

EVOLUTIONS SPATIALES ET TEMPORELLES DES PROPRIETES MICROSTRUCTURALES : QUELQUES MODELISATIONS MECANIKES

Y. Monerie, *Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire & Laboratoire MIST, CE Cadarache, bât. 702, BP3-13115 Saint-Paul-lez-Durance. Téléphone : 04 42 19 96 17. Adresse électronique : yann.monerie@irsn.fr*

Mots clés : Microstructures, Homogénéisation, Fissuration, Vieillissement.

1 INTRODUCTION

Le vieillissement naturel (air, eau de mer, corrosion, etc.) ou induit (ambiances corrosives, attaques chimiques, radioactivité, etc.) des ouvrages, des structures industrielles ou des infrastructures de transport sont aujourd'hui un enjeu fort des recherches théoriques et appliqués en mécanique des matériaux. Dans le domaine de l'énergie, notamment nucléaire, cette problématique est particulièrement marquée, les centrales arrivant progressivement aux échéances pour lesquelles elles avaient été initialement dimensionnées. Les marges estimées a priori à la conception de ces structures doivent aujourd'hui être réévaluées finement.

Cette thématique "vieillissement" englobe les problèmes de fatigue du point de vue des chargements, mais s'en différencie principalement par des évolutions microstructurales : apparition de précipités, modifications des tenues interfaciales dans les milieux composites, germination-croissance-coalescence de cavités, naissance de gradients microstructuraux, etc. Pour fixer un peu naïvement les idées, la prédiction d'une propriété effective P_{eff} à partir de données microstructurales m (fractions volumiques, distribution spatiale, propriétés des phases) s'obtient par des méthodes de changement d'échelles : $P_{\text{eff}} = P_{\text{eff}}(m)$. L'analyse du vieillissement de cette propriété consiste à estimer a minima sa dérivée temporelle :

$$\frac{\partial P_{\text{eff}}}{\partial t} = \frac{\partial P_{\text{eff}}}{\partial m} \frac{\partial m}{\partial t}.$$

Le terme $\partial m / \partial t$ relève souvent de la physico-chimie ou de la physique du solide ; il s'agit essentiellement de données métiers. Le terme $\partial P_{\text{eff}} / \partial m$ relève de la mécanique des matériaux. Ces problèmes sont délicats, notamment dans le cas d'une multiphysique couplée même simple (on peut penser par exemple à la poromécanique), les évolutions microstructurales étant souvent doublées d'une microstructure induite (bandes de plasticité, fissuration, etc.). Aucune technique générique n'est actuellement disponible et les problèmes sont traités principalement au cas par cas, visant à comprendre l'effet des évolutions temporelles et spatiales de propriétés microstructurales sur les comportements effectifs. Cette communication illustre cette démarche pour deux cas particuliers issus de la sûreté nucléaire : les propriétés apparentes de rupture pour un milieu à gradient de propriétés et la perméabilité d'un milieu polydispersé cimenté ; ces deux propriétés sont recherchées des domaines admissibles de variation pour les propriétés microstructurales.

2 FRAGILISATION DES GAINAGES DE COMBUSTIBLE NUCLEAIRE HYDRURES ET IR-RADIES

Du point de vue de la sûreté, les gainages de combustible constituent la première barrière de confinement des matières nucléaires. Leur analyse s'axe donc autour des conditions d'une éventuelle perte de leur intégrité : amorçage et propagation de multifissure, émergence d'une fissure principale, ruine. Les non linéarités associées à ces mécanismes adoucissants sont actuellement trop sévères pour être envisagées sous l'angle des techniques d'homogénéisation purement analytiques. Une démarche multiéchelle couplant approche analytique et numérique est présentée ici.

2.1 Une démarche multiéchelle cohésive-volumique pour l'analyse de la rupture des milieux à gradient de propriétés

Durant leur vie en réacteur, les gainages de Zircaloy passent progressivement d'un matériau monophasé métallique à un matériau multicouche à gradient de propriétés. Ce dernier est constitué d'une matrice métallique ductile et d'inclusions d'hydrures majoritairement alignées et distribuées aléatoirement (FIG. 1). La prédiction de la multifissuration et de la rupture de tels matériaux requiert des approches mécaniques dédiées telles que l'**approche multiéchelle cohésive-volumique**. Cette dernière permet l'analyse de la rupture des milieux hétérogènes possédant une évolution spatiale des paramètres microstructuraux : le matériau à gradient de propriétés est considéré en chaque point comme un biphasé dont la fraction volumique d'inclusions évolue spatialement. Son comportement équivalent est scindé en une partie *durcissante* (e.g. élastoplastique) traitée par des méthodes d'homogénéisation analytiques et en une partie *adoucissante* (e.g. endommagement, fissuration) traitée par homogénéisation numérique. Le principe de cette méthode est illustré sur la FIG. 2.

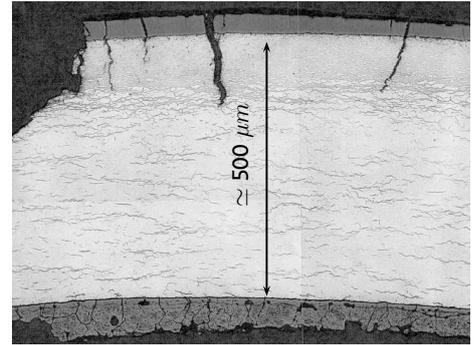


FIG. 1 – Micrographie d'une gaine de Zircaloy hydruré après rupture volontaire.

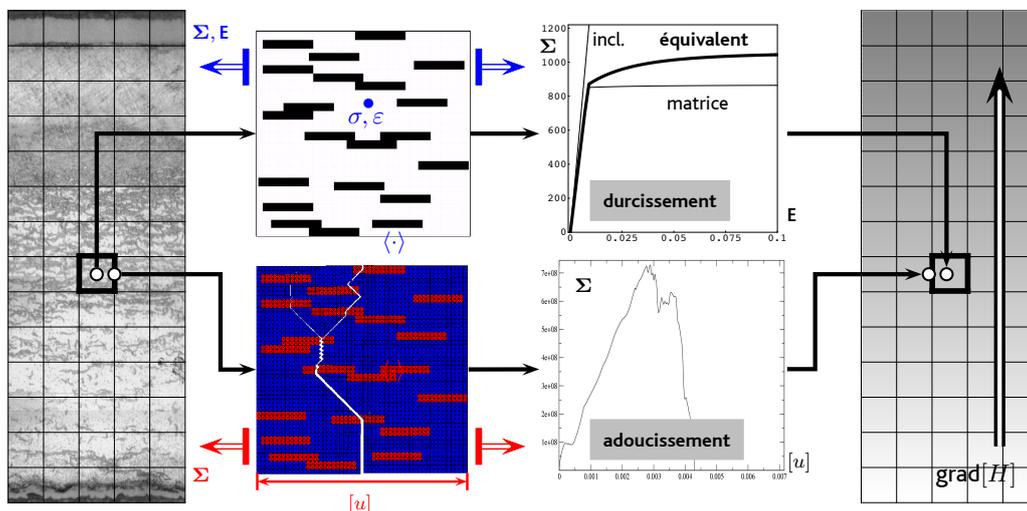


FIG. 2 – Principe de la méthode de changement d'échelles cohésive-volumique pour les matériaux à gradient de propriétés. A gauche : échelle microscopique, les comportements volumiques et surfaciques sont estimés par des techniques d'homogénéisation pour les composites aléatoires non linéaires. A droite : échelle macroscopique, les comportements volumiques et surfaciques estimés à l'échelle inférieure sont introduits à l'échelle macroscopique pour une distribution spatiale donnée du paramètre microstructural (ici la teneur en inclusions).

Cette démarche multiéchelle nécessite de s'appuyer sur des modèles locaux de fissuration. Les modèles cohésifs sont de bons candidats pour rendre compte de certains mécanismes d'endommagement et de fissuration dans les matériaux : ces mécanismes sont décrits au travers d'une loi surfacique donnant l'effort de résistance à la séparation en fonction de l'écartement de lèvres de fissure ou de cavités en train de se créer. La stratégie de modélisation numérique consiste alors en une décomposition du milieu continu en un système multicorps (les mailles ou groupes de mailles dans une discrétisation aux éléments finis), chaque corps interagissant avec ses voisins via une loi de cohésion : l'approche *éléments finis cohésifs-volumiques*. Le comportement global du matériau est décrit par le comportement volumique de chacun des corps auquel vient se superposer le comportement surfacique de la zone cohésive. Cette double description permet une modélisation des phénomènes d'endommagement aussi bien que de fissuration.

Cette approche cohésive-volumique soulève plusieurs difficultés d'ordre numérique et théorique pour lesquels les principaux remèdes sont rapidement évoqués ci-dessous (Monerie, 2010).

1. **Pertinence matérielle.** La pertinence matérielle de ce découpage — réalisé a priori pour convenance numérique — d'un comportement global de type élasto-visco-plastique en une partie volumique purement durcissante et en une partie surfacique résumant l'ensemble des processus

adoucissants a été illustrée par Richefeu et al. (2012) et Wen (2012). Ces auteurs ont notamment montré qu'il est possible d'associer expérimentalement la forme d'un modèle cohésif à la réponse macroscopique des matériaux, justifiant ainsi les règles empiriques utilisées par les numériques selon que le comportement global visé est ductile ou quasi-fragile (e.g. de Borst et al. (2006)).

2. **Sensibilité au maillage.** Comme pour tout modèle adoucissant, les modèles cohésifs exhibent une dépendance à la taille de maille. Blal et al. (2011, 2012b,a) ont récemment proposé des critères micromécaniques permettant de rendre la réponse apparente des modèles cohésifs insensible à la taille de maille pour des topologies de maillage régulières ou isotropes. Ces critères étendent à tout taux de triaxialité les critères semi-empirique antérieurement établis par Espinosa et Zavattieri (2003) et Tomar et al. (2004).
3. **Instabilité.** L'adoucissement surfacique associé aux modèles cohésifs rend le problème mal posé et des instabilités peuvent apparaître par perte d'unicité de la solution (Monerie et Acary, 2001). Trois grandes classes de solutions peuvent être proposées (Chaboche et al., 2001) : les régularisations spatiales, les régularisations visqueuses, les régularisations dynamiques.
4. **Interpénétrabilité, mixité locale.** L'analyse de matériaux hétérogènes de constituants de coefficients de Poisson distincts induit une mixité des modes de fissuration aux interfaces entre phases pouvant engendrer une interpénétrabilité des mailles de l'approche multicorps (Comninou, 1977). Cette mixité impose la prise en compte de conditions non régulières de type contact frottant dans les modèles cohésifs (Perales et al., 2010).

A ces problèmes spécifiques aux modèles cohésifs s'ajoute la problématique plus générale de la recherche de Volume Elémentaires Représentatifs (VER) pour les matériaux hétérogènes. En s'appuyant sur les méthodes géostatistiques de Matheron (1971), Kanit et al. (2003) ont proposé une démarche systématique pour les comportements linéaires : une estimation convenable de la moyenne d'espace $\langle Z \rangle$ d'une variable aléatoire peut être obtenue soit par prise de moyenne sur un VER très grand (en toute rigueur infini), soit par moyenne d'ensemble d'un nombre N suffisant de réalisations sur des VER de volume $|V|$ plus réduits. La notion de "suffisant" doit être comprise au sens d'une erreur relative ϵ_{rel} commise sur la valeur moyenne exacte M du processus aléatoire $\langle Z \rangle$. Plus précisément, Kanit et al. (2003) exhibent dans ce dernier cas la relation suivante :

$$N = \frac{4D_Z^2(V)}{\epsilon_{\text{rel}}^2 M^2} = \frac{4D_Z^2}{\epsilon_{\text{rel}}^2 M^2} \left(\frac{\mathcal{A}}{|V|} \right)^{\alpha_Z} \quad (1)$$

où $D_Z^2(V)$ est la variance de $\langle Z \rangle$, D_Z^2 la variance ponctuelle, α_Z un exposant (égal à 1 dans le cas des variables scalaires additives) et \mathcal{A} est la portée intégrale de la variable aléatoire Z . Cette relation est claire : le nombre de réalisations N nécessaire pour atteindre une précision donnée ϵ_{rel} décroît lorsque la taille du VER considéré augmente. Cette relation a été étendue aux cas des comportements en fissuration par Pelissou et al. (2009).

Cette méthode cohésive-volumique multiéchelle est utilisée ici dans le cadre de la fissuration des matériaux à gradient de propriétés, l'application visée concernant le Zircaloy hydruré. La modélisation de ce type de biphasés à matrice ductile et à inclusions fragiles dont la teneur varie spatialement est effectuée par changement d'échelles. A l'échelle locale, pour une fraction volumique d'inclusions donnée, sont estimés les comportements homogènes équivalents volumiques (élastoplasticité à écrouissage positif) et surfaciques (modèle cohésif apparent). Une estimation analytique de l'évolution de ces comportements avec le taux d'inclusions est recherchée et introduite à l'échelle globale dans une approche cohésive-volumique. Ces deux étapes locales et globales sont maintenant précisées.

2.2 Comportements équivalents à l'échelle locale

2.2.1 Échelle locale : le comportement volumique durcissant.

La recherche du comportement élastoplastique équivalent du Zircaloy hydruré et irradié relève de l'homogénéisation des matériaux composites anisotropes à matrice métallique. L'origine microscopique de cette anisotropie est double : une origine matérielle — l'anisotropie plastique de la matrice — et une origine morphologique — la forme et l'alignement des inclusions. Plus précisément, les modèles développés dans ce cadre concernent les composites à matrice élastiquement isotrope et plastiquement orthotrope obéissant à un critère de Hill et contenant des inclusions parallélépipédiques élastiques isotropes alignées et distribuées aléatoirement (Vincent et al., 2010). Pour des chargements monotones radiaux, le comportement élastoplastique de la matrice est modélisé en théorie de la déformation. En notant par un exposant 1 (resp.

2) les propriétés de la matrice (resp. des inclusions) et en adoptant une approche en contraintes, les comportements microscopiques de ces phases dérivent des potentiels suivants ($i = 1, 2$):

$$\psi^{(i)}(\boldsymbol{\sigma}) = \psi_{\text{ela}}^{(i)}(\boldsymbol{\sigma}) + \psi_{\text{pla}}^{(i)}(\boldsymbol{\sigma}) \quad \text{avec} \quad \psi_{\text{ela}}^{(i)}(\boldsymbol{\sigma}) = \frac{1}{2k^{(i)}}\sigma_m^2 + \frac{1}{6\mu^{(i)}}(\sigma_{\text{eq}}^{\text{VM}})^2 \quad (2)$$

avec $\psi_{\text{pla}}^{(2)} = 0$ et où $k^{(i)}$ et $\mu^{(i)}$ sont respectivement les coefficients de compressibilité et de cisaillement de la phase i , $\sigma_{\text{eq}}^{\text{VM}} = \sqrt{\frac{3}{2}(\boldsymbol{\sigma}_{\text{dev}} : \boldsymbol{\sigma}_{\text{dev}})}$ désigne la contrainte équivalente de von Mises. Le comportement anisotrope plastique de la matrice suit une loi de Ramberg-Osgood multiaxiale :

$$\psi_{\text{pla}}^{(1)}(\boldsymbol{\sigma}) = \frac{(\sigma_0^{(1)})^2}{6\mu^{(1)}} H(\sigma_{\text{eq}}^{\text{H}} - \sigma_0^{(1)}) \left[\frac{2}{n+1} \left(\left(\frac{\sigma_{\text{eq}}^{\text{H}}}{\sigma_0^{(1)}} \right)^{n+1} - 1 \right) - \left(\left(\frac{\sigma_{\text{eq}}^{\text{H}}}{\sigma_0^{(1)}} \right)^2 - 1 \right) \right]$$

où H est la fonction de Heavyside, n le coefficient d'écroutissage, $\sigma_0^{(1)}$ la limite d'élasticité de la matrice et $\sigma_{\text{eq}}^{\text{H}} = \sqrt{\frac{3}{2}(\boldsymbol{\sigma}_{\text{dev}} : \mathbb{M} : \boldsymbol{\sigma}_{\text{dev}})}$ indique la contrainte équivalente de Hill (le tenseur du quatrième ordre \mathbb{M} est la matrice d'anisotropie). Le comportement effectif contrainte-déformation $\boldsymbol{\Sigma} - \mathbf{E}$ de ce biphasé anisotrope est obtenu à l'aide de la méthode variationnelle de Ponte Castañeda (1991). Sous sa forme sécante modifiée (Suquet, 1995), cette méthode conduit à la résolution d'un problème de point fixe (exposant k pour les itérations, volume occupé par la matrice $V^{(1)}$ et fraction volumique $f^{(1)}$)

$$\begin{array}{l} \text{Entrée: } \boldsymbol{\Sigma}, \quad \text{Initialisation: } \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_{V^{(1)}}^0 = (1/2)\boldsymbol{\Sigma} \otimes \boldsymbol{\Sigma} \\ \text{Itération } k: \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{boucle jusqu'à convergence du critère} \\ \left\| \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_{V^{(1)}}^k - \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_{V^{(1)}}^{k-1} \right\| \leq \delta \left\| \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_{V^{(1)}}^k \right\| : \\ \mathbb{L}_0^{(1)k} = \mathbb{L}_{\text{sct}}^{(1)} \left(\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_{V^{(1)}}^{k-1} \right), \quad \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_{V^{(1)}}^k = \frac{1}{f^{(1)}} \frac{\frac{1}{2} \partial (\boldsymbol{\Sigma} : \mathbb{L}_0^{\text{hom}} : \boldsymbol{\Sigma})}{\partial \mathbb{L}_0^{(1)k}} \end{array} \right. \\ \text{Sortie: } \mathbf{E} = \mathbb{L}_0^{\text{hom}} : \boldsymbol{\Sigma} \end{array}$$

où $\langle \bullet \rangle_{\mathcal{D}}$ indique la moyenne sur un domaine \mathcal{D} , $\mathbb{L}_{\text{sct}}^{(1)}$ est la souplesse sécante de la matrice du composite linéaire de comparaison (CLC) $\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbb{L}_{\text{sct}}^{(1)} : \boldsymbol{\sigma}$ et $\mathbb{L}_0^{\text{hom}}$ est la souplesse effective de ce CLC.

Ce modèle a été validé de manière très satisfaisante sur des simulations numériques par éléments finis et comparé, dans le cas du Zircaloy à fort taux de combustion, à des résultats expérimentaux. Un exemple de ces comparaisons est donné sur la FIG. 3 où une approche *enveloppe* sur les paramètres morphologiques a été associée à une approche de type *best-estimate*, dans un soucis de fournir des informations exploitables en termes de sûreté nucléaire.

Ces comparaisons indiquent qu'il est judicieux de distinguer les effets de l'irradiation de ceux de l'hydruration. L'apparition progressive d'inclusions d'hydrures avec le taux de combustion accroît l'anisotropie initiale de manière plus significative qu'il ne l'est observé expérimentalement. Ainsi, en suivant les constatations expérimentales de Nakatsuka et Nagai (1987), l'hypothèse est formulée que l'irradiation tend à rendre progressivement la matrice plus isotrope : les défauts d'irradiation sont spatialement aléatoires. Pour tenir compte de cet effet, une nouvelle matrice d'anisotropie $\tilde{\mathbb{M}}$ est substituée à \mathbb{M} dans le critère de Hill : $\tilde{\mathbb{M}} = (1 - \alpha)\mathbb{K} + \alpha\mathbb{M}$, où le paramètre α permet de passer progressivement d'un critère de Hill ($\alpha = 1$) à un critère de von Mises ($\alpha = 0$). L'introduction de ce tenseur $\tilde{\mathbb{M}}$ a pour but d'estimer l'effet de l'anisotropie plastique de la matrice sur le comportement du composite en faisant varier le scalaire α . La souplesse sécante de la matrice s'écrit alors :

$$\mathbb{L}_{\text{sct}}^{(1)}(\boldsymbol{\sigma}) = \mathbb{L}_{\text{ela}}^{(1)} + \frac{1}{2\mu^{(1)}} \left[\left(\left(\frac{\sigma_{\text{eq}}^{\text{H}}}{\sigma_0^{(1)}} \right)^{n-1} - 1 \right) \tilde{\mathbb{M}} : \mathbb{K} \right] H(\sigma_{\text{eq}}^{\text{H}} - \sigma_0^{(1)}) \quad (3)$$

L'anisotropie globale du Zircaloy fortement irradié et hydruré est alors convenablement reproduite en adaptant simultanément la forme des inclusions d'hydrures et le degré d'anisotropie plastique de la matrice de Zircaloy. Il a été montré que l'anisotropie plastique macroscopique observée expérimentalement ne pouvait s'expliquer que par une diminution d'au moins 90% de l'anisotropie initiale de la

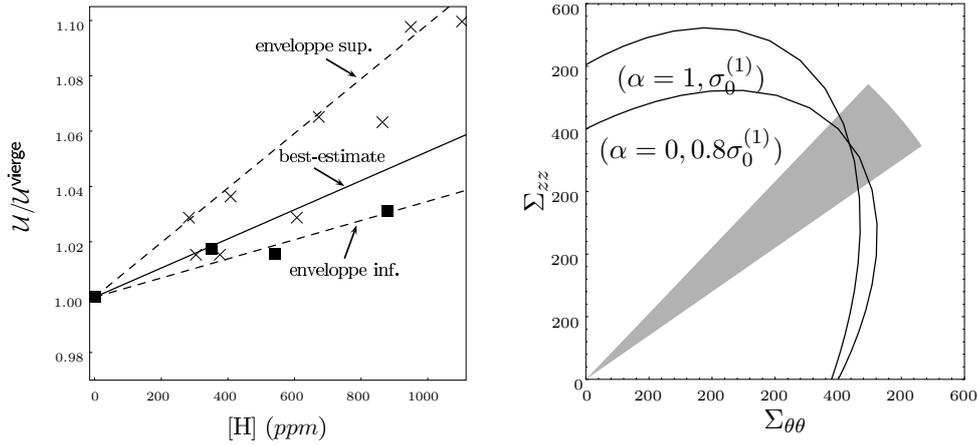


FIG. 3 – Comportement du Zircaloy hydruré à l'échelle microscopique. A gauche : évolution de la contrainte maximale longitudinale normalisée en fonction de la teneur en hydrogène ; comparaison entre des données expérimentales (carrés : Kuroda et al. (2002) ; croix : Grange et al. (2000)) et les prédictions du modèle micromécanique pour différents rapports morphologiques. A droite : recherche d'un critère de plasticité isotrope équivalent pour un domaine de taux de triaxialité ciblé.

matrice. Dans le cas limite où la matrice est entièrement isotrope élastiquement et plastiquement, un modèle *analytique* a pu être obtenu pour le Zircaloy à fort taux de combustion sur la base d'une correction du modèle micromécanique de Li et Ponte Castañeda (1994). Il a pu être montré que, dans la plage des triaxialités correspondant à certaines situations accidentelles, un modèle de von Mises possédant une limite d'élasticité 20% plus faible que celle mesurée expérimentalement sur des essais de traction dans la direction axiale des tubes de gainage était convenable (FIG. 3, à droite).

2.2.2 Échelle locale : le comportement surfacique adoucissant. On s'intéresse ici au comportement en fissuration du Zircaloy irradié et hydruré à l'échelle locale. L'objectif est d'être en mesure de fournir à l'échelle du calcul des structures une énergie de rupture équivalente pour tout taux d'inclusions. Sur la base de simulations par approche cohésive-volumique, un modèle analytique basé sur la notion de composite de comparaison évolutif est proposé. L'approche cohésive-volumique est employée dans le cadre d'une formulation périodique (Perales et al., 2008) et pour des VER en traction unidirectionnelle (correspondant à un chargement de type orthoradial pour le gainage, voir FIG. 4).

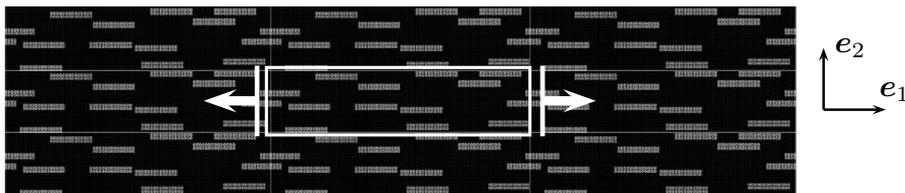


FIG. 4 – Illustration des microstructures considérées pour l'analyse des VER aléatoires et périodiques (20% d'inclusions), ici reproduction de neuf VER.

Le composite considéré ici est constitué d'inclusions fragiles alignées et distribuées aléatoirement dans une matrice élastoplastique parfaite. Pour différents taux d'inclusions fragiles, les comportements apparents résultants présentent clairement trois mécanismes principaux de déformation (FIG. 5 à gauche) : 1/ un comportement élastique, 2/ une recharge élastique après rupture des inclusions et 3/ un endommagement ductile. Il semble ainsi possible de modéliser analytiquement le comportement adoucissant du Zircaloy irradié et hydruré en s'appuyant sur la notion de *Composite de Comparaison Évolutif* (Jaubert et al., 2013) : en fonction du niveau de déformation macroscopique, un composite simple est choisi et son comportement effectif estimé. Trois mécanismes principaux de déformation étant relevé, le comportement effectif global est alors décrit par morceaux :

- Un *comportement élastique* pour le composite linéaire constitué d'une matrice de Zircaloy isotrope contenant des inclusions d'hydrures isotropes alignées, distribuées aléatoirement et supposées convenablement représentées par des ellipsoïdes : le comportement linéaire effectif peut être obtenu par l'estimation de Ponte Castañeda et Willis (1995).

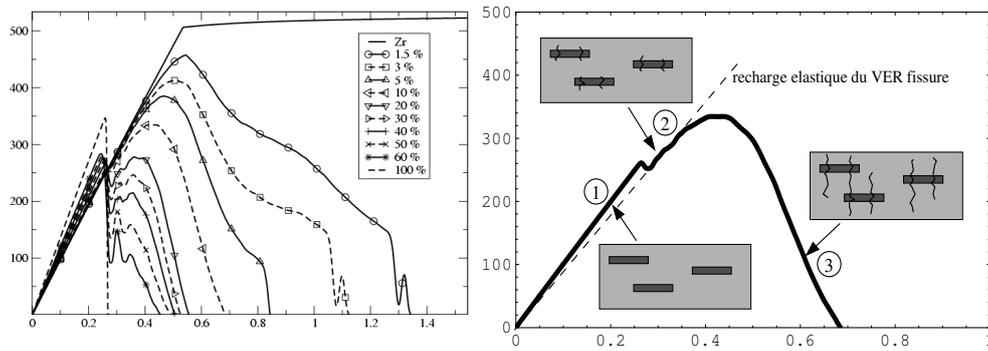


FIG. 5 – Simulation du comportement local adoucissant pour le Zircaloy hydruré. A gauche : simulations numériques périodiques en traction unidirectionnelle ; contrainte (MPa) et déformation axiale (%) pour différents taux d'inclusions. A droite : descriptif des 3 principaux mécanismes de déformation pour un taux d'inclusions de 10%.

- Une recharge élastique après rupture des inclusions supposées fragiles : lorsqu'un niveau de déformation apparent est atteint les inclusions rompent et le rechargement élastique s'effectue sur un milieu élastique constitué d'une matrice de Zircaloy contenant des fissures modélisées par des vides ellipsoïdaux. La définition de ce composite de comparaison fissuré repose sur deux hypothèses : le niveau de déformation macroscopique conduisant à la rupture des inclusions est le même à tout taux d'inclusions et les contraintes sont écartées dans et au voisinage des inclusions rompues. Ces hypothèses semblent admissibles au vu des champs locaux obtenus numériquement. Les vides ellipsoïdaux de ce composite de comparaison sont distribués aléatoirement et alignés dans une direction perpendiculaire à la traction ; en l'absence d'information supplémentaire, leur fraction volumique est supposée identique à celle du composite linéaire initial. En d'autres termes, le composite de comparaison pour le Zircaloy fissuré est identique au précédent avec des vides à la place des inclusions et à une rotation de $\pi/2$ près. Enfin, une hypothèse supplémentaire est formulée sur le rapport d'aspect des vides ellipsoïdaux dont on suppose que la forme est d'autant plus sphérique que leur fraction volumique est grande (un taux élevé d'inclusions donne des fissures initiales assez courtes dont l'ouverture est identique à toute fraction volumique, la déformation de rupture macroscopique n'en dépendant pas) : une relation en loi puissance est proposée, un exposant doit être identifié. Le comportement linéaire effectif de ce milieu poreux est de nouveau obtenu par l'estimation de Ponte Castañeda et Willis (1995).
- Une phase endommagement ductile correspondant à la croissance des vides dans une matrice de Zircaloy plastique, puis à leur coalescence jusqu'à rupture totale. Un modèle d'endommagement ductile pour une matrice plastique contenant des vides ellipsoïdaux alignés et distribués aléatoirement a été établi (Vincent et Monerie, 2008). Un modèle de croissance inspiré des travaux de Gologanu et al. (1997) et une extension du modèle de coalescence de Klöcker et Tvergaard (2003) complètent le modèle. Un exposant doit être identifié dans le modèle de coalescence.

Un modèle micromécanique jusqu'à rupture du Zircaloy hydruré et irradié est ainsi obtenu. L'utilisation de ce modèle requiert la connaissance de trois paramètres scalaires qui peuvent être identifiés indépendamment les uns des autres sur une seule simulation numérique pour un taux d'inclusions donné : la déformation à rupture des inclusions (lieu de changement de pente entre la charge élastique et la recharge), un exposant dans le rapport d'aspect des vides ellipsoïdaux (pente de la recharge élastique) et un exposant dans le modèle de coalescence (intensité de l'adoucissement). Ces trois paramètres sont identifiés pour une fraction volumique d'inclusions d'environ 3% et le modèle est ensuite validé de 0 à 100% d'hydrures (FIG. 6).

La démarche globale de changement d'échelle consiste alors à remonter à l'échelle supérieure du matériau à gradient de propriétés modélisé par une approche cohésive-volumique : 1/ dans les modèles de zone cohésive, l'énergie de rupture correspondant à ce modèle micromécanique d'adoucissement, 2/ aux points de Gauss, le comportement effectif durcissant obtenu précédemment.

2.3 Comportement à l'échelle globale du matériau à gradient de propriétés

La structure typique considérée est une portion de gaine possédant un gradient radial d'hydrures (moins d'hydrures en interne, plus en externe) et une couche extérieure d'oxyde (zircone, matériau très fragile). Cette structure est soumise à un chargement mécanique symptomatique d'une situation accidentelle de type accident d'injection de réactivité : une vitesse de déformation interne imposée. Différents teneurs

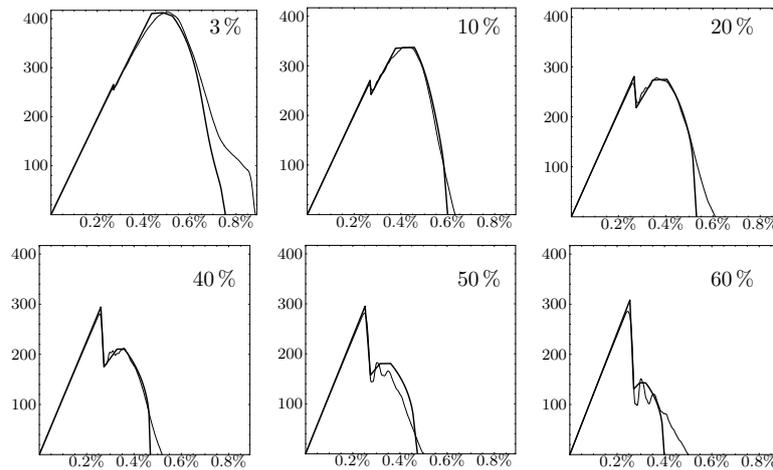


FIG. 6 – Identification et validation de modèle d'adoucissement du Zircaloy hydruré sur des essais de traction unidirectionnelle pour différentes fractions volumiques d'inclusions. Contrainte macroscopique (MPa) en fonction de la déformation macroscopique (%): modèle analytique (traits épais), résultats numériques (traits fins).

moyennes d'hydrures sont considérées, ainsi que différentes répartitions spatiales (formes différentes des gradients), FIG. 7 à gauche. Une multifissuration s'initie dans la couche externe de zircon (la plus fragile) et une fissure principale se propage de l'extérieur du tube vers l'intérieur conduisant à la rupture finale de la gaine. Le type de résultats accessibles par l'approche proposée est illustré sur la FIG. 7 à droite : 1/ l'énergie qu'il faut fournir à la gaine pour la rompre décroît avec le taux d'inclusions, 2/ un gradient prononcé est favorable à la tenue de la gaine (en toute rigueur un gradient infini donne lieu à un matériau bi-couche qui offre la résistance maximale si son interface est parfaitement tenace), les résultats de l'approche semblent constituer une enveloppe des résultats expérimentaux permettant la définition de critère de sûreté.

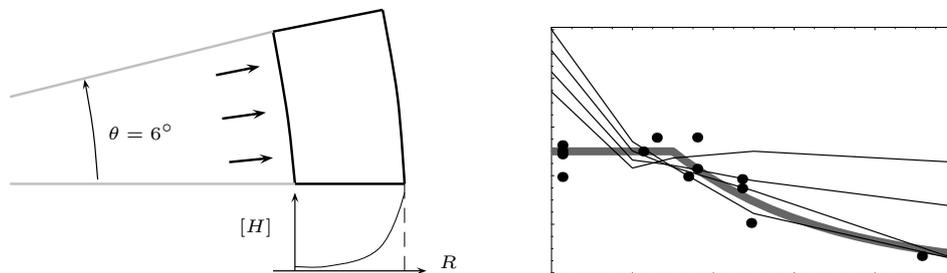


FIG. 7 – A gauche : déformation interne imposée sur une portion de gaine à gradient de teneur en hydrure. A droite : énergie de rupture de la structure en fonction de la teneur en hydrure ; modélisation multiéchelle (traits fins pour différents profil de gradient), données expérimentales (point), un des critères de sûreté proposé par la communauté internationale (trait épais) ; absence d'échelles sur les axes pour raisons de confidentialité.

3 RELATION PERMEABILITE-MICROSTRUCTURE DANS LES BETONS

La perméabilité des structures bétonnées est un enjeu important des analyses de vieillissement : étanchéité des enceintes de confinement des centrales nucléaires (dernier rempart avant l'atmosphère), stockage profond, résurgences dans les habitations sur sols pollués, etc.

3.1 Ténacité des agrégats granulaires cimentés

Les bétons relèvent de la classe des matériaux granulaires cimentés poreux. La simulation numérique de ces matériaux complexes requiert des analyses statistiques poussées pour quantifier l'effet des variations microstructurales (densité d'agrégats et de pores, distribution granulométrique, adhésion agrégat-matrice) sur leur comportement mécanique apparent. Pour traiter ces nombreux cas de

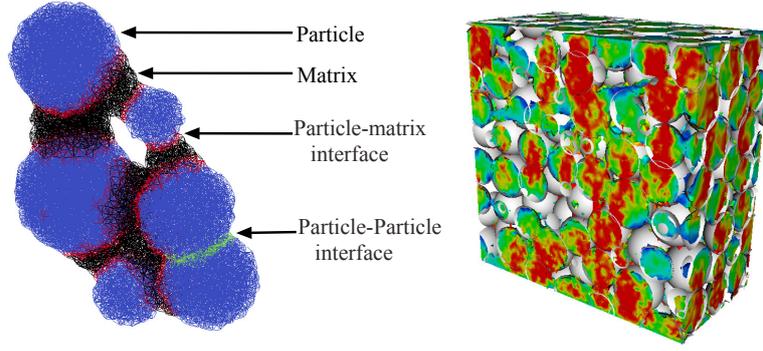


FIG. 8 – Milieu granulaire cimenté poreux. A gauche : schématisation d'une discrétisation du réseau. A droite : contraintes axiales lors d'un essai de traction unidirectionnel (chargement vertical).

rupture quasi-fragile, une méthode numérique tridimensionnelle sur réseau (Lattice Element Method), efficace et robuste, a été proposée (Affes et al., 2012) : le solide est représenté par un réseau de liens élastiques fragiles connectant un ensemble de points matériels. Des bétons numériques représentatifs ont été générés sur la base de descripteurs morphologiques traduisant convenablement la distribution spatiale des agrégats et l'agencement des phases.

L'analyse de la fissuration d'échantillons numériques cubiques en traction uniaxiale a permis :

- de proposer un modèle micromécanique de ténacité apparente traduisant convenablement l'effet de concentration de contraintes associées à la présence de pores

$$\frac{\sigma_{\text{eff}}}{\sigma^{pm}} = A \frac{\rho^m (2\rho_f^m - \rho^m)}{1 - k\rho^m}, \quad (4)$$

où σ_{eff} et σ^{pm} sont respectivement les ténacités apparentes et de l'interface agrégat-matrice, ρ^m est la fraction volumique de matrice (valeur à saturation, sans pores, ρ_f^m), $k \simeq 2.5$ et $A \simeq 0.3$ sont des constantes sans dimension,

- de mettre en évidence l'existence trois régimes de rupture distincts (déflexion, abrasion, pénétration) et de quantifier notamment les situations conduisant à une déflexion des fissures aux interfaces agrégats-matrice. Un scénario de rupture conforme aux bétons réels a été défini.

3.2 Relation entre la microstructure et la morphologie des fissures

Pour ce scénario, une analyse statistique complète (taille de VER, paramètres microstructuraux) a permis de relier la tortuosité des fissures à la microstructure polydisperse du béton. La tortuosité ($1 \leq \tau < +\infty$) se définit comme le rapport de la mesure de la fissure percolante sur celle de sa projetée perpendiculairement au sens de traction. Cette tortuosité traduit notamment pour partie l'empreinte des agrégats sur le front de fissure. Lorsque la fissure est plane (ou rectiligne en 2D), Stroeven (2000) a montré que la tortuosité ne dépend que de la fraction volumique des agrégats et pas de la polydispersité granulaire : $\tau = 1 + (\pi^2/8 - 1)\rho^m$. La situation réelle est un peu différente et une fissure réelle se réoriente au grès de la microstructure locale (FIG. 9).

Sur la base des résultats numériques obtenus et de considérations mécaniques (Affes, 2012), le résultat de Stroeven (2000) a été adapté au cas des fissures non planes et la tortuosité a été obtenue comme une fonction explicite de la fraction volumique d'agrégats ρ^m et de l'étalement granulométrique des agrégats ($1 \leq \eta < +\infty$) :

$$\tau \simeq 1 + (1.7e^{-\sqrt{\eta-1}/4})\rho^m \quad \text{symétrisé à } \rho^m \simeq 0.42 \quad (5)$$

La pertinence de cette estimation, confrontée à des résultats expérimentaux et numériques de la littérature pour différents matériaux, suggère une portée assez générale pour la classe des composites à inclusions polydisperses.

3.3 Relation entre la perméabilité des fissures et leur microstructure

La perméabilité apparente d'un réseau de fissures à tortuosité donnée a été estimée par une approche numérique de type Lattice-Boltzmann. Il a été montré que l'inverse de cette perméabilité K est une

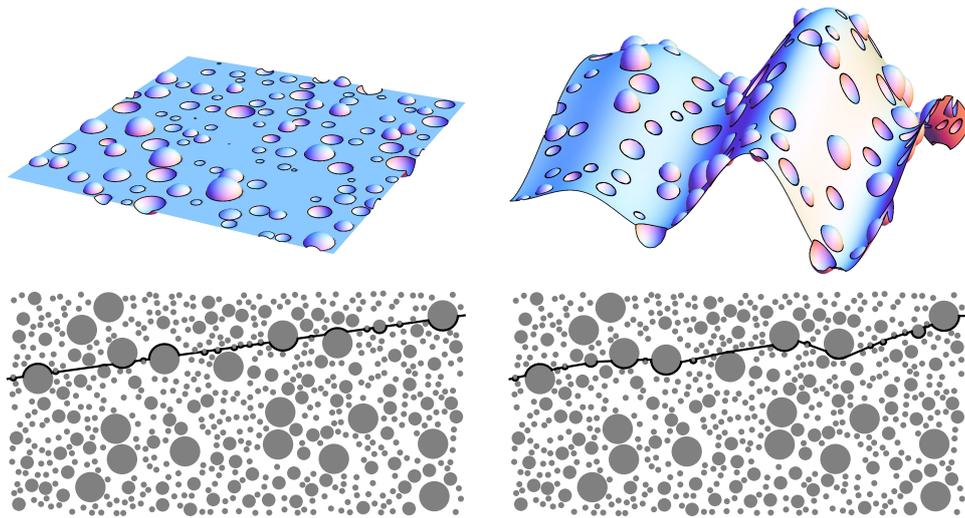


FIG. 9 – Schématisation d'une fissure principale comme "empreinte" d'une microstructure granulaire polydisperse. En haut : cas 3D ; en bas : cas 2D. Colonne de gauche : fissure plane ; colonne de droite : fissure non plane plus représentative d'une situation réelle.

fonction affine croissante de la tortuosité (K_p est la perméabilité d'un écoulement de Poiseuille de mêmes dimensions), voir FIG. 10 :

$$\frac{K_p}{K} \simeq -2.7 + 3.1\tau. \quad (6)$$

En associant cette relation avec la relation tortuosité-microstructure (5), une relation perméabilité-microstructure est obtenue. Ainsi, il est possible de prédire sur la base d'une simple micrographie d'un béton sa perméabilité apparente attendue avec une précision estimée à 20%. Ce dernier résultat doit être confirmé quant à sa sensibilité à l'ouverture des fissures.

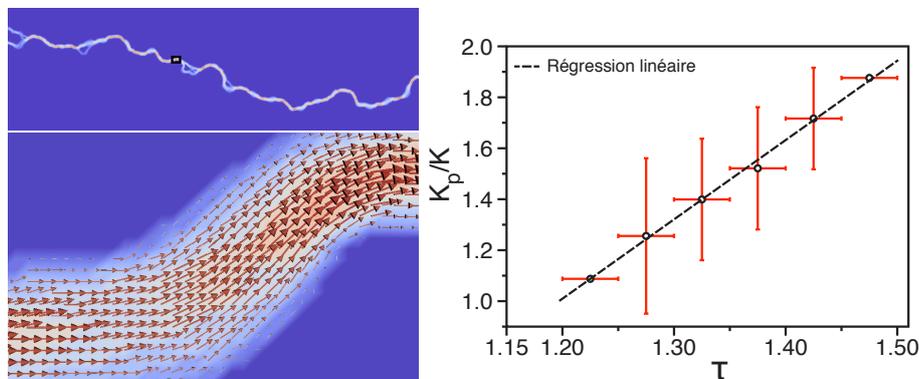


FIG. 10 – A gauche : champ de vitesse d'un écoulement dans une fissure et zoom. A droite : inverse de la perméabilité apparente normé en fonction de la tortuosité ; résultats numériques et régression affine (équation (6)).

Références

- Affes, R., 2012. Relations microstructure-fissuration-perméabilité dans les milieux granulaires cimentés. Thèse, Université Montpellier II.
- Affes, R., Delenne, J.-Y., Monerie, Y., Radjai, F., Topin, V., 2012. Tensile strength and fracture of cemented granular aggregates. *European Physical Journal E* 35 (11), 117.
- Blal, N., Daridon, L., Monerie, Y., Pagano, S., 2011. Criteria on the artificial compliance inherent to the intrinsic cohesive zone. *Comptes Rendus de Mécanique* 339, 789–795.
- Blal, N., Daridon, L., Monerie, Y., Pagano, S., 2012a. Artificial compliance inherent to the intrinsic cohesive zone models: criteria and application to planar meshes. *International Journal of Fracture* 178 (1-2), 71–83.

- Blal, N., Daridon, L., Monerie, Y., Pagano, S., 2012b. Micromechanical-based criteria for the calibration of cohesive zone parameters. *Journal of Computational and Applied Mathematics* DOI 10.1016/j.cam.2012.10.031.
- Chaboche, J.-L., Feyel, F., Monerie, Y., 2001. Interface debonding model: a viscous regularization with a limited rate dependency. *Int. J. Solids Structures* 38, 3127–3160.
- Comninou, M., 1977. The interface crack. *Journal of Applied Mechanics* 44, 631–636.
- de Borst, R., Remmers, J., Needleman, A., 2006. Mesh-independent discrete numerical representations of cohesive-zone models. *Engineering Fracture Mechanics* 73, 160–177.
- Espinosa, H., Zavattieri, P., 2003. A grain level model for the study of failure initiation and evolution in polycrystalline brittle materials. Part I: Theory and numerical implementation. *Mechanics of Materials* 35, 333–364.
- Gologanu, M., Leblond, J.-B., Perrin, G., Devaux, J., 1997. Recent extensions of Gurson's model for porous ductile metals. Vol. 32. In P. Suquet editor, *Continuum Micromechanics*, Springer-Verlag, Udine.
- Grange, M., Besson, J., Andrieu, E., 2000. An anisotropic gurson type model to represent the ductile rupture of hydrided Zircaloy-4 sheets. *International Journal of Fracture* 105, 273–293.
- Jaubert, A., Monerie, Y., Perales, F., 2013. Fracture of the hydrided zircaloy: numerical and analytical modeling. *International Journal of Mechanical Sciences En préparation*.
- Kanit, T., Forest, S., Galliet, I., Mounoury, V., Jeulin, D., 2003. Determination of the size of the representative volume element for random composites: statistical and numerical approach. *International Journal of Solids and Structures* 40, 3647–3679.
- Klöcker, H., Tvergaard, V., 2003. Growth and coalescence of non-spherical voids in metals deformed at elevated temperature. *International Journal of Mechanical Sciences* 45, 1283–1308.
- Kuroda, M., Yamanaka, S., Setoyama, D., Uno, M., Takeda, K., Anada, H., Nagase, F., Uetsuka, H., 2002. Tensile test of hydrided Zircaloy. *Journal of Alloys and Compounds* 330-332, 404–407.
- Li, G., Ponte Castañeda, P., 1994. Variational estimates for the elastoplastic response of particle-reinforced metal-matrix composites. *Applied Mechanics Reviews* 47, S77–94.
- Matheron, G., 1971. The theory of regionalized variables and its applications. Tech. rep., Paris School of Mines publications.
- Monerie, Y., 2010. *Micromécanique du combustible: homogénéisation, fissuration, milieux granulaires*. Habilitation à Diriger les Recherches, U. Montpellier II.
- Monerie, Y., Acary, V., 2001. Formulation dynamique d'un modèle de zone cohésive tridimensionnel couplant endommagement et frottement. *Revue Eur. Eléments Finis* 10, 489–504.
- Nakatsuka, M., Nagai, M., 1987. Reduction of plastic anisotropy of Zircaloy cladding by neutron irradiation. *Journal of Nuclear Science and Technology* 24 (10), 832–838.
- Pelissou, C., Baccou, J., Monerie, Y., Perales, F., 2009. Determination of the size of the representative volume element for random quasi-brittle composites. *International Journal of Solids and Structures* 46 (14-15), 2842–2855.
- Perales, F., Bourgeois, S., Chrysochoos, A., Monerie, Y., 2008. Two field multibody method for periodic homogenization in fracture mechanics of non linear composites. *Engineering Fracture Mechanics* 75, 3378–3398.
- Perales, F., Dubois, F., Monerie, Y., Piar, B., Stainier, L., 2010. Code coupling (xper) and application to fracture. *European Journal of Computational Mechanics* 19 (4), 389–417.
- Ponte Castañeda, P., 1991. The effective mechanical properties of nonlinear isotropic composites. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 39, 45–71.
- Ponte Castañeda, P., Willis, J. R., 1995. The effect of spatial distribution on the effective behavior of composite materials and cracked media. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 43, 1919–1951.
- Richefeu, V., Chrysochoos, A., Huon, V., Monerie, Y., Peyroux, R., Wattrisse, B., 2012. Toward local identification of cohesive zone models using digital image correlation. *European Journal of Mechanics/A Solids* 34, 38–51.
- Stroeven, P., 2000. Stereological approach to roughness of fracture surfaces and tortuosity of transport paths in concrete. *Cement and Concrete Composites* 22 (5), 331–341.
- Suquet, P., 1995. Overall properties of nonlinear composites: A modified secant moduli theory and its link with Ponte Castañeda's nonlinear variational procedure. *C. R. Acad. Sci., Paris Série II* (320), 563–571.
- Tomar, V., Zhai, J., Zhou, M., 2004. Bounds for element size in a variable stiffness cohesive finite element model. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 61 (11), 1894–1920.
- Vincent, P.-G., Bourgeois, S., Monerie, Y., 2010. Overall elastoplastic behavior of anisotropic metal-matrix composites reinforced by aligned inclusions. application to hydrided and irradiated zircaloy. *Mechanics of Materials* 42, 175–188.
- Vincent, P.-G., Monerie, Y., 2008. Yield criterion for a rigid-ideally plastic material with randomly oriented cracks. *Comptes Rendus Mécanique* 336, 297–303.
- Wen, S., 2012. Identification expérimentale de modèles de zones cohésives à partir de techniques d'imagerie thermomécanique. Thèse, Université Montpellier II.