrure transformation during warm working of beta-treated lamellar Zircaloy-4 within the upper  $\alpha$  range'. Mat. Sci. Eng A431 (2006) p. 59-67

[2] T. Mura, 'Micromechanics of Defects in Solids', Martinus Publishers, Dortrecht (1987), p 178

## Simulations par éléments finis d'agrégats polycristallins pour une analyse statistique de modèles à champ moyen.

Mathieu Priser (Doctorant AREVA - Laboratoire d'Ingénierie des Matériaux de Bretagne, Université de Bretagne-Sud, Lorient), Thomas Parenteau (LIMatB/UBS), Serge Pascal (DEN/DANS/DM2S/SEMT/LM2S, CEA Saclay), Philippe Pilvin (LIMatB/UBS).

#### Résumé

Cette étude concerne le comportement en fluage des alliages de zirconium, de structure cristallographique hexagonale. Ces alliages, étudiés à l'état recristallisé, sont utilisés dans les assemblages combustibles de réacteur de fission sous forme de plaques et de tubes. Ces composants sont élaborés par laminage et ont donc un comportement mécanique anisotrope que l'on peut tenter de décrire par des modèles polycristallins à champ moyen. Les étapes clés de ces approches micromécaniques sont : (i) la représentation statistique des orientations cristallines du polycristal, (ii) la description de l'écoulement viscoplastique et de l'écrouissage à l'échelle des grains et (iii) la règle de transition entre l'échelle macroscopique et les phases cristallines.

Dans le cadre du schéma auto-cohérent classique où chaque phase cristalline est en interaction directe avec le milieu homogène équivalent, de nombreuses lois de transition d'échelle ont été proposées. En l'absence de solutions rigoureuses pour un comportement élastoviscoplastique, la question de leur validité reste posée, surtout dans un contexte où l'anisotropie est marquée. Afin d'apporter des éléments tangibles à ce questionnement sur les règles de transition d'échelle, des calculs par éléments finis sur des agrégats polycristallins ont été mis en oeuvre. Des agrégats de forme cubique, contenant entre 343 (73) et 1000 (103) grains polyédriques, ont été générés par le code Cast3M. L'écoulement viscoplastique à l'échelle des grains est modélisé par le glissement thermiquement activé des dislocations vis sur les 3 systèmes prismatiques et l'écrouissage est gouverné par l'évolution des champs mécaniques moyens dans le grain central a été conduite en fonction de son orientation cristalline, de sa forme et des orientations cristallines de ses premiers voisins.



#### Homogénéisation des plaques aléatoires

Karam Sab

#### UR Navier, Ecole des Ponts ParisTech, 6-8 Avenue Blaise Pascal, cité Descartes, 77454 Marne-la-Vallée cedex 2, France

#### Résumé

The homogenization of elastic periodic plates has been studied by many authors. Two characteristic length scales coexist: the typical size L of the plate and its thickness t. Moreover, the in-plane periodicity of the structure introduces an additional characteristic length  $\varepsilon$  which describes the in-plane size of the unit cell that generates the plate by periodicity. For a fixed value of L, the homogenization problem consists in finding the asymptotic solution when t and  $\varepsilon$  tend to zero. As shown by Caillerie (1984), in the case where the in-plane size of the unit cell is comparable to the thickness of the plate (t~ $\varepsilon$ →0), the 3D heterogeneous body is replaced by a homogeneous Love-Kirchhoff plate whose stiffness constants are computed by solving an auxiliary boundary problem on the 3D unit cell.

In the present study, a generalization of the above mentioned approach is presented for the random case. The homogenized bending stiffness and the moduli for in-plane deformation of a plate cut from a block of composite material, considered to be a statistically uniform random material in the in-plane directions, are defined in four equivalent manners: a) the first definition considers statistically uniform stress and stress fields in the infinite plate. In the other definitions, a finite representative volume element of the plate is submitted to suitable b) stress boundary conditions c) strain boundary conditions and d) periodic boundary conditions. The relationships between these three definitions are studied and bounds are derived.

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

Serge PASCAL<sup>1</sup>, François DI PAOLA<sup>1,2</sup>, Clotilde BERDIN<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup> CEA Saclay, DEN/DANS/DM2S/SEMT/LM2S, 91191 Gif-sur-Yvette Cedex, France

<sup>2</sup> LMSS-Mat, École Centrale Paris, grande voie des vignes, 92290 Châtenay-Malabry, France

<sup>3</sup> LEMHE, ICMMO, Université Paris-Sud 11, 91400 Orsay, France

serge.pascal@cea.fr

#### Résumé

Le « calcul de microstructure » s'appuie sur la modélisation d'échantillons numériques de la microstructure d'un matériau, communément appelés Volumes Élémentaires Représentatifs « VER », pour analyser les mécanismes à l'origine de son comportement ou, plus simplement, pour le caractériser. Malgré les capacités informatiques actuelles, ces échantillons numériques demeurent d'une taille limitée et, pour un même cas de chargement, le choix des conditions aux limites (C.L.) influence significativement les résultats. Nous distinguons trois types de C.L.

Tout d'abord, les C.L. homogènes au contour permettent d'assurer un encadrement du comportement effectif de l'échantillon et vérifient le principe de macro-homogénéité [1]. Toutefois, ces C.L. offrent généralement un encadrement trop large des propriétés recherchées. Une alternative courante est d'utiliser des C.L. périodiques. Si ce choix permet d'obtenir exactement le comportement effectif de milieux périodiques, leur emploi dans le cas de milieux non périodiques relève d'une démarche purement empirique, « l'expérience » montrant que ces C.L. offrent une meilleure estimation des propriétés effectives [2]. Par ailleurs, leur mise en œuvre nécessite souvent la réalisation de maillages périodiques. L. GELEBART *et coll.* ont récemment proposé des C.L. mixtes normales [3], qui rationnalisent l'emploi courant de C.L. de type « faces planes », tout en assurant la conservation du principe de macro-homogénéité. Si, en relâchant les contraintes statiques et cinématiques imposées aux bords des échantillons, ce type de C.L. conduit à une estimation *a priori* plus précise de leur comportement effectif, rien ne permet d'apprécier la qualité de cette estimation.

L'idée que nous avons développée pour nous affranchir de ces « effets de bords » ne repose pas sur le choix d'un nouveau type de C.L. Partant du constat que les solutions obtenues en C.L. homogènes au contour diffèrent essentiellement aux bords des échantillons, notre idée a été de post-traiter ces solutions sur un sous-maillage érodé des bords. Celle-ci a été mise en œuvre dans le cadre de la thèse de F. Di Paola sur l'étude du comportement thermoélastique d'un combustible à particules de taille mono-disperse D. L'analyse des propriétés apparentes d'échantillons numériques de différentes tailles a montré que les solutions obtenues avec les deux C.L. homogènes au contour convergent vers la même valeur pour une profondeur d'érosion de l'ordre d'un rayon de particule. Cette convergence est également observée sur les densités de distributions de contrainte au sein des échantillons. En s'affranchissant ainsi des effets de bords, on peut explorer un volume de matière relativement

important, en sommant les contributions des différents échantillons. Mais cette méthode n'est pas exempte d'un certain biais : le chargement moyen sur le maillage érodé n'est pas tout à fait égal au chargement macroscopique imposé à l'échantillon. Toutefois, l'écart entre ces deux derniers diminue avec la taille des échantillons et converge vers une solution acceptable pour des échantillons de taille 5D dans le cas du combustible à particules étudié.

#### Références

[1] BORNERT (M.), BRETHEAU (T.) et GILORMINI (P.), « Homogénéisation en mécanique des matériaux 1 – Matériaux aléatoires élastiques », Paris, Hermès Science Publications, 2001.

[2] KANIT (T.), FOREST (S.), GALLIET (I.), MOUNOURY (V.) et JEULIN (D.), « Determination of the size of the representative volume element for random composites: statistical and numerical approach », Int. J. Solids and Struct. 40 (2003) 3647-3679.

[3] GELEBART (L), CHATEAU (C.) et BORNERT (M.), « Conditions aux limites mixtes normales », dans les actes du 19<sup>e</sup> Congrès Français de Mécanique, Marseille, 2009.

#### Une approche par potentiels numériques pour le calcul des structures hétérogènes non linéaires

J. Yvonnet, Q.-C. He

Université Paris-Est, Laboratoire Modélisation et Simulation Multi Echelle (MSME) UMR 8208 CNRS, 5 Bd Descartes, 77454 Marne-la-Vallée cedex 2, France.

#### Résumé

Une méthode numérique simple [1,2] est proposée pour calculer la réponse de structures composées de matériaux hétérogènes, non linéaires et arbitrairement anisotropes, en petites et grandes déformations élastiques. L'idée principale est de construire une représentation discrète de la fonction densité d'énergie de déformation moyenne, ou potentiel élastique effectif, associé à volume élémentaire représentatif. Le potentiel effectif est une fonction multidimensionelle des composantes du tenseur des déformations macroscopique, et ses valeurs peuvent être calculées numériquement par la méthode des éléments finis sur une grille de points discrets. Dans l'approche proposée, les composantes des contraintes et des tenseurs élastiques tangents peuvent être évaluées simplement en interpolant les valeurs nodales pré-calculées et en dérivant les fonctions interpolées. La technique est une méthode multi-échelle découplant les calculs aux deux échelles, contrairement à la majorité des méhodes proposées aujourd'hui de type "élements finis multi niveaux" [3]. Une fois les calculs microscopiques réalisés et le potentiel effectif numérique calculé, aucun nouveau calcul micro n'est nécessaire pour un nouveau calcul de structure (changement des conditions aux limites, de la géométrie, du maillage). Des méthodes d'interpolation multidimensionnelles efficaces sont proposées pour évaluer rapidement les contraintes et les matrices tangentes lors du calcul de structure. La méthode est illustrée pour des composites non lineaires en petites et grandes déformations.

**Mots clé**: Méthodes multi échelles, méthodes numériques, problèmes non linéaires, méthode de potentiels numériques explicites.

#### Références

[1] J. Yvonnet, D. Gonzalez, Q.-C. He, Numerically explicit potentials for the homogenization of nonlinear elastic heterogeneous materials, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 198:2723-2737 (2009).

[2] J. Yvonnet J., Q.-C. He, A non-concurrent multiscale method for computing the response of nonlinear heterogeneous structures, accepted in European Journal of Computational Mechanics, April 2010

[3] F. Feyel, « Multiscale FE2 elastoviscoplastic analysis of composite structure finite element modeling », *Comput. Mater. Sci.*, vol. 16, n° 1-4, p. 433-454, 1999.

## Reconstruction expérimentale de la dynamique d'endommagement microscopique accompagnant la rupture dynamique des matériaux fragiles

C. Guerra, J. Scheibert, D. Bonamy, D. Dalmas

Groupe Systèmes Complexes & Fracture IRAMIS /SPCSI Bat. 462 CEA Saclay 91191 Gif sur Yvette

#### Résumé

Un composite à matrice céramique (CMC) est constitué de fibres et de matrice en céramique. Lors d'un essai, ce matériau connaît une fissuration multiple et aléatoire, qui lui confère un comportement effectif endommageable.

Les modèles de fissuration des composites 1D proposés dans la littérature peuvent se classer en trois catégories :

- l'approche continue, qui s'applique à des composites de taille infinie ;

- l'approche Random Strength (RSA) qui consiste à discrétiser le

composite, et à affecter à chaque élément une limite à rupture aléatoire :

- l'approche Random Crack (RCA) qui génère aléatoirement chaque fissure,

sa contrainte à rupture et sa position.

Dans le cas d'un microcomposite, nous montrons que ces 3 approches donnent des résultats équivalents. Le microcomposite est un système modèle très simple. Il permet - de bien appréhender le processus de fissuration à partir d'une distribution aléatoire de défauts ;

- de comprendre comment un processus de fissuration aléatoire et multiple peut conduire à un comportement endommageable et déterministe à l'échelle du matériau.

## Simulation du comportement thermo-élastique d'échantillons d'un combustible nucléaire à particules

François DI PAOLA<sup>1,2</sup>, Serge PASCAL<sup>1</sup>, Clotilde BERDIN<sup>2,3</sup>

# <sup>1</sup> CEA Saclay, DEN/DANS/DM2S/SEMT/LM2S, 91191 Gif-sur-Yvette Cedex, France <sup>2</sup> LMSS-Mat, École Centrale Paris, grande voie des vignes, 92290 Châtenay-Malabry, France <sup>3</sup> LEMHE, ICMMO, Université Paris-Sud 11, 91400 Orsay, France <u>francois.di-paola@cea.fr</u>

#### Résumé

Le CEA dirige des études d'avant-projet sur un réacteur nucléaire à caloporteur gaz fonctionnant à haute température. Ces réacteurs sont basés sur un combustible nucléaire réfractaire, constitué de particules d' $UO_2$  revêtues de carbone pyrolytique et noyées dans une matrice de graphite. La fraction volumique de particules est de l'ordre de 45 %. On propose de caractériser le comportement et la distribution des champs mécaniques par des simulations de microstructures.

Pour ce faire, nous avons développé différents outils de modélisation de microstructures dans le code de calcul par éléments finis Cast3M. Les échantillons numériques sont réalisés à partir de tirages aléatoires des centres des particules, obtenus à l'aide d'un algorithme de croissance de sphères [1]. Le maillage de ces échantillons s'appuie sur les cellules de Voronoï associées aux centres des particules, ce qui permet d'obtenir des maillages respectant la topologie des interfaces des différents constituants. Près de deux cents échantillons numériques ont ainsi pu être réalisés.



Figure 1 : Conductivité thermique apparente en fonction de la taille des échantillons (en diamètre de particule).

Figure 2 : Répartition du coefficient de localisation de la contrainte hydrostatique (échantillon de taille 8D).

La caractérisation du comportement thermo-élastique du combustible (modules élastiques, conductivité et dilatation thermique) est réalisée en appliquant des conditions aux limites homogènes sur le contour, fournissant ainsi un encadrement des propriétés effectives de l'échantillon. Une estimation de ces propriétés effectives est obtenue en s'affranchissant des effets de bord par érosion du maillage (résumé de S. Pascal dans le même séminaire). On étudie l'influence de la taille de l'échantillon sur les résultats (Figure 1). L'hétérogénéité des champs mécaniques locaux (contraintes et déformations) est également analysée en déterminant leur densité de probabilité au sein de chaque phase sur une base de chargements thermo-mécaniques élémentaires (Figure 2).

#### Références

[1] DONEV (A.), STILLINGER (F.H.) et TORQUATO (S.) – « Neighbor List Collision-Driven Molecular Dynamics Simulation for Nonspherical Particles. I. Algorithmic Details II. Applications to Ellipses and Ellipsoids », *J. Comp. Phys*, **202** (2005), 737-764 (part I) and 765-793 (part II).

## Modélisation thermomécanique visco hyperélastique pour les polymères à partir des théories de réseau

N Billon, J Bikard, E Baquet

#### Résumé

On explore dans cette étude une nouvelle façon de construire un modèle visco hyperélastique. Le cadre général est la thermodynamique des processus irréversibles. L'originalité réside dans la construction des potentiels.

Ceux ci ne sont pas déduits de considérations phénoménologiques basées sur une décomposition, a priori, des contraintes ou déformations en processus élémentaires (élastique, visqueux etc.).

Basée sur nos observations expérimentales, le comportement du polymère est au contraire supposé centré sur potentiel hyper élastique auquel s'ajoute des effets anélastiques.

Ces derniers résultent d'une évolution des paramètres du potentiel, induits et contrôlés par l'énergie élastique stockée.

Les évolutions sont pilotées par une loi cinétique de telle sorte que les énergies soient conservées et donc que le 2ième principe reste vérifié.

Le choix est fait de prendre comme cœur un modèle de réseau, issu des approches de type statistique de chaîne, le modèle d'Edward – Vilgis.

A ce modèle est adjoint une source d'anélasticité déduite de considération sur les dé-enchevêtrements ou le blocage du réseau.

Le modèle rend compte des effets de vitesse, de température couplés, de dissipation thermique et peut être inclu dans une résolution thermomécanique complète avec un nombre restreint de paramètres qui conservent un sens physique.

Des exemples d'utilisation et d'identification couplée mécanique – thermique seront présentés.

#### De la RMN à la courbe de traction d'un élastomère

Grégory Marque, Domitille Pitard, Nathalie Largenton, Charles Toulemonde

EDF R&D, Département Matériaux et Mécanique des Composants

Site des Renardières, 77818 Moret-sur-Loing

#### Résumé

La caractérisation des propriétés mécaniques des élastomères est classiquement réalisée *via* des essais mécaniques macroscopiques destructifs nécessitant un prélèvement important de matière. Aujourd'hui, EDF s'intéresse, dans le cadre du suivi du vieillissement des câbles nucléaires, au développement d'une technique de contrôle non destructif permettant de suivre sur site l'évolution au cours du temps, des propriétés mécaniques des gaines et isolants.

Le principal mécanisme de dégradation impactant les propriétés mécaniques d'un élastomère est la scission des chaînes, scission qui conduit à l'évolution de la distribution des masses molaires entre nœuds de réticulation<sup>1,2</sup>. De récents travaux ont montré que la masse molaire entre nœuds de réticulation dans un élastomère modèle pouvait être déterminée expérimentalement par résonance magnétique nucléaire<sup>3,4</sup>.

Nous présentons ici l'outil numérique qui a été développé à EDF R&D sur la base de l'équation de Wu et Van der Giessen<sup>5</sup> afin de traiter l'information microscopique, obtenue par RMN, sur la masse molaire entre nœud de réticulation en termes de propriétés mécaniques à rupture. Cet outil permet, pour une distribution de masses molaires entre nœuds de réticulation donnée, de reproduire des essais de traction en prenant en compte l'élasticité non linéaire, la viscosité, la plasticité et en intégrant un critère de rupture des chaînes en fonction de leur taille (Figure 1).

Cet outil est aujourd'hui développé pour un élastomère modèle, les perspectives de ce travail sont l'identification des paramètres propres aux masses molaires entre nœuds de réticulation, la prise en compte de la cristallinité, et l'intégration du rôle des charges.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Verdu, J. . « Vieillissement des plastiques » (1984)

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Verdu, J.« Effect of aging on the mechanical properties of polymeric materials » *Journal of Macromolecular Science, Part A* <u>31</u> (1994) *1383 - 1398* 

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> <u>Saalwächter</u>, K.; <u>Ziegler</u>, P.; <u>Spyckerelle</u>, O.; <u>Haidar</u>, B.; <u>Vidal</u>, A.; <u>Sommer</u>, J.-U. « <u>H multiple-quantum</u> nuclear magnetic resonance investigations of molecular order distributions in poly(dimethylsiloxane) networks: <u>Evidence for a linear mixing law in bimodal systems</u> » *J. Chem. Phys.* **119** (2003) *3468-3482* 

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup> Saalwächter, K. « <u>Proton multiple-quantum NMR for the study of chain dynamics and structural constraints in</u> polymeric soft materials » *Progress in Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy* **51** (2007) *1-35* 

<sup>&</sup>lt;sup>5</sup> Wu, P.-D. ; Van der Giessen, E. « On improved network models for rubber elasticity and their applications to orientation hardening in glassy polymers » *J. Mech. Phys. Solids* **41** (1993) 427-456



Figure 1. Modélisation d'un essai dynamique de traction sur un polymère. Représentation du premier (---) et du second (---) cycle.

## Encadrements améliorés des propriétés effectives d'un composite linéaire à fort contraste

M. Salmi1, F. Auslender1, M. Bornert2, M. Fogli1

1 LaMI, Université Blaise Pascal / IFMA, BP 265, 63175 Aubière France, moncef.salmi@ifma.fr, {francois.auslender, fogli}@univ-bpclermont.fr

2 UR Navier, Ecole des Ponts ParisTech, Champs-sur-Marne, 77455 Marne-la-Vallee Cedex, France, michel.bornert@enpc.fr

#### Résumé

Cette étude présente de nouvelles bornes du comportement effectif des matériaux biphasés de type matrice inclusions à comportement linéaire élastique. Leur obtention repose sur une démarche inspirée conjointement des travaux d'Ostoja-Starjewski [1] et de Danielson et al [2]. Dans [1], Ostoja-Starjewski montre que les moyennes d'ensemble du comportement apparent d'un composite, pour des Conditions aux Limites (CL) en déplacements affines ou en contraintes homogènes, conduisent respectivement à une borne supérieure ou inférieure du comportement effectif - le comportement apparent correspondant au comportement macroscopique d'un volume élémentaire (VE) du composite, de forme carrée ou cubique, de taille  $\delta = L/d$ , L étant la longueur du coté, et d le diamètre des inclusions. L'écart entre les bornes supérieure et inférieure décroît d'autant plus que  $\delta$  augmente, tendant vers 0, une fois le comportement effectif atteint. Avec cette approche, dans le cas de forts contrastes entre les phases (e.g., particules rigides ou pores), l'écart entre les bornes demeure important, même pour de grandes valeurs de  $\delta$ , ceci étant du au fait que l'énergie de déformation provenant des particules intersectant la frontière du VE devient très importante quand des CL en déformations ou en contraintes homogènes sont appliquées directement aux particules rigides ou aux pores intersectés.

Afin de corriger cette limitation, nous considérons un VE construit à partir d'un assemblage de cellules de Voronoï, chaque cellule contenant une inclusion entourée de matrice, permettant ainsi d'éviter l'application directe des CL sur les inclusions. La génération de tels VEs est obtenu par une extension au cas de microstructures entièrement aléatoires du schéma proposé par Danielson et al [2]. Pour des microstructures stationnaires et ergodiques, un nouvel encadrement du comportement effectif est obtenu:

$$\left\langle \frac{V_{\delta \prime}}{\langle V_{\delta \prime} \rangle} S^t_{\delta \prime} \right\rangle^{-1} \leq \left\langle \frac{V_{\delta}}{\langle V_{\delta} \rangle} S^t_{\delta} \right\rangle^{-1} \leq S^{-1}_{eff} = C_{eff} \leq \left\langle \frac{V_{\delta}}{\langle V_{\delta} \rangle} C^d_{\delta} \right\rangle \leq \left\langle \frac{V_{\delta \prime}}{\langle V_{\delta \prime} \rangle} C^d_{\delta \prime} \right\rangle \qquad \forall \delta' \leq \delta$$

où  $\langle A \rangle$  désigne la moyenne d'ensemble d'une variable aléatoire A(.),  $C_{\delta}^{d}$  et  $S_{\delta}^{t}$  sont respectivement les tenseurs des modules et des souplesses d'un VE de taille  $\delta$ , soumis à des CL en déformations et en contraintes homogènes. Enfin,  $C_{eff} = S_{eff}^{-1}$  est le tenseur des modules effectifs. Les premières applications ont été conduites sur un biphasé constitué d'une matrice et de fibres

Les premières applications ont été conduites sur un biphasé constitué d'une matrice et de fibres identiques cylindriques, à section circulaire, de même orientation, distribuées aléatoirement dans le plan transverse. Chaque phase suit la loi de Hooke et le chargement est plan. Afin de simplifier le problème, seules les propriétés planes des comportements apparents et effectifs ont été considérées permettant ainsi une résolution 2D du problème local sous l'hypothèse des déformations planes. En raison de l'isotropie du comportement des phases et pour une distribution isotrope des fibres, les bornes supérieure et inférieure du comportement effectif sont aussi isotropes, et caractérisées, à d donné, uniquement par les modules de compressibilité  $K_{\delta}^{d,t}$  d et de cisaillement  $\mu_{\delta}^{d,t}$ , les indices d et t correspondant respectivement aux CL en déformations et en contraintes homogènes. La figure 1 représente l'évolution des nouvelles bornes du module de cisaillement effectif d'un matériau poreux, pour des VE composés de cellules de Voronoï (noté VOR) ainsi que les évolutions des bornes issues de la méthodologie d'Ostoja-Starzewski pour des VE de forme carrée (noté SC).



Figure 1: Représentation des bornes du module de cisaillement effectif  $\mu_{\delta}^{d,t}$  $\delta$  pour un matériau poreux en fonction de d

#### Références

[1] Ostoja-Starzewski, M., 1998. Random field models of heterogenous materials. Int. J. Solids and Struct. 35, 2429-2455.

[2] Danielsson, M., Parks, D., Boyce, M., 2007. Micromechanics, macromechanics and constitutive modeling of the elasto-viscoplastic deformation

of rubber-toughened glassy polymers. J. Mech. Phys. Solids 55, 533-561.

## Modélisation de la fissuration dans les composites 1D: Comparaison de différentes approches.

É. Castelier<sup>1</sup>, L. Gélébart<sup>2</sup>, C. Lacour, C. Lantuéjoul<sup>3</sup>

<sup>1</sup>CEA, DEN,DEC/SESC, Centre de Cadarache, 13108 St Paul lez Durance , France. etienne.castelier@cea.fr

<sup>2</sup> CEA, DEN, SRMA, Centre de Saclay 91191 Gif-sur-Yvette, France. lionel.gelebart@cea.fr

<sup>3</sup> MINESPARISTECH, 35 rue Saint Honoré, 77305 Fontainebleau France. christian.lantuejoul@ensmp.fr

Un composite à matrice céramique (CMC) est constitué de fibres et de matrice en céramique. Lors d'un essai, ce matériau connaît une fissuration multiple et aléatoire, qui lui confère un comportement effectif endommageable.

Les modèles de fissuration des composites 1D proposés dans la littérature peuvent se classer en trois catégories :

- l'approche continue, qui s'applique à des composites de taille infinie ;
- l'approche Random Strength (RSA) qui consiste à discrétiser le composite, et à affecter à chaque élément une limite à rupture aléatoire ;
- l'approche Random Crack (RCA) qui génère aléatoirement chaque fissure, sa contrainte à rupture et sa position.

Dans le cas d'un microcomposite, nous montrons que ces 3 approches donnent des résultats équivalents. Le microcomposite est un système modèle très simple. Il permet

- de bien appréhender le processus de fissuration à partir d'une distribution aléatoire de défauts ;
- de comprendre comment un processus de fissuration aléatoire et multiple peut conduire à un comportement endommageable et déterministe à l'échelle du matériau.