

Surface de charge de plasticité effective pour un matériau biporeux saturé : modélisation analytique et simulations numériques

Pierre-Guy Vincent^{ab}, Yann Monerie^{ab}, Hervé Moulinec^c, Pierre Suquet^c

a. Laboratoire de Micromécanique et d'Intégrité des Structures

b. Institut de Radioprotection et de Sécurité Nucléaire (IRSN), PSN, CE Cadarache, BP3, 13115 Saint-Paul-lez-Durance, Cedex, France

c. Laboratoire de Mécanique et d'Acoustique, UPR CNRS 7051, 31 Chemin Joseph Aiguier, 13402 Marseille Cedex 20, France

Résumé :

Ce travail concerne la modélisation de la surface de charge de plasticité effective pour un matériau biporeux saturé. Plusieurs modèles, déjà proposés dans [12], sont brièvement rappelés. Un nouveau modèle analytique a récemment été développé sur la base d'un critère GTN. La pertinence de ce nouveau modèle est vérifiée par comparaison avec des simulations numériques en champ complet par transformées de Fourier rapides (méthode FFT, [7]). Des simulations sur des volumes contenant plus de 500 cavités ellipsoïdales dans une matrice de Gurson ont notamment été réalisées. L'effet des pressions internes dans les cavités est correctement reproduit par le nouveau modèle analytique.

Abstract :

This work is devoted to the modeling of the overall yield surface for a biporous saturated material. Several models, which have already been proposed in [12], are briefly recalled. A new analytical model, based on a GTN criterion, has recently been developed. The accuracy of this new model is checked thanks to full field numerical simulations using Fast Fourier Transforms (FFT method, [7]). In particular, simulations over volumes containing more than 500 ellipsoidal cavities in a Gurson matrix have been performed. The effect of the internal pressures inside the cavities is properly reproduced by the new analytical model.

Mots clefs : Plasticité ; Micromécanique ; Transformées de Fourier Rapides

1 Introduction

Ce travail concerne la modélisation de la surface de charge de plasticité effective pour un matériau biporeux saturé. L'application visée concerne le combustible nucléaire UO₂ fortement irradié, étudié par l'Institut de Radioprotection et de Sécurité Nucléaire afin d'estimer la tenue des crayons combustibles lors d'un accident de réactivité. Ce matériau a la particularité de posséder, en première approximation, deux populations de cavités saturées : des bulles intragranulaires sphériques, de l'ordre de quelques nanomètres et des bulles intergranulaires, plutôt lenticulaires et de l'ordre du micromètre (voir figure 1). A haute température, ce matériau est principalement ductile et les deux populations de cavités sont soumises à des pressions internes dues aux gaz de fission qu'elles contiennent. On s'intéresse, dans ce travail, à la modélisation de la *surface de charge de plasticité effective* pour un tel matériau biporeux saturé.

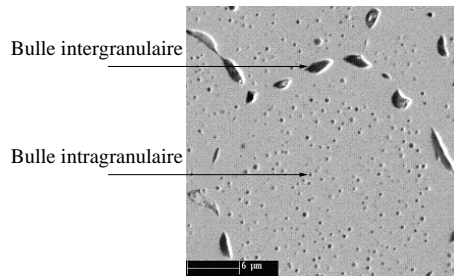


FIGURE 1 – Micrographie d' UO_2 irradié (33 GW j/T) après traitement thermique à 2000 K durant 3 h d'après [2].

2 Modélisation : approche multi-échelles

Afin de tenir compte des deux populations de bulles (inter/intragranulaires), on s'intéresse à un volume élémentaire représentatif et à deux changements d'échelles :

- un milieu homogène équivalent, noté M_1 , représentant un milieu constitué d'une matrice d' UO_2 (milieu continu M_0), dans lequel sont plongées des cavités intragranulaires sphériques de fraction volumique f_b pressurisées à une pression p_b uniforme (f_b étant une fraction volumique *locale* au sens du milieu M_1). La matrice est supposée incompressible et suivre un critère de type Von Mises pour sa surface de plasticité de limite d'élasticité σ_0 .
- un milieu homogène équivalent, noté M_2 , représentant un milieu dont la matrice est constituée du milieu M_1 précédent, dans lequel sont plongées des cavités intergranulaires. Ces bulles sont supposées ellipsoïdales oblates, de même facteur d'aspect w (i.e. rapport petit axe sur grand axe), distribuées aléatoirement dans l'espace et en orientation. La fraction volumique de ces cavités est notée f_e ; elles sont pressurisées à une pression p_e uniforme.

3 Premier changement d'échelle : critère GTN

Pour le premier changement d'échelle (milieu M_1), on utilise le critère de Gurson-Tvergaard-Needleman [4, 5, 9] :

$$q_3 \left(\frac{\Sigma_{eq}}{\sigma_0} \right)^2 + 2q_1 f_b \cosh \left(\frac{3}{2} \frac{\Sigma_m + p_b}{\sigma_0} \right) - 1 - (q_1 f_b)^2 = 0, \quad (1)$$

où Σ_m est la contrainte hydrostatique, Σ_{eq} est la contrainte équivalente de Von Mises, $\Sigma_m = \frac{1}{3} \text{Tr}(\boldsymbol{\Sigma})$, $\Sigma_{eq} = \sqrt{\frac{3}{2} \boldsymbol{\Sigma}^d : \boldsymbol{\Sigma}^d}$, la partie déviatorique de $\boldsymbol{\Sigma}$ étant notée $\boldsymbol{\Sigma}^d = \boldsymbol{\Sigma} - \Sigma_m \mathbf{i}$. Différentes expressions des coefficients q_1 et q_3 peuvent être trouvées dans [5] et [6]. Etant donné que q_1 apparaît dans l'expression (1) comme un coefficient multiplicatif à la porosité f_b , ce coefficient ne sera pas précisé dans les équations suivantes. Lorsque les cavités sont soumises à une pression interne p_b , le critère de Gurson est conservé en remplaçant Σ_m par $\Sigma_m + p_b$ [12].

4 Deuxième changement d'échelle : simulations numériques FFT

Des simulations numériques en champ complet ont été réalisées en utilisant la méthode par Transformées de Fourier Rapides (FFT method, Fast Fourier Transforms method). Cette méthode itérative basée sur les transformées de Fourier rapides dans le but d'obtenir les propriétés effectives de microstructures périodiques a été proposée par [8] et [7]. Cette méthode a été appliquée avec succès pour le cas traité ici d'un milieu à matrice GTN sous pression (milieu M_1 tel que défini dans la section précédente) contenant des cavités ellipsoïdales oblates orientées et distribuées aléatoirement dans le volume. Tout d'abord, des simulations ont été réalisées dans le cas particulier où la porosité intragranulaire (f_b) est nulle : le milieu M_1 suit alors le critère de Von Mises (le critère GTN se réduit dans ce cas au critère de Von Mises). Sur ce cas moins complexe, des calculs ont été effectués sur trois microstructures différentes afin d'étudier la représentativité du volume élémentaire. Ensuite, des simulations ont été réalisées dans le cas d'une matrice GTN (porosité f_b non nulle) sur deux microstructures

différentes (changement du rapport d'aspect des ellipsoïdes w). L'effet d'une pression interne p_b , ou plus précisément d'une différence de pression entre les bulles intra et intergranulaires $p = p_b - p_e$, a également été étudié.

4.1 Cas particulier où $f_b = 0$

Les trois microstructures différentes (notées “microstructure 0” à “microstructure 2”) testées comprennent chacune un grand nombre de cavités : 511 cavités ellipsoïdales oblates de taille unique sont placées dans la matrice. Chaque ellipsoïde (en gris sur la figure 2) est entourée par une couche sphérique de matrice (en noir sur la figure 2) dans le but d'éviter toute intersection entre cavités. Ainsi, chaque sphère composite comprend une cavité ellipsoïdale oblate entourée d'une couche de matrice. Ces sphères composites sont entourées de matrice dans la cellule unitaire totale. Toutes les sphères composites ont la même porosité et le taux de remplissage de la cellule unitaire totale par ces sphères composites est de 62 %.

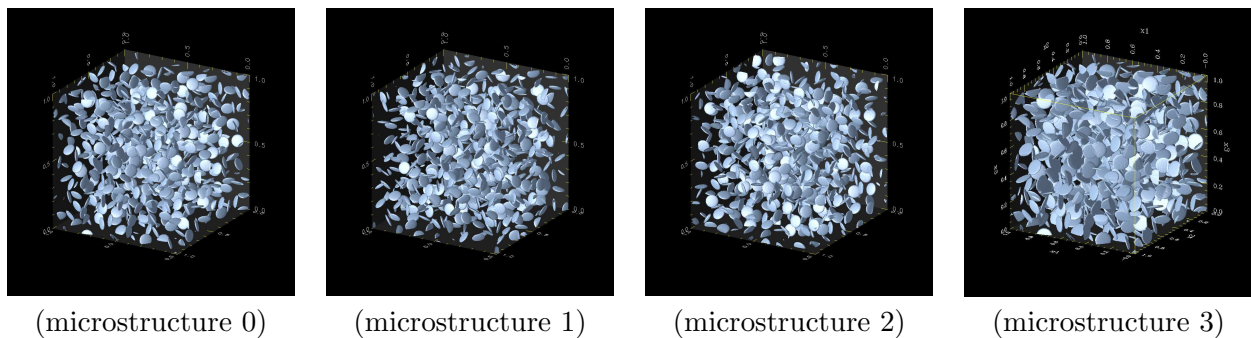


FIGURE 2 – Cellules unitaires périodiques utilisées pour les simulations FFT. Les microstructures # 0 à 2 contiennent des cavités ellipsoïdales de rapport de forme 1/5 tandis que la microstructure # 3 contient des cavités ellipsoïdales de rapport de forme 1/10.

Les calculs ont été réalisés en imposant les états de contraintes effectives suivants (axisymétrique ou de cisaillement pur) :

$$\Sigma = \Sigma_m \mathbf{i} + \Sigma_{eq} \begin{pmatrix} -1/3 & 0 & 0 \\ 0 & -1/3 & 0 \\ 0 & 0 & 2/3 \end{pmatrix}, \quad \Sigma = \Sigma_m \mathbf{i} + \Sigma_{eq} \begin{pmatrix} -1/\sqrt{3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/\sqrt{3} \end{pmatrix}. \quad (2)$$

Les valeurs des paramètres des simulations sont données dans le tableau 1.

Discrétisation (voxels pour chaque direction)	$N_1 = N_2 = N_3$	512
Géométrie	Nombre de cavités	511
	Porosité f_e	0.04
	Rapport de forme w	1/5
Matrice	Module de Young	10
	Coefficient de Poisson	0.2
	Limite d'élasticité σ_0	1
	Porosité interne f_b	0
	Milieu de référence	Module de Young
	Coefficient de Poisson	0.2

TABLE 1 – Paramètres des simulations FFT (cas de la matrice incompressible).

Les résultats des simulations sont représentés sur la figure 3. Les trois microstructures conduisent à des résultats similaires (en termes de surface de charge effective), ce qui valide la taille des cellules

unitaires testées. De plus, de faibles différences sont observées sur les résultats obtenus entre les états de contraintes axisymétrique et de cisaillement pur, ce qui indique une faible influence du troisième invariant des contraintes sur la surface de charge effective.

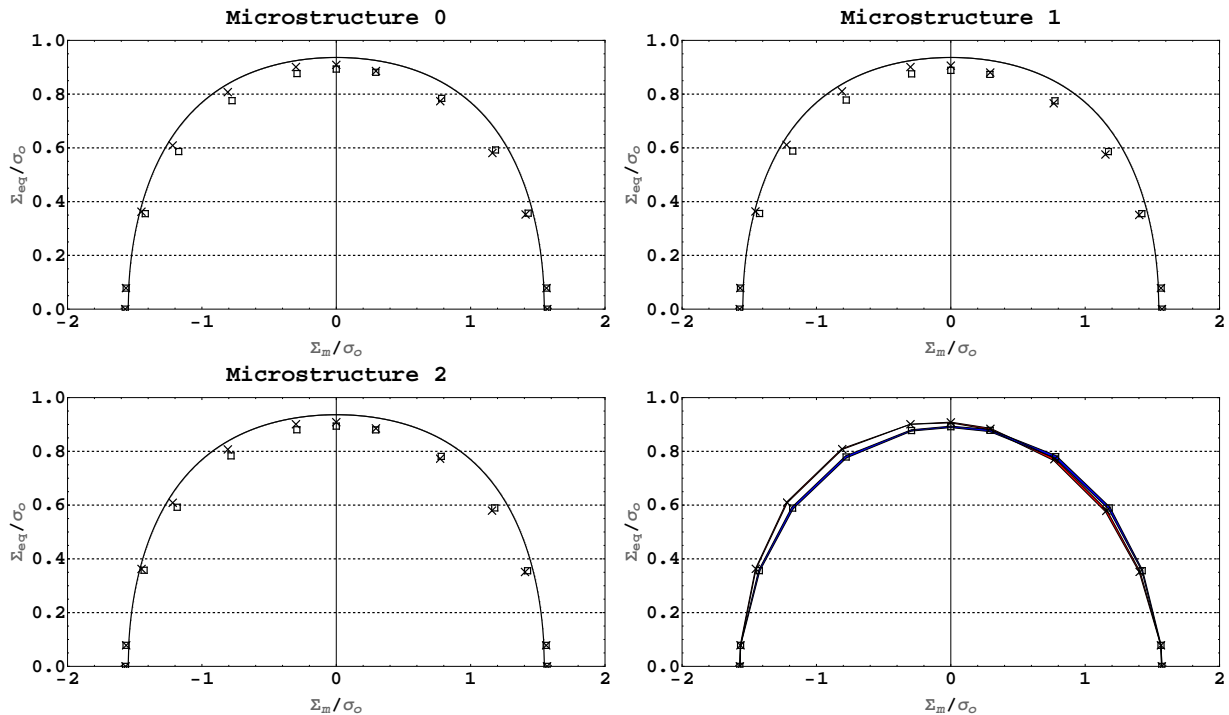


FIGURE 3 – Surface de charge effective : (trait plein) nouvelle estimation (3) évaluée avec $f_b = 0$, $f_e = 0.04$, $w = 1/5$, $q_3 = 1$, $p_e = 0$. Résultats FFT obtenus sur les microstructures 0 à 2 de la figure 2 : (croix) contrainte effective axisymétrique, (carrés) contrainte effective de cisaillement pur. Figure en bas à droite : moyenne des résultats FFT obtenus sur les microstructures 0 à 2, l'écart entre les valeurs maximales et minimales est représenté en rouge (resp. bleu) dans le cas des contraintes effectives axisymétriques (resp. de cisaillement pur).

4.2 Cas général où $f_b \neq 0$

Des simulations numériques avec matrice GTN ($f_b \neq 0$) ont ensuite été réalisées. Une nouvelle microstructure (microstructure # 3) a été créée sur la base de la microstructure # 0 (figure 2) en modifiant le rapport de forme des ellipsoïdes ($w = 1/5$ devenant $w = 1/10$), tout en conservant leurs orientations et leur distribution dans la matrice. Les simulations ont été réalisées en imposant un état de contrainte macroscopique axisymétrique. Les valeurs des paramètres pour les simulations sont les mêmes que celles indiquées dans le tableau 1 hormis que w peut prendre les valeurs $w = 1/5$ ou $w = 1/10$ et que la porosité f_b est fixée à 0.02. Différentes valeurs de pression interne p_b ont été testées sur ces microstructures. Les résultats sont présentés sur la figure 4 : une bonne adéquation est obtenue entre les prédictions du modèle analytique présenté à la section suivante et les résultats de ces simulations numériques en champ complet.

5 Modélisation de la surface de charge effective : détermination d'un modèle analytique

Concernant la surface de charge effective pour un tel matériau biporeux saturé, deux bornes supérieures et une estimation ont été proposées dans [12] :

- une borne supérieure, obtenue par l'intermédiaire de la méthode variationnelle de [10] (ou méthode sécante modifiée [11]), précise pour de faibles taux de triaxialité ;
- une borne supérieure, obtenue en généralisant l'approche de [3] à un matériau à matrice compressible, précise pour de forts taux de triaxialité ;

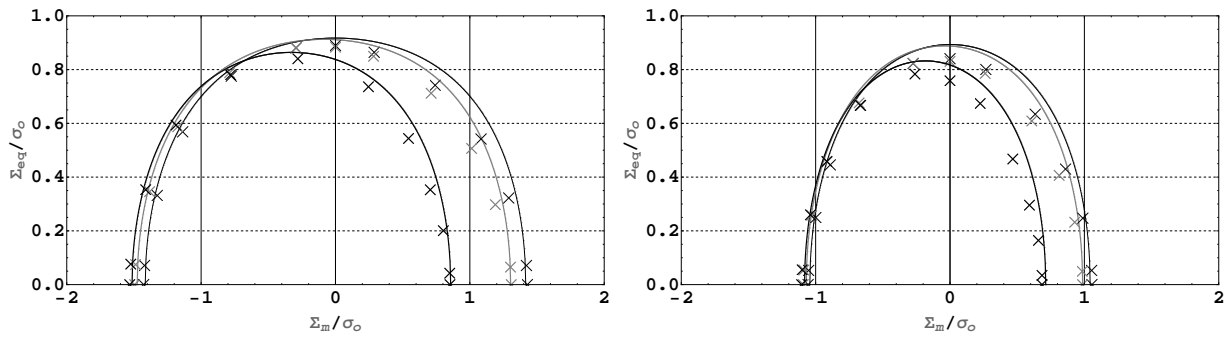


FIGURE 4 – Surface de charge effective : (trait plein) nouvelle estimation (3) évaluée avec $f_b = 0.02$, $f_e = 0.04$, $q_3 = 1$, $p_e = 0$, (croix) résultats des simulations FFT sur la microstructure # 0 de la figure 2, (noir fin) $p_b = 0$, (gris) $p_b = 0.5\sigma_0$, (noir épais) $p_b = 1.5\sigma_0$. Figure de gauche : $w = 1/5$, Figure de droite : $w = 1/10$.

– une estimation, appelée modèle "N-phases", inspirée des travaux de [1] et aussi basée sur la méthode variationnelle de [10], est proposée afin de correspondre au meilleur des deux types de bornes précédentes selon le taux de triaxialité.

Le modèle N-phases s'est révélé extrêmement pertinent pour un large spectre de paramètres internes (porosités, pressions des cavités, rapport de forme w). Néanmoins, son implémentation nécessite la résolution d'un système d'équations non linéaires. Même si la résolution numérique approchée d'un tel système est aisée, nous avons cherché à obtenir un nouveau modèle totalement analytique, essentiellement pour des raisons liées au temps de calcul et à la facilité d'intégration dans un logiciel de calcul de structure. Ainsi, nous proposons un critère de type GTN pour la surface de charge effective d'un matériau bi-poreux avec pressions internes :

$$\frac{1}{\beta} \left(\frac{\bar{\Sigma}_{eq}}{\sigma_0} \right)^2 + \frac{1}{\alpha} \cosh \left(\frac{3}{2} \left(\frac{\bar{\Sigma}_m}{\sigma_0} - \frac{\bar{\Sigma}_m^- + \bar{\Sigma}_m^+}{2\sigma_0} \right) \right) - 1 = 0, \quad (3)$$

$$\alpha = \cosh \left(\frac{3}{4} \frac{\bar{\Sigma}_m^+ - \bar{\Sigma}_m^-}{\sigma_0} \right), \quad \beta = \left(\frac{\bar{\Sigma}_{eq}}{\sigma_0} \right)^2 \frac{\alpha}{\alpha - 1}, \quad (4)$$

$\bar{\Sigma}_m^+$, $\bar{\Sigma}_m^-$ et $\bar{\Sigma}_{eq}$ sont des approximations des contraintes effectives purement hydrostatiques ou équivalentes correspondant respectivement à des taux de déformation effectifs purement hydrostatiques (positif ou négatif) ou déviatorique. Ainsi, le critère proposé consiste à imposer une forme de type GTN passant par ces points particuliers comme schématisé sur la figure 5.

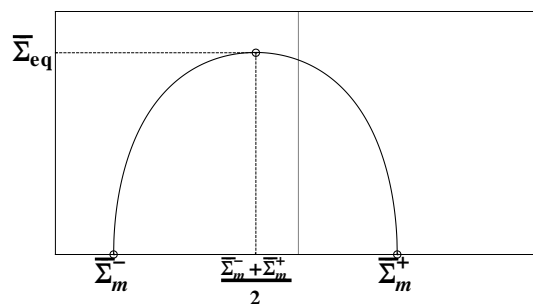


FIGURE 5 – Le critère de charge proposé consiste à imposer une forme de type GTN passant par les points suivants : $(\bar{\Sigma}_m^+, 0)$, $(\bar{\Sigma}_m^-, 0)$, $(\frac{\bar{\Sigma}_m^- + \bar{\Sigma}_m^+}{2}, \bar{\Sigma}_{eq})$.

Les fonctions $\bar{\Sigma}_m^+$, $\bar{\Sigma}_m^-$ et $\bar{\Sigma}_{eq}$ dépendent des paramètres internes tels que les porosités f_b et f_e , la différence des pressions $p = p_b - p_e$ et le rapport de forme des cavités ellipsoïdales oblates w . Ces fonctions ont été obtenues en partant de la borne supérieure de [12] obtenue en généralisant l'approche de [3] à un matériau à matrice compressible. Dans le cas des cavités sphériques (pour faire court dans cette communication, le potentiel étant de forme similaire dans le cas des cavités ellipsoïdales), ce

résultat s'écrit de la façon suivante. Le potentiel effectif $\Phi(\dot{\mathbf{E}}, p_b, p_e)$ est majoré par :

$$\bar{\Phi}(\dot{\mathbf{E}}, p_b, p_e) = \inf_A \left[\sigma_0 \int_{f_e}^1 \int_{f_b}^1 \sqrt{4 \frac{A^2}{y^2} + 4 \frac{(\dot{E}_m - A)^2}{q_3 z^2} + \frac{(\dot{E}_{eq})^2}{q_3}} dy dz - 3(1 - f_e)pA \right] - 3p_e \dot{E}_m. \quad (5)$$

En notant A_{sol} la solution de ce problème de minimisation, la surface de charge effective associée est obtenue ($\Sigma = \partial\bar{\Phi}/\partial\dot{\mathbf{E}}$). Les fonctions Σ_m^+ , Σ_m^- et Σ_{eq} ont été obtenues de façon analytique par approximation de A_{sol} (ce scalaire représentant le taux de déformation hydrostatique moyen dans la matrice, il est relatif à la dilatation moyenne de la matrice).

Le critère analytique proposé (équation 3) a été comparé aux simulations numériques FFT (figures 3 et 4). Une bonne adéquation entre simulations numériques en champ complet et modèle analytique proposé est observée. Notamment, la forme générale imposée au critère 3 semble pertinente (critère de forme GTN). L'effet des pressions internes est correctement reproduit : la différence $p = p_b - p_e$ implique une translation du critère le long de l'axe hydrostatique mais également une réduction en taille de la surface de plasticité (diminution du domaine élastique).

6 Conclusion

Un modèle analytique a récemment été mis au point afin de décrire la surface de plasticité effective d'un matériau bi-poreux avec pressions internes. Des simulations numériques en champ complet ont été réalisées en utilisant la méthode FFT de [8] et [7]. Les résultats de ces simulations permettent de montrer la pertinence du modèle analytique proposé.

Références

- [1] Bilger, N., Auslender, F., Bornert, M., Masson, R. 2002 New bounds and estimates for porous media with rigid perfectly plastic matrix. *Comptes Rendus Mécanique* **330** 127-132
- [2] Dubourg, R., Faure-Geors, H., Nicaise, G., Barrachin, M. 2005 Fission product release in the first two PHEBUS tests FPT0 and FPT1. *Nuclear Engineering and Design* **235** 2183-2208
- [3] Gologanu, M., Leblond, J.B., Devaux, J. 1994 Approximate models for ductile metals containing non-spherical voids-Case of axisymmetric oblate ellipsoidal cavities. *ASME Journal of Engineering Materials and Technology* **116** 290-297
- [4] Gurson, A.L. 1977 Continuum Theory of Ductile Rupture by Void Nucleation and Growth : Part I - Yield Criteria and Flow Rules for Porous Ductile Media. *Journal of Engineering Materials and Technology* **99** 1-15
- [5] Koplik, J., Needleman, A. 1988 Void growth and coalescence in porous plastic solids. *International Journal of Solids and Structures* **24** 835-853
- [6] Leblond, J.B., Perrin, G., Suquet, P. 1994 Exact Results and Approximate Models for Porous Viscoplastic Solids. *International Journal of Plasticity* **10** 213-235
- [7] Michel, J.-C., Moulinec, H., Suquet, P. 2000 A Computational Method Based on Augmented Lagrangians and Fast Fourier Transforms for Composites with High Contrast. *Computer Modeling in Engineering and Sciences* **1**, n. 2, pp. 79-88
- [8] Moulinec, H., Suquet, P. 1998 A numerical method for computing the overall response of nonlinear composites with complex microstructure. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* **157** 69-94
- [9] Tvergaard, V. 1990 Material Failure by Void Growth to Coalescence. *In Advances in Applied Mechanics* (ed. J.W. Hutchinson et T.Y. Wu) vol. 27, pp. 83-151, Academic Press, New-York.
- [10] Ponte Castañeda, P. 1991 The effective mechanical properties of nonlinear isotropic composites. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **39** 45-71
- [11] Ponte Castañeda, P., Suquet, P. 1998 Nonlinear Composites *In Advances in Applied Mechanics* vol. 34, pp. 171-302.
- [12] Vincent, P.-G., Monerie, Y., Suquet, P. 2009 Porous materials with two populations of voids under internal pressure : I. Instantaneous constitutive relations. *International Journal of Solids and Structures* **46** 480-506