



HAL
open science

Modélisation micromécanique du comportement de matériaux du nucléaire

Pierre-Guy Vincent

► **To cite this version:**

Pierre-Guy Vincent. Modélisation micromécanique du comportement de matériaux du nucléaire. Mécanique [physics]. Université de Montpellier (UM), FRA, 2023. tel-04166850

HAL Id: tel-04166850

<https://irsn.hal.science/tel-04166850v1>

Submitted on 20 Jul 2023

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



Distributed under a Creative Commons Attribution - NonCommercial - NoDerivatives 4.0 International License



UNIVERSITÉ DE MONTPELLIER

Mémoire d'Habilitation à Diriger des Recherches

Modélisation micromécanique du comportement de matériaux du nucléaire

Présenté par :

Pierre-Guy VINCENT

Déposé le 22 novembre 2022 et soutenu le 13 juin 2023 devant le jury composé de :

Mme Emmanuelle ROUHAUD	Professeure des universités Université de technologie de Troyes	Présidente
M. Renald BRENNER	Directeur de recherche CNRS	Rapporteur
M. Renaud MASSON	Directeur de recherche CEA	Rapporteur
Mme Carole NADOT-MARTIN	Professeure des universités ENSMA	Rapporteuse
M. Mihail GARAJEU	Maître de conférences Aix-Marseille Université	Examineur
M. Martin IDIART	Full professor Université Nationale de La Plata (Argentine)	Examineur
M. Yann MONERIE	Professeur des universités Université de Montpellier	Examineur

Je déclare avoir respecté, dans la conception et la rédaction de ce mémoire d'HDR, les valeurs et principes d'intégrité scientifique destinés à garantir le caractère honnête et scientifiquement rigoureux de tout travail de recherche, visés à l'article L.211-2 du Code de la recherche et énoncés par la Charte nationale de déontologie des métiers de la recherche et la Charte d'intégrité scientifique de l'Université de Montpellier. Je m'engage à les promouvoir dans le cadre de mes activités futures d'encadrement de recherche.

Table des matières

I	Rapport scientifique	7
1	Introduction générale	9
2	Les combustibles nucléaires en dioxyde d'uranium et oxydes mixtes	15
2.1	Surface de charge de plasticité pour un matériau biporeux saturé	19
2.1.1	Position du problème	21
2.1.2	Cavités intergranulaires sphériques	24
2.1.3	Cavités intergranulaires ellipsoïdales	27
2.1.4	Simulations numériques en champs complets	29
2.1.5	Effet de la taille relative des cavités intergranulaires	36
2.1.6	Intégration du modèle analytique dans le code SCANAIR	42
2.2	Élasticité des nanoporeux saturés	45
2.2.1	Choix de l'approche par motifs morphologiques	45
2.2.2	Modélisation de la zone perturbée	48
2.2.3	Comportement élastique effectif	50
2.3	Endommagement et rupture ductile	57
2.3.1	Développement d'un modèle de zone cohésive	57
2.3.2	Application : simulation d'un essai de traction sur éprouvette pré-entallée	64
2.3.3	Application : simulation d'un fragment de pastille de dioxyde d'uranium en situation de RIA	70
2.4	Viscoplasticité des matériaux poreux avec effets d'amas : application au MOX	73
2.5	Viscoplasticité des matériaux poreux et plasticité cristalline : application au MOX	82
3	Les internes de cuve en aciers inoxydables austénitiques	89
3.1	Viscoplasticité d'un polycristal poreux	95
3.2	Application : modèle complet en élasto-viscoplasticité	102
3.3	Viscoplasticité d'un monocristal poreux sous chargement purement hydrostatique	114
4	Conclusion générale et perspectives	121
4.1	Bilan du travail réalisé	121
4.2	Perspective : modélisation de l'endommagement d'un matériau viscoplastique poreux par une approche cohésive-volumique pour application au dioxyde d'uranium irradié	122
4.3	Perspective : couplage entre thermique, mécanique et diffusion d'espèces pour application au dioxyde d'uranium irradié	123

4.4	Perspective : modélisation du comportement viscoplastique d'un polycristal pour application au durcissement d'un acier de cuve irradié	124
4.5	Perspective : simulation numérique de la rupture d'éprouvettes mini-C(T) d'aciers de cuve	126
4.6	Perspective : stratégie meso-macro pour simuler la rupture des gros composants	126
II	Notice individuelle	141
5	Curriculum Vitae	143
6	Activités de recherche	149
6.1	Thématiques de recherche	149
6.2	Collaborations scientifiques	150
6.3	Responsabilités administratives et collectives	151
6.3.1	Contrats de recherche scientifique	151
6.3.2	Laboratoire	152
6.3.3	Expertises	152
6.4	Publications scientifiques	152
6.4.1	Articles dans des revues internationales à comité de lecture	153
6.4.2	Chapitre de livre	155
6.4.3	Article de "review"	155
6.4.4	Conférences à comité de lecture, colloques, groupe de travail	155
6.4.5	Mémoires	157
6.5	Encadrements scientifiques	157
6.5.1	Post-doctorats	157
6.5.2	Thèses de doctorat	158
6.5.3	Stage ingénieur	159
7	Sélection de quatre articles	161
7.1	Article : "Effective flow surface of porous materials with two populations of voids under internal pressure : I. A GTN model"	161
7.2	Article : "Cohesive GTN model for ductile fracture simulation"	191
7.3	Article : "A micromechanical model for the secondary creep of elasto-viscoplastic porous materials with two rate-sensitivity exponents : Application to a mixed oxide fuel"	210
7.4	Article : "Porous polycrystal plasticity modeling of neutron- irradiated austenitic stainless steels"	226

Première partie

Rapport scientifique

Chapitre 1

Introduction générale

Les travaux de recherche présentés dans ce rapport scientifique ont été menés à l'Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire (IRSN), qui, sous le statut d'établissement public à caractère industriel et commercial (EPIC), est l'expert public des risques nucléaires et radiologiques. L'IRSN mène des recherches et des expertises scientifiques dans les disciplines du risque, de la sûreté et de la sécurité des installations nucléaires, du transport et du contrôle des matières nucléaires et sensibles, de la protection de l'environnement et de la santé. Les travaux de recherche présentés ici ont été réalisés au Service de Maîtrise des Incidents et des Accidents (SEMIA), au sein du Pôle Sûreté Nucléaire (PSN) de l'IRSN. Ce travail s'inscrit dans le cadre des recherches menées dans le domaine de la sûreté des réacteurs nucléaires à eau pressurisée, sur le comportement thermomécanique du combustible en dehors des conditions nominales de fonctionnement et sur les effets du vieillissement sur le comportement mécanique des matériels appelés "internes de cuve".

L'ensemble des résultats présentés ici a été obtenu en collaboration avec des chercheurs, des ingénieurs et des étudiants. Ce rapport synthétise une dizaine d'années de recherche (depuis fin 2011) en micromécanique pour différents matériaux du nucléaire. Ces recherches ont été menées, en partie, en collaboration avec le Laboratoire de Mécanique et Génie Civil (LMGC), unité mixte de recherche de l'Université de Montpellier (UM) et du Centre National de la Recherche Scientifique (CNRS), dans le cadre du laboratoire de Micromécanique et Intégrité des Structures (MIST). Le Laboratoire MIST, laboratoire commun créé en 2007 entre l'IRSN, le CNRS et l'UM, a été issu d'une politique visant à renforcer les synergies entre recherche théorique et appliquée dans le domaine de la sûreté nucléaire. La vocation initiale de ce laboratoire commun a été d'une part, de proposer des outils de compréhension et de prédiction de phénomènes relevant explicitement de la sûreté nucléaire et d'autre part, d'aborder des thématiques scientifiques plus vastes, des actions de recherche fondamentale, en particulier en matière de modélisation et de simulation de comportements complexes. Une partie des travaux de recherche présentés dans ce rapport scientifique a également été menée en collaboration avec le Laboratoire de Mécanique et d'Acoustique (LMA), unité mixte de recherche depuis 2018 d'Aix-Marseille Université (AMU), du CNRS et de Centrale Marseille, dans le cadre de plusieurs accords de collaboration de recherche spécifiques.

En premier lieu, la motivation appliquée de ces recherches porte sur le comportement des combustibles nucléaires en dioxyde d'uranium (UO_2) et oxydes mixtes (appelé MOX pour "mixed oxide") lors d'éventuels transitoires accidentels de puissance dans les réacteurs à eau sous pression (REP). L'objectif appliqué est d'améliorer les prédictions du code SCANAIR développé à l'IRSN et destiné à la simulation numérique simplifiée des crayons de combustible nucléaire en situation d'accident d'insertion de réactivité (appelé RIA pour "Reactivity Initiated Accident"). Les améliorations concernent ici la modélisation du comportement thermomécanique

de l'UO₂ et du MOX irradiés sous chargements complexes et notamment pour tout taux de triaxialité des contraintes. En second lieu, la motivation appliquée de ces recherches porte sur le comportement des "internes de cuve" dans les REP. Les "internes", principalement en aciers inoxydables austénitiques, sont des matériels qui sont disposés à l'intérieur de la cuve et qui remplissent des fonctions essentielles à la sûreté de l'installation. Durant leur utilisation, ces deux types de matériaux, céramique pour les combustibles UO₂ et MOX et métallique pour les internes de cuve, subissent des températures élevées et de fortes doses d'irradiation, ce qui modifie leur microstructure et leur comportement mécanique. L'objectif appliqué revient à fournir des modèles de comportement tridimensionnels prenant en compte le plus explicitement possible les effets de l'irradiation tout en restant intégrables et utilisables dans des codes de calculs dits "métiers", tel que SCANAIR pour le combustible, ou des codes de calculs de structures par éléments finis plus génériques, tel que XPER développé à l'IRSN pour traiter de la multifissuration des milieux hétérogènes. Il apparaît clairement que procéder à une discrétisation spatiale complète de toutes les hétérogénéités des matériaux considérés, dues à leur fabrication ou leur utilisation en réacteur, n'est ni réaliste, ni judicieux. Les échelles considérées ici se situent entre celle des hétérogénéités matérielles rencontrées (de plusieurs nanomètres à plusieurs microns) et celle du calcul des structures (du millimètre au centimètre). A ces échelles, les microstructures rencontrées et les mécanismes élémentaires de déformation identifiés sont extrêmement variés. Ainsi ce programme de recherche va introduire des modèles pour traiter de l'élasticité, de la plasticité, de la viscoplasticité, de l'endommagement et de la rupture.

Du point de vue théorique, ce travail de recherche s'intéresse à l'homogénéisation des matériaux hétérogènes. Des matériaux poreux idéalisés contenant une ou plusieurs populations de cavités, drainées ou saturées par des gaz présents à l'intérieur des cavités, sont considérés. De plus, divers types de comportement sont pris en compte pour la matrice environnant les pores dans ces matériaux idéalisés : élasticité, plasticité, ou viscoplasticité. Des matrices cristallines anisotropes ou complètement "isotropisées" peuvent être considérées. La porosité introduit une compressibilité globale au matériau qu'il convient de modéliser. De plus, les pressions saturantes induisent des chargements mécaniques sur les microstructures qu'il convient également de prendre en compte. Ainsi, des modèles de comportement tridimensionnels avec prise en compte de la triaxialité des contraintes sont recherchés. Enfin, ce travail de recherche s'intéresse à la modélisation et la simulation numérique de l'endommagement et de la rupture ductile par croissance et coalescence de cavités dans le matériau. Le programme de recherche s'attache à convertir un modèle micromécanique tridimensionnel existant en un modèle surfacique, de type cohésif, pour traiter de l'amorçage et de la propagation de fissure tout en conservant les variables d'endommagement physiques du modèle micromécanique.

Le présent rapport scientifique est ordonné de la façon suivante.

Chapitre 2 - Les combustibles nucléaires en dioxyde d'uranium et oxydes mixtes

Après avoir défini les matériaux d'étude et les conditions considérées, deux sections sont dédiées à l'homogénéisation des matériaux biporeux saturés. La première section traite de la surface de charge de plasticité. La deuxième section aborde le cas de l'élasticité des matériaux nanoporeux saturés avec prise en compte des effets de surface. Ensuite, une troisième section est consacrée à la dérivation d'un modèle cohésif surfacique à partir d'un modèle micromécanique tridimensionnel pour simuler l'endommagement et la rupture ductile. Les applications visées pour ces trois sections concernent le combustible UO₂. Une quatrième section traite de la recherche d'un modèle d'homogénéisation pour décrire le comportement viscoplastique d'un matériaux poreux avec regroupement des cavités en amas et où la déformation visqueuse de la matrice correspond à deux méca-

nismes différents de fluage. Une cinquième section s'attache en particulier au comportement des amas poreux en considérant une matrice polycristalline. Notamment, des simulations numériques en champs complets y sont présentées. Ces deux dernières sections concernent le combustible MOX.

Chapitre 3 - Les internes de cuve en aciers inoxydables austénitiques

Le cadre général est exposé avec une présentation du matériau d'étude et de ses conditions d'utilisation. Une première section est dédiée à l'homogénéisation des polycristaux poreux en viscoplasticité. Dans la deuxième section, une application pour acier inoxydable austénitique irradié est présentée pour aboutir à la proposition d'un modèle global en élasto-viscoplasticité. La troisième section est dédiée au cas particulier des monocristaux poreux sous chargement purement hydrostatique.

Chapitre 4 - Conclusion générale et perspectives

Une conclusion dresse un état d'avancement sur les problématiques scientifiques abordées dans ce travail de recherche. Cinq nouvelles perspectives sont ensuite énoncées. La première concerne l'endommagement et la rupture en viscoplasticité pour le combustible UO_2 . La deuxième perspective à plus long terme est relative au couplage entre la thermique, la fissuration et la diffusion d'espèces pour les combustibles nucléaires. Concernant le vieillissement des aciers, deux perspectives sont proposées avec un élargissement du champ de recherche à un autre matériau, à savoir les aciers de cuve des REP. Une perspective concerne les méthodes d'homogénéisation récentes pour polycristaux en viscoplasticité et leur utilisation avec des modèles de comportement en plasticité cristalline complexes pour aciers de cuve irradiés. La deuxième perspective concerne la simulation d'essais de rupture d'éprouvettes entaillées de type C(T) (Compact Tension) de petite taille (appelée mini-C(T)). Enfin, une dernière perspective d'ordre plus général est exposée autour de la simulation numérique de la fissuration de gros composants ou de structures complètes.

Pour chaque thème de recherche, les noms des différents collaborateurs sont précisés.

De façon générale, ces travaux de recherche sont des travaux de modélisation qui portent sur le comportement mécanique de matériaux du nucléaire. Pour chaque problème posé, l'objectif est d'aboutir à une solution pertinente, présentant un bon compromis entre précision et complexité : précision vis à vis des phénomènes physiques à modéliser, complexité vis à vis des solutions proposées. Ainsi, le présent manuscrit cherche à décrire la démarche générale de ces travaux de recherche qui tend à :

- 1. synthétiser la motivation appliquée de chaque problème, en termes, par exemple, de matériels ou de composants, de matériaux, de conditions d'utilisation ou de chargement,**
- 2. "capter" la physique suffisante pour traiter chaque problème donné et sélectionner les cadres théoriques pertinents,**
- 3. effectuer les développements théoriques nécessaires et proposer une solution en essayant de ne conserver que les éléments principaux, i.e., éviter de rajouter des éléments "superflus" vis à vis du problème à traiter.**

Il est à noter que ces activités de recherche sont pilotées par les besoins de l'IRSN, ce qui a conduit à aborder des sujets de natures diverses en micromécanique (céramiques à haute température,

matériaux métalliques, plasticité, viscoplasticité, élasticité des nanoporeux, endommagement, fissuration...) dans un cadre coopératif. Ce manuscrit cherche à souligner une cohérence d'ensemble à ces travaux de recherche. De plus, il est à noter que la sélection des cadres théoriques évoquée ci-dessus implique à chaque fois un travail conséquent et difficile afin de maîtriser les outils et méthodes associés souvent complexes.

Des résultats scientifiques ont été obtenus lors de la réalisation de ce programme de recherche durant ces dix dernières années. Ces résultats constituent des avancées scientifiques dans le domaine de la mécanique des solides et des matériaux.

Parmi les résultats scientifiques obtenus, il est important (d'un certain point de vue) de souligner les résultats suivants :

- pour le problème relatif à la surface de charge de plasticité d'un matériaux biporeux saturé avec deux populations de bulles sous pressions de formes et de tailles différentes (sphériques et ellipsoïdales aplaties), un double changement d'échelles est effectué. Le premier changement d'échelles revient à homogénéiser une matrice incompressible avec des bulles sphériques sous pression. Pour le deuxième changement d'échelles, des cavités ellipsoïdales aplaties sous pression sont ajoutées à ce matériau homogénéisé. L'estimation proposée est essentiellement basée sur le taux de dilatation de la matrice (lors du deuxième changement d'échelles). L'estimation proposée du taux de dilatation de la matrice dépend, bien entendu, du taux de déformation macroscopique, mais aussi, de la différence des pressions entre les deux populations de bulles (et non pas des pressions prises séparément). Au final, un modèle ayant la forme générale d'un modèle "de type" Gurson pour la surface de charge de plasticité effective se révèle pertinent. De plus, une disposition particulière des bulles aplaties le long de joints de grains (lors du deuxième changement d'échelles) peut avoir un effet important sur la surface de charge de plasticité effective, notamment dans le cas d'un chargement purement hydrostatique.
- pour l'élasticité des matériaux nanoporeux saturés avec prise en compte des effets de surface, il ressort que l'approche par motifs morphologiques représentatifs combinée à un modèle d'interface imparfaite cohérente offre un cadre théorique efficace : elle a été appliquée pour obtenir un modèle d'homogénéisation en élasticité des matériaux nanoporeux avec deux populations de bulles sous pressions de formes et de tailles différentes (sphériques et ellipsoïdales aplaties). Dans le cas d'application considéré, il ressort que l'effet de surface sur les bulles ellipsoïdales devient non-négligeable dès lors que leur taille (selon le grand axe de l'ellipsoïde) devient inférieure à une dizaine de nanomètres.
- pour l'endommagement et la rupture ductile par nucléation, croissance et coalescence de cavités, un nouveau modèle de zone cohésive est proposé. La démarche développée est assez générique pour être appliquée à d'autres modèles micromécaniques tridimensionnels d'endommagement et de rupture que celui utilisé dans ce travail. Le modèle de zone cohésive proposé varie en fonction de la triaxialité des contraintes. Lors de son application, le modèle de zone cohésive est capable de prendre en compte, "à la volée" lors du calcul, de l'évolution de l'état de contrainte en pointe de fissure.

- pour le comportement d'un matériau poreux constitué de cavités regroupées en amas et d'une matrice viscoplastique avec deux mécanismes de fluage, un modèle est proposé. Pour le cas d'application considéré, il ressort que le regroupement des cavités en amas n'a qu'un impact assez limité sur la vitesse de déformation effective du matériau poreux. Un point particulièrement intéressant est l'obtention d'un modèle d'homogénéisation assez simple pour ce matériau poreux à deux mécanismes de fluage et pertinent pour ce cas d'application, qui ne fait pas appel aux modèles d'homogénéisation à plusieurs potentiels plus compliqués à mettre en œuvre.
- pour le même matériau que celui étudié dans le point précédent, le cas particulier de pores et de grains de tailles similaires dans les amas est étudié. Le comportement anisotrope des grains est modélisé par un modèle de comportement en plasticité cristalline. Pour le cas d'application considéré, l'étude montre que l'effet de la taille relative des cavités par rapport à la taille des grains dans les amas est négligeable pour les microstructures à cavités sphériques (faible effet de l'anisotropie des grains). Pour des cavités de forme polyédrique, cet effet est plus important.
- un modèle d'homogénéisation est proposé pour décrire le comportement viscoplastique d'un polycristal poreux à cavités intragranulaires. Un point particulièrement intéressant est que, pour un chargement purement hydrostatique, le modèle micromécanique utilise un résultat obtenu pour un monocristal poreux idéalisé comme un laminé de rang infini (donc sur un matériau avec une géométrie différente). Un modèle complet est proposé en élasto-viscoplasticité pour le matériau d'étude.

Chapitre 2

Les combustibles nucléaires en dioxyde d'uranium et oxydes mixtes

Le cœur d'un réacteur à eau sous pression comprend plusieurs assemblages combustibles. Par exemple, les réacteurs français de type 900 MWe comportent 157 assemblages et ceux de type 1300 MWe comportent 193 assemblages. Dans ces deux types de réacteurs précités, chaque assemblage totalise 264 crayons combustibles disposés en un réseau à maille carrée de type 17x17, un tube d'instrumentation central et 24 tubes guides servant au passage des barres de contrôle (Couturier, 2021). Chaque crayon combustible est composé d'une gaine tubulaire en alliage de Zirconium fermée à chaque extrémité par un bouchon soudé à la gaine. Chaque gaine comprend une colonne de pastilles de combustible empilées les unes sur les autres. Cet ensemble constitué des pastilles et de la gaine est appelé crayon combustible et présente une longueur d'environ 4 m pour 1 cm de diamètre environ (Guillet *et al.*, 2008) (voir figure 2.1). Les combustibles nucléaires utilisés en France sont le dioxyde d'uranium UO_2 et un mélange de dioxyde d'uranium et de dioxyde de plutonium UO_2 - PuO_2 appelé combustible MOX ("Mixed OXide fuel"). Initialement, le crayon est pressurisé avec de l'hélium entre 15 et 31 bars afin de "contrebalancer" l'effet de la pression externe du fluide caloporteur sur la gaine. Chaque pastille de combustible se présente sous la forme d'un cylindre de 8.2 mm de diamètre et de 13.5 mm de hauteur environ (voir figure 2.2). Ces pastilles sont obtenues par frittage, leur conférant une porosité de fabrication de l'ordre de quelques %.

La "défense en profondeur" est le principe sur lequel est fondé la sûreté des centrales nucléaires : des niveaux multiples de protection, présents dès le stade de la conception de l'installation, ramènent à un niveau extrêmement faible le risque qu'un accident puisse avoir des conséquences graves à l'extérieur de la centrale (IRSN, 2019). Dans un REP, la prise en compte de ce concept implique l'existence de 3 barrières de confinement des produits radioactifs contenus dans le cœur du réacteur :

- la gaine (en alliage de zirconium) des crayons combustibles,
- le circuit primaire (généralement fait d'alliages d'acier) dans lequel l'eau primaire circule et refroidit les crayons combustibles,
- l'enceinte de confinement (en béton) qui est le bâtiment abritant le circuit primaire.

De façon générale, le travail de recherche présenté dans ce chapitre s'intéresse à la modélisation fine du comportement mécanique du combustible et de son interaction mécanique avec la première barrière lors d'un éventuel accident d'insertion de réactivité.

En fonctionnement normal, le champ de température dans la pastille de combustible est fortement hétérogène.

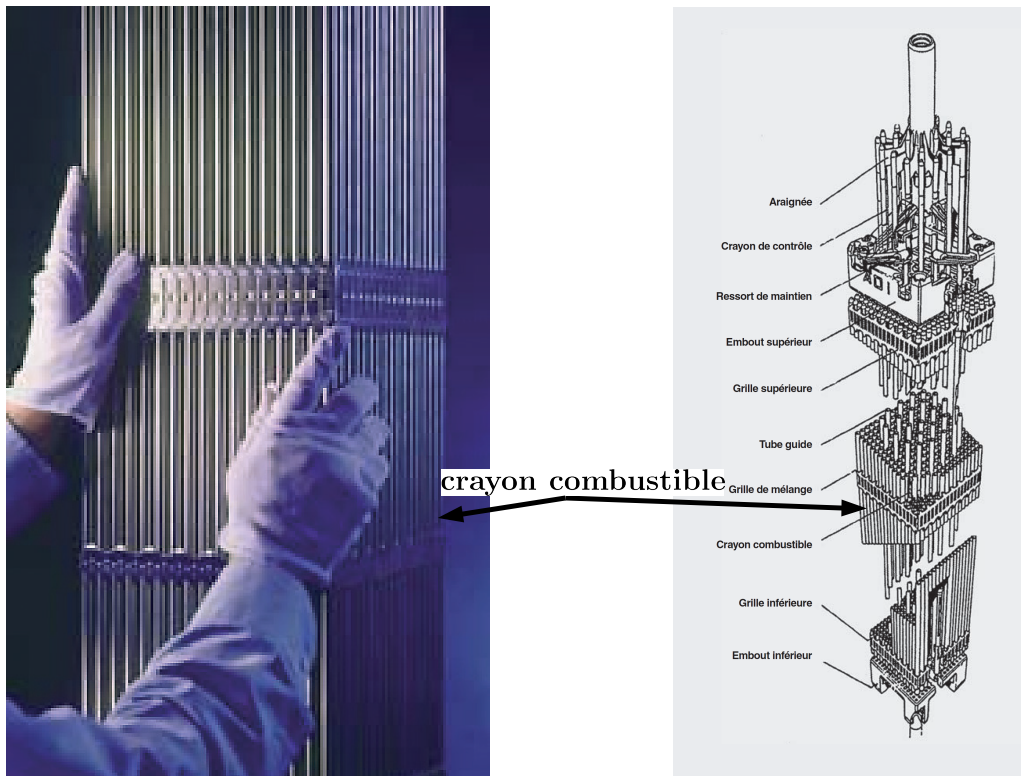


FIGURE 2.1 – Photographie d'une portion d'assemblage combustible (gauche) et schéma d'un assemblage combustible et d'une grappe de commande (droite) d'après (Guillet *et al.*, 2008).

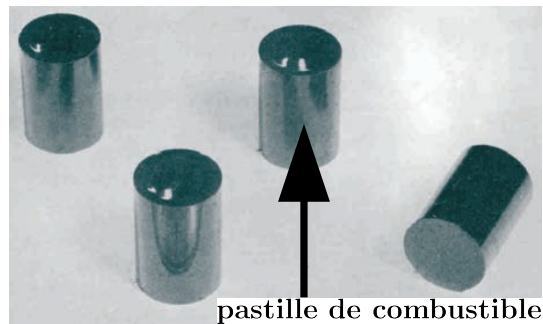


FIGURE 2.2 – Photographie de pastilles de combustible d'après (Guillet *et al.*, 2008).

Radialement, la température est maximale au centre (environ 950 – 1200 °C) et diminue vers la périphérie (environ 500 °C) (Guillet *et al.*, 2008). Les phénomènes en conditions de fonctionnement normal dans la pastille ont été synthétisés dans les analyses bibliographiques des thèses de Haller (2015) et Nkoumbou Kaptchouang (2019). Le lecteur est invité à consulter ces documents et les références associées pour plus d'informations. Néanmoins, les phénomènes importants suivants intervenant dans la pastille en début d'irradiation sont rappelés :

- création de fissures radiales et axiales (voir figure 2.3),
- prise d'une forme dite "de diablo" (voir figure 2.3),
- densification globale du matériau, qui se traduit notamment par une forte diminution de la densité des petits pores de fabrication et qui conduit à une variation de volume de l'ordre du %,
- gonflement (solide ou gazeux). Après un taux de combustion global d'environ 15 GWj/t, seul le gonflement est sensible et plus la densification. Cette unité (GWj/t) est utilisée pour évaluer l'énergie totale libérée au cours de la vie du combustible par unité de masse du combustible, en prenant soit la masse totale de l'oxyde, soit la masse de métal lourd (U ou U + Pu). En toute rigueur, cette définition correspond à celle

de la "combustion massive" et est souvent appelée improprement "taux de combustion". En France, l'unité est en général donnée en tonne de métal pour les REP,

- diminution du diamètre de la gaine par fluage, du fait de la pression externe du fluide caloporteur (eau primaire),
- fermeture du jeu initial entre la pastille et la gaine et création aux points de contact d'une couche de zircône (oxyde).

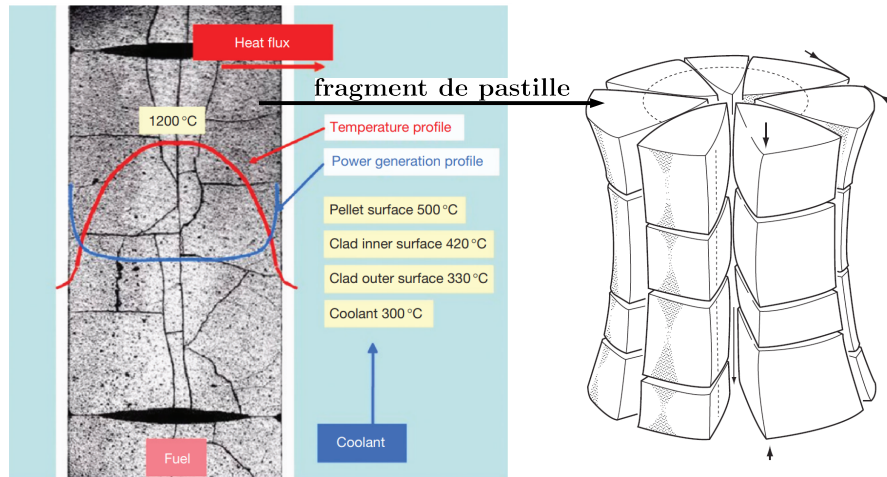


FIGURE 2.3 – Macrographie d'un combustible irradié : illustration de la fragmentation et des profils radiaux de température (gauche). Illustration de la forme de "diabolo" prise par une pastille de combustible (droite). D'après (Baron et Hallstadius, 2012).

Les transitoires de puissances les plus contraignants utilisés pour le dimensionnement du crayon combustible sont ceux obtenus lors d'un éventuel accident d'insertion de réactivité (RIA). Les phénomènes ont été synthétisés dans les analyses bibliographiques des thèses de Haller (2015) et Nkoumbou Kaptchouang (2019). Quelques éléments y sont repris ici. Ce type d'accident résulte d'une défaillance d'un des moyens de contrôle des réactions neutroniques du cœur, notamment la rupture mécanique et l'éjection d'une barre de commande en raison de la différence de pression entre le circuit primaire (à 155 bars) et l'enceinte de confinement (à pression atmosphérique). Cela conduit à un emballement local de la réactivité pendant quelques dizaines de millisecondes et à un pic de puissance, appelé "pulse" de puissance, dans le voisinage de la barre éjectée. Une quantité d'énergie significative est déposée dans les crayons combustibles se caractérisant par une augmentation rapide de la température du combustible (environ 10^4 K/s). Cela entraîne une dilatation rapide du combustible, un comblement du jeu entre la pastille et la gaine (si jeu non nul avant accident) et une augmentation importante de la pression interne des gaz de fission relâchés à travers les fissures libres du combustible. La question de sûreté est relative à l'intégrité de la gaine lors de tels transitoires de puissance. Plusieurs modes de rupture de gaine ont été observés. On retiendra les modes de rupture de gaine suivants, respectivement plutôt de type "déformation imposée" et "contrainte imposée" :

- une rupture fragile peut être obtenue suite à une interaction mécanique entre la pastille et la gaine et la dilatation du combustible (fortes contraintes dans la gaine). Ce type de rupture peut survenir plutôt en début de transitoire, lorsque la température de la gaine est encore assez basse et sur des combustibles à fort taux de combustion pour lesquels la gaine a subi une fragilisation due à la corrosion et à l'absorption d'hydrogène.

- pour une ductilité suffisante de gaine, l'augmentation continue de sa température provoque l'apparition d'un film de vapeur au niveau de la paroi extérieure de la gaine (phénomène appelé DNB pour "Departure from Nucleate Boiling"). Ce film de vapeur réduit le coefficient d'échange thermique entre la gaine et le fluide caloporteur, exacerbant la montée de température dans la gaine. À haute température, le relâchement des gaz de fission du combustible et l'augmentation de la pression interne dans la gaine provoque son ballonnement (gaine plus ductile à haute température, fortes déformations dans la gaine) et une éventuelle déchirure ductile.

Un programme d'essai, appelé CABRI REP-Na, a été réalisé par l'IRSN en coopération avec EDF pour l'étude du comportement des combustibles irradiés soumis à des transitoires rapides de puissance. Ces essais ont été réalisés dans la boucle à sodium du réacteur CABRI. Par la suite, le CABRI International Program (CIP) a été lancé en 2000. Il est piloté par l'IRSN sous l'égide de l'Organisation de Coopération et de Développement Économiques (OCDE) (Biard *et al.*, 2020). Il est prévu d'utiliser la nouvelle boucle à eau du réacteur CABRI pour étudier notamment la phase avancée du transitoire post-DNB. L'IRSN développe le code de calcul SCANAIR (Système de Codes pour l'Analyse d'Accidents d'Insertion de Réactivité) afin de simuler le comportement thermomécanique d'un crayon combustible de REP lors d'un RIA (Moal *et al.*, 2014). Ce code a vocation à préciser les conditions de perte d'intégrité des gaines, établir et vérifier les critères de sûreté et permet également l'interprétation de résultats expérimentaux comme ceux obtenus dans le programme CABRI REP-Na. De nombreux aspects physiques comme la thermique, la mécanique et la cinétique des gaz de fission sont couplés. Les calculs sont réalisés à l'échelle d'un crayon de combustible et le code s'appuie sur des simplifications géométriques (modélisation 1.5D) et de modélisation afin de garantir des temps de calculs faibles (environ 1 minute pour la simulation d'un essai du programme CABRI REP-Na). Axialement, une maille de la discrétisation spatiale du crayon peut comporter une voire plusieurs pastilles de combustible. Radialement, la discrétisation est plus fine et comporte en général une vingtaine de mailles selon le rayon de la pastille, avec une progression pour obtenir des tailles de maille plus petites en périphérie de la pastille.

De façon générale, il ressort que l'étude du comportement du combustible nucléaire (dioxyde d'uranium ou MOX) lors de ce type d'accident permet de contribuer, à l'échelle la plus fine, à l'analyse de l'intégrité de la première barrière de confinement de la matière radioactive et des produits de fission associés. Deux particularités fortes de l'étude du comportement de ces matériaux sont, d'une part, l'évolution constante de leur microstructure lors de leur vie en réacteur (comme l'apparition de bulles saturées par des gaz de fission ou la modification de la taille des grains dans certaines zones) et d'autre part, l'extrême difficulté à procéder à des mesures locales en ligne de leur comportement. Ces deux particularités font que la modélisation multi-échelles constitue une démarche intéressante dans la prédiction quantitative du comportement de ces matériaux après un temps donné de séjour en réacteur. Comme énoncé en introduction, les modèles micromécaniques présentés dans les sections suivantes ont pour but, du point de vue appliqué, de prendre en compte le plus explicitement possible certains effets de l'irradiation tout en restant suffisamment simplifiés pour être intégrables et utilisables :

- directement dans un code de calcul métier tel que le code SCANAIR (section 2.1 sur la surface de charge de plasticité, section 2.2 sur le comportement en élasticité, sections 2.4 et 2.5 sur le comportement viscoplastique),
- et/ou dans un code de calcul de structure par éléments finis plus générique, tel que le code XPER développé à l'IRSN pour traiter de la multifissuration des milieux hétérogènes.

Dans ce dernier cas, un fragment de pastille peut être finement modélisé et simulé avec XPER et il convient

de discuter comment les résultats du code SCANAIR peuvent être utilisés pour déterminer les conditions de chargement macroscopique à imposer sur ce fragment de pastille (section 2.3 sur l'endommagement et la rupture).

2.1 Surface de charge de plasticité pour un matériau biporeux saturé

Les résultats présentés ci-dessous jusqu'à la sous-section 2.1.4 incluse ont été obtenus en collaboration avec Pierre Suquet, Yann Monerie et Hervé Moulinec. Ils ont été publiés dans (Vincent et al., 2014a,b).

Ce travail a pour but de déterminer un modèle analytique pour décrire la surface de charge de plasticité effective pour un matériau biporeux à deux populations de cavités de tailles et de formes différentes : des bulles intragranulaires sphériques à une échelle inférieure et des bulles intergranulaires ellipsoïdales aplaties ("oblates") à une échelle supérieure. Ces cavités sont saturées par un fluide ou un gaz et sont soumises à des pressions internes qui peuvent être différentes selon les deux populations de cavités. Elles sont distribuées de façon aléatoire (isotrope) dans le matériau, à la fois en espace et en orientation (pour les bulles ellipsoïdales). Une telle microstructure représente une simplification d'une microstructure caractéristique de dioxyde d'uranium fortement irradié en conditions REP. En effet, l' UO_2 est un matériau polycristallin qui présente, lorsque fortement irradié, une microstructure particulière à plusieurs populations de cavités sous pressions de tailles et de formes différentes comme cela est illustré sur la figure 2.4 (Kashibe et al., 1993; Lösönen, 2000; Kashibe et Une, 1991) :

- à l'échelle inférieure (échelle microscopique), une première population de cavités de forme plutôt sphérique (arrondie) est observée à l'intérieur des grains. La taille de ces bulles intragranulaires est de l'ordre du nanomètre, taille bien inférieure à la taille des grains qui est d'environ $10 \mu\text{m}$ (Olander, 1976; Dherbey et al., 2002; Kashibe et Une, 1991).
- à l'échelle supérieure (échelle mésoscopique), une deuxième population de cavités, plutôt aplatie, est située sur les joints de grain. La taille de ces bulles intergranulaires est de l'ordre du micron.

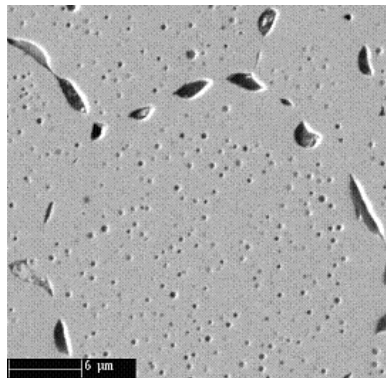


FIGURE 2.4 – Bulles intragranulaires et intergranulaires dans le combustible UO_2 irradié à 23.4 GWj/t porté à 2000 K pendant approximativement 3 h (Dubourg et al., 2005).

Ces cavités sont remplies par des gaz de fission avec des pressions différentes dans les bulles intragranulaires et intergranulaires. En conditions de RIA, la température du matériau augmente fortement ainsi que la pression dans les bulles. A haute température, la céramique polycristalline d' UO_2 est ductile (apparition de déformation irréversible avant rupture), les cavités croissent avec le chargement et certaines coalescent aux joints de grain. Une partie des interconnexions ainsi formées peut alors croître et aboutir à la création d'une microfissure (Tottle, 1965), mécanisme rappelant fortement la rupture ductile dans les métaux. La taille caractéristique du matériau

polycristallin à l'échelle macroscopique est bien supérieure à celle des deux populations de bulles pré-citées. Le comportement macroscopique de ce matériau est obtenu en effectuant deux procédures d'homogénéisation successives : une première depuis l'échelle microscopique vers l'échelle mésoscopique et une seconde depuis l'échelle mésoscopique vers l'échelle macroscopique, comme cela est illustré sur la figure 2.5.

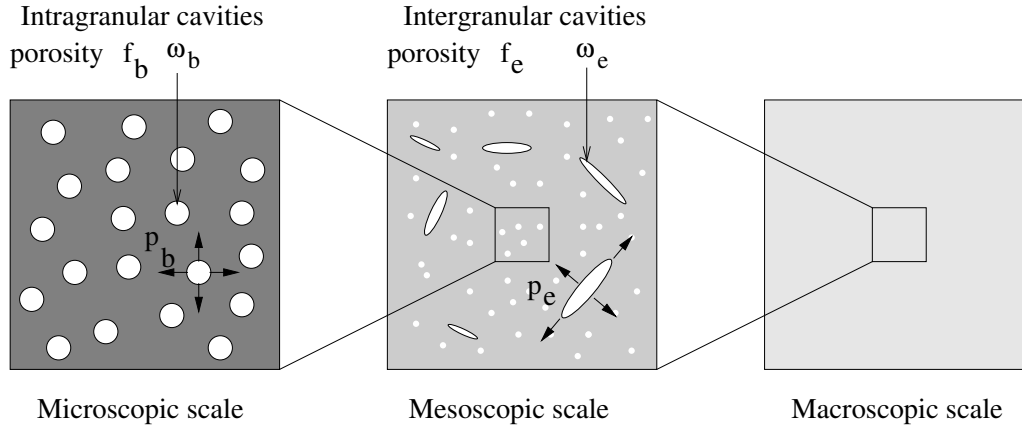


FIGURE 2.5 – Deux procédures d'homogénéisation successives (Vincent *et al.*, 2009).

La première étape revient à homogénéiser un matériau composé d'une matrice de von Mises et de cavités sphériques sous pression distribuées de façon isotrope. Le modèle de Gurson (1977), avec prise en compte de la pression dans les cavités, est utilisé pour ce premier changement d'échelles. Ce modèle a notamment l'avantage de présenter une forme explicite du potentiel de dissipation à l'échelle mésoscopique, ce qui est nécessaire pour la seconde étape d'homogénéisation. La seconde étape revient à déterminer la surface de charge de plasticité effective pour un matériau poreux saturé, composé d'une matrice de Gurson et de cavités ellipsoïdales sous pression distribuées aléatoirement. L'objectif est d'aboutir à une expression analytique simple de la surface d'écoulement effective d'un tel matériau biporeux saturé en s'appuyant sur l'étude précédente de Vincent *et al.* (2009) où deux bornes supérieures rigoureuses et une estimation de la surface d'écoulement effective ont été obtenues. La première borne, basée sur la méthode variationnelle de Ponte Castañeda (1991), également appelée *méthode sécante modifiée* (Suquet, 1995; Ponte Castañeda et Suquet, 1998), était précise à faible triaxialité des contraintes. La deuxième borne, obtenue en généralisant l'approche de Gurson (1977) et de Gologanu *et al.* (1994) aux matériaux compressibles (procédure d'analyse limite) s'était révélée précise à forte triaxialité des contraintes. Enfin, l'estimation appelée *modèle à N-phases* et inspirée de Bilger *et al.* (2002) était à nouveau basée sur la méthode variationnelle de Ponte Castañeda (1991) et correspondait à la meilleure des deux bornes à forte et faible triaxialité des contraintes. Cependant, son utilisation dans un code de calcul de structure par éléments finis nécessite de résoudre, en chaque point de Gauss, un ensemble de $4(N - 1)$ équations non linéaires, ce qui engendre un coût numérique significatif pour le calcul de structure. L'objectif est donc de proposer un modèle analytique de la surface d'écoulement effective qui soit à la fois précis et peu coûteux en temps de calcul. Le travail de Vincent *et al.* (2014a,b) a conduit à proposer un modèle "de type" Gurson ou Gurson-Tvergaard-Needleman (GTN) de la surface de charge de plasticité effective sous la forme suivante :

$$\frac{1}{\beta} \left(\frac{\Sigma_{eq}}{\sigma_0} \right)^2 + \frac{1}{\alpha} \cosh \left(\frac{3}{2} \left(\frac{\Sigma_m}{\sigma_0} - \frac{\bar{\Sigma}_m^- + \bar{\Sigma}_m^+}{2\sigma_0} \right) \right) - 1 = 0, \quad (2.1)$$

où Σ_m est la contrainte macroscopique hydrostatique, Σ_{eq} est la contrainte macroscopique de von Mises, $\Sigma_m = 1/3 \text{Tr}(\Sigma)$, $\Sigma_{eq} = \sqrt{3/2 \Sigma^d : \Sigma^d}$, $\Sigma^d = \Sigma - \Sigma_m \mathbf{i}$ est la partie déviatorique de Σ , σ_0 est la limite

d'élasticité du matériau sans cavité, \mathbf{i} est le tenseur identité d'ordre 2 et l'opérateur \cdot correspond au produit doublement contracté. Les contraintes particulières $\bar{\Sigma}_m^+$ et $\bar{\Sigma}_m^-$ représentent les contraintes d'écoulement sous taux de déformation purement hydrostatique (correspondant respectivement à une contraction et une dilatation du matériau) et α et β sont deux fonctions scalaires :

$$\alpha = \cosh\left(\frac{3\bar{\Sigma}_m^+ - \bar{\Sigma}_m^-}{4\sigma_0}\right), \quad \beta = \left(\frac{\bar{\Sigma}_{eq}}{\sigma_0}\right)^2 \frac{\alpha}{\alpha - 1}, \quad (2.2)$$

où $\bar{\Sigma}_{eq}$ est la contrainte d'écoulement du matériau sous taux de déformation purement déviatorique. Les fonctions α , β , $\bar{\Sigma}_m^+$ et $\bar{\Sigma}_m^-$ dépendent de la forme et de la fraction volumique des deux populations de cavités et des pressions internes p_b (dans les bulles intragranulaires) et p_e (dans les bulles intergranulaires). Ainsi, le critère de plasticité proposé est un critère de type Gurson passant par les trois points particuliers $\bar{\Sigma}_m^+$, $\bar{\Sigma}_m^-$ et $\bar{\Sigma}_{eq}$ comme cela est illustré sur la figure 2.6.

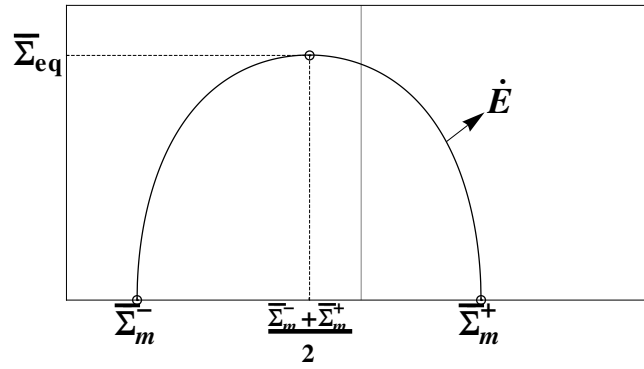


FIGURE 2.6 – Contrainte macroscopique équivalente en fonction de la contrainte macroscopique hydrostatique. Critère de type GTN passant par les trois points particuliers $(\bar{\Sigma}_m^+, 0)$, $(\bar{\Sigma}_m^-, 0)$, $(\frac{\bar{\Sigma}_m^- + \bar{\Sigma}_m^+}{2}, \bar{\Sigma}_{eq})$ correspondant respectivement à des taux de déformation macroscopiques purement hydrostatiques (positif ou négatif) et purement déviatorique (Vincent *et al.*, 2014a).

Des approximations précises pour ces trois points particuliers sont dérivées du champ de vitesse compressible de Vincent *et al.* (2009) qui généralise aux matériaux compressibles l'approche de Gologanu *et al.* (1994). Le point central de l'analyse réside dans l'estimation du taux de dilatation moyen dans la matrice.

2.1.1 Position du problème

Le volume élémentaire représentatif à l'échelle macroscopique est noté V . Le volume occupé par les bulles intergranulaires est noté ω_e et celui occupé par les bulles intragranulaires est noté ω_b . Les porosités f_b , f_e et la porosité totale f s'écrivent :

$$f_b = \frac{|\omega_b|}{|V - \omega_e|}, \quad f_e = \frac{|\omega_e|}{|V|}, \quad f = f_e + f_b - f_e f_b. \quad (2.3)$$

Les cavités sphériques intragranulaires sont remplies de gaz de fission à la pression p_b . Les cavités plus grandes, intergranulaires et ellipsoïdales, sont remplies de gaz de fission à la pression p_e . Le volume élémentaire représentatif est soumis à un taux de déformation effectif $\dot{\mathbf{E}}$.

La contrainte et la vitesse de déformation effectives sont les moyennes volumiques des champs locaux de contrainte et de vitesse de déformation sur un volume élémentaire représentatif V comprenant un domaine matriciel et un domaine occupé par des cavités désigné par ω (ω_b ou ω_e selon la transition d'échelle considérée). Les cavités sont soumises à une pression uniforme p (p_b ou p_e selon l'échelle considérée). La contrainte et le taux

de déformation effectifs sont définis par :

$$\Sigma = \langle \sigma \rangle = \frac{1}{|V|} \int_{V-\omega} \sigma \, dx - \frac{|\omega|}{|V|} p \mathbf{i}, \quad (2.4)$$

$$\dot{\mathbf{E}} = \langle \dot{\varepsilon} \rangle = \frac{1}{|V|} \left(\int_{V-\omega} \dot{\varepsilon} \, dx - \int_{\partial\omega} \dot{\mathbf{u}} \otimes_s \mathbf{n} \, ds \right), \quad (2.5)$$

où σ et $\dot{\varepsilon}$ sont les champs locaux de contrainte et de vitesse de déformation, \mathbf{n} est le vecteur normal unitaire sur la surface des cavités pointant de la matrice vers l'intérieur de la cavité et $\dot{\mathbf{u}}$ est le champ de vitesse local. Le produit tensoriel symétrique de $\mathbf{a} \otimes_s \mathbf{b}$ des deux vecteurs \mathbf{a} et \mathbf{b} est défini comme $(\mathbf{a} \otimes_s \mathbf{b})_{ij} = 1/2 (a_i b_j + a_j b_i)$.

La procédure d'homogénéisation est basée sur la minimisation de la dissipation plastique moyenne dans le volume élémentaire représentatif sous vitesse de déformation macroscopique imposée. Le principe variationnel s'applique aux deux changements d'échelle :

$$\Sigma = \frac{\partial \Phi}{\partial \dot{\mathbf{E}}}(\dot{\mathbf{E}}, p), \quad (2.6)$$

avec

$$\Phi(\dot{\mathbf{E}}, p) = \inf_{\dot{\mathbf{u}} \in \mathcal{K}(\dot{\mathbf{E}})} \frac{1}{|V|} \left[\int_{V-\omega} \varphi(\varepsilon(\dot{\mathbf{u}})) \, dx + p \int_{\partial\omega} \dot{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{n} \, ds \right], \quad (2.7)$$

où $\mathcal{K}(\dot{\mathbf{E}})$ représente l'ensemble des champs de vitesse $\dot{\mathbf{u}}$ satisfaisant $\dot{\mathbf{u}} = \dot{\mathbf{E}} \cdot \mathbf{x}$ sur ∂V . Le potentiel de dissipation de la matrice est noté φ et Φ est le potentiel de dissipation effectif du domaine $P^{\text{hom}}(p)$:

$$P^{\text{hom}}(p) = \{ \Sigma \text{ tels que } \Sigma : \dot{\mathbf{E}} \leq \Phi(\dot{\mathbf{E}}, p) \text{ pour tout } \dot{\mathbf{E}} \}. \quad (2.8)$$

La frontière du domaine $P^{\text{hom}}(p)$ est la surface d'écoulement effective du matériau et correspond aux contraintes dérivant du potentiel Φ :

$$\text{pour } \dot{\mathbf{E}} \neq \mathbf{0}, \Sigma = \frac{\partial \Phi}{\partial \dot{\mathbf{E}}}(\dot{\mathbf{E}}, p) \text{ est sur la surface d'écoulement effective.} \quad (2.9)$$

Pour la première transition d'échelle, le potentiel de dissipation plastique φ correspond à un matériau de von Mises, incompressible ($\varphi(\dot{\varepsilon}) = \sigma_0 \dot{\varepsilon}_{eq}$). En généralisant l'approche de Gurson pour tenir compte de la pression interne dans les cavités, [Vincent et al. \(2009\)](#) ont établi que le potentiel effectif (mésoscopique) s'écrit :

$$\Phi^b(\dot{\mathbf{E}}, p_b) = \Phi^{\text{Gur}}(\dot{\mathbf{E}}) - 3p_b \dot{E}_m, \quad (2.10)$$

où le potentiel de Gurson correspondant au cas drainé ($p_b = 0$) s'écrit :

$$\Phi^{\text{Gur}}(\dot{\mathbf{E}}) = \sigma_0 \int_{f_b^*}^1 \left(\frac{4}{y^2} (\dot{E}_m)^2 + \frac{1}{q_3} (\dot{E}_{eq})^2 \right)^{\frac{1}{2}} dy. \quad (2.11)$$

\dot{E}_m est le taux de déformation hydrostatique et \dot{E}_{eq} est la norme de von Mises du taux de déformation, $\dot{E}_m = 1/3 \text{Tr}(\dot{\mathbf{E}})$, $\dot{E}_{eq} = \sqrt{2/3 \dot{\mathbf{E}}^d : \dot{\mathbf{E}}^d}$, $\dot{\mathbf{E}}^d = \dot{\mathbf{E}} - \dot{E}_m \mathbf{i}$ est la partie déviatorique de $\dot{\mathbf{E}}$. Dans l'analyse initiale de Gurson $f_b^* = f_b$ et $q_3 = 1$. La porosité modifiée $f_b^* = q_1 f_b$ et le paramètre q_3 ont été introduits par [Koplik et Needleman \(1988\)](#) pour retrouver des résultats de calculs sur cellules unitaires. La surface d'écoulement effective associée à (2.10) correspond à un critère généralisé de Gurson-Tvergaard-Needleman (GTN) ([Gurson, 1977](#); [Koplik et Needleman, 1988](#); [Tvergaard, 1990](#)) :

$$q_3 \left(\frac{\Sigma_{eq}}{\sigma_0} \right)^2 + 2q_1 f_b \cosh \left(\frac{3 \Sigma_m + p_b}{2 \sigma_0} \right) - 1 - (q_1 f_b)^2 = 0. \quad (2.12)$$

Pour la deuxième transition d'échelle, le potentiel de dissipation local φ dans (2.7) est le potentiel effectif mésoscopique (2.10) correspondant à un matériau compressible et le domaine des cavités est constitué des bulles intergranulaires $\omega = \omega_e$ sous pression $p = p_e$. Le potentiel effectif de (2.7) est le potentiel effectif macroscopique $\Phi(\dot{\mathbf{E}}, p_b, p_e)$. Une microstructure particulière est supposée à l'échelle mésoscopique, en considérant un assemblage d'ellipsoïdes creux co-focaux. Toutes les cavités intergranulaires sont supposées être de forme sphéroïdale et de même rapport de forme w , entre le demi-axe dans la direction de l'axe du sphéroïde et le demi-axe dans le plan orthogonal à cette direction. Les cavités intergranulaires sont donc "oblates" lorsque $w < 1$, sphériques lorsque $w = 1$ et "prolates" lorsque $w > 1$. Chaque cavité est entourée par un domaine ellipsoïdal de matrice co-focal. L'espace entier est rempli de ces ellipsoïdes auto-similaires d'orientation et de taille quelconques (voir figure 2.7).

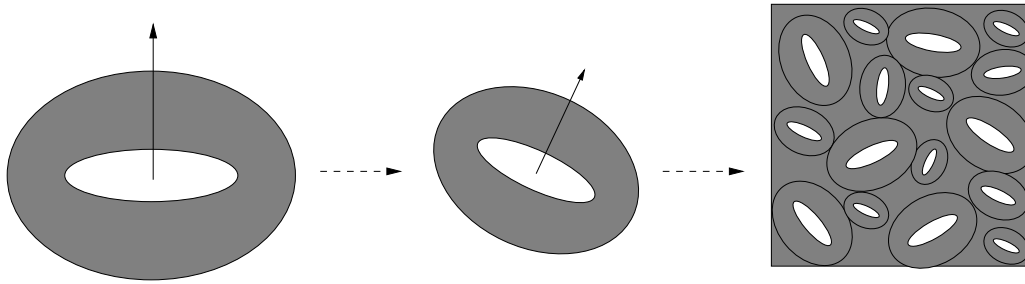


FIGURE 2.7 – Assemblage d'ellipsoïdes creux auto-similaires d'orientation et de taille aléatoires (Vincent *et al.*, 2009).

Dans (Vincent *et al.*, 2009), les égalités suivantes ont été démontrées :

$$\Phi(\dot{\mathbf{E}}, p_b, p_e) = \Phi(\dot{\mathbf{E}}, p_b - p_e, 0) - 3p_e \dot{E}_m = \Phi(\dot{\mathbf{E}}, 0, p_e - p_b) - 3p_b \dot{E}_m. \quad (2.13)$$

Cela signifie que si les deux populations de cavités sont sous pressions (i.e. saturées), avec une pression p_b dans les petites cavités et p_e dans les grandes cavités et si la matrice est incompressible à l'échelle microscopique, alors il suffit de réaliser la seconde transition d'échelle pour une matrice poreuse drainée (i.e. $p_b = 0$), en considérant que la pression dans les grandes cavités est égale à $p_e - p_b$. De manière équivalente, il suffit de déterminer le potentiel $\Phi(\dot{\mathbf{E}}, p_b - p_e, 0)$ pour une matrice poreuse saturée avec une pression $p_b - p_e$, en considérant que la pression dans les grandes cavités est nulle.

Dans (Vincent *et al.*, 2009), une limite supérieure rigoureuse a été établie en généralisant aux matériaux compressibles l'approche de Gologanu *et al.* (1994) et en utilisant pour un unique ellipsoïde creux le champ de vitesse suivant :

$$\dot{\mathbf{u}} = \dot{\mathbf{u}}^{Gol} + A\mathbf{x}, \quad (2.14)$$

où A est une constante et $\dot{\mathbf{u}}^{Gol}$ est dérivé du champ de vitesse incompressible de Gologanu *et al.* (1994) (ajout d'un partie non-axisymétrique au taux de déformation effectif). Une construction détaillée du champ de vitesse (2.14) est donnée dans (Vincent *et al.*, 2008, 2009). Ce champ de vitesse est ensuite étendu à tout l'assemblage et le champ de taux de déformation s'écrit :

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}} = \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{Gol} + A\mathbf{i}, \quad (2.15)$$

où le champ $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{Gol}$ est incompressible et A représente le taux de dilatation dans la matrice qui est supposé

uniforme :

$$\dot{\epsilon}_m = A \quad \text{dans la matrice.} \quad (2.16)$$

Le point essentiel de (Vincent *et al.*, 2014a) consiste à déterminer le taux de dilatation moyen A dans la matrice pour tout chargement p_b , p_e et $\dot{\mathbf{E}}$. L'objectif est d'obtenir une approximation analytique de ce taux de dilatation.

2.1.2 Cavités intergranulaires sphériques

Lorsque les cavités intergranulaires sont sphériques, (Vincent *et al.*, 2009) ont montré que le potentiel effectif peut être borné par :

$$\Phi^+(\dot{\mathbf{E}}, p_b, p_e) = \inf_A \phi(A, \dot{\mathbf{E}}, p) - 3p_e \dot{E}_m, \quad (2.17)$$

où $p = p_b - p_e$ et

$$\phi(A, \dot{\mathbf{E}}, p) = \sigma_0 \int_{f_e}^1 \int_{f_b^*}^1 \sqrt{4 \frac{A^2}{y^2} + 4 \frac{(\dot{E}_m - A)^2}{q_3 z^2} + \frac{(\dot{E}_{eq})^2}{q_3}} dy dz - 3(1 - f_e)pA. \quad (2.18)$$

La surface d'écoulement effective correspondante à ce potentiel (2.17) est définie par les équations paramétriques suivantes :

$$\left. \begin{aligned} \Sigma_m &= \frac{1}{3} \frac{\partial \Phi^+}{\partial \dot{E}_m}(\dot{\mathbf{E}}, p_b, p_e) = -p_e + \frac{4}{3} \frac{\sigma_0}{q_3} \int_{f_b^*}^1 \int_{f_e}^1 \frac{\dot{E}_m - A_{\text{sol}}}{z^2 \sqrt{4 \frac{A_{\text{sol}}^2}{y^2} + 4 \frac{(\dot{E}_m - A_{\text{sol}})^2}{q_3 z^2} + \frac{(\dot{E}_{eq})^2}{q_3}}} dz dy, \\ \Sigma_{eq} &= \frac{\partial \Phi^+}{\partial \dot{E}_{eq}}(\dot{\mathbf{E}}, p_b, p_e) = \frac{\sigma_0}{q_3} \int_{f_b^*}^1 \int_{f_e}^1 \frac{\dot{E}_{eq}}{\sqrt{4 \frac{A_{\text{sol}}^2}{y^2} + 4 \frac{(\dot{E}_m - A_{\text{sol}})^2}{q_3 z^2} + \frac{(\dot{E}_{eq})^2}{q_3}}} dz dy, \end{aligned} \right\} \quad (2.19)$$

où A_{sol} désigne la solution du problème de minimisation (2.17). L'objectif est d'en déterminer une expression analytique approchée et ensuite, de l'utiliser pour proposer une expression analytique simple pour la surface d'écoulement effective. Cette approximation de A_{sol} est basée sur quelques propriétés générales dont les démonstrations sont données en Annexe A de (Vincent *et al.*, 2014a). On note que A_{sol} dépend de p_b et p_e uniquement par l'intermédiaire de leur différence, notée dans la suite $p = p_b - p_e$.

— Propriété 1 : $A_{\text{sol}}(p, \dot{\mathbf{E}})$ est une fonction impaire de $(p, \dot{\mathbf{E}})$:

$$A_{\text{sol}}(-p, -\dot{\mathbf{E}}) = -A_{\text{sol}}(p, \dot{\mathbf{E}}). \quad (2.20)$$

— Propriété 2 : $A_{\text{sol}}(p, \dot{\mathbf{E}})$ est une fonction monotone croissante de p .

— Propriété 3 :

$$\lim_{p \rightarrow \pm p^\infty} A_{\text{sol}}(p, \dot{\mathbf{E}}) = \pm \infty \quad \text{où} \quad p^\infty = \frac{2}{3} \frac{\sigma_0}{1 - f_e} I_0, \quad (2.21)$$

et :

$$A_{\text{sol}}(p, \dot{\mathbf{E}}) \sim \pm \sqrt{\frac{\sigma_0}{12q_3(1 - f_e)}} \sqrt{4\dot{E}_m^2 I_1 + \dot{E}_{eq}^2 I_2} \frac{1}{\sqrt{p^\infty \mp p}} \quad \text{lorsque} \quad p \rightarrow \pm p^\infty, \quad (2.22)$$

où I_0 , I_1 , and I_2 sont trois fonctions de f_e et f_b^* (voir les définitions dans l'Annexe A de (Vincent *et al.*, 2014a) et les formes analytiques dans l'Annexe C de (Vincent *et al.*, 2014a)).

— Propriété 4 : $A_{\text{sol}}(p, \dot{\mathbf{E}}) = 0$ (taux de dilatation moyen de la matrice nul) lorsque $p = p^0(\dot{\mathbf{E}})$ avec

$$p^0(\dot{\mathbf{E}}) = \frac{-4\sigma_0(1 - f_b^*)}{3\sqrt{q_3}(1 - f_e)} \dot{E}_m \int_{f_e}^1 \frac{1}{z^2} \left(4 \frac{\dot{E}_m^2}{z^2} + \dot{E}_{eq}^2 \right)^{-1/2} dz. \quad (2.23)$$

De plus,

$$\frac{\partial A_{\text{sol}}}{\partial p}(p^0, \dot{\mathbf{E}}) = \frac{3(1-f_e)}{4\sigma_0\sqrt{q_3}(1-f_b^*)} \frac{1}{\left[\frac{1}{f_b^*} \left(4\dot{E}_m^2 J_1 + \dot{E}_{eq}^2 J_2 \right) + \frac{\dot{E}_{eq}^2}{q_3} J_1 \right]}, \quad (2.24)$$

où J_1 et J_2 sont des fonctions de f_b^* , f_e et $\dot{\mathbf{E}}$ (voir Annexe A de (Vincent *et al.*, 2014a)).

— Propriété 5 : $A_{\text{sol}}(p, \dot{\mathbf{E}}) = \dot{E}_m$ (pas d'évolution de la fraction volumique des bulles intergranulaires) lorsque $p = p^1(\dot{\mathbf{E}})$ avec

$$p^1(\dot{\mathbf{E}}) = \frac{4\sigma_0}{3} \dot{E}_m \int_{f_b^*}^1 \frac{1}{y^2} \left(4\frac{\dot{E}_m^2}{y^2} + \frac{\dot{E}_{eq}^2}{q_3} \right)^{-1/2} dy. \quad (2.25)$$

De plus,

$$\frac{\partial A_{\text{sol}}}{\partial p}(p^1, \dot{\mathbf{E}}) = \frac{3q_3}{4\sigma_0} \frac{1}{\left(\frac{1}{f_e} J_3 + \dot{E}_{eq}^2 J_4 \right)}, \quad (2.26)$$

où J_3 et J_4 sont des fonctions de f_b^* , f_e et $\dot{\mathbf{E}}$ (voir Annexe A de (Vincent *et al.*, 2014a)).

Le cas où $\dot{E}_m > 0$ est uniquement considéré sans perte de généralité : le cas où $\dot{E}_m < 0$ peut en être déduit en changeant les signes de p et de A_{sol} et en utilisant (2.20). L'intervalle $] -p^\infty, +p^\infty[$ est découpé en trois sous-intervalles et une approximation explicite de A_{sol} est proposée :

$$\bar{A}(\dot{\mathbf{E}}, p) = \begin{cases} A_-(\dot{\mathbf{E}}, p) & \text{lorsque } -p^\infty < p \leq p^0, \\ A_0(\dot{\mathbf{E}}, p) & \text{lorsque } p^0 \leq p \leq p^1, \\ A_+(\dot{\mathbf{E}}, p) & \text{lorsque } p^1 \leq p < p^\infty. \end{cases} \quad (2.27)$$

Les branches sont choisies de façon à ce que la singularité de $A_{\text{sol}}(p, \dot{\mathbf{E}})$ en $p = \pm p^\infty$ soit retrouvée, ainsi que les valeurs exactes de $A_{\text{sol}}(p, \dot{\mathbf{E}})$ et $\frac{\partial A_{\text{sol}}}{\partial p}(p, \dot{\mathbf{E}})$ en $p = p^0$ et $p = p^1$. Les fonctions proposées sont les suivantes :

$$A_-(\dot{\mathbf{E}}, p) = -C_- \left(\frac{\sqrt{p^\infty + p^0}}{\sqrt{p^\infty + p}} - 1 \right) + D_-(p - p^0) \quad (2.28)$$

avec

$$\left. \begin{aligned} C_- &= \frac{1}{\sqrt{p^\infty + p^0}} \sqrt{\frac{\sigma_0}{12q_3(1-f_e)}} \sqrt{4\dot{E}_m^2 I_1 + E_{eq}^2 I_2}, \\ D_- &= \frac{\partial A_{\text{sol}}}{\partial p}(p^0) - \frac{C_-}{2(p^\infty + p^0)}. \end{aligned} \right\} \quad (2.29)$$

$$A_+(\dot{\mathbf{E}}, p) = C_+ \left(\frac{\sqrt{p^\infty - p^1}}{\sqrt{p^\infty - p}} - 1 \right) + D_+(p - p^1) + \dot{E}_m \quad (2.30)$$

avec

$$\left. \begin{aligned} C_+ &= \frac{1}{\sqrt{p^\infty - p^1}} \sqrt{\frac{\sigma_0}{12q_3(1-f_e)}} \sqrt{4\dot{E}_m^2 I_1 + E_{eq}^2 I_2}, \\ D_+ &= \frac{\partial A_{\text{sol}}}{\partial p}(p^1) - \frac{C_+}{2(p^\infty - p^1)}. \end{aligned} \right\} \quad (2.31)$$

$$A_0(\dot{\mathbf{E}}, p) = (p - p^0) \left(\frac{E}{2}(p - p^1)^2 + F(p - p^1) + \frac{\dot{E}_m}{p^1 - p^0} \right) \quad (2.32)$$

avec

$$\left. \begin{aligned} E &= \frac{2}{(p^1 - p^0)^2} \left(\frac{\partial A_{\text{sol}}}{\partial p}(p^0) + \frac{\partial A_{\text{sol}}}{\partial p}(p^1) - \frac{2\dot{E}_m}{p^1 - p^0} \right), \\ F &= \frac{1}{p^1 - p^0} \left(\frac{\partial A_{\text{sol}}}{\partial p}(p^1) - \frac{\dot{E}_m}{p^1 - p^0} \right). \end{aligned} \right\} \quad (2.33)$$

La fonction approchée (2.27) est ensuite comparée dans (Vincent *et al.*, 2014a) avec la solution exacte A_{sol} pour trois différents taux de triaxialité du taux de déformation macroscopique : $\dot{E}_m/\dot{E}_{eq} = 0$, $\dot{E}_m/\dot{E}_{eq} = +\infty$ et $\dot{E}_m/\dot{E}_{eq} = 1$. Une bonne adéquation est obtenue. On note que des expressions analytiques des intégrales intervenant dans p^0 , p^1 , J_1 , J_2 , J_3 et J_4 pour les cas $\dot{E}_m = 0$ et $\dot{E}_{eq} = 0$ sont établies. Par contre, elles sont estimées numériquement dans le cas $\dot{E}_m = \dot{E}_{eq}$. A titre d'illustration, un exemple de comparaison est donné sur la figure 2.8 dans le cas purement hydrostatatique.

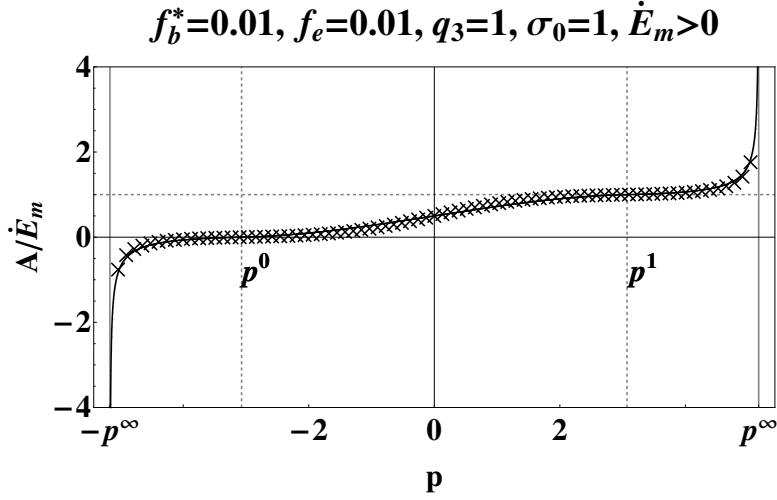


FIGURE 2.8 – Cavités intergranulaires sphériques. Taux de déformation macroscopique purement hydrostatatique ($\dot{E}_{eq} = 0$). Comparaison entre le taux de dilatation exact A_{sol} (croix) et l'approximation \bar{A} (trait plein) en fonction de la différences des pressions $p = p_b - p_e$ (Vincent *et al.*, 2014a).

L'approximation \bar{A} permet d'établir une borne supérieure, notée $\bar{\Phi}$, pour le potentiel de dissipation effectif :

$$\bar{\Phi}(\dot{\mathbf{E}}, p_b, p_e) = \phi(\bar{A}(p, \dot{\mathbf{E}}), \dot{\mathbf{E}}, p) - 3p_e \dot{E}_m. \quad (2.34)$$

La surface d'écoulement effective associée est obtenue par les équations paramétriques suivantes :

$$\Sigma_m = \frac{1}{3} \frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial \dot{E}_m}(\dot{\mathbf{E}}, p_b, p_e), \quad \Sigma_{eq} = \frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial \dot{E}_{eq}}(\dot{\mathbf{E}}, p_b, p_e). \quad (2.35)$$

Il est à noter que ces équations paramétriques (2.35) ne se réduisent pas aux équations paramétriques (2.19) en changeant A_{sol} par \bar{A} . En effet, les dérivées de \bar{A} par rapport à \dot{E}_m et \dot{E}_{eq} doivent être prises en compte.

Comme cela est illustré sur la figure 2.6, une surface de charge de plasticité effective de type GTN est recherchée passant par les trois points suivants : $(\bar{\Sigma}_m^-, 0)$ et $(\bar{\Sigma}_m^+, 0)$ sur l'axe hydrostatatique et le point $(\frac{1}{2}(\bar{\Sigma}_m^- + \bar{\Sigma}_m^+), \bar{\Sigma}_{eq})$ sur l'axe équivalent (déviatorique). Les deux points hydrostatatiques $(\bar{\Sigma}_m^\pm, 0)$ correspondent à deux taux de déformation purement hydrostatatiques $\dot{\mathbf{E}} = \pm \mathbf{i}$. En effet, \bar{A} et par conséquent $\bar{\Phi}$ dépendent des deux premiers invariants de $\dot{\mathbf{E}}$. Par conséquent, le comportement effectif obtenu est isotrope. Les axes principaux des contraintes effectives coïncident avec ceux des taux de déformation effectifs. Les trois points mentionnés ci-dessus peuvent être obtenus par dérivation de (2.34) par rapport à $\dot{\mathbf{E}}$. Néanmoins, il est plus simple d'utiliser la propriété selon laquelle $\bar{\Phi}$ est une fonction positive homogène de degré 1 en $\dot{\mathbf{E}}$:

$$\bar{\Phi}(\lambda \dot{\mathbf{E}}) = \lambda \bar{\Phi}(\dot{\mathbf{E}}) \quad \text{pour tout } \lambda \text{ positif.} \quad (2.36)$$

L'équation d'Euler est obtenue en dérivant par rapport à λ (et en posant $\lambda = 1$) :

$$\frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial \dot{\mathbf{E}}}(\dot{\mathbf{E}}) : \dot{\mathbf{E}} = \bar{\Phi}(\dot{\mathbf{E}}). \quad (2.37)$$

Cette relation est appliquée avec $\dot{\mathbf{E}} = \pm \mathbf{i}$:

$$3\bar{\Sigma}_m^\pm = \pm\phi(\bar{A}^\pm, \pm\mathbf{i}, p) - 3p_e, \quad (2.38)$$

où ϕ est défini en (2.18) et où $\bar{A}^\pm = \bar{A}(\pm\mathbf{i}, p)$ avec la fonction \bar{A} définie en (2.27). De même, cette relation est appliquée avec un taux de déformation purement déviatorique $\dot{\mathbf{E}}^d$ avec $\dot{E}_{eq}^d = 1$:

$$\bar{\Sigma}_{eq} = \phi(\bar{A}_{eq}, \dot{\mathbf{E}}^d, p), \quad (2.39)$$

où $\bar{A}_{eq} = \bar{A}(\dot{\mathbf{E}}^d, p)$ avec la fonction \bar{A} définie en (2.27). Des formes analytiques sont obtenues pour les grandeurs \bar{A}^\pm et \bar{A}_{eq} en utilisant les relations de l'Annexe A de (Vincent *et al.*, 2014a). Elles ne sont pas reprises ici par souci de concision. Enfin, les trois contraintes introduites ci-dessus, $\bar{\Sigma}_m^-$, $\bar{\Sigma}_m^+$ et $\bar{\Sigma}_{eq}$, s'écrivent sous la forme suivante :

$$\left. \begin{aligned} \bar{\Sigma}_m^\pm &= \pm \frac{\sigma_0}{3} \int_{f_e}^1 \int_{f_b^*}^1 \sqrt{4 \frac{(\bar{A}^\pm)^2}{y^2} + 4 \frac{(\pm 1 - \bar{A}^\pm)^2}{q_3 z^2}} dy dz - (1 - f_e)p\bar{A}^\pm - p_e, \\ \bar{\Sigma}_{eq} &= \sigma_0 \int_{f_e}^1 \int_{f_b^*}^1 \sqrt{4 \frac{\bar{A}_{eq}^2}{y^2} + 4 \frac{\bar{A}_{eq}^2}{q_3 z^2} + \frac{1}{q_3}} dy dz - 3(1 - f_e)p\bar{A}_{eq}. \end{aligned} \right\} \quad (2.40)$$

Une forme analytique des intégrales entrant dans (2.40) est obtenue dans l'Annexe C de (Vincent *et al.*, 2014a). Enfin, les trois surfaces de charge correspondant aux potentiels Φ^+ et $\bar{\Phi}$ et à l'approximation (2.1) sont comparées pour différentes porosités et pressions. Une bonne adéquation a été obtenue pour tous les taux de triaxialité testés. Un exemple est donné sur la figure 2.9.

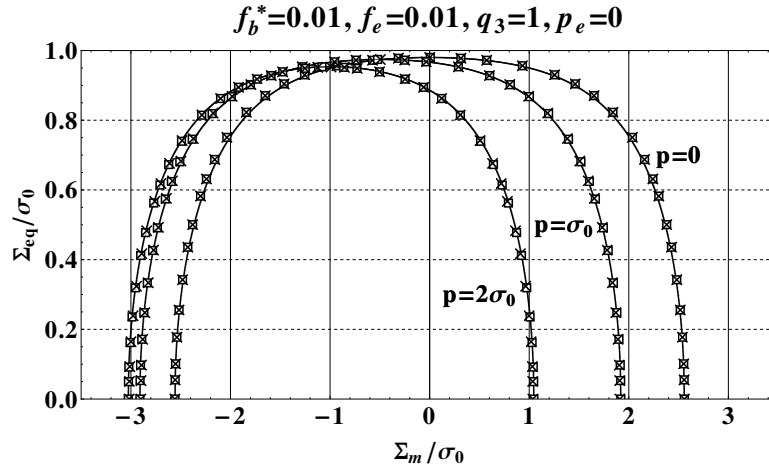


FIGURE 2.9 – Cavités intergranulaires sphériques. Comparaison entre les surfaces de charge obtenues avec le potentiel Φ^+ (croix), le potentiel $\bar{\Phi}$ (carrés) et l'approximation de type GTN (2.1) (traits pleins). La pression p correspond à la différence des pressions $p_b - p_e$. Contrainte macroscopique équivalente normalisée par σ_0 (limite d'élasticité du matériau sans cavité) en fonction de la contrainte macroscopique hydrostatique normalisée par σ_0 (Vincent *et al.*, 2014a).

2.1.3 Cavités intergranulaires ellipsoïdales

Le cas des cavités ellipsoïdales aplaties "oblates" est ensuite traité. Ce sont des ellipsoïdes pour lesquels deux axes sont égaux et le troisième axe est plus petit que les deux axes égaux. Les cavités sont supposées distribuées et orientées aléatoirement dans une matrice de Gurson. Le même rapport de forme w (rapport petit axe sur grand axe, $w < 1$) est considéré pour toutes les cavités. En utilisant le champ de vitesse (2.14) et les calculs de (Vincent *et al.*, 2008) (passage d'un unique ellipsoïde creux à un assemblage d'ellipsoïdes creux par

moyenne sur toutes les orientations), une borne supérieure pour le potentiel de dissipation effectif a été obtenue dans (Vincent *et al.*, 2009) :

$$\Phi^+(\dot{\mathbf{E}}, p_b, p_e) = \inf_A \left[\sigma_0 \int_{f_b^*}^1 \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} \bar{H}(\lambda, A, y, \dot{E}_m, \dot{E}_{eq}) d\lambda dy - 3(1 - f_e)pA \right] - 3p_e \dot{E}_m, \quad (2.41)$$

où :

$$\bar{H}(\lambda, A, y, \dot{E}_m, \dot{E}_{eq}) = \sqrt{J^2(\lambda) \frac{4A^2}{y^2} + \frac{J(\lambda)}{q_3} \left(3Q_J(\lambda) (\dot{E}_m - A)^2 + J(\lambda) \dot{E}_{eq}^2 \right)} \quad (2.42)$$

et λ est relatif au système de coordonnées ellipsoïdales. Les fonctions J et Q_J sont données dans l'Annexe E de (Vincent *et al.*, 2014a). Afin d'obtenir des résultats analytiques, le potentiel $\Phi^+(\dot{\mathbf{E}}, p_b, p_e)$ est approché par une expression plus simple (en suivant l'analyse de Gologanu *et al.* (1994) d'après (Vincent *et al.*, 2008)) :

$$\Phi^+(\dot{\mathbf{E}}, p_b, p_e) \approx \tilde{\Phi}(\dot{\mathbf{E}}, p_b, p_e) = \inf_A \left[\tilde{\phi}(\dot{\mathbf{E}}, p_b, p_e, A) \right] - 3p_e \dot{E}_m, \quad (2.43)$$

où :

$$\tilde{\phi}(\dot{\mathbf{E}}, p_b, p_e, A) = \sigma_0(g+1) \int_{f_b^*}^1 \int_{\tilde{f}}^1 \sqrt{\frac{4A^2}{y^2} + \frac{(\dot{E}_m - A)^2 \tilde{a}^2}{z^2} \frac{1}{q_3} + (\dot{E}_m - A)^2 \frac{\tilde{b}^2}{q_3} + \frac{(\dot{E}_{eq})^2}{q_3}} dz dy - 3(1 - f_e)pA. \quad (2.44)$$

Les coefficients g , \tilde{a} , \tilde{b} , dépendent de la géométrie de la cavité ellipsoïdale uniquement. Le paramètre \tilde{f} est fonction de cette géométrie et de la porosité f_e . Leurs expressions sont données dans l'Annexe E de (Vincent *et al.*, 2014a). La forme globale du potentiel (2.44) est très proche de celle du potentiel pour cavités sphériques (2.18), à l'exception du terme supplémentaire $(\dot{E}_m - A)^2 \frac{\tilde{b}^2}{q_3}$. Une procédure similaire à celle pour cavités sphériques est suivie. Tout d'abord, une approximation \tilde{A} de la solution A_{sol} de (2.43) est proposée, en utilisant des propriétés particulières de A_{sol} . Puis, cette approximation est utilisée pour identifier les coefficients d'un critère GTN (2.1). La procédure étant similaire à celle pour cavités sphériques, elle n'est pas détaillée ici par souci de concision : le lecteur est invité à lire (Vincent *et al.*, 2014a) pour une description précise. Afin d'illustrer la pertinence de l'approximation \tilde{A} , un exemple de comparaison entre \tilde{A} et A_{sol} est donné sur la figure 2.10 dans le cas purement hydrostatique. Un exemple de surfaces de charge est donné sur la figure 2.11. Cette figure montre aussi la surface de charge obtenue en utilisant l'approximation \tilde{A} pour obtenir une borne supérieure, notée $\bar{\Phi}$, de Φ^+ :

$$\bar{\Phi}(\dot{\mathbf{E}}, p_b, p_e) = \sigma_0 \int_{f_b^*}^1 \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} \bar{H}(\lambda, \tilde{A}(\dot{E}_m, \dot{E}_{eq}), y, \dot{E}_m, \dot{E}_{eq}) d\lambda dy - 3(1 - f_e)p\tilde{A}(\dot{E}_m, \dot{E}_{eq}) - 3p_e \dot{E}_m. \quad (2.45)$$

Une bonne adéquation est obtenue entre les deux bornes supérieures (obtenues avec les potentiels Φ^+ et $\bar{\Phi}$) et l'approximation (2.1).

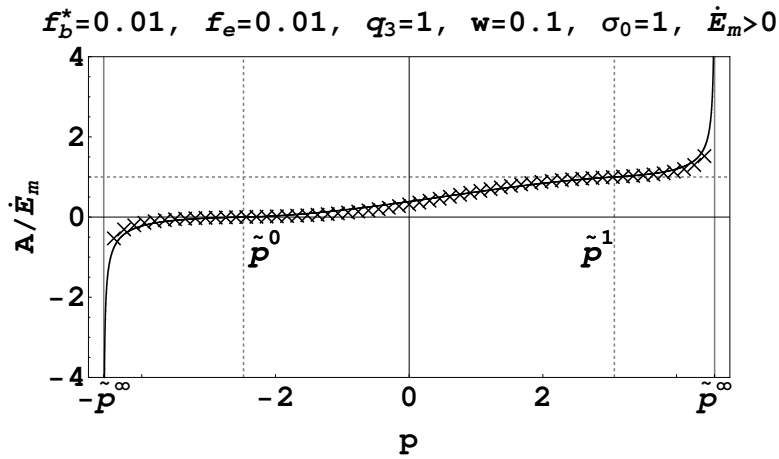


FIGURE 2.10 – Cavités intergranulaires ellipsoïdales. Taux de déformation macroscopique purement hydrostatique ($\dot{E}_{eq} = 0$). Comparaison entre le taux de dilatation exact A_{sol} (croix) et l'approximation \hat{A} (trait plein) en fonction de la différence des pressions $p = p_b - p_e$ (Vincent *et al.*, 2014a).

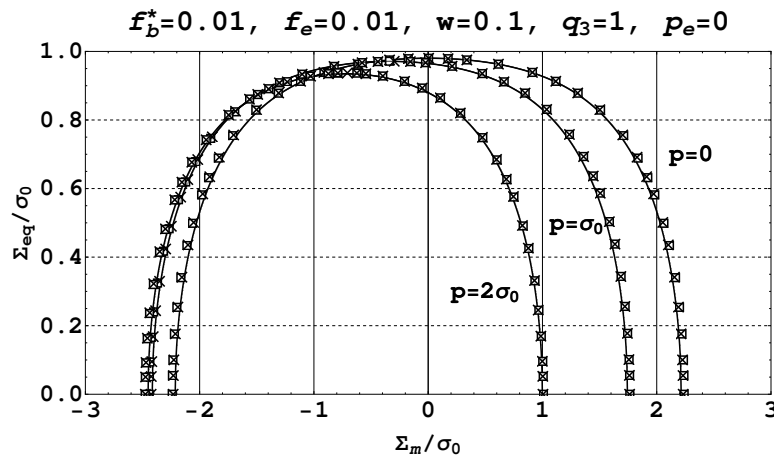


FIGURE 2.11 – Cavités intergranulaires ellipsoïdales. Comparaison entre les surfaces de charge obtenues avec le potentiel Φ^+ (croix), le potentiel $\bar{\Phi}$ (carrés) et l'approximation de type GTN (2.1) (traits pleins). La pression p correspond à la différence des pressions $p_b - p_e$. Contrainte macroscopique équivalente normalisée par σ_0 (limite d'élasticité du matériau sans cavité) en fonction de la contrainte macroscopique hydrostatique normalisée par σ_0 (Vincent *et al.*, 2014a).

Les prédictions du modèle simplifié (2.1) sont ensuite comparées dans (Vincent *et al.*, 2014b) avec des simulations numériques en champs complets, obtenues par une méthode numérique à base de Transformées de Fourier Rapides (FFT pour "Fast Fourier Transforms"). Cette méthode itérative a été proposée initialement par Moulinec et Suquet (1994, 1998) pour des microstructures périodiques soumises à des conditions aux limites périodiques. Cette comparaison a été effectuée pour des cavités intergranulaires sphériques et ellipsoïdales. Par souci de concision, uniquement les résultats pour cavités intergranulaires ellipsoïdales oblates seront présentés dans le présent rapport.

2.1.4 Simulations numériques en champs complets

Les simulations sont réalisées sur des microstructures générées selon deux étapes successives.

- 1 La cellule unitaire est remplie par des sphères mono-dispersées (en taille) selon un algorithme itératif. Tout d'abord, les sphères sont placées aléatoirement dans le volume (interpénétration possible). Ensuite, une distance et un vecteur d'interpénétration sont calculés pour chaque sphère et ses sphères voisines.

Pour chaque sphère, toutes ces distances sont sommées. Le centre de la sphère est déplacé d'une certaine fraction de cette somme à laquelle est ajouté un petit déplacement aléatoire et dans la direction de la somme des vecteurs d'interpénétration. Le processus est arrêté lorsqu'aucune interpénétration n'est détectée entre les sphères. Il a été constaté que la fraction volumique de sphères peut atteindre environ 60 % pour des sphères mono-dispersées.

- 2 Ensuite, une cavité ellipsoïdale oblate orientée aléatoirement, est placée au centre de chaque sphère. Toute les cavités placées dans les différentes sphères sont de même dimension. Les porosités de chaque sphère sont identiques. Au final, chaque cavité est entourée d'une couche de matrice.

Trois tirages sont utilisés et représentés sur la Figure 2.12. Le rapport de forme des cavités est fixé à $w = 1/5$ et chaque tirage contient 511 cavités.

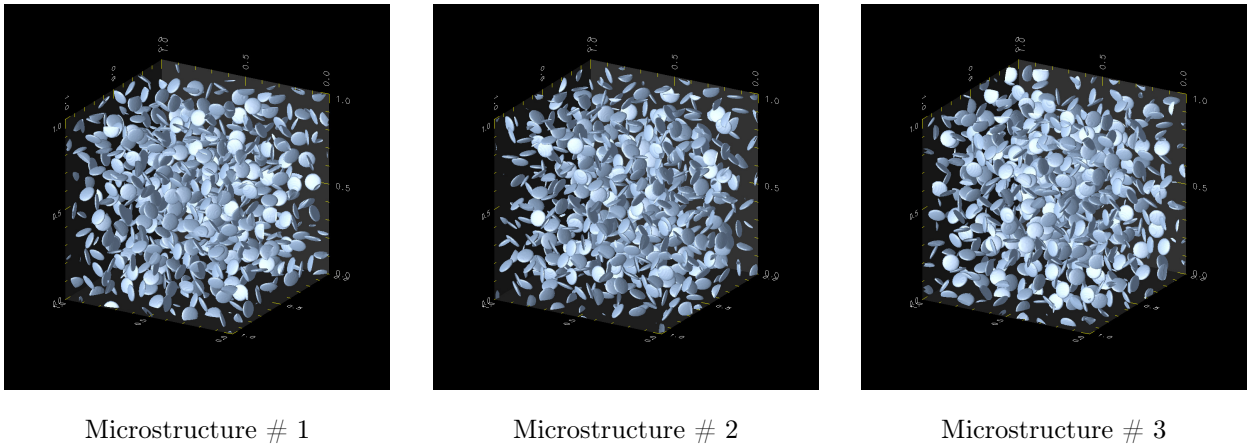


FIGURE 2.12 – Cavités intergranulaires ellipsoïdales oblates. Trois tirages de 511 cavités avec porosité totale $f_e = 0.04$. Mêmes dimensions et rapport de forme pour toutes les cavités : $w = 1/5$ (Vincent *et al.*, 2014b).

Chaque image de microstructure est discrétisée en $N \times N \times N$ voxels réguliers avec $N = 512$. La question de la résolution spatiale (la discrétisation) devrait, en toute rigueur, être traitée pour chaque microstructure, en faisant croître progressivement le nombre de voxels jusqu'à atteindre une certaine stationnarité vis à vis de la quantité d'intérêt (ici la contrainte effective d'écoulement). Cela nécessiterait un grand nombre de calculs très coûteux (en terme de temps et de mémoire) à réaliser. Une autre stratégie est adoptée qui consiste à étudier une simple cellule unitaire contenant une unique cavité sphérique en son centre. Une cellule unitaire discrétisée en 32^3 , 64^3 , 128^3 voxels est considérée et la convergence de la surface d'écoulement effective en fonction de la discrétisation spatiale est analysée. La porosité est fixée à 0.04 et la matrice est de type von Mises. Un chargement en direction de contrainte macroscopique imposée est considéré (purement axisymétrique ou de cisaillement pur). Les résultats sont donnés dans l'Annexe B de (Vincent *et al.*, 2014b). La discrétisation avec 64^3 semble être un bon compromis entre taille et précision (moins de 1 % d'écart sur les résultats avec la résolution la plus fine). Ainsi, il est choisi de distribuer M cavités dans la cellule unitaire avec M plus petit que $(N/64)^3$. Pour $N = 512$, le nombre de cavités doit être inférieur à 512. Les microstructures utilisées contiennent 511 cavités. Cette résolution permet de réaliser chaque calcul avec un coût raisonnable (environ 35 h sur 20 cœurs et 70 Go de RAM).

Un autre problème est relatif à l'isotropie globale de la microstructure. Le matériau tel que modélisé en 2.1.1 est globalement isotrope et de comportement non linéaire. Dans les simulations FFT, la question est de savoir combien de cavités doivent être placées dans la cellule unitaire pour s'approcher de l'isotropie globale.

Dans (Vincent *et al.*, 2014b), il est distingué l'isotropie "géométrique" et l'isotrope "mécanique". L'isotropie "géométrique" est relative à l'agencement géométrique des phases. Dans (Vincent *et al.*, 2014b), une étude par covariogramme 2D de la phase de cavité est proposée. L'isotropie "mécanique" consiste à évaluer l'isotropie de la réponse mécanique de l'élément de volume sous l'application d'un chargement mécanique. La première définition d'isotropie est plus large que la seconde, dans le sens où l'isotropie géométrique implique l'isotropie mécanique. Néanmoins, la déviation à l'isotropie basée sur l'inspection de covariogrammes 2D de coupes d'images 3D, est difficile à définir et reste essentiellement qualitative (une courte étude basée sur les covariogrammes est présentée à l'Annexe D de (Vincent *et al.*, 2014b)). Ceci est plus facile avec l'approche mécanique, où une mesure quantitative de la déviation à l'isotropie sous différents chargements peut être effectuée. Un nouveau critère pour mesurer la déviation à l'isotropie mécanique est proposée dans (Vincent *et al.*, 2014b).

Les covariogrammes de la microstructure # 1 de la figure 2.12 sont présentés sur la figure 2.13. Ces covariogrammes $C(\mathbf{r})$ ont été tracés pour plusieurs plans de coupe et selon plusieurs directions. Il apparaît que les covariogrammes se stabilisent à partir d'environ 100 voxels (ce qui correspond à environ trois fois le rayon des sphères de sécurité entourant les cavités), avec une portée intégrale d'environ 25 voxels. Ces valeurs sont bien inférieures à la taille totale de la cellule unitaire, ce qui suggère que la stationnarité a été atteinte pour chacun de ces plans de coupe. De plus, dans chacun de ces plans, les covariogrammes obtenus restent proches les uns des autres, ce qui signifie qu'ils sont peu dépendants de l'orientation : $C(\mathbf{r}) \approx C(|\mathbf{r}|)$.

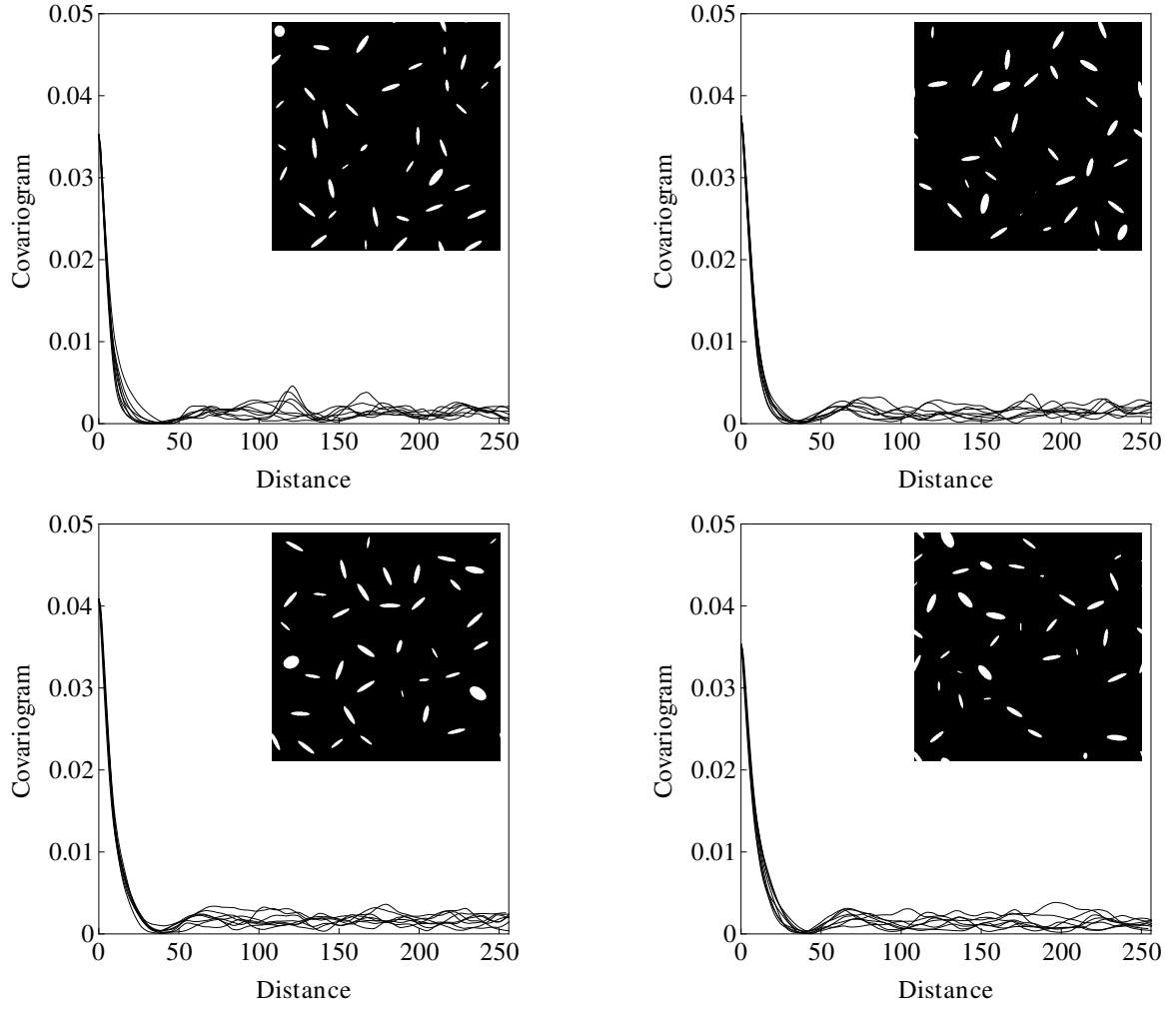


FIGURE 2.13 – Covariogrammes en termes de distance (en voxels). 4 plans de coupe parallèles dans l'image # 1 (figure 2.12). Sur chacun de ces plans de coupe, les covariogrammes sont tracés selon 8 directions. Les plans de coupe sont reportés sur chaque figure (Vincent *et al.*, 2014b).

Le critère proposé pour mesurer la déviation à l'isotropie mécanique s'écrit comme ceci. L'isotropie macroscopique impose des conditions nécessaires aux relations obtenues par simulations entre la contrainte macroscopique et la vitesse de déformation macroscopique. Un matériau idéalement plastique et macroscopiquement isotrope est considéré. Ses propriétés d'écoulement peuvent être décrites au moyen d'une fonction de charge \mathcal{F}_c dépendant des trois invariants de Σ :

$$\mathcal{F}_c(\Sigma) = \mathcal{F}_c(\Sigma_m, \Sigma_{eq}, J_3), \quad J_3 = \frac{1}{3} \Sigma_{ij}^d \Sigma_{jk}^d \Sigma_{ki}^d \quad (2.46)$$

(attention : J_3 représente ici le troisième invariant de Σ^d et non l'intégrale introduite en 2.26). Si \mathcal{F}_c est différentiable, alors le taux de déformation associé avec cette fonction de charge s'écrit en utilisant la règle de normalité :

$$\dot{\mathbf{E}} = \dot{\lambda} \frac{\partial \mathcal{F}_c}{\partial \Sigma_m}(\Sigma_m, \Sigma_{eq}, J_3) \frac{\partial \Sigma_m}{\partial \Sigma} + \dot{\lambda} \frac{\partial \mathcal{F}_c}{\partial \Sigma_{eq}}(\Sigma_m, \Sigma_{eq}, J_3) \frac{\partial \Sigma_{eq}}{\partial \Sigma} + \dot{\lambda} \frac{\partial \mathcal{F}_c}{\partial J_3}(\Sigma_m, \Sigma_{eq}, J_3) \frac{\partial J_3}{\partial \Sigma}, \quad (2.47)$$

avec

$$\frac{\partial \Sigma_m}{\partial \Sigma} = \frac{1}{3} \mathbf{i}, \quad \frac{\partial \Sigma_{eq}}{\partial \Sigma} = \frac{3}{2} \frac{\Sigma^d}{\Sigma_{eq}}, \quad \frac{\partial J_3}{\partial \Sigma} = \Sigma^d \cdot \Sigma^d - \frac{2}{9} \Sigma_{eq}^2 \mathbf{i}. \quad (2.48)$$

Par conséquent, le taux de déformation macroscopique peut être décomposé selon trois tenseurs orthogonaux $\mathbf{V}_i|_{i=1,2,3}$:

$$\dot{\mathbf{E}} = \sum_{i=1}^3 \dot{\xi}^{(i)} \mathbf{V}_i, \quad \mathbf{V}_1 = \mathbf{i}, \quad \mathbf{V}_2 = \Sigma^d, \quad \mathbf{V}_3 = \Sigma^d \cdot \Sigma^d - \frac{2}{9} \Sigma_{eq}^2 \mathbf{i} - \frac{9}{2} \frac{J_3}{\Sigma_{eq}^2} \Sigma^d, \quad (2.49)$$

où $\dot{\xi}^{(i)}$ sont des scalaires. La vitesse de déformation macroscopique calculée $\dot{\mathbf{E}}^{\text{comp}}$ associée à un état de contrainte macroscopique Σ situé sur la surface d'écoulement macroscopique doit être conforme à la décomposition (2.49). Pour vérifier que cette exigence soit satisfaite, $\dot{\mathbf{E}}^{\text{comp}}$ est décomposé en une composante parallèle à l'espace couvert par les \mathbf{V}_i et une composante orthogonale à cet espace :

$$\dot{\mathbf{E}}^{\text{comp}} = \dot{\mathbf{E}}^{\parallel} + \dot{\mathbf{E}}^{\perp}, \quad \dot{\mathbf{E}}^{\parallel} = \sum_{i=1}^3 a^{(i)} \mathbf{V}_i, \quad \dot{\mathbf{E}}^{\perp} \cdot \mathbf{V}_i = 0 \quad i = 1, 2, 3. \quad (2.50)$$

La déviation par rapport à l'isotropie est alors mesurée par :

$$\eta = \frac{\|\dot{\mathbf{E}}^{\perp}\|}{\|\dot{\mathbf{E}}^{\text{comp}}\|}, \quad (2.51)$$

où

$$\|\dot{\mathbf{E}}^{\text{comp}}\|^2 = \dot{\mathbf{E}}^{\text{comp}} : \dot{\mathbf{E}}^{\text{comp}}, \quad \|\dot{\mathbf{E}}^{\perp}\|^2 = \|\dot{\mathbf{E}}^{\text{comp}}\|^2 - \sum_{i=1}^3 \frac{(\dot{\mathbf{E}}^{\text{comp}} : \mathbf{V}_i)^2}{\|\mathbf{V}_i\|^2}. \quad (2.52)$$

Les différentes valeurs de η calculées pour les différentes configurations peuvent être trouvées dans l'Annexe C de (Vincent *et al.*, 2014b) (pour les trois microstructures de la figure 2.12 avec matrice de Von Mises). Les configurations prises individuellement peuvent s'écarter significativement de l'isotropie (quelques pourcents). Cependant, lorsque les moyennes sur plusieurs microstructures sont prises, l'écart par rapport à l'isotropie est faible (moins de 3.5 %).

Pour les simulations numériques par FFT, une partie élastique est ajoutée au comportement de la matrice et la théorie de la déformation est utilisée. La surface d'écoulement effective est caractérisée par les états de contraintes macroscopiques obtenus par limites asymptotiques de la contrainte macroscopique le long de trajets de chargement particuliers. La surface d'écoulement effective ne dépend pas des différents trajets de chargement qui ont été suivis pour déterminer ces états et ne dépend pas de l'élasticité attribuée à la matrice. De plus, la surface d'écoulement effective ne dépend pas du type de théorie de plasticité utilisée, en incrémental ou en déformation, pour la matrice.

La méthode accélérée de (Michel *et al.*, 2001) basée sur un Lagrangien augmenté est utilisée pour les simulations numériques par FFT. Le chargement est en direction de contrainte macroscopique Σ^0 imposée :

$$\Sigma(t) = h(t) \Sigma^0, \quad \Sigma^0 : \dot{\mathbf{E}}(t) = t. \quad (2.53)$$

où l'amplitude $h(t)$ est une inconnue (scalaire) qui est déterminée par la deuxième équation de (2.53) où t décrit un niveau de vitesse de déformation imposé. L'avantage de ce type de chargement est qu'il permet d'imposer la triaxialité du taux de déformation macroscopique η_{Σ} :

$$\eta_{\Sigma} = \frac{\Sigma_m}{\Sigma_{eq}}. \quad (2.54)$$

Ce taux pourrait être obtenu en imposant directement la contrainte macroscopique et non la direction de contrainte macroscopique. Néanmoins, un tel chargement pourrait conduire à des instabilités numériques lorsque proche du comportement asymptotique. Deux types de contraintes macroscopiques sont considérées ($\Sigma = \Sigma_m \mathbf{i} + \Sigma^d$) afin d'étudier l'effet du troisième invariant :

$$\left. \begin{aligned} \text{axisymétrique : } \quad \Sigma^d &= \frac{2}{3} \Sigma_{eq} \left(-\frac{1}{2} \mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1 - \frac{1}{2} \mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_3 \right), \\ \text{cisaillement plan : } \quad \Sigma^d &= \frac{1}{\sqrt{3}} \Sigma_{eq} \left(-\mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_3 \right), \end{aligned} \right\} \quad (2.55)$$

correspondant aux angles de Lode $\omega = 0$ et $\omega = \pi/6$ respectivement et où \otimes représente le produit tensoriel (attention : ω représente ici l'angle de Lode et non un volume comme en 2.1.1).

Afin de pouvoir comparer les résultats obtenus avec les simulations numériques par FFT et avec le modèle analytique, la porosité modifiée f_e^* suivante est introduite dans le modèle analytique :

$$f_e^* = q f_e. \quad (2.56)$$

Le paramètre q joue un rôle équivalent à celui du paramètre q_1 dans le modèle GTN. Pour rappel, suivant [Tvergaard \(1982\)](#), si f est la fraction volumique de cavité dans une cellule unitaire axisymétrique, alors les résultats de ses simulations en champs complets doivent être comparés au modèle de Gurson avec une porosité modifiée $q_1 f$, où q_1 varie approximativement entre 1.15 et 1.7. En effet, la cellule unitaire perd sa capacité de résistance lorsque la cavité sphérique atteint la limite du cylindre, ce qui se produit lorsque $f = 2/3$, et ce qui conduit à $q_1 = 1.5$ (correspondant à la valeur proposée par [Tvergaard \(1982\)](#)). [Koplik et Needleman \(1988\)](#) ont trouvé une bonne adéquation entre leurs simulations sur cellules unitaires et le critère de Gurson avec $q_1 = 1.25$, c'est-à-dire à mi-chemin entre la valeur originale de Gurson ($q_1 = 1$) et la valeur de Tvergaard ($q_1 = 1.5$). Une analyse similaire est effectuée ici. Les microstructures sont générées de façon à ce que chaque cavité soit placée au centre d'une sphère de matrice. La fraction volumique occupée par ces sphères de matrice est notée d ($d = 0.62$ dans les microstructures de la figure 2.12). Une porosité modifiée f^* est définie comme la porosité de la cavité ellipsoïdale dans un volume de matrice ellipsoïdal co-focal inscrit dans la sphère de matrice (voir figure 2.14). En notant a_1 et b_1 les petit et grand axes de la cavité et a_2 et b_2 les petit et grand axes du volume co-focal de matrice, les relations suivantes sont obtenues :

$$f^* = \frac{a_1 b_1^2}{a_2 b_2^2}, \quad \frac{f_e}{d} = \frac{w b_1^3}{b_2^3}, \quad b_1^2 - a_1^2 = b_2^2 - a_2^2, \quad (2.57)$$

Cela conduit à :

$$f^* = \left(1 - \left(\frac{f_e}{w d} \right)^{2/3} (1 - w^2) \right)^{-1/2} \frac{f_e}{d}. \quad (2.58)$$

Cela conduirait à proposer une fonction q de la forme $(1/d) \left(1 - \left(\frac{f_e}{w d} \right)^{2/3} (1 - w^2) \right)^{-1/2}$. En suivant [Koplik et Needleman \(1988\)](#), la fonction q suivante est proposée, à mi-chemin entre la valeur originale ($q = 1$) et la valeur ci-dessus. Cela conduit à proposer :

$$q = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{d \left(1 - \left(\frac{f_e}{w d} \right)^{2/3} (1 - w^2) \right)^{1/2}} \right). \quad (2.59)$$

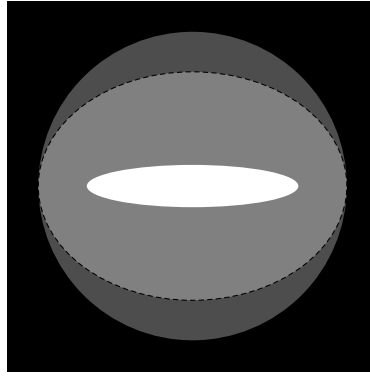


FIGURE 2.14 – Définition de f^* comme la porosité de la cavité ellipsoïdale (blanc) dans un volume de matrice ellipsoïdal co-focal (gris clair) inscrit dans la sphère de matrice (gris foncé) (Vincent *et al.*, 2014b).

Tout d'abord, le cas d'une matrice de von Mises est considéré ($f_b = 0$). Les surfaces de charge obtenues pour les trois microstructures de la figure 2.12 sont reportées sur les figures 2.15 et 2.16. Il peut être observé que la dispersion entre les trois tirages est faible. De plus, une bonne adéquation est observée avec le modèle analytique. Enfin, le modèle analytique a été tracé avec la porosité modifiée $f_e^* = qf_e$ et la relation (2.59) (qui conduit à $q = 1.588$). La forme globale du modèle GTN est confirmée, ainsi que la relation (2.59) pour q . Ensuite, la déviation à l'isotropie est calculée pour chaque cas en utilisant (2.51). Comme énoncé plus haut, il ressort que les configurations prises individuellement peuvent s'écarter significativement de l'isotropie (jusqu'à 10 %). Cependant, lorsque les moyennes sur les trois microstructures sont prises, l'écart par rapport à l'isotropie est faible (moins de 3.5 %). Enfin, une faible asymétrie de la surface de charge par rapport à l'axe $\Sigma_m = 0$ est observée dans le cas $\omega = 0$ (chargement axisymétrique) sur la figure 2.15. Cette asymétrie est clairement imputable à l'effet du troisième invariant des contraintes.

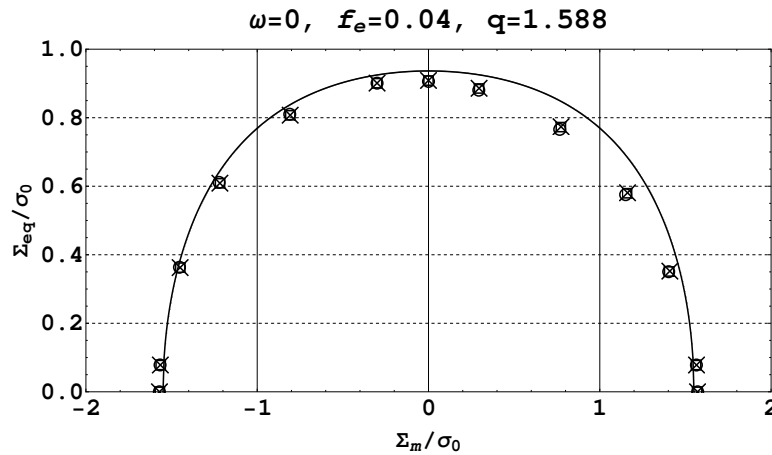


FIGURE 2.15 – Cavités ellipsoïdales, matrice de von Mises, angle de Lode $\omega = 0$. Microstructures # 1 à # 3 de la figure 2.12. Trait plein : estimation (2.1) avec $f_b = 0$, $f_e^* = q \times 0.04$, $q = 1.588$, $w = 1/5$, $q_3 = 1$, $p_b = p_e = 0$. Symboles : simulations FFT. Contrainte macroscopique équivalente normalisée par σ_0 (limite d'élasticité du matériau sans cavité) en fonction de la contrainte macroscopique hydrostatique normalisée par σ_0 (Vincent *et al.*, 2014b).

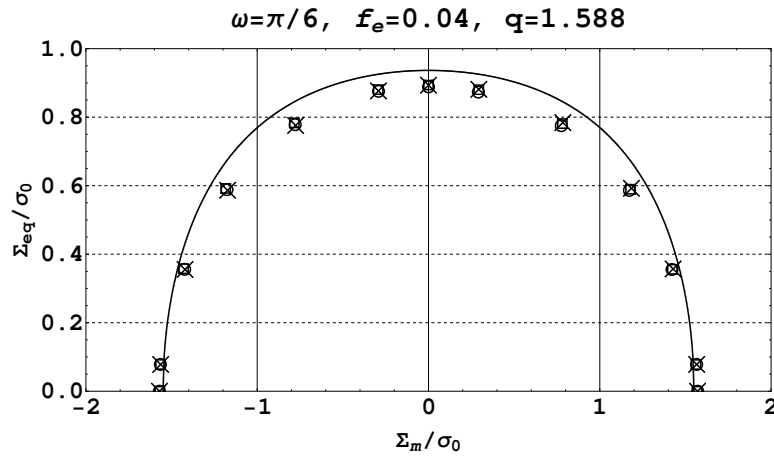


FIGURE 2.16 – Cavités ellipsoïdales, matrice de von Mises, angle de Lode $\omega = \pi/6$. Microstructures # 1 à # 3 de la figure 2.12. Trait plein : estimation (2.1) avec $f_b = 0$, $f_e^* = q \times 0.04$, $q = 1.588$, $w = 1/5$, $q_3 = 1$, $p_b = p_e = 0$. Symboles : simulations FFT. Contrainte macroscopique équivalente normalisée par σ_0 (limite d'élasticité du matériau sans cavité) en fonction de la contrainte macroscopique hydrostatique normalisée par σ_0 (Vincent *et al.*, 2014b).

Enfin, les simulations pour une matrice de Gurson ($f_b \neq 0$) et différentes pressions internes dans les cavités sont comparées au modèle analytique. Étant donné la faible dispersion des résultats entre les trois microstructures, seule la microstructure # 1 de la figure 2.12 a été étudiée sous contrainte macroscopique axisymétrique ($\omega = 0$). Une bonne adéquation est obtenue entre le critère analytique ((2.1)) et les résultats FFT pour toutes les valeurs de pression interne p_b considérées (voir figure 2.17).

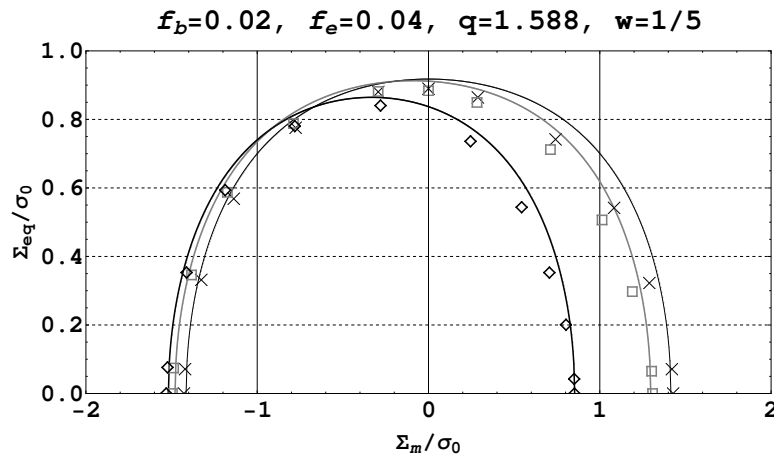


FIGURE 2.17 – Cavités intergranulaires ellipsoïdales. Trait plein : estimation (2.1) avec $f_b = 0.02$, $f_e^* = q \times 0.04$, $q = 1.588$, $w = 1/5$, $q_3 = 1$, $p_e = 0$. Symboles : simulations FFT sur la microstructure # 1 de la figure 2.12. Noir fin : $p_b = 0$. Gris : $p_b = 0.5\sigma_0$. Noir épais : $p_b = 1.5\sigma_0$. Contrainte macroscopique équivalente normalisée par σ_0 (limite d'élasticité du matériau sans cavité) en fonction de la contrainte macroscopique hydrostatique normalisée par σ_0 (Vincent *et al.*, 2014b).

2.1.5 Effet de la taille relative des cavités intergranulaires

Les résultats présentés dans cette sous-section 2.1.5 ont été obtenus en collaboration avec Guylaine Boittin, Hervé Moulinec et Mihail Garajeu. Ils ont été publiés dans (Boittin *et al.*, 2017).

Une représentation plus fine de la microstructure de l'UO₂ irradié a été considérée dans l'étude numérique de (Boittin *et al.*, 2017). Une distribution plus réaliste des bulles le long des joints de grains est considérée, au lieu de bulles distribuées et orientées de façon complètement aléatoire. De plus, des bulles intergranulaires

lenticulaires et non plus ellipsoïdales sont considérées. La microstructure reste globalement isotrope : elle est composée de bulles lenticulaires le long de joints de grains fictifs orientés de manière aléatoire dans une matrice isotrope. Un point essentiel dans cette modélisation est que les longueurs des bulles lenticulaires sont plus petites que les longueurs des grains fictifs, de sorte que plusieurs bulles peuvent être localisées le long d'un même joint de grain. L'objectif est de saisir l'effet d'une telle distribution de bulles sur la surface d'écoulement plastique effective par l'intermédiaire de simulations numériques par FFT.

Une large gamme de porosité intergranulaire (entre 0.1 et 6 %) est étudiée. Pour des fractions volumiques élevées, les bulles peuvent former un réseau interconnecté (White, 2004). Néanmoins, la présente étude se limite aux bulles non interconnectées. De plus, pour des raisons de simplicité, les bulles situées au point triple (à l'intersection de trois grains ou plus) sont également négligées. Une forme lenticulaire est attribuée aux cavités intergranulaires (voir figure 2.18). Ceci est en accord avec les observations de Reynolds *et al.* (1971), Hodkin (1980), Une (1988) et Zacharie *et al.* (1998) réalisées par microscopie (TEM et/ou MEB) sur combustible UO_2 . La forme lenticulaire est caractérisée par l'angle de contact, θ , entre le plan du joint de grain et la surface de la bulle (voir figure 2.18). Dans l' UO_2 , l'angle de contact peut varier d'un joint de grain à l'autre : Reynolds *et al.* (1971) ont trouvé des valeurs comprises entre 34° et 52° dans un même échantillon. Une valeur fixe de 45° pour l'angle de contact est considérée dans la présente étude.

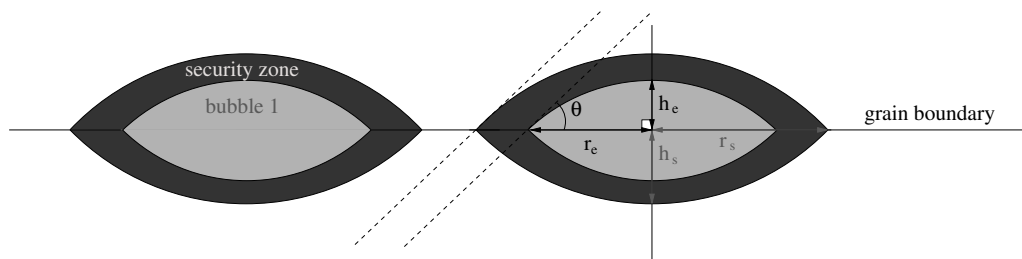


FIGURE 2.18 – Notations pour une bulle lenticulaire intergranulaire. Définition de la zone de sécurité autour de la bulle (Boittin *et al.*, 2017).

La taille des cavités intergranulaires lenticulaires est caractérisée par le rayon r_e (voir figures 2.18 et 2.19) et par la hauteur $h_e = r_e \tan(\theta/2)$ de la zone lenticulaire.

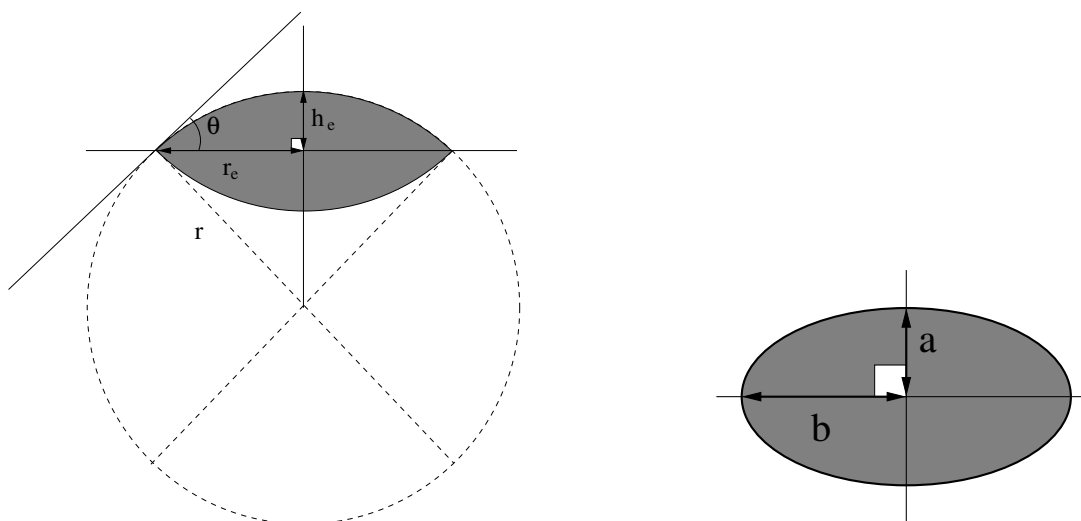


FIGURE 2.19 – Notations pour une bulle lenticulaire et pour une bulle ellipsoïdale (Boittin *et al.*, 2017).

La porosité due aux bulles intragranulaires est toujours prise en compte par un modèle GTN. Seules les bulles intergranulaires sont discrétisées géométriquement dans le volume V . Dans les simulations, ce volume est considéré comme un cube de côté L et le rayon moyen des grains r_g est défini par :

$$\frac{r_g}{L} = \left(\frac{3}{4\pi N_g} \right)^{1/3}, \quad (2.60)$$

où N_g désigne le nombre de grains dans V . Un algorithme a été développé pour générer les microstructures en reproduisant la croissance des bulles le long des joints de grains. La microstructure est construite en quatre étapes successives :

- i* génération d'un polycristal avec un pavage de Voronoï,
- ii* identification des joints de grains,
- iii* génération des germes aléatoires pour les bulles sur les joints de grains,
- iv* croissance des bulles jusqu'à l'obtention de leur taille finale.

La quatrième étape consiste à faciliter la croissance des bulles le long des joints de grains et à la limiter vers l'intérieur des grains. Pour chaque bulle, la croissance est arrêtée lorsque le rayon souhaité r_e est atteint. Le processus général est illustré sur la figure 2.20.

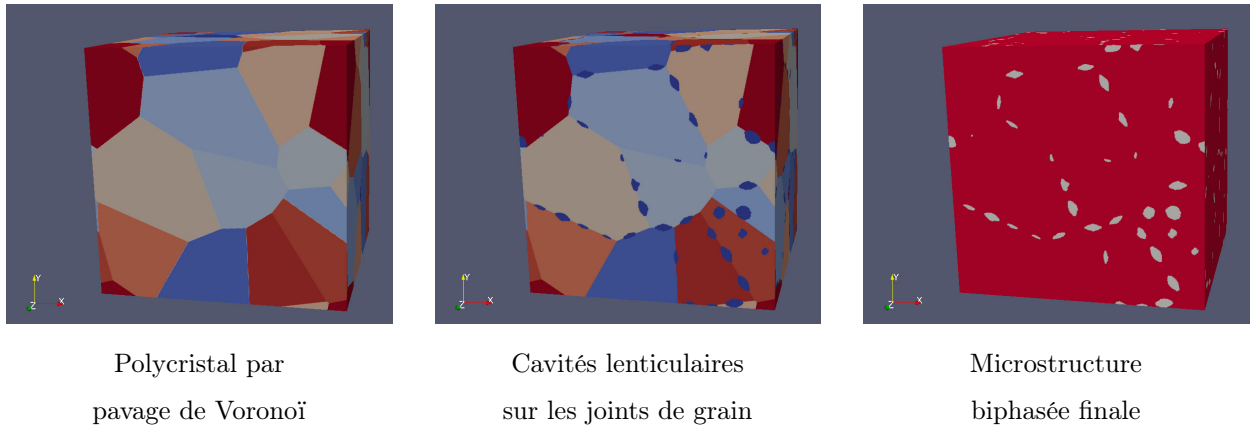


FIGURE 2.20 – Procédure de génération des microstructures (Boittin *et al.*, 2017).

Afin d'éviter tout chevauchement entre bulles, un rayon de sécurité r_s est introduit. La croissance de ces "zones de sécurité" suit le même algorithme que celui de la croissance des bulles : mêmes germes, même forme (même rapport de forme $h_s/r_s = h_e/r_e$, voir figure 2.18). Dans l'algorithme développé, deux zones de sécurité de deux bulles distinctes ne peuvent pas se chevaucher. Ainsi, ce processus permet non seulement d'éviter le chevauchement entre les bulles mais aussi assure une distance minimale entre deux centres de bulles le long d'un joint de grain de $2r_s$ ($r_s \geq r_e$) dans la microstructure.

Les simulations par FFT ont été réalisées avec le code CraFT développé au LMA et présenté dans (Suquet *et al.*, 2012). Comme dans l'étude précédente présentée en 2.1.4, la méthode accélérée de (Michel *et al.*, 2001) basée sur un Lagrangien augmenté est utilisée.

La matrice (tout le domaine entourant les bulles intergranulaires) suit un comportement élasto-plastique isotrope avec critère GTN (2.12) où les paramètres q_1 et q_3 sont pris égaux à 1 (par souci de simplicité). La pression p_b est imposée dans les bulles intragranulaires. Les simulations par FFT sont réalisées en théorie incrémentale de la plasticité. Une méthode de "retour radial" a été écrite pour intégrer les relations de comportement de la matrice en temps. Le lecteur est invité à consulter (Boittin *et al.*, 2017) pour de plus amples informations sur

cette méthode. Elle aboutit à une équation non linéaire scalaire en σ_m (à résoudre de façon approchée à chaque fois que la loi de comportement est appelée).

La résolution spatiale est calibrée d'une façon analogue à l'étude précédente en 2.1.4. La cellule considérée est une structure cubique contenant un vide lenticulaire en son centre et testée sous deux conditions de chargement (en direction de contrainte imposée) : traction simple dans la direction de l'axe de révolution du vide ($\Sigma_{11} \neq 0$, $\Sigma_{22} = 0$, $\Sigma_{33} = 0$, $\Sigma_{ij, i \neq j} = 0$) et chargement purement hydrostatique ($\Sigma_{11} = \Sigma_{22} = \Sigma_{33}$, $\Sigma_{ij, i \neq j} = 0$). Cette étude conduit à considérer une valeur minimale de 2000 voxels par cavité.

Afin de limiter la taille des calculs, la discrétisation des cellules périodiques est limitée à 512^3 voxels. Pour une cellule avec 80 grains, 2000 voxels par bulle signifie que la taille relative minimale pour les bulles est d'environ 0.16 (taille relative par rapport à la taille moyenne des grains). Afin d'étudier l'effet de bulles plus petites, une deuxième cellule est générée avec 21 grains. Dans cette deuxième cellule, la taille relative minimale des bulles est de 0.1. Plusieurs valeurs pour la porosité des bulles intergranulaires f_e , pour le rayon de la bulle projetée sur les joints de grains r_e et pour le rayon de sécurité r_s sont testées. D'autres microstructures particulières sont générées où les bulles sont tirées aléatoirement une par une jusqu'à ce que plus aucune bulle ne puisse être ajoutée (effet des zones de sécurité) : la porosité f_e n'est alors pas prescrite mais est obtenue par "saturation" des joints de grains avec des bulles. La matrice de test conduit à un total de 25 jeux de paramètres pour les microstructures. Deux exemples de microstructures sont présentés sur la figure 2.21.

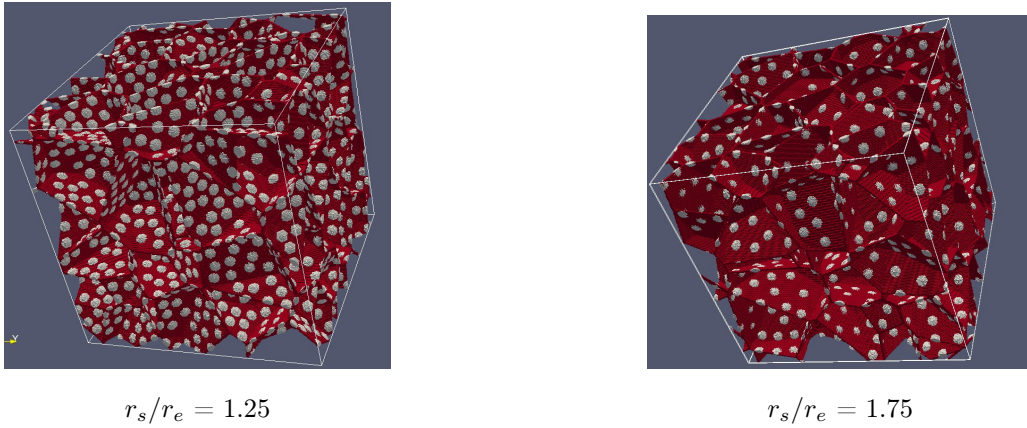


FIGURE 2.21 – Exemples de cellules unitaires utilisées dans les simulations FFT : polycristal avec bulles intergranulaires (blanc) saturant les joints de grains (rouge). Effet de deux espacements minimaux distincts entre bulles (Boittin *et al.*, 2017).

Chaque microstructure est soumise à trois conditions de chargement distinctes (en direction de contrainte macroscopique imposée) :

- traction purement hydrostatique,
- chargement axisymétrique purement déviatorique ($\Sigma_{33} = -2\Sigma_{11} = -2\Sigma_{22}$, $\Sigma_{ij, i \neq j} = 0$),
- chargement axisymétrique intermédiaire avec un fort taux de triaxialité ($\Sigma_m/\Sigma_{eq} = 4$, $\Sigma_{33} = 1.27\Sigma_{11} = 1.27\Sigma_{22}$, $\Sigma_{ij, i \neq j} = 0$).

Pour ces différents chargements, les calculs en champs complets ont été réalisés sur les différentes microstructures (avec $f_b = 0.02$ et $p_b = 0$). Pour chaque chargement, la contrainte d'écoulement macroscopique (hydrostatique ou équivalente) est tracée en fonction de la porosité f_e . Un exemple est donné sur la figure 2.22 dans le cas du chargement purement hydrostatique. Cette campagne de calculs a conduit aux observations principales suivantes :

- la taille relative des bulles a une forte influence sur la contrainte d'écoulement effective pour un chargement purement hydrostatique (pour une fraction volumique donnée de bulles, la contrainte d'écoulement diminue lorsque la taille relative diminue).
- la taille relative des bulles a une influence plus faible sur la contrainte d'écoulement effective pour un chargement axisymétrique purement déviatorique (pour une fraction volumique donnée de bulles, la contrainte d'écoulement diminue également lorsque la taille relative diminue).

Il est rappelé que les tailles relatives de bulles mentionnées ici sont des tailles relatives par rapport à la taille moyenne des grains (fixe).

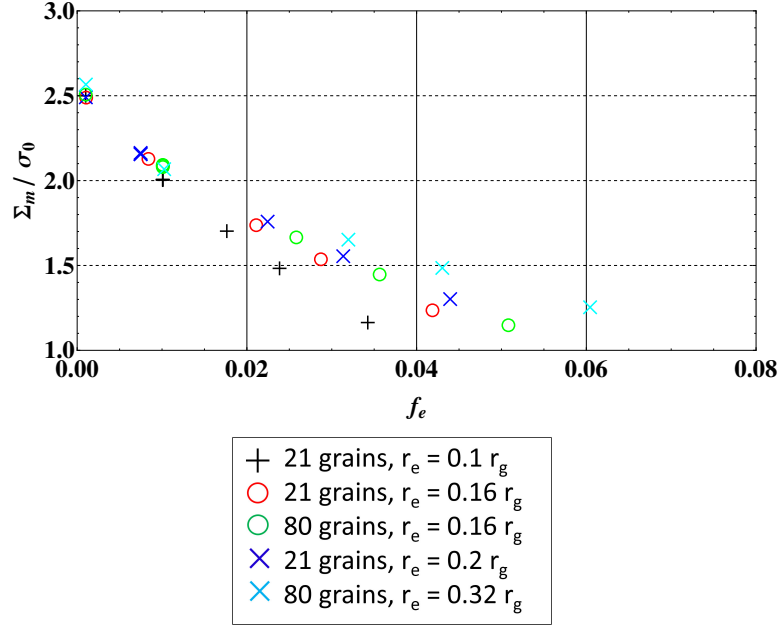


FIGURE 2.22 – Contraintes hydrostatiques effectives pour un chargement purement hydrostatique en fonction de la fraction volumique f_e pour différentes tailles relatives des bulles (r_e/r_g) (Boittin *et al.*, 2017).

Les calculs en champs complets précédents (présentés en 2.1.4) ont montré la nécessité d'utiliser une fraction volumique corrigée dans le modèle analytique (2.1) (présenté en 2.1.3) afin d'obtenir une bonne adéquation avec les simulations numériques. Étant données les microstructures particulières considérées ici (bulles allongées sur les joints de grains), une correction adaptée est de nouveau identifiée. Le modèle analytique considère des bulles intergranulaires ellipsoïdales aplaties et non lenticulaires. Le rapport de forme des bulles intergranulaires du modèle analytique est calculé en fonction de l'angle θ en considérant que les bulles ellipsoïdales aplaties sont équivalentes aux bulles lenticulaires lorsqu'elles ont le même volume et la même surface sur le joint de grain.

La porosité modifiée à considérer dans le modèle analytique de surface de charge à la place de f_e est notée f^* . Pour de faibles valeurs de la porosité f_e , il est observé que la taille relative des bulles a une faible influence sur la contrainte d'écoulement effective, qui dépend principalement de la fraction volumique des bulles. Pour des fractions volumiques élevées de bulles intergranulaires, il a été observé que la fraction volumique et la taille relative des bulles jouent un rôle sur la la contrainte d'écoulement effective et que ce rôle est plus prononcé dans le cas purement hydrostatique que dans le cas purement déviatorique. Ainsi, il ressort que la correction à apporter dépend aussi de la direction du chargement. Comme trois valeurs spécifiques doivent être identifiées pour le modèle analytique ($\bar{\Sigma}_{eq}$, $\bar{\Sigma}_m^+$, et $\bar{\Sigma}_m^-$), il ressort que seules deux corrections sont nécessaires. La première, désignée par f_h^* , correspond au chargement purement hydrostatique et est relative à $\bar{\Sigma}_m^-$ et $\bar{\Sigma}_m^+$. La seconde,

notée f_d^* , correspond au chargement purement déviatorique et est relative à $\bar{\Sigma}_{eq}$. Les fonctions proposées sont de la forme suivante :

$$f_{h,d}^* = g_{h,d}(f_e) + h_{h,d}(f_e, r_e/r_g), \quad (2.61)$$

avec :

$$f_d^* = 1.9f_e + 25 \left(\frac{r_g}{r_e} \right)^2 f_e^{7/2} \quad (2.62)$$

et :

$$f_h^* = 0.5f_e^{3/4} + 4.3 \left(\frac{r_g}{r_e} \right)^2 f_e^{5/2}. \quad (2.63)$$

Les contraintes d'écoulement effectives calculées par FFT et à partir du modèle analytique (2.1) avec les $f_{h,d}^*$ identifiés sont tracées sur la figure 2.23. Il est rappelé que, pour le modèle analytique, $\bar{\Sigma}_m^-$ et $\bar{\Sigma}_m^+$ sont évalués avec f_h^* au lieu de la vraie porosité f_e et que $\bar{\Sigma}_{eq}$ est évalué avec f_d^* (au lieu de f_e).

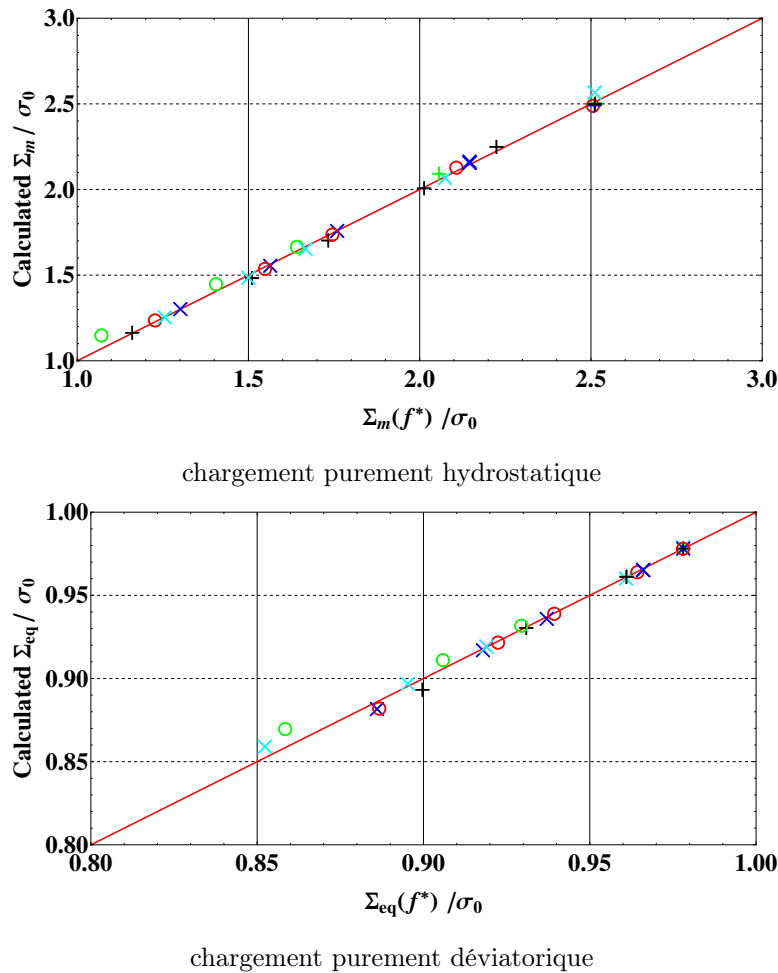


FIGURE 2.23 – Contraintes d'écoulement effectives calculées par FFT et données par le modèle analytique (2.1) (Boittin *et al.*, 2017).

Ensuite, la pertinence du modèle analytique corrigé est vérifiée pour d'autres situations :

- pour d'autres valeurs de la porosité intragranulaire ($f_b = 6\%$ et 0.7%), des calculs par FFT sont réalisés pour différentes microstructures et pour des chargements purement hydrostatique et purement déviatorique. Ils sont comparés aux résultats du modèle analytique et une bonne adéquation est obtenue (voir (Boittin *et al.*, 2017)).

- pour une microstructure donnée (21 grains, à saturation avec $r_e/r_g = 0.2$, $r_s = 1.5 r_e$), 16 directions de contrainte différentes (triaxialités) sont considérées. La porosité intragranulaire locale f_b est de 2 %. Les différences entre calculs FFT et modèle analytique corrigé sont inférieures à 5 %, comme cela est illustré sur la figure 2.24. Deux types de chargements axisymétriques sont testés : $\Sigma_{11} = \Sigma_{22} = \bar{S}$ et $\Sigma_{33} = \bar{T}$, $\Sigma_{ij, i \neq j} = 0$. Le premier correspond à $|\bar{T}| > |\bar{S}|$ et le second à $|\bar{T}| < |\bar{S}|$. La figure 2.24 montre que les résultats correspondant à $|\bar{T}| > |\bar{S}|$ ont systématiquement une contrainte d'écoulement plus faible que le cas $|\bar{S}| > |\bar{T}|$ (pour le même taux de triaxialité des contraintes). Cela est imputable à l'effet du troisième invariant des contraintes.
- pour cette même microstructure et pour les mêmes types de chargement (que dans le point précédent), la pertinence du modèle analytique corrigé est vérifiée pour une valeur non nulle de la pression p_e dans les bulles intergranulaires. Par souci de concision, ces résultats ne sont pas présentés en ici. Il est juste rappelé que grâce au résultat (2.13), dans le cas où les bulles sont pressurisées (pression p_b dans les bulles intragranulaires et p_e dans les bulles intergranulaires), la surface d'écoulement effective peut être obtenue à partir du problème des cavités intragranulaires drainées ($p_b = 0$), à condition que la pression dans les bulles intergranulaires soit fixée à $p_e - p_b$. Le domaine $P^{\text{hom}}(p_b, p_e)$ est obtenu à partir du domaine $P^{\text{hom}}(0, p_e - p_b)$ correspondant à une matrice drainée à l'échelle microscopique par une translation de $-p_b \mathbf{i}$. De manière équivalente, il peut être obtenu à partir du problème avec des cavités intergranulaires drainées ($p_e = 0$), à condition que la pression dans les bulles intragranulaires soit fixée à $p_b - p_e$. Dans ce cas, le domaine $P^{\text{hom}}(p_b, p_e)$ est obtenu à partir du domaine $P^{\text{hom}}(p_b - p_e, 0)$ par une translation de $-p_e \mathbf{i}$.

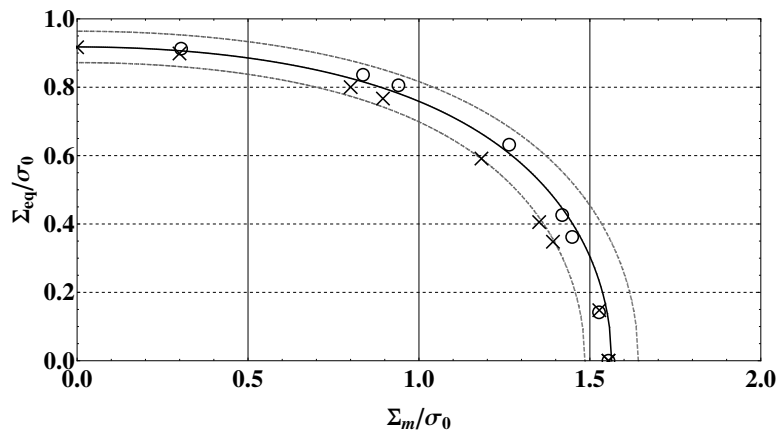


FIGURE 2.24 – Surface de charge effective calculée par FFT (croix : $|\bar{T}| > |\bar{S}|$, cercles : $|\bar{S}| > |\bar{T}|$) et donnée par le modèle analytique (2.1) (trait plein). Microstructure : 21 grains, à saturation avec $r_e/r_g = 0.2$, $r_s/r_e = 1.5$. Pointillés : modèle analytique à $\pm 5\%$. Contrainte effective équivalente normalisée par σ_0 (limite d'élasticité du matériau sans cavité) en fonction de la contrainte effective hydrostatique normalisée par σ_0 (Boittin *et al.*, 2017).

2.1.6 Intégration du modèle analytique dans le code SCANAIR

Le modèle analytique a été intégré dans le code de calcul SCANAIR (Système de Codes pour l'Analyse d'Accidents d'Insertion de Réactivité) développé à l'IRSN. Pour rappel, ce code métier est dédié à la simulation du comportement thermomécanique d'un crayon combustible complet lors d'un RIA (Moal *et al.*, 2014). Il est composé de trois modules principaux traitant de la thermique, de la mécanique et des gaz de fission. Les calculs sont réalisés à l'échelle d'un crayon de combustible et le code s'appuie sur des simplifications géométriques

(modélisation 1.5D) et de modélisation afin de garantir des temps de calculs faibles (environ 1 minute pour la simulation d'un essai du programme CABRI REP-Na). Axialement, une maille de la discrétisation spatiale du crayon peut comporter une voire plusieurs pastilles de combustible. Radialement, la discrétisation est plus fine et comporte en général une vingtaine de mailles selon le rayon de la pastille, avec une progression pour obtenir des tailles de maille plus petites en périphérie de la pastille. La modélisation thermique prend en compte le crayon, le canal (zone de passage du fluide caloporteur) et une enveloppe (paroi externe). Le crayon est composé de l'empilement de pastilles, de la gaine, du jeu entre le combustible et la gaine, du plénum inférieur et du plénum supérieur (zones libres dans le crayon en dessous et au dessus de l'empilement de pastilles). Pour la modélisation mécanique, la déformation totale est obtenue par superposition linéaire de la déformation induite par plusieurs phénomènes élémentaires. Pour le matériau combustible, la déformation totale est la somme des déformations élastique, plastique, de fissuration, thermique, de gonflement et d'évidement (comblement des évidements et des chanfreins des pastilles). Pour le matériau de gainage, la déformation totale est la somme des déformations élastique, plastique et thermique. Le problème est supposé être axisymétrique. L'ensemble des pastilles et la gaine sont supposés être des cylindres suffisamment longs pour justifier plusieurs hypothèses qui conduisent à considérer que le tenseur des déformations est uniquement diagonal et que les déformations axiales sont uniformes dans une tranche axiale du combustible et dans une tranche axiale de la gaine. La modélisation des gaz de fission dans les pastilles prend en compte, suite à une augmentation de température, de l'augmentation des volumes, des rayons et des pressions des différentes populations de cavités contenant les gaz de fission. Par exemple, pour les bulles intragranulaires, les phénomènes modélisés sont : la migration des bulles intragranulaires à travers le réseau cristallin vers les bulles intergranulaires sur les joints de grains par diffusion (gradient thermique), la coalescence de bulles intragranulaires en raison de leurs mouvements relatifs par diffusion (gradient thermique et mouvement brownien) et le gonflement des bulles intragranulaires sous l'effet d'une surpression par diffusion des lacunes du réseau cristallin vers les bulles. Le module de gaz de fission calcule la quantité de gaz de fission libérée dans les volumes libres et qui conduit à une surpressurisation interne de la gaine. Les modules de thermique et de gaz utilisent la méthode des volumes finis. Le module de mécanique utilise la méthode des éléments finis. Le couplage entre les différents modules est illustré sur la figure 2.25.

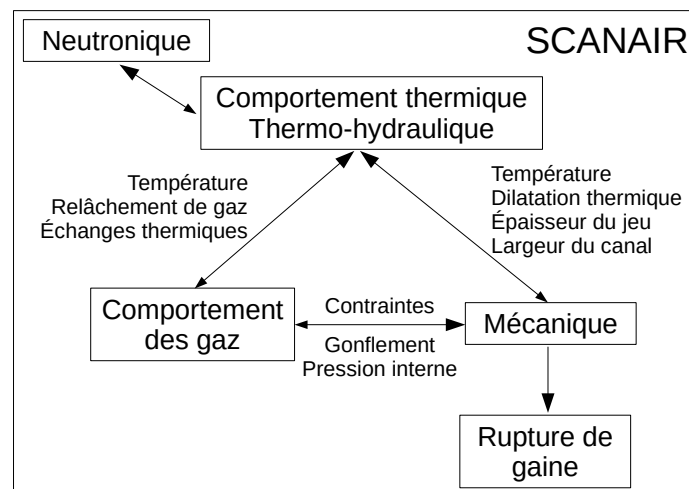


FIGURE 2.25 – SCANAIR : couplage entre les différents modules (d'après (Moal *et al.*, 2014)).

Suite à l'intégration du modèle analytique dans SCANAIR, la déformation plastique dans la pastille peut maintenant être évaluée par l'intermédiaire du critère de type GTN (2.1), à la place du critère de von Mises traditionnellement utilisé. L'effet des bulles intra et intergranulaires et leurs pressions sur le comportement mécanique plastique peuvent alors être pris en compte. Le modèle analytique permet également d'accéder à une estimation du taux de dilatation moyen de la matrice (noté A). Cette information permet d'estimer la croissance des bulles intra et intergranulaires par déformation plastique. Dans le modèle analytique, l'évolution de la porosité des bulles intergranulaires f_e est régie par (conservation de la masse) :

$$\dot{f}_e = 3(1 - f_e) (\dot{E}_m - A), \quad (2.64)$$

De même, la loi d'évolution de la fraction volumique locale des cavités intragranulaires f_b , qui, rigoureusement, varie d'un point à l'autre, s'écrit :

$$\dot{f}_b(\mathbf{x}) = 3(1 - f_b(\mathbf{x}))\dot{\varepsilon}_m(\mathbf{x}). \quad (2.65)$$

Cette relation est moyennée pour donner :

$$\dot{f}_b \approx 3(1 - f_b)A. \quad (2.66)$$

Afin d'avoir une estimation analytique du taux de dilatation moyen de la matrice, A est simplement approchée par :

$$A \approx \tilde{A}(\dot{E}_m = \text{sign}(\dot{E}_m), \dot{E}_{eq} = 0)|\dot{E}_m| + \tilde{A}(\dot{E}_m = 0, \dot{E}_{eq} = 1)\dot{E}_{eq} \quad (2.67)$$

où les formes analytiques de $\tilde{A}(\dot{E}_m = \text{sign}(\dot{E}_m), \dot{E}_{eq} = 0)$ (chargement purement hydrostatique) et de $\tilde{A}(\dot{E}_m = 0, \dot{E}_{eq} = 1)$ (chargement purement déviatorique) sont données dans (Vincent *et al.*, 2014a) (fonction \tilde{A} introduite en 2.1.3). Ces informations sont utilisées pour mettre à jour les porosités et les rayons des bulles.

Le modèle analytique de surface de charge de plasticité effective (2.1) ne prend pas en compte explicitement les effets de surface dus aux bulles intragranulaires qui sont de taille nanométrique. Cependant, le modèle classique de Gurson a été étendu par Dormieux et Kondo (2010) pour incorporer l'effet des contraintes de surface ou d'interface à l'échelle nanométrique. Dans (Dormieux et Kondo, 2010), il est supposé que l'interface peut être décrite par un critère de von Mises. L'idée ici est de simplement ajuster les paramètres q_1 et q_3 entrant dans le critère GTN utilisé dans (Vincent *et al.*, 2014a) pour le premier changement d'échelle pour retrouver approximativement les résultats de (Dormieux et Kondo, 2010). Ces paramètres sont ajustés de façon à ce que la contrainte purement hydrostatique et la contrainte purement équivalente de (Dormieux et Kondo, 2010) puissent être retrouvées avec la contrainte purement hydrostatique et la contrainte purement équivalente du critère GTN classique. Les expressions suivantes sont obtenues :

$$q_1 = e^{-3\bar{\Gamma}}, \quad (2.68)$$

$$q_3 = \left(\frac{1 - q_1 f_b}{1 - f_b + \frac{9f_b}{\sqrt{15}}\bar{\Gamma}} \right)^2. \quad (2.69)$$

Ensuite, concernant la tension de surface γ_b , Dormieux et Kondo (2010) montrent qu'elle peut être prise en compte par une simple translation de la surface GTN le long de l'axe hydrostatique, p_b étant remplacé par $p_b -$

$2\gamma_b/r_b$, où la taille des bulles est notée r_b . En procédant ainsi, la taille nanométrique des bulles intragranulaires et ses effets de surface peuvent être pris en compte (à moindre coût) dans le modèle de (Vincent *et al.*, 2014a). Les paramètres q_1 et q_3 obtenus dépendent de la porosité due aux bulles intragranulaires et d'un nouveau paramètre $\bar{\Gamma} = k_{int}/(r_b \sigma_0)$. Le paramètre k_{int} est la limite d'élasticité de l'interface. Suivant une analyse de Monchiet et Bonnet (2010), cette limite d'élasticité interfaciale peut être estimée comme l'épaisseur de la zone entourant les nano-bulles avec effets de surface (c'est-à-dire l'épaisseur d'une interphase h) multipliée par la limite d'élasticité spécifique de l'interphase $k_{int} = h \sigma_0^{interphase}$. Ainsi, l'expression suivante de $\bar{\Gamma}$ est proposée :

$$\bar{\Gamma} = \frac{h \sigma_0^{interphase}}{r_b \sigma_0}. \quad (2.70)$$

En considérant que h est de l'ordre du paramètre de maille de la structure cristalline et que $\sigma_0^{interphase}$ est de l'ordre de $\mu/5$ avec μ le module de cisaillement de la matrice d'après (Mi *et al.*, 2011) (contrainte critique de cisaillement d'un cristal), alors il est obtenu que $\bar{\Gamma} r_b \approx 80$ nm (en considérant les valeurs approchées suivantes pour l'UO₂ : $h \approx 0.5$ nm, $\mu \approx 80$ GPa, $\sigma_0 \approx 100$ MPa).

Une première étude a mis en application ce modèle simplifié avec SCANAIR sur les tests de la campagne REP-Na. Cette étude préliminaire a montré que les elongations résiduelles du combustible (grandeur mesurable après essai) calculées sont de manière générale plus proches des valeurs mesurées expérimentalement avec ce nouveau modèle qu'avec le critère de von Mises. Ces résultats sont à consolider et des études supplémentaires sont nécessaires. Une piste d'amélioration concerne la prise en compte de la rigidité accrue de la matrice autour des bulles intragranulaires. Dans les calculs réalisés, le rapport $\sigma_0^{interphase}/\sigma_0$ est constant au cours de la simulation. Il serait sans doute plus judicieux de l'exprimer sous la forme d'une fonction dépendante de la température.

2.2 Élasticité des nanoporeux saturés

Les résultats présentés dans cette section ont été obtenus en collaboration avec Xavier Haller, Yann Monerie et Stéphane Pagano. Ils sont basés sur Haller (2015) et (Haller et al., 2016).

Les travaux de dynamique moléculaire de Colbert (2012); Jelea *et al.* (2011) ont mis en évidence un effet de surface à l'échelle des cavités intragranulaires nanométriques et ont montré un impact significatif de cet effet de surface sur les propriétés élastiques effectives. L'objectif de (Haller, 2015) est de développer un modèle de comportement en élasticité linéaire pour l'UO₂ irradié capable de tenir compte à la fois de la microstructure hétérogène présentée en 2.1 et à la fois de l'effet de surface entre les bulles et la matrice. Le modèle de comportement proposé doit être analytique afin d'être utilisable dans le code de calcul SCANAIR en préservant des temps de calcul faibles. Les modèles mis en œuvre relèvent des modèles d'homogénéisation en élasticité linéaire et plus particulièrement de modèles issus de l'approche par motifs morphologiques représentatifs (MMR).

2.2.1 Choix de l'approche par motifs morphologiques

L'approche par motifs morphologique, initialement proposée par Stolz et Zaoui (1991), a été développée par Bornert (1996a,b); Bornert *et al.* (1996); Bornert (2001). Contrairement à une approche d'homogénéisation classique (comme les estimations de Hashin et Shtrikman (1963); Ponte Castañeda et Willis (1995)), l'approche par motifs repose sur la construction de champs admissibles non uniformes par phases et permet de prendre en compte des informations sur l'arrangement local des phases. Dans cette approche, le volume élémentaire représentatif est décomposé en sous-domaines disjoints connexes. Ces sous-domaines sont regroupés en familles

appelées "motifs morphologiques". Tous les membres d'un même motif partagent la même géométrie et la même distribution spatiale des propriétés mécaniques locales. La démarche est illustrée sur la figure 2.26.

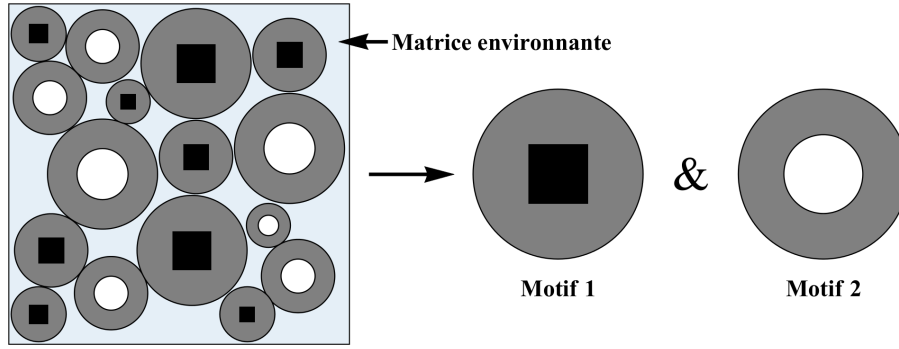


FIGURE 2.26 – Approche par motifs morphologiques représentatifs : exemple de décomposition à partir de deux motifs de formes extérieures sphériques et d'un domaine de matrice (Haller, 2015).

Le volume élémentaire représentatif V est décomposé en $N_M - 1$ motifs (indices $r \in [2, \dots, N_M]$, fractions volumiques c_r) et un domaine de matrice (indice 1, fraction volumique c_1). Chaque motif comporte N_r membres. Les membres (indices i) de chaque motif sont définis sur les domaines notés D_r^i centrés aux points \mathbf{x}_r^i ($\forall r \in [2, \dots, N_M]$ et $\forall i \in [1, \dots, N_r]$). Des domaines D_r ($\forall r \in [2, \dots, N_M]$) sont introduits : ils sont centrés à l'origine et sont tels que les domaines D_r^i sont obtenus à partir des domaines D_r par translation de vecteur \mathbf{x}_r^i . Un motif est ainsi caractérisé par un domaine D_r et une distribution spatiale des tenseurs de rigidité locaux $\mathbf{C}_r(\mathbf{x})$ ($\forall \mathbf{x} \in D_r$). Plusieurs modèles peuvent être développés à partir de la description en motifs comme les bornes de Voigt et Reuss généralisées ou les estimations de Hashin et Shtrikmann généralisées. Comme dans les méthodes d'homogénéisation classiques, les conditions de déformations homogènes sont de la forme $\mathbf{u} = \boldsymbol{\varepsilon}^0 \cdot \mathbf{x}$, $\forall \mathbf{x} \in \partial V$, où la déformation $\boldsymbol{\varepsilon}^0$ est homogène. La déformation macroscopique s'exprime comme suit :

$$\mathbf{E} = \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle = \frac{1}{|V|} \int_V \boldsymbol{\varepsilon} dV = \boldsymbol{\varepsilon}^0 \quad (2.71)$$

et la contrainte macroscopique est alors définie par :

$$\boldsymbol{\Sigma} = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = \frac{1}{|V|} \int_V \boldsymbol{\sigma} dV. \quad (2.72)$$

De manière duale, les conditions de contraintes homogènes sont de la forme $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = \boldsymbol{\sigma}^0 \cdot \mathbf{n}$, $\forall \mathbf{x} \in \partial V$, où la contrainte $\boldsymbol{\sigma}^0$ est homogène et \mathbf{n} représente la normale sortante au bord de V . La contrainte macroscopique s'exprime comme suit :

$$\boldsymbol{\Sigma} = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = \frac{1}{|V|} \int_V \boldsymbol{\sigma} dV = \boldsymbol{\sigma}^0 \quad (2.73)$$

et la déformation macroscopique est alors définie par :

$$\mathbf{E} = \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle = \frac{1}{|V|} \int_V \boldsymbol{\varepsilon} dV. \quad (2.74)$$

La borne supérieure est appelée borne de Voigt généralisée (VG) :

$$\mathbf{C}_M^{\text{VG}} = c_1 \mathbf{C}_1 + \sum_{r=2}^{N_M} c_r \mathbf{C}_{Mr}^{\text{VG}} \quad \text{avec} \quad \forall \mathbf{E}, \quad \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_{D_r} = \mathbf{C}_{Mr}^{\text{VG}} : \mathbf{E}. \quad (2.75)$$

La déformation homogène \mathbf{E} (qui correspond à la déformation macroscopique appliquée sur le bord du volume élémentaire représentatif, VER) est appliquée directement sur le bord du motif r et le tenseur $\boldsymbol{\sigma}$ décrit le champ

de contrainte local sur le motif r induit par le chargement \mathbf{E} . La moyenne volumique sur le domaine D_r est notée $\langle \cdot \rangle_{D_r} = 1/|D_r| \int_{D_r} \cdot dV$. La borne inférieure est appelée borne de Reuss généralisée (RG) :

$$\left(\mathbf{C}_M^{\text{RG}}\right)^{-1} = c_1 \left(\mathbf{C}_1\right)^{-1} + \sum_{r=2}^{N_M} c_r \left(\mathbf{C}_{M_r}^{\text{RG}}\right)^{-1} \quad \text{avec} \quad \forall \boldsymbol{\Sigma}, \quad \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_{D_r} = \left(\mathbf{C}_{M_r}^{\text{RG}}\right)^{-1} : \boldsymbol{\Sigma}. \quad (2.76)$$

La contrainte homogène $\boldsymbol{\Sigma}$ (qui correspond à la contrainte macroscopique appliquée sur le bord du VER) est appliquée directement sur le bord du motif r et le tenseur $\boldsymbol{\varepsilon}$ décrit le champ de déformation local sur le motif r induit par le chargement $\boldsymbol{\Sigma}$. Les tenseurs $\mathbf{C}_{M_r}^{\text{VG}}$ et $\mathbf{C}_{M_r}^{\text{RG}}$ sont donc obtenus à partir de l'étude du motif r sur lequel des conditions de déformations homogènes et de contraintes homogènes sont respectivement appliquées sur la frontière extérieure de r .

Des formulations variationnelles similaires à celles de [Hashin et Shtrikman \(1963\)](#) ont été développées dans le cadre de l'approche par motifs ([Bornert, 1996b](#)). Cette étude se limite au cas de matériaux dont la distribution des centres des motifs (points \mathbf{x}_r^i , $\forall r \in [2, \dots, N_M]$ et $\forall i \in [1, \dots, N_r]$) est supposée ellipsoïdale au sens de [Ponte Castañeda et Willis \(1995\)](#). Pour une telle distribution des centres, la détermination des propriétés élastiques effectives passe par l'étude de problèmes dits "auxiliaires". Chacun de ces problèmes correspond à l'étude du comportement d'un motif plongé dans un milieu de référence infini (de rigidité \mathbf{C}_0) soumis à l'infini à une déformation $\boldsymbol{\varepsilon}^0$. Les tenseurs suivants d'ordre quatre $\mathbf{U}_{M_r}^0$, $\mathbf{V}_{M_r}^0$ et $\mathbf{T}_{M_r}^0$ sont introduits pour chaque problème auxiliaire :

$$\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_{D_r} = \mathbf{U}_{M_r}^0 : \boldsymbol{\varepsilon}^0, \quad \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_{D_r} = \mathbf{V}_{M_r}^0 : \boldsymbol{\varepsilon}^0, \quad \langle \boldsymbol{\tau} \rangle_{D_r} = \mathbf{T}_{M_r}^0 : \boldsymbol{\varepsilon}^0 = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_{D_r} - \mathbf{C}_0 : \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_{D_r}, \quad (2.77)$$

où le tenseur $\boldsymbol{\tau}$ est le tenseur de polarisation défini par :

$$\forall \mathbf{x} \in V, \quad \boldsymbol{\tau}(\mathbf{x}) = (\mathbf{C}(\mathbf{x}) - \mathbf{C}_0) : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}). \quad (2.78)$$

En adoptant les travaux de [Bornert \(1996b\)](#), plusieurs cas particuliers sont considérés dans ([Haller, 2015](#)). Par souci de concision, dans le présent document, uniquement le premier cas est considéré, où le milieu de référence correspond à la matrice. Ce type de modèle est qualifié d'estimation de Mori et Tanaka généralisée (MTG). Ce modèle est retenu dans le présent document car il est utilisé pour dériver le modèle complet finalement proposé par ([Haller, 2015](#)) pour décrire le comportement effectif pour l'UO₂ irradié (avec prise en compte des effets de surface pour les bulles intra et intergranulaires sous pressions). En effet, ce type de modèle conduit à des formes analytiques. De plus, le problème auxiliaire de la cavité ellipsoïdale, va être résolu de façon approchée uniquement dans le cas où la matrice correspond au milieu de référence. L'estimation de Mori et Tanaka généralisée (MTG) s'écrit :

$$\mathbf{C}_M^{\text{MTG}} = \mathbf{C}_1 + \left(\mathbf{I} - \langle \mathbf{T}_{M_r}^0 \rangle_M : \mathbf{P}_d^0 \right)^{-1} : \langle \mathbf{T}_{M_r}^0 \rangle_M, \quad (2.79)$$

où $\langle \mathbf{T}_{M_r}^0 \rangle_M = \sum_{r=2}^{N_M} c_r \mathbf{T}_{M_r}^0$ avec $\mathbf{C}_0 = \mathbf{C}_1$ et \mathbf{I} est le tenseur identité d'ordre quatre. De la même façon que pour l'estimation de [Ponte Castañeda et Willis \(1995\)](#), le tenseur \mathbf{P}_d^0 est le tenseur de Hill relatif à la forme de la distribution spatiale des centres des motifs (ici avec $\mathbf{C}_0 = \mathbf{C}_1$). Lorsque la forme extérieure des motifs correspond à celle de la distribution des centres, alors les inégalités suivantes sont obtenues [Bornert \(1996b\)](#) (inégalités sur les tenseurs d'ordre quatre au sens des formes quadratiques) :

$$\mathbf{C}_M^{\text{RG}} < \mathbf{C}_M^{\text{MTG}} < \mathbf{C}_M^{\text{VG}}. \quad (2.80)$$

2.2.2 Modélisation de la zone perturbée

C'est la présence d'une zone perturbée de quelques rangées d'atomes à la frontière entre les différentes phases du matériau qui induit l'effet de surface précédemment introduit. Dans le cadre du présent travail, les phases considérées correspondent aux cavités (ou bulles) et à la matrice. Cet effet de surface est en général négligé en mécanique des milieux continus classique. Cependant, il peut devenir important pour des nanocomposites (dont les matériaux nanoporeux) qui sont caractérisés par une surface spécifique importante. Afin de développer des modèles micromécaniques pour le comportement élastique effectif des nanocomposites, une description mécanique doit, tout d'abord, être donnée à la zone perturbée. Le modèle d'interface imparfaite cohérente et le modèle d'interphase sont deux modèles couramment utilisés dans la littérature pour établir cette description.

Le modèle d'interface imparfaite cohérente présente l'avantage de conduire à des modèles de comportement effectif qui sont analytiques et plus simples à mettre en œuvre dans un code de calcul de structure. Il suppose que l'épaisseur de la zone perturbée est petite devant les autres longueurs caractéristiques de la microstructure du matériau (comme le rayon des cavités dans le cas présent). La zone perturbée est alors décrite par une surface (i.e. épaisseur nulle). Ce modèle a été proposé initialement par [Gurtin et Murdoch \(1975\)](#). Il considère une discontinuité du vecteur contrainte et la continuité du déplacement à travers l'interface. Le modèle de [Gurtin et Murdoch \(1975\)](#) comporte deux équations : une équation d'équilibre et une loi de comportement surfacique. La loi de comportement surfacique comprend une partie élastique et une contrainte résiduelle. Celles-ci sont généralement supposées isotropes dans le plan tangent (ou transverse) à l'interface. Une interface imparfaite cohérente Γ est considérée entre deux milieux (notés 1 et 2) (voir figure 2.27). Le vecteur normal unitaire à Γ est noté \mathbf{n} (orienté de 1 vers 2) et $\{\mathbf{t}_t, \mathbf{t}_b\}$ forme une base orthonormée directe pour les vecteurs de surface tangents. Le trièdre $\{\mathbf{t}_t, \mathbf{t}_b, \mathbf{n}\}$ forme une base orthonormée directe pour les vecteurs de l'espace (i.e. $\mathbf{n} = \mathbf{t}_t \wedge \mathbf{t}_b$). Les tenseurs identité d'ordre deux et quatre dans le plan tangent, respectivement notés \mathbf{i}_T et \mathbf{I}_T , sont définis par :

$$\mathbf{i}_T = \mathbf{i} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}, \quad (2.81)$$

$$\mathbf{I}_T = \sum_{\alpha, \beta=t,b} \left[\mathbf{t}_\alpha \otimes \mathbf{t}_\alpha \otimes \mathbf{t}_\alpha \otimes \mathbf{t}_\alpha + \frac{1}{2} (\mathbf{t}_\alpha \otimes \mathbf{t}_\beta \otimes \mathbf{t}_\alpha \otimes \mathbf{t}_\beta + \mathbf{t}_\alpha \otimes \mathbf{t}_\beta \otimes \mathbf{t}_\beta \otimes \mathbf{t}_\alpha) \right]. \quad (2.82)$$

L'équation d'équilibre du modèle d'interface imparfaite cohérente s'écrit :

$$[\boldsymbol{\sigma}] \cdot \mathbf{n} + (\boldsymbol{\sigma}_s : \mathbf{b})\mathbf{n} + \text{div}_s \boldsymbol{\sigma}_s = \mathbf{0}, \quad (2.83)$$

où \mathbf{b} est le tenseur de courbure et l'opérateur div_s est la divergence surfacique (définitions précises données à l'Annexe C de [Haller, 2015](#)) dédiée à la géométrie différentielle des surfaces d'après [Garrigues, 1999](#)). La loi de comportement surfacique s'écrit :

$$\boldsymbol{\sigma}_s = \gamma_s \mathbf{i}_T + \mathbf{C}_s : \boldsymbol{\varepsilon}_s, \quad (2.84)$$

où $\boldsymbol{\sigma}_s$ est défini comme le tenseur des contraintes surfaciques. Le tenseur $\boldsymbol{\varepsilon}_s$ est le tenseur des déformations surfaciques dans le cadre de l'hypothèse des petites perturbations. Le saut de contraintes $[\boldsymbol{\sigma}]$ à travers l'interface Γ est défini par $[\boldsymbol{\sigma}] = \boldsymbol{\sigma}^{(2)} - \boldsymbol{\sigma}^{(1)}$ où $\boldsymbol{\sigma}^{(1)}$ et $\boldsymbol{\sigma}^{(2)}$ sont les tenseurs des contraintes à l'interface dans les milieux 1 et 2 respectivement. Le scalaire γ_s correspond à une précontrainte hydrostatique dans le plan tangent appelée tension de surface et \mathbf{C}_s est un tenseur de rigidité surfacique d'ordre quatre. L'élasticité surfacique est supposée

isotrope dans le plan tangent et le tenseur de rigidité surfacique \mathbf{C}_s peut s'écrire dans la base d'isotropie transverse pour les tenseurs d'ordre quatre (axe d'isotropie transverse porté par le vecteur \mathbf{n}) :

$$\mathbf{C}_s = 2(k_s \mathbf{J}_T + \mu_s \mathbf{K}_T), \quad (2.85)$$

où $\mathbf{J}_T = \frac{1}{2}(\mathbf{i}_T \otimes \mathbf{i}_T)$ et $\mathbf{K}_T = \mathbf{I}_T - \mathbf{J}_T$. Les scalaires k_s et μ_s sont les coefficients d'élasticité surfacique exprimés, tout comme γ_s , en J/m^2 (ou en N/m). Le tenseur de rigidité surfacique \mathbf{C}_s est supposé défini positif dans ce travail. La déformation surfacique $\boldsymbol{\varepsilon}_s$ est égale à la partie tangente à l'interface de la déformation dans le milieu 1 ou dans le milieu 2. Le déplacement est supposé continu à travers l'interface. Cela implique que les composantes tangentielles du tenseur des déformations sont continues :

$$\boldsymbol{\varepsilon}_s(\mathbf{x}) = \mathbf{I}_T(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\varepsilon}^{(1)}(\mathbf{x}) = \mathbf{I}_T(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\varepsilon}^{(2)}(\mathbf{x}), \quad \forall \mathbf{x} \in \Gamma, \quad (2.86)$$

où $\boldsymbol{\varepsilon}^{(1)}$ et $\boldsymbol{\varepsilon}^{(2)}$ sont les tenseurs des déformations à l'interface respectivement dans le milieu 1 et le milieu 2.

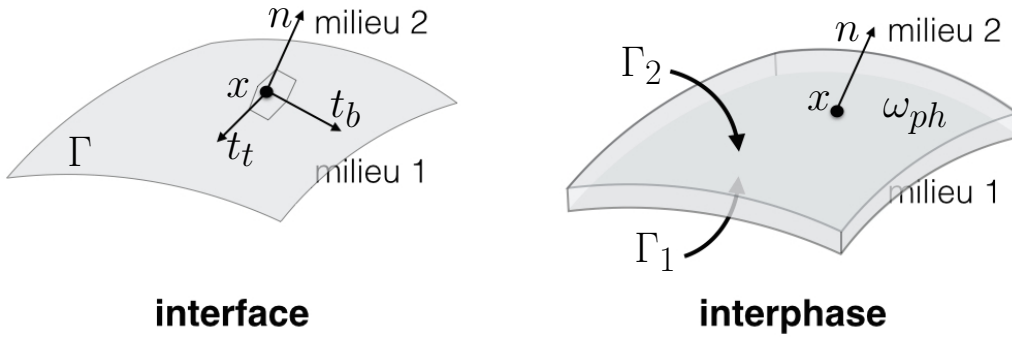


FIGURE 2.27 – Représentations de l'interface imparfaite cohérente (à gauche) et de l'interphase (à droite) (Haller, 2015).

Dans le modèle d'interphase, la zone perturbée est modélisée comme une phase homogène (interphase, domaine ω_{ph}) et les champs locaux sur l'interphase vérifient l'équation d'équilibre ($\text{div} \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0}$) (Paliwal et Cherkaoui, 2012). Le comportement mécanique de l'interphase est décrit par une loi de comportement élastique linéaire (tenseur de rigidité \mathbf{C}_{ph}) supposée isotrope avec précontrainte hydrostatique $\gamma_{ph} \mathbf{i}$. Les interfaces entre l'interphase et les milieux environnants 1 et 2 sont supposées parfaites (continuité du déplacement et du vecteur contrainte) et sont notées respectivement Γ_1 et Γ_2 . Le vecteur unitaire normal au contour $\partial\omega_{ph}$ de ω_{ph} et dirigé vers l'extérieur du domaine est noté \mathbf{n} . Les équations dans l'interphase sont les suivantes :

$$\begin{cases} \text{div} \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0}, & \boldsymbol{\sigma} = \gamma_{ph} \mathbf{i} + \mathbf{C}_{ph} : \boldsymbol{\varepsilon} \text{ dans } \omega_{ph} \\ [\boldsymbol{\sigma}] \cdot \mathbf{n} = \mathbf{0}, & [\mathbf{u}] = \mathbf{0} \text{ sur } \Gamma_1 \\ [\boldsymbol{\sigma}] \cdot \mathbf{n} = \mathbf{0}, & [\mathbf{u}] = \mathbf{0} \text{ sur } \Gamma_2 \end{cases} \quad (2.87)$$

avec :

$$\mathbf{C}_{ph} = 3k_{ph} \mathbf{J} + 2\mu_{ph} \mathbf{K}, \quad (2.88)$$

où k_{ph} et μ_{ph} désignent respectivement les modules de compressibilité et de cisaillement de l'interphase (\mathbf{J} et \mathbf{K} sont les tenseurs d'ordre 4 classiques de projection sur la partie hydrostatique et sur la partie déviatorique respectivement). Le modèle d'interphase présente l'inconvénient de conduire à des modèles micromécaniques plus complexes à mettre en œuvre que le modèle d'interface imparfaite cohérente. De plus, le modèle d'interphase n'est pas forcément plus pertinent que le modèle d'interface imparfaite cohérente : le nombre de couches d'atomes

dans l'épaisseur de la zone perturbée étant relativement faible, l'utilisation d'une approche par interphase semble difficile à justifier.

Au final, tel que souligné dans (Haller, 2015), quelle que soit la modélisation retenue, celle-ci relève d'une analogie consistant à assimiler un modèle particulier à la zone perturbée. Dans ce travail, le modèle d'interface imparfaite cohérente est privilégié car il aboutit à des modèles analytiques relativement simples.

Le modèle d'interface imparfaite cohérente est utilisé par Duan *et al.* (2005, 2007a,b); Le Quang et He (2008); Brisard *et al.* (2010a,b). Les modèles développés sont capables de décrire le comportement effectif des matériaux nanoporeux à cavités sphériques. D'autres modèles, comme ceux de Hervé et Pellegrini (1995); Cherkaoui *et al.* (1995); Marcadon (2005); Lipinski *et al.* (2006), s'appuient sur le modèle d'interphase. Ils sont capables de décrire le comportement effectif des matériaux nanoporeux. Les modèles de Cherkaoui *et al.* (1995); Lipinski *et al.* (2006) permettent de tenir compte de l'anisotropie des phases et de la forme ellipsoïdale des cavités et de l'interphase. Une description de ces modèles est donnée dans (Haller, 2015).

Un point particulièrement intéressant est que le modèle d'interface imparfaite cohérente correspond à un modèle de type voile dont l'épaisseur tend vers zéro, c'est-à-dire à une coque mince d'épaisseur h petite (ou à une interphase fine) de Kirchhoff-Love pour laquelle les efforts nécessaires pour la fléchir sont négligeables devant les efforts nécessaires pour l'allonger et pour laquelle le comportement mécanique volumique, indicé ph comme introduit pour le modèle d'interphase, est le suivant :

$$\boldsymbol{\sigma} = \gamma_{ph} \mathbf{i} + \mathbf{C}_{ph} : \boldsymbol{\varepsilon} \quad \text{avec} \quad \mathbf{C}_{ph} = 3k_{ph} \mathbf{J} + 2\mu_{ph} \mathbf{K}, \quad (2.89)$$

où :

$$k_{ph} = \frac{1}{h} \frac{4k_s \mu_s}{3(3\mu_s - k_s)}, \quad \mu_{ph} = \frac{\mu_s}{h}, \quad \gamma_{ph} = \frac{\gamma_s}{h} \frac{2\mu_s}{3\mu_s - k_s}. \quad (2.90)$$

Lorsque l'épaisseur h tend vers zéro, les modèles surfacique et volumique sont équivalents. Inversement, le modèle d'interface imparfaite cohérente permet de décrire le comportement d'une interphase fine rigide lorsque :

$$k_s = h \frac{9k_{ph} \mu_{ph}}{3k_{ph} + 4\mu_{ph}}, \quad \mu_s = h \mu_{ph}, \quad \gamma_s = \gamma_{ph} \frac{6h \mu_{ph}}{3k_{ph} + 4\mu_{ph}}. \quad (2.91)$$

Ces relations entre les propriétés élastiques surfaciques et volumiques ont été mises en évidence par Wang *et al.* (2005) et Brisard *et al.* (2010a). L'Annexe D de Haller (2015) comporte une démonstration de ces relations. La relation entre γ_s et γ_{ph} constitue une originalité de ce travail. Comme Brisard *et al.* (2010a,b), il est supposé que le tenseur de rigidité de l'interphase équivalente à l'interface imparfaite cohérente est supposé défini positif dans l'ensemble de ce travail (i.e. $0 \leq k_s \leq 3\mu_s$).

2.2.3 Comportement élastique effectif

Deux motifs sont définis : un motif, noté \mathcal{S} , relatif aux cavités sphériques (cavités intragranulaires de l' UO_2) et un motif, noté \mathcal{E} , relatif aux cavités ellipsoïdales (cavités intergranulaires de l' UO_2).

Le motif \mathcal{S} est composé d'une cavité sphérique (indice v) enrobée d'une couche de matrice (indice m). L'interface entre la matrice et la cavité suit les conditions d'interface imparfaite cohérente (voir figure 2.28 (a)). La forme extérieure du motif est sphérique et concentrique avec la cavité. Les rayons de la cavité et du motif sont respectivement notés r_1 et r_0 . Les ensembles de points caractérisés respectivement par $r = r_1$ et $r = r_0$ en coordonnées sphériques sont notés Γ_1 et Γ_0 et le vecteur unitaire normal à Γ_1 et Γ_0 est noté \mathbf{n} , orienté selon \mathbf{e}_r (attention : le vecteur \mathbf{n} est orienté dans l'autre sens en 2.1.1).

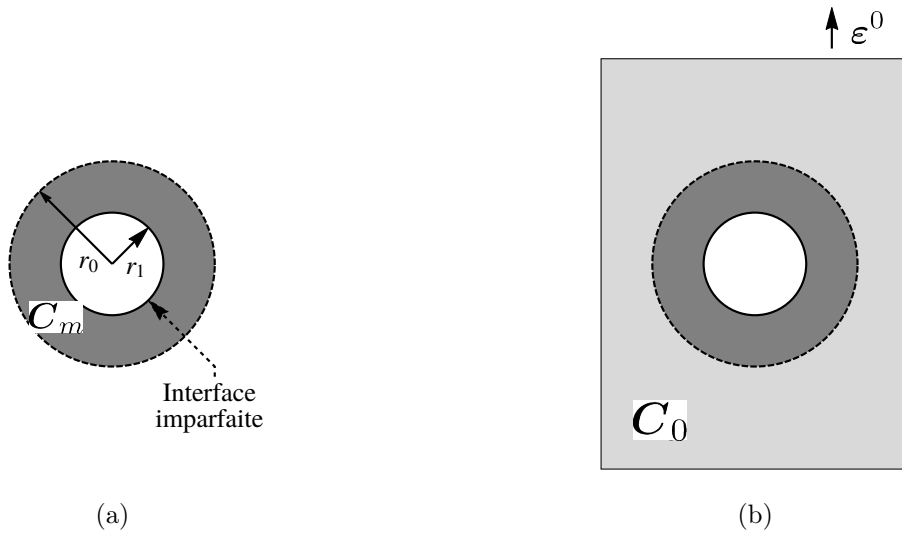


FIGURE 2.28 – (a) Motif \mathcal{S} (b) problème auxiliaire relatif au motif \mathcal{S} .

De façon similaire, le motif \mathcal{E} est composé d'une cavité ellipsoïdale (indice v) enrobée d'une couche de matrice (indice m). L'interface entre la matrice et la cavité suit les conditions d'interface imparfaite cohérente (voir figure 2.29 (a)). La forme extérieure du motif est sphérique (rayon r_0). Les demi-axes de la cavités sont notés a (selon l'axe de révolution) et b (rapport de forme $w = a/b$).

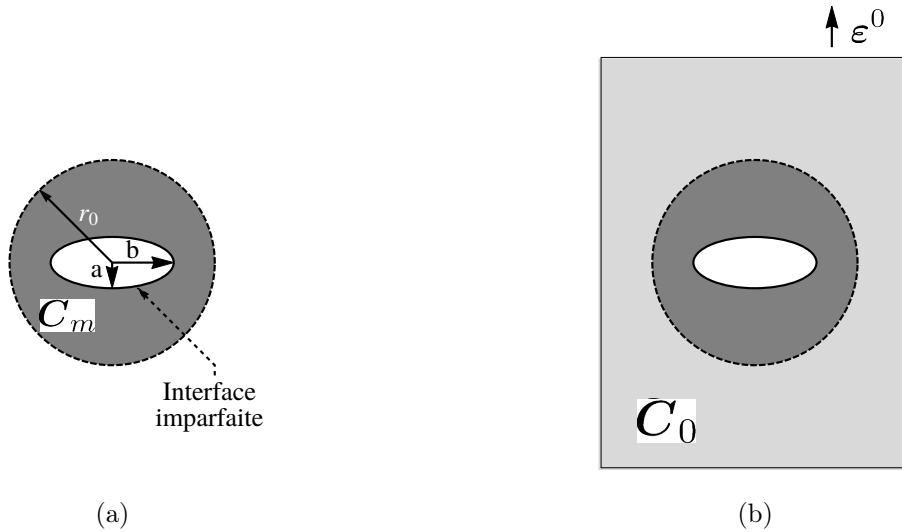


FIGURE 2.29 – (a) Motif \mathcal{E} (b) problème auxiliaire relatif au motif \mathcal{E} .

La détermination des propriétés élastiques effectives passe par la résolution des problèmes d'inclusions hétérogènes, ayant la structure des motifs, noyés dans un milieu infini (noté 0 et de rigidité C_0) sur lequel une déformation ϵ^0 est appliquée à l'infini. Les problèmes à résoudre sont illustrés sur la figure 2.28 (b) et la figure 2.29 (b). Par souci de concision, le présent document se limite au cas où la distribution spatiale des centres des cavités est sphérique (isotrope) et où le milieu infini a les propriétés de la matrice.

La résolution exacte du problème auxiliaire relatif au motif \mathcal{S} peut être trouvée dans [Duan et al. \(2005\)](#). La démonstration est détaillée dans [Haller, 2015](#). Le problème s'écrit de la façon suivante (le domaine occupé par

la phase i est noté ω_i) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0}, \quad \boldsymbol{\varepsilon} = (1/2)(\operatorname{grad} \mathbf{u} + {}^T \operatorname{grad} \mathbf{u}) \text{ dans } \omega_0 \text{ et } \omega_m \\ \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C}_0 : \boldsymbol{\varepsilon} \text{ dans } \omega_0 \text{ et } \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C}_m : \boldsymbol{\varepsilon} \text{ dans } \omega_m \\ (\boldsymbol{\sigma}^{(0)} - \boldsymbol{\sigma}^{(m)}) \cdot \mathbf{n} = \mathbf{0} \text{ et } (\mathbf{u}^{(0)} - \mathbf{u}^{(m)}) = \mathbf{0} \text{ sur } \Gamma_0 \\ \boldsymbol{\sigma}^{(m)} \cdot \mathbf{n} + (\boldsymbol{\sigma}_s : \mathbf{b}) \mathbf{n} + \operatorname{div}_s \boldsymbol{\sigma}_s = \mathbf{0}, \quad \boldsymbol{\varepsilon}_s = \mathbf{I}_T : \boldsymbol{\varepsilon}, \quad \boldsymbol{\sigma}_s = \mathbf{C}_s : \boldsymbol{\varepsilon}_s \text{ sur } \Gamma_1 \\ \mathbf{u} = \boldsymbol{\varepsilon}^0 \cdot \mathbf{x} \text{ lorsque } \|\mathbf{x}\| \rightarrow \infty \end{array} \right. \quad (2.92)$$

où $\boldsymbol{\sigma}^{(0)}$ et $\boldsymbol{\sigma}^{(m)}$ font référence aux tenseurs des contraintes respectivement dans le milieu infini et la matrice et où $\operatorname{grad} \mathbf{u}$ et ${}^T \operatorname{grad} \mathbf{u}$ sont respectivement le gradient de déplacement et la transposée du gradient de déplacement. Les vecteurs $\mathbf{u}^{(0)}$ et $\mathbf{u}^{(m)}$ font référence aux déplacements respectivement dans le milieu infini et la matrice. Le tenseur d'élasticité surfacique est donné par (2.85). Le comportement de la matrice (et du milieu de référence) est supposé isotrope (avec k_m et μ_m les modules de compressibilité et de cisaillement) :

$$\mathbf{C}_m = \mathbf{C}_0 = 3k_m \mathbf{J} + 2\mu_m \mathbf{K}. \quad (2.93)$$

La résolution du problème aboutit à une expression exacte du tenseur \mathbf{T}_{MS}^m associé au motif \mathcal{S} .

Le problème relatif au motif \mathcal{E} est résolu de façon approchée en s'appuyant sur les travaux de [Cherkaoui et al. \(1995\)](#). Ces auteurs ont étudié la réponse d'une inclusion ellipsoïdale enrobée d'une interphase, elle-même entourée d'un milieu infini sur lequel est imposé une déformation homogène à l'infini. Ils ont donné une solution approchée du problème en considérant deux hypothèses majeures : i. l'interphase est très mince, ii. la déformation en tout point de l'inclusion est supposée égale à sa valeur moyenne. La solution du problème auxiliaire relatif au motif \mathcal{E} est ensuite obtenue asymptotiquement dans ([Haller, 2015](#)) à partir du résultat de [Cherkaoui et al. \(1995\)](#) en exploitant l'équivalence entre interphase fine et interface imparfaite cohérente. Finalement, une expression approchée du tenseur \mathbf{T}_{ME}^m est obtenue. Il a été observé que, dans le cas où le rapport de forme de la cavité sphéroïdale du motif \mathcal{E} est égal à 1 (cavité sphérique), la partie déviatorique du tenseur \mathbf{T}_{ME}^m n'est pas égale à celle du tenseur \mathbf{T}_{MS}^m (identifié sur le problème auxiliaire relatif au motif \mathcal{S}). Néanmoins, il a été observé que les parties déviatoriques sont égales lorsque les cavités sont petites ($r \rightarrow 0$) ou lorsque les cavités sont grandes ($r \rightarrow \infty$) ou lorsque l'interface est souple ($\|\mathbf{C}_s\| \rightarrow 0$) ou lorsque l'interface est rigide ($\|\mathbf{C}_s\| \rightarrow \infty$). D'autre part, il a été vérifié que la partie hydrostatique du tenseur \mathbf{T}_{ME}^m (lorsque $w = 1$) est égale à celle du tenseur \mathbf{T}_{MS}^m .

Une estimation de Mori et Tanaka généralisée (MTG) est ensuite proposée pour un matériau contenant deux populations de cavités : i. des nano-cavités sphériques supposées de même taille, réparties de façon homogène et isotrope, ii. des nano-cavités ellipsoïdales supposées de même taille, même forme, orientées aléatoirement et réparties de façon homogène et isotrope. Les propriétés élastiques des interfaces pour les motifs \mathcal{S} et \mathcal{E} sont prises identiques. Le tenseur de rigidité effectif suivant est proposé, où le tenseur \mathbf{P}_d^m est le tenseur de Hill relatif à une distribution isotrope (matrice pour milieu de référence) :

$$\mathbf{C}_M^{\text{MTG}} = \mathbf{C}_m + \left(\mathbf{I} - (c_S \mathbf{T}_{MS}^m + c_E \langle \mathbf{T}_{ME}^m \rangle_{\odot}) : \mathbf{P}_d^m \right)^{-1} : (c_S \mathbf{T}_{MS}^m + c_E \langle \mathbf{T}_{ME}^m \rangle_{\odot}), \quad (2.94)$$

où c_S est la fraction volumique des membres du motif \mathcal{S} et c_E est celle des membres du motif \mathcal{E} . La moyenne sur toutes les orientations $\langle \cdot \rangle_{\odot}$ est obtenue par projection sur la base d'isotropie ([Gatt et al., 2005](#)).

Il convient ensuite de modéliser l'effet des pressions exercées par les gaz contenus dans les cavités (bulles intra et intergranulaires) sur le comportement macroscopique du matériau. L'effet est pris en compte en introduisant

des tenseurs de Biot particuliers afin de tenir compte de la présence des interfaces imparfaites cohérentes. De plus, vu que le comportement mécanique de ces interfaces a été décomposé en une partie élastique linéaire et une précontrainte (supposée isotrope dans le plan tangent à l'interface et appelée tension de surface), l'effet de cette dernière sur le comportement mécanique macroscopique est également modélisé.

De façon générale, on considère un matériau constitué de N_c familles de cavités de formes sphéroïdales dispersées dans une matrice homogène (indice m), de rigidité \mathbf{C}_m et qui occupe le domaine ω_m (fraction volumique de matrice noté c_m). Les familles de cavités sont représentées par les indices i ($i \in [1, \dots, N_c]$). Chaque famille regroupe des cavités de même taille, forme, pression interne p_i et tension de surface $\gamma_s^{(i)}$. Le domaine des cavités de la famille i est noté $\omega_v^{(i)}$ (porosité f_i) et leur interface est noté $\Gamma^{(i)}$ ($i \in [1, \dots, N_c]$) (normale unitaire à $\Gamma^{(i)}$ dirigée vers la matrice notée \mathbf{n}). Le comportement des interfaces imparfaites cohérentes associées aux cavités de la famille i est identique :

$$\boldsymbol{\sigma}_s = \gamma_s^{(i)} \mathbf{i}_T + \mathbf{C}_s^{(i)} : \boldsymbol{\varepsilon}_s, \quad (2.95)$$

où :

$$\mathbf{C}_s^{(i)} = 2(k_s^{(i)} \mathbf{J}_T + \mu_s^{(i)} \mathbf{K}_T) \quad (2.96)$$

et où les scalaires $k_s^{(i)}$ et $\mu_s^{(i)}$ sont les coefficients d'élasticité surfacique associés à $\Gamma^{(i)}$. Le problème à résoudre, \mathcal{P} , se traduit par le système d'équations suivant :

$$\mathcal{P} : \begin{cases} \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0}, \quad \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C}_m : \boldsymbol{\varepsilon}, \quad \boldsymbol{\varepsilon} = (1/2)(\operatorname{grad} \mathbf{u} + {}^T \operatorname{grad} \mathbf{u}) & \text{dans } \omega_m \\ [\boldsymbol{\sigma}] \cdot \mathbf{n} + (\boldsymbol{\sigma}_s : \mathbf{b}) \mathbf{n} + \operatorname{div}_s \boldsymbol{\sigma}_s = \mathbf{0}, \quad \boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{I}_T : \boldsymbol{\varepsilon} \text{ sur } \Gamma^{(i)}, \quad \forall i \in [1, \dots, N_c] \\ \boldsymbol{\sigma}_s = \gamma_s^{(i)} \mathbf{i}_T + \mathbf{C}_s^{(i)} : \boldsymbol{\varepsilon} \text{ sur } \Gamma^{(i)}, \quad \forall i \in [1, \dots, n] \\ \boldsymbol{\sigma} = -p_i \mathbf{i} \text{ dans } \omega_v^{(i)} \quad \forall i \in [1, \dots, N_c] \\ \mathbf{u} = \mathbf{E} \cdot \mathbf{x} \text{ sur } \partial V \end{cases} \quad (2.97)$$

De part la linéarité du problème \mathcal{P} , la loi de comportement macroscopique peut se mettre sous la forme suivante :

$$\boldsymbol{\Sigma} = \tilde{\mathbf{C}} : \mathbf{E} - \sum_{i=1}^n p_i \mathbf{B}_i + \sum_{i=1}^n \gamma_s^{(i)} \mathbf{G}_i. \quad (2.98)$$

Le tenseur de rigidité effectif $\tilde{\mathbf{C}}$ est déterminé en résolvant le problème qui dérive du problème \mathcal{P} lorsque tous les chargements sont nuls excepté la déformation macroscopique \mathbf{E} . La détermination des tenseurs de Biot \mathbf{B}_i et des tenseurs \mathbf{G}_i (nouveaux tenseurs introduits pour les tensions de surface) s'obtient de façon assez similaire à celle pour les tenseurs de Biot classiques (i.e. sans effet de surface). La détermination des tenseurs \mathbf{B}_i passe par la résolution du problème qui dérive du problème \mathcal{P} lorsque tous les chargements sont nuls excepté les pressions p_i . L'analyse conduit à :

$$\mathbf{B}_i = f_i \mathbf{i} : \langle \mathbf{A} \rangle_{\omega_v^{(i)}}, \quad \forall i \in [1, \dots, N_c], \quad (2.99)$$

où $\langle \mathbf{A} \rangle_{\omega_v^{(i)}}$ sont les moyennes du tenseur de localisation obtenu à partir de la solution du problème qui dérive du problème \mathcal{P} lorsque les pressions et les tensions de surfaces sont nulles ($p_i = \gamma_s^{(i)} = 0$). L'approche par MMR permet d'obtenir une estimation de ce tenseur. Dans le cas d'une distribution isotrope d'une unique population de cavités sphériques (rayon r), le tenseur de Biot suivant est obtenu (estimation de Mori Tanaka généralisée) :

$$\mathbf{B} = \frac{fr(3k_m + 4\mu_m)}{(3fk_m + 4\mu_m)r + 4(1-f)k_s} \mathbf{i} = b_{sphere}^{iso} \mathbf{i}. \quad (2.100)$$

Cette expression correspond dans ce cas à celle déjà établie par [Pensée et al. \(2009\)](#). Lorsque les cavités sont grandes ($r \rightarrow \infty$), le tenseur de Biot tend vers le tenseur de Biot classique (sans effet de surface) correspondant :

$$\mathbf{B} = \frac{f(3k_m + 4\mu_m)}{3fk_m + 4\mu_m} \mathbf{i}. \quad (2.101)$$

De façon analogue, la détermination des tenseurs \mathbf{G}_i passe par la résolution du problème qui dérive du problème \mathcal{P} lorsque tous les chargements sont nuls excepté les tensions de surface homogènes. Il est possible de montrer que la détermination des tenseurs \mathbf{G}_i nécessite de déterminer les moyennes de la déformation surfacique sur les surfaces $\Gamma^{(i)}$:

$$\mathbf{G}_i = \frac{|\Gamma^{(i)}|}{|V|} \mathbf{i} : \langle \mathbf{I}_T : \mathbf{A} \rangle_{\Gamma^{(i)}}, \quad (2.102)$$

où \mathbf{A} est le tenseur de localisation obtenu à partir de la solution du problème qui dérive du problème \mathcal{P} lorsque les pressions et les tensions de surfaces sont nulles ($p_i = \gamma_s^{(i)} = 0$). Dans le cas du motif \mathcal{S} , le problème auxiliaire à été résolu directement de manière exacte. Dans le cas d'une distribution isotrope d'une unique population de cavités sphériques, le tenseur suivant est obtenu (estimation de Mori Tanaka généralisée) :

$$\mathbf{G} = \frac{2}{r} b_{sphere}^{iso} \mathbf{i}. \quad (2.103)$$

Lorsque les cavités sont grandes ($r \rightarrow \infty$), il n'y a plus d'effet de la tension de surface ($\mathbf{G} = 0$). En revanche, le problème auxiliaire relatif au motif \mathcal{E} est résolu de façon approchée en utilisant les travaux de [Cherkaoui et al. \(1995\)](#) fondés sur une approche par interphase. Par conséquent, la solution du problème est obtenue par l'intermédiaire d'un second problème identique où les interfaces imparfaites cohérentes sont remplacées par des interphases. Les tenseurs \mathbf{G}_i sont obtenus asymptotiquement en exploitant l'équivalence entre les modèles d'interface imparfaite cohérente et d'interphase fine.

Le modèle complet proposé pour le dioxyde d'uranium irradié est synthétisé ci-dessous. Pour rappel, il considère une distribution isotrope des centres de deux populations de bulles : des nanobulles sphériques pour représenter les bulles intragranulaires (unique rayon r , porosité f_b , attention : ici f_b est la porosité réelle et non la porosité relative suite à un premier changement d'échelle comme en [2.1.1](#), ici un unique changement d'échelle est effectué) et des nanobulles ellipsoïdales oblates pour représenter les bulles intergranulaires (unique demi-grand axe b , unique rapport de forme w , orientations aléatoires, porosité f_e) sous pression (pression interne homogène p_b pour les nanobulles sphériques et p_e pour les nanobulles ellipsoïdales oblates). La matrice est isotrope (tenseur de rigidité \mathbf{C}_m , modules de compressibilité k_m et de cisaillement μ_m). Les effets de surface entre les bulles et la matrice sont pris en compte par des tensions de surface homogènes (γ_b pour les nanobulles sphériques et γ_e pour les nano-bulles ellipsoïdales oblates) et par des propriétés élastiques des interfaces isotropes dans le plan transverse (modules de compressibilité surfacique k_s et de cisaillement surfacique μ_s). Le matériau est macroscopiquement isotrope (tenseur de rigidité $\tilde{\mathbf{C}}$, modules de compressibilité \tilde{k} et de cisaillement $\tilde{\mu}$). Le modèle de comportement est de la forme suivante :

$$\boldsymbol{\Sigma} = \left[3\tilde{k}\mathbf{J} + 2\tilde{\mu}\mathbf{K} \right] : \mathbf{E} - \left[p_b B_b + p_e B_e - \gamma_b G_b - \gamma_e G_e \right] \mathbf{i}. \quad (2.104)$$

Les coefficients \tilde{k} et $\tilde{\mu}$ sont donnés par :

$$\tilde{\mathbf{C}} = 3\tilde{k}\mathbf{J} + 2\tilde{\mu}\mathbf{K} = \mathbf{C}_m + \left(\mathbf{I} - \langle \mathbf{T}_{Mr}^m \rangle_M : \mathbf{P}_d^m \right)^{-1} : \langle \mathbf{T}_{Mr}^m \rangle_M, \quad (2.105)$$

où :

- $\langle \mathbf{T}_{Mr}^m \rangle_M = f_b \mathbf{T}_{MS}^m + f_e \langle \mathbf{T}_{M\mathcal{E}}^m \rangle_{\odot}$
- $\mathbf{P}_d^m = \frac{1}{3k_m + 4\mu_m} \mathbf{J} + \frac{3}{5\mu_m} \frac{k_m + 2\mu_m}{3k_m + 4\mu_m} \mathbf{K}$
- $\mathbf{T}_{MS}^m = \frac{(3k_m + 4\mu_m)(4k_s - 3k_m r)}{4(k_s + \mu_m r)} \mathbf{J} + \frac{10\mu_m(3k_m + 4\mu_m)\beta_d}{3k_m\delta_d + 4\mu_m\zeta_d} \mathbf{K}$
 - $\beta_d = (k_s + r\mu_m)(\mu_s - r\mu_m)$
 - $\delta_d = 3r\mu_m(r\mu_m + \mu_s) + 2k_s(2r\mu_m + \mu_s)$
 - $\zeta_d = 3k_s(r\mu_m + \mu_s) + 2r\mu_m(r\mu_m + 2\mu_s)$
- $\mathbf{T}_{M\mathcal{E}}^m = \left[\bar{\alpha}(\mathbf{I} - \mathbf{H}) : \tilde{\mathbf{C}}_s - \mathbf{C}_m \right] : \mathbf{Q}_{\mathcal{E}}$
 - $\bar{\alpha} = \frac{1+2w}{bw}$
 - $\mathbf{H} = \tilde{\mathbf{C}}_s : \left[\mathbf{S}^E(\tilde{\mathbf{C}}_s) - \frac{1}{\bar{\alpha}} \mathbf{N}(\tilde{\mathbf{C}}_s) \right] : \tilde{\mathbf{C}}_s^{-1}$
 - $\tilde{\mathbf{C}}_s = \frac{4k_s\mu_s}{3\mu_s - k_s} \mathbf{J} + 2\mu_s \mathbf{K}$
 - $\mathbf{Q}_{\mathcal{E}} = \left[\mathbf{I} - \mathbf{P}_m : \left(\mathbf{C}_m - \bar{\alpha}(\mathbf{I} - \mathbf{H}) : \tilde{\mathbf{C}}_s \right) \right]^{-1}$
 - $\mathbf{P}_m = \mathbf{S}^E(\mathbf{C}_m) : \mathbf{C}_m^{-1}$.

Les tenseurs $\mathbf{S}^E(\mathbf{C}_m)$ et $\mathbf{S}^E(\tilde{\mathbf{C}}_s)$ sont les tenseurs d'Eshelby, exprimés à l'Annexe B de (Haller, 2015), dont les rapports de forme des inclusions correspondent à celui des cavités sphéroïdales (w). Le tenseur $\mathbf{N}(\tilde{\mathbf{C}}_s)$ est donné à l'Annexe B de (Haller, 2015) où le rapport de forme correspond également à celui des cavités sphéroïdales (w). Il est à noter que :

$$\nu_m = \frac{3k_m - 2\mu_m}{2(3k_m + \mu_m)}, \quad \tilde{\nu}_s = \frac{3\tilde{k}_s - 2\tilde{\mu}_s}{2(3\tilde{k}_s + \tilde{\mu}_s)} = \frac{k_s - \mu_s}{k_s + \mu_s}. \quad (2.106)$$

Les coefficients B_b , B_e , G_b et G_e sont donnés par :

- $B_b = \frac{f_b}{3} \frac{r(3k_m + 4\mu_m)}{4(k_s + \mu_m r)} \mathbf{i} : \left(\mathbf{I} - \mathbf{P}_d^m : \langle \mathbf{T}_{Mr}^m \rangle_M \right)^{-1} : \mathbf{i}$
- $B_e = \frac{f_e}{3} \mathbf{i} : \langle \mathbf{Q}_{\mathcal{E}} \rangle_{\odot} : \left(\mathbf{I} - \mathbf{P}_d^m : \langle \mathbf{T}_{Mr}^m \rangle_M \right)^{-1} : \mathbf{i}$
- $G_b = \frac{2}{r} B_b$
- $G_e = \frac{\bar{\alpha}f_e}{3} \frac{2\mu_s}{3\mu_s - k_s} \mathbf{i} : \langle \mathbf{Z}_{\mathcal{E}} \rangle_{\odot} : \left(\mathbf{I} - \mathbf{P}_d^m : \langle \mathbf{T}_{Mr}^m \rangle_M \right)^{-1} : \mathbf{i}$
- $\mathbf{Z}_{\mathcal{E}} = \left[\mathbf{I} - \tilde{\mathbf{C}}_s^{-1} : \mathbf{H} : \tilde{\mathbf{C}}_s \right] : \mathbf{Q}_{\mathcal{E}}$.

Une application numérique est proposée. Le modèle complet est comparé à la partie poroélastique du modèle de Vincent (2007) où l'effet des tensions de surface est uniquement pris en compte en soustrayant $(2\gamma_b)/r$ et $(2\gamma_e \sin\theta)/b$ (avec $\theta = 50^\circ$) respectivement aux pressions p_b et p_e . Cela permet d'introduire une dépendance des coefficients G_b et G_e du modèle aux longueurs r et b . Voilà pourquoi, ce modèle est qualifié de *partie poroélastique saturée du modèle de Vincent (2007) avec prise en compte partielle des effets de surface* dans (Haller, 2015). Les paramètres matériaux retenus pour la matrice d'UO₂ vierge sont ceux donnés par la relation de Martin (1989) pour une température de 1200°C et une porosité de fabrication nulle. La porosité des bulles intragranulaires est fixée à 3 % et celle des bulles intergranulaires à 1 %. Le rapport de forme des bulles intragranulaires est fixé à 0.4. Cette valeur correspond au rapport de forme d'une cavité oblate dont la longueur b (longueur du plus grand demi-axe) et le volume sont égaux à ceux de la lentille correspondante avec $\theta = 50^\circ$ (Moal et al., 2014). Le rayon des cavités intragranulaires est pris à 1 nm et la longueur b pour les cavités sphéroïdales oblates est prise à 10 nm. Les paramètres choisis pour l'application numérique sont répertoriés dans le tableau 2.1.

k_m	μ_m	k_s	μ_s	
181 GPa	70.7 GPa	90.6 N.m ⁻¹	35.3 N.m ⁻¹	
f_b	f_e	r	b	w
3 %	1 %	1 nm	10 nm	0.4

TABLE 2.1 – Paramètres matériaux de l'UO₂ pour l'application numérique.

Par souci de concision, uniquement les évolutions de \tilde{k} , B_b et G_b sont présentés ici en fonction du rayon r à b fixé (10 nm) et en fonction de la longueur b à r fixé (1 nm) sur les figures 2.30 et 2.31.

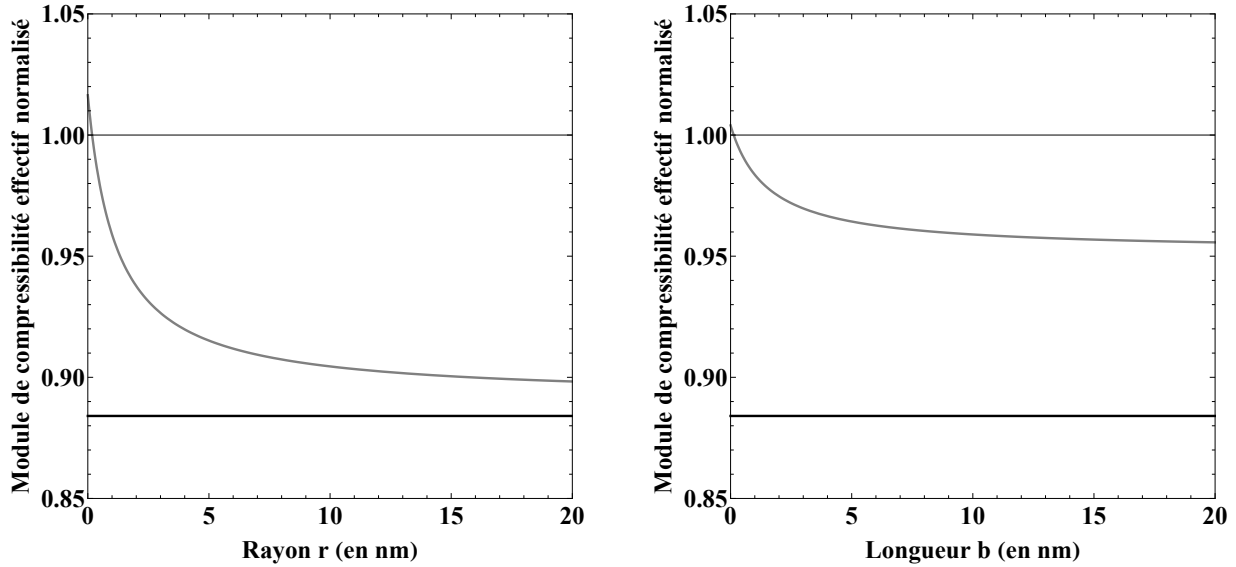


FIGURE 2.30 – Module de compressibilité \tilde{k} normalisé par k_m en fonction du rayon r (à gauche) et de la longueur b (à droite). En noir : partie poroélastique saturée du modèle de Vincent (2007) avec prise en compte partielle des effets de surface, en gris : modèle complet.

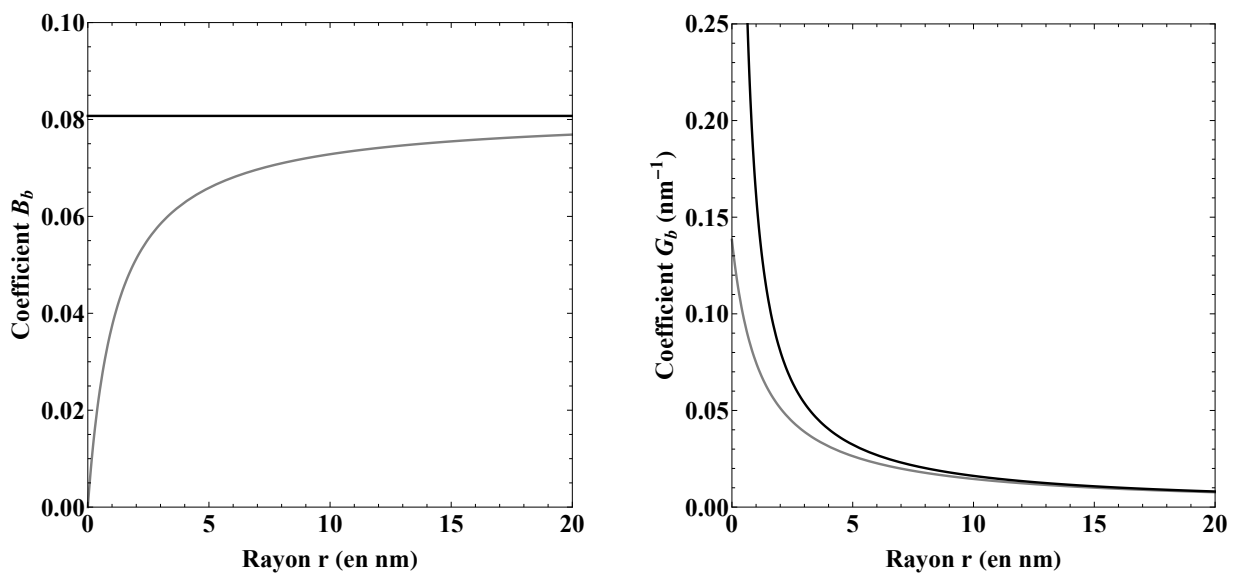


FIGURE 2.31 – Coefficients B_b (à gauche) et G_b (à droite) en fonction du rayon r . En noir : partie poroélastique saturée du modèle de Vincent (2007) avec prise en compte partielle des effets de surface, en gris : modèle complet.

Les points principaux suivants sont observés :

- l'effet de surface à l'échelle des bulles intergranulaires devient non-négligeable dès lors que b est inférieur à 5 nm.
- l'effet de surface des bulles intragranulaires, lorsque r est égal à 1 nm, influence les propriétés élastiques effectives à hauteur de 8 %.
- l'influence sur les coefficients B_b et G_b est plus importante, de l'ordre de 50 %. Un point notable est que l'élasticité surfacique tend à diminuer l'influence de la tension de surface γ_b et de la pression p_b sur la contrainte macroscopique.

2.3 Endommagement et rupture ductile

2.3.1 Développement d'un modèle de zone cohésive

Les résultats présentés dans cette section ont été obtenus en collaboration avec Noé Brice Nkoumbou Kaptchouang, Yann Monerie et Frédéric Perales. Ils sont basés sur (Nkoumbou Kaptchouang, 2019) et (Nkoumbou Kaptchouang et al., 2021).

L'objectif appliqué dans (Nkoumbou Kaptchouang, 2019) est de contribuer au développement d'approches génériques pour décrire l'initiation et la propagation de fissures dans les matériaux, approches qui pourront être appliquées (entre autres) à l'étude du comportement mécanique macroscopique du combustible UO_2 , en tenant compte explicitement de sa fissuration et de sa fragmentation lors des transitoires rapides de type RIA. Cela est, en effet, important pour décrire finement le comportement du crayon combustible lors d'un tel scénario accidentel :

- la quantité de gaz de fission contenue dans la pastille de combustible n'est pas répartie de façon homogène. Ainsi, il est intéressant d'estimer les zones de combustible qui vont se fissurer lors du transitoire thermique afin d'estimer la quantité de gaz de fission relâchée par le combustible ;
- l'analyse de la temporalité de la fissuration du combustible lors du scénario accidentel considéré peut donner des indications quant au moment où les produits de fission inclus dans le combustible sont relâchés. Par exemple, lors du transitoire thermique, si la majorité des gaz de fission est relâchée lors de la phase de montée en température, alors ceux-ci vont participer à la pressurisation de la gaine (première barrière de sûreté), à un moment où celle-ci présente un risque de rupture fragile ;
- la prédiction de l'état de fissuration du combustible est intéressante pour déterminer la perméabilité radiale et axiale de la pastille vis-à-vis de l'écoulement des gaz de fission lors du scénario accidentel considéré.

Comme exposé dans (Nkoumbou Kaptchouang, 2019), la question de la prédiction et de la simulation du comportement du combustible UO_2 en conditions extrêmes avec une description explicite de sa fissuration fait appel aux modèles théoriques "amonts" de la mécanique de la rupture et à des méthodes de simulations adaptées. Ce travail se limite au cadre de l'endommagement et de la rupture ductile. L'approche développée dans (Nkoumbou Kaptchouang, 2019) est suffisamment générique pour être applicable à une large classe de matériaux ductiles, comme par exemple les aciers ou les céramiques à haute température. Le terme de "rupture ductile" fait référence aux matériaux qui subissent d'importantes déformations avant rupture. Dans ce travail, il est question des matériaux ductiles qui s'endommagent suite à un mécanisme microscopique de nucléation, de croissance et de coalescence de cavités dans le matériau. L'approche retenue consiste à utiliser des modèles

de zones cohésives pour décrire l'amorçage et la propagation d'une fissure au sein d'un milieu continu. Cette approche cohésive consiste à attribuer un modèle de comportement adoucissant aux points matériels situés sur le trajet de fissuration. Ce modèle relie le vecteur contrainte normal \mathbf{R} et le saut de déplacement $[u]$ mesurant une ouverture de fissure (voir figure 2.32). Dans ce travail, l'endommagement et la fissuration sont entièrement modélisés par la zone cohésive : le comportement volumique est durcissant et les zones cohésives apportent un comportement adoucissant, ce qui permet de modéliser une réponse globale du matériau endommageable (figure 2.33). Dans ce travail, un modèle cohésif $\mathbf{R}([u])$ est recherché capable de prendre en compte des mécanismes d'endommagement initiant la fissure.

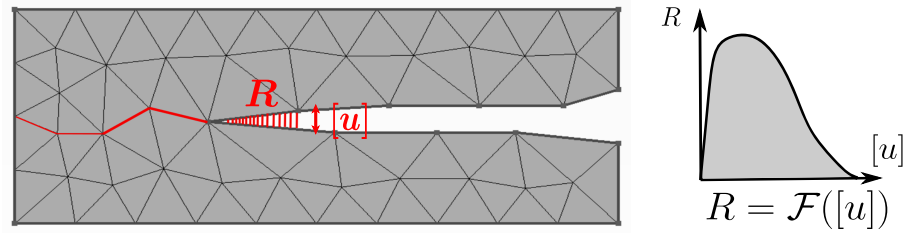


FIGURE 2.32 – Principe des modèles de zones cohésives (Nkoumbou Kaptchouang, 2019).

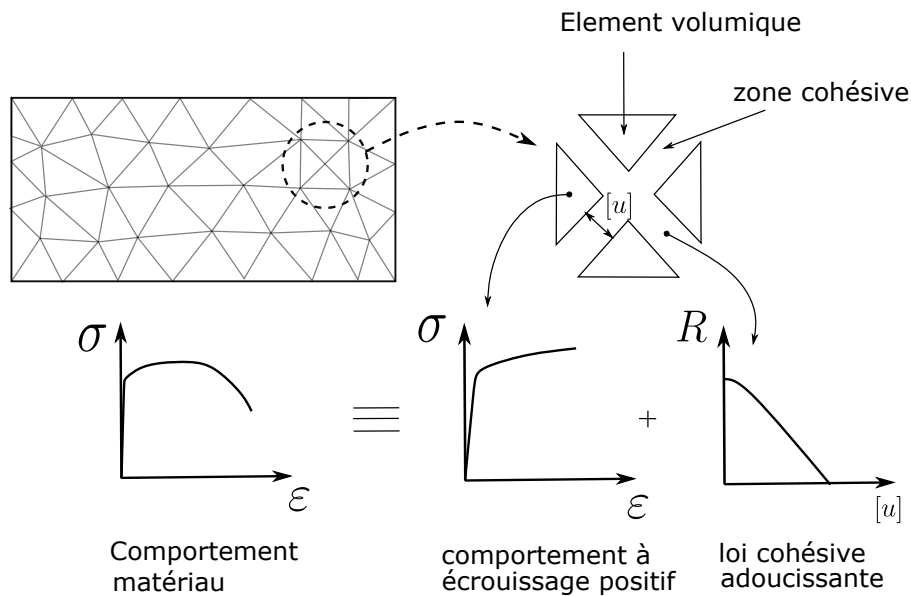


FIGURE 2.33 – Approche cohésive-volumique (Nkoumbou Kaptchouang, 2019).

Deux idées principales sont utilisées pour développer le nouveau modèle de zone cohésive (MZC) pour un matériau ductile :

- la zone d'élaboration de la fissure est assimilée à une interface adhésive de faible épaisseur. L'ouverture de la fissure correspond à la différence (ou saut) entre le champ de déplacement de part et d'autre de cette interface. Une mesure de la déformation de l'interface est associée au champ de déplacement de part et d'autre de l'interface, ce qui permet d'écrire un comportement de type contrainte-déformation à l'intérieur de la bande cohésive. Cette bande est interprétée comme une zone de localisation des déformations plastiques amorçant la rupture ductile ;
- le comportement local à l'intérieur de la zone cohésive est supposé similaire à celui d'un volume élémentaire représentatif du matériau considéré. Le modèle GTN est retenu pour décrire l'endommagement et

la rupture ductile.

Pour un matériau donné, la forme de la loi de traction-séparation du MZC $\mathbf{R}([\mathbf{u}])$ est en général postulée à priori et plusieurs fonctions sont proposées dans la littérature (voir par exemple (Needleman, 1987, 1990; Tvergaard et Hutchinson, 1992; Scheider et Brocks, 2003)). Néanmoins, les paramètres d'un tel MZC correspondant à un comportement volumique d'endommagement ductile ne peuvent pas être considérés comme des paramètres purement matériaux, puisque la rupture ductile basée sur les mécanismes de nucléation, croissance et coalescence de cavités est fortement dépendante des états de contrainte et de déformation locaux (Koplik et Needleman, 1988; Bao et Wierzbicki, 2004; Benzerga *et al.*, 2016). Des travaux antérieurs ont introduit une dépendance des paramètres du modèle cohésif à l'état plastique environnant. Par exemple, Tvergaard et Hutchinson (1996); Tvergaard (1997) proposent d'ajouter une dépendance du MZC à la déformation plastique cumulée du matériau adjacent à la zone cohésive. Une autre approche pour déterminer les paramètres cohésifs ductiles consiste à considérer un VER composé d'un matériau de type Gurson et à identifier les paramètres cohésifs d'un MZC donné afin de retrouver la réponse effective du VER. Cette idée a été introduite par Tvergaard et Hutchinson (1992) qui a étudié le comportement d'une cellule unitaire de type GTN en déformation uniaxiale. Puisque la croissance et la coalescence des cavités à forte triaxialité des contraintes est le principal mécanisme microscopique de la rupture ductile considérée, cette approche a été étendue par Siegmund et Brocks (1999, 2000); Scheider (2009) afin d'introduire la triaxialité des contraintes locales comme variable interne du modèle cohésif. Ils ont déterminé la dépendance des paramètres cohésifs à la triaxialité des contraintes par l'étude numérique d'une cellule unitaire axisymétrique ou en déformation plane sous différents chargements en contrainte biaxés. En suivant l'idée que la loi de traction-séparation doit représenter le comportement à rupture d'une cellule unitaire du matériau, ce travail propose de dériver un MZC pour matériaux ductiles à partir d'une approche micromécanique. L'objectif est d'obtenir un MZC dont la forme ainsi que les paramètres dérivent directement d'un modèle d'endommagement ductile volumique, à savoir ici le modèle GTN.

Il est tout d'abord rappelé que le modèle de Gurson (1977) est basé sur l'étude d'une sphère creuse (domaine V , porosité f) constituée d'une matrice plastique parfaite homogène et incompressible (limite d'élasticité σ_0) et soumise à un taux de déformation homogène au bord $\dot{\mathbf{E}}$ sur sa surface extérieure ∂V , $\mathbf{v} = \dot{\mathbf{E}} \cdot \mathbf{x}$ sur ∂V , où \mathbf{v} est le champ de vitesse et \mathbf{x} le vecteur position. Il est rappelé que le potentiel de dissipation effectif correspondant à la surface de charge de Gurson s'écrit de la façon suivante (Gurson, 1977; Găărăjeu et Suquet, 1997) :

$$\Phi^{\text{Gur}}(\dot{\mathbf{E}}) = \sigma_0 \int_f^1 \sqrt{\frac{4(\dot{E}_m)^2}{y^2} + (\dot{E}_{eq})^2} dy. \quad (2.107)$$

Une expression générale de l'intégrale (2.107) peut être trouvée dans Găărăjeu et Suquet (1997) :

$$\Phi^{\text{Gur}}(\dot{\mathbf{E}}) = \sigma_0 \dot{E}_{eq} [3\eta_{\dot{\mathbf{E}}} H(\eta_{\dot{\mathbf{E}}}, f) + D(\eta_{\dot{\mathbf{E}}}, f)], \quad (2.108)$$

avec :

$$H(\eta_{\dot{\mathbf{E}}}, f) = \frac{2}{3} \left(\operatorname{arcsinh} \left(\frac{2\eta_{\dot{\mathbf{E}}}}{f} \right) - \operatorname{arcsinh} (2\eta_{\dot{\mathbf{E}}}) \right), \quad D(\eta_{\dot{\mathbf{E}}}, f) = \sqrt{(2\eta_{\dot{\mathbf{E}}})^2 + 1} - \sqrt{(2\eta_{\dot{\mathbf{E}}})^2 + f^2} \quad (2.109)$$

et :

$$\eta_{\dot{\mathbf{E}}} = \frac{\dot{E}_m}{\dot{E}_{eq}}. \quad (2.110)$$

La contrainte macroscopique $\Sigma = \partial \Phi^{\text{Gur}} / \partial \dot{\mathbf{E}}$ est dérivée du potentiel effectif (2.108) et conduit à :

$$\Sigma_m = \sigma_0 H(\eta_{\dot{\mathbf{E}}}, f) \quad \text{et} \quad \Sigma_{eq} = \sigma_0 D(\eta_{\dot{\mathbf{E}}}, f). \quad (2.111)$$

Le critère de Gurson est ensuite obtenu en éliminant la variable $\eta_{\dot{\mathbf{E}}}$ entre les parties hydrostatique et équivalente de la contrainte macroscopique dans (2.111) :

$$\frac{\Sigma_{eq}^2}{\sigma_0^2} + 2f \cosh\left(\frac{3}{2} \frac{\Sigma_m}{\sigma_0}\right) - 1 - f^2 = 0. \quad (2.112)$$

Il est rappelé que le modèle GTN s'écrit :

$$\frac{\Sigma_{eq}^2}{\sigma_0^2} + 2q_1 f^* \cosh\left(\frac{3}{2} q_2 \frac{\Sigma_m}{\sigma_0}\right) - 1 - q_3 f^{*2} = 0, \quad (2.113)$$

où $q_1, q_2, q_3 = q_1^2$ sont des constantes et f^* est une porosité effective reliée à la coalescence des cavités :

$$f^* = \begin{cases} f & \text{pour } 0 \leq f \leq f_c \\ f_c + \frac{f_u^* - f_c}{f_f - f_c} (f - f_c) & \text{pour } f_c \leq f \end{cases} \quad (2.114)$$

où f_c est la porosité au début de la coalescence, f_f est la porosité à rupture, $f^*(f_f) = f_u^* = 1/q_1$ (attention : des définitions différentes de la porosité f^* sont données en 2.1.4 et 2.1.5). La notation suivante est couramment introduite $k = (f_u^* - f_c)/(f_f - f_c)$. L'écoulement isotrope est classiquement introduit en remplaçant σ_0 par $\sigma_y(\bar{\epsilon})$ dans ((2.113)), où σ_y est la contrainte d'écoulement de la matrice entourant la cavité. La variable scalaire $\bar{\epsilon}$ est interprétée comme une déformation plastique "moyenne" de la matrice. Son évolution est obtenue via la dissipation plastique :

$$\Sigma : \dot{\mathbf{E}} = (1 - f) \sigma_y \dot{\bar{\epsilon}}. \quad (2.115)$$

L'évolution de la porosité est donnée par :

$$\dot{f} = \dot{f}_g + \dot{f}_n, \quad (2.116)$$

où \dot{f}_g est le taux de porosité dû à la croissance des cavités (conservation de la masse) :

$$\dot{f}_g = (1 - f) \text{Tr} \dot{\mathbf{E}} \quad (2.117)$$

et où \dot{f}_n est le taux de porosité dû à la nucléation de cavités. Dans le cas d'une nucléation contrôlée par la déformation, [Chu et Needleman \(1980\)](#) proposent la fonction suivante (distribution normale) :

$$\dot{f}_n = \frac{f_N}{s_N \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2} \left(\frac{\bar{\epsilon} - \epsilon_N}{s_N}\right)^2\right) \dot{\bar{\epsilon}}, \quad (2.118)$$

où f_N , ϵ_N et s_N sont des constantes.

Afin de construire le modèle de zone cohésive, un domaine élasto-plastique Ω est considéré composé de deux régions, Ω^- et Ω^+ , séparés par une bande de localisation de la déformation (vecteur normal unitaire \mathbf{n}). En dehors de cette bande, le matériau obéit à un modèle de plasticité de type J2 sans endommagement. L'endommagement ductile se produit uniquement dans la bande de localisation et son comportement est décrit par le modèle GTN. L'épaisseur h de la bande de localisation est petite par rapport à une grandeur caractéristique de Ω . Cette bande est donc modélisée par une surface cohésive S entre Ω^- et Ω^+ . En désignant par \mathbf{u}^+ et \mathbf{u}^- les champs de déplacements sur les bords de Ω^+ et Ω^- en intersection avec S , le saut de déplacement à travers S est défini par :

$$[\mathbf{u}] = \mathbf{u}^+ - \mathbf{u}^- = [u_n] \mathbf{n} + [u_t] \mathbf{t} + [u_s] \mathbf{s} \quad (2.119)$$

dans la base locale $(\mathbf{n}, \mathbf{t}, \mathbf{s})$ où \mathbf{t} et \mathbf{s} sont deux vecteurs unitaires définissant le plan tangent. En suivant (Suquet, 1988; Michel *et al.*, 1994), le taux de déformation sur la surface cohésive peut être approché par l'expression suivante :

$$\dot{\mathbf{E}} \approx \frac{[\dot{\mathbf{u}}] \otimes_s \mathbf{n}}{h} = \begin{bmatrix} \frac{[\dot{u}_n]}{h} & \frac{[\dot{u}_t]}{2h} & \frac{[\dot{u}_s]}{2h} \\ \frac{[\dot{u}_t]}{2h} & 0 & 0 \\ \frac{[\dot{u}_s]}{2h} & 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (2.120)$$

En utilisant cette approximation, la triaxialité en taux de déformation $\eta_{\dot{\mathbf{E}}}$ est bornée par 1/2. Cette valeur supérieure limite fortement le taux de croissance des cavités obtenu par l'équation (2.117). C'est une limitation forte vis à vis de l'endommagement ductile. Afin de s'affranchir de cette limitation, la cinématique cohésive est enrichie en introduisant un taux de déformation plan additionnel \dot{p} (attention : p ici n'est pas une pression comme définie en 2.1) :

$$\dot{\mathbf{E}} \approx \frac{[\dot{\mathbf{u}}] \otimes_s \mathbf{n}}{h} + \dot{p} (\mathbf{t} \otimes_s \mathbf{t} + \mathbf{s} \otimes_s \mathbf{s}) = \begin{bmatrix} \frac{[\dot{u}_n]}{h} & \frac{[\dot{u}_t]}{2h} & \frac{[\dot{u}_s]}{2h} \\ \frac{[\dot{u}_t]}{2h} & \dot{p} & 0 \\ \frac{[\dot{u}_s]}{2h} & 0 & \dot{p} \end{bmatrix} \quad (2.121)$$

Il est choisi de faire dépendre le taux \dot{p} de l'état de chargement fourni par l'élément fini volumique "esclave" adjacent à la zone cohésive, comme décrit ci-après. La loi de traction-séparation est ensuite directement obtenue en utilisant le modèle GTN et la cinématique réduite (2.121). Le vecteur contrainte s'écrit :

$$\mathbf{R} = \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{n} = \left(\Sigma_m \mathbf{i} + \frac{2 \Sigma_{eq}}{3 \dot{E}_{eq}} \dot{\mathbf{E}}^d \right) \cdot \mathbf{n} \quad (2.122)$$

avec Σ_m et Σ_{eq} donnés par (2.111). Les équations obtenues sont les suivantes :

$$\mathbf{R} = \sigma_y \mathbf{T} \cdot \mathbf{n} \quad \text{avec} \quad \mathbf{T} = \frac{1}{\sigma_y} \boldsymbol{\Sigma}, \quad \text{et} \quad \mathbf{T} \cdot \mathbf{n} = \begin{cases} T_{nn} = \frac{1}{q_2} H(\chi) + \frac{4}{9} D(\chi) \frac{1}{\dot{E}_{eq}} \left(\frac{[\dot{u}_n]}{h} - \dot{p} \right) \\ T_{nt} = \frac{1}{3} D(\chi) \frac{1}{\dot{E}_{eq}} \frac{[\dot{u}_t]}{h} \\ T_{ns} = \frac{1}{3} D(\chi) \frac{1}{\dot{E}_{eq}} \frac{[\dot{u}_s]}{h} \end{cases} \quad (2.123)$$

$$\dot{E}_{eq} = \frac{2}{3} \sqrt{\left(\frac{[\dot{u}_n]}{h} - \dot{p} \right)^2 + \frac{3}{4} \frac{[\dot{u}_t]^2}{h^2} + \frac{3}{4} \frac{[\dot{u}_s]^2}{h^2}}, \quad \eta_{\dot{\mathbf{E}}} = \frac{\frac{[\dot{u}_n]}{h} + 2\dot{p}}{2 \sqrt{\left(\frac{[\dot{u}_n]}{h} - \dot{p} \right)^2 + \frac{3}{4} \frac{[\dot{u}_t]^2}{h^2} + \frac{3}{4} \frac{[\dot{u}_s]^2}{h^2}}}, \quad (2.124)$$

où χ représente le couple de variables $\chi = \{\eta_{\dot{\mathbf{E}}}, q_1 f^*(f)\}$ et la porosité effective f^* s'exprime en fonction de la porosité f par (2.114). Les évolutions de la porosité et de la variable d'écroutissage sont données par (2.116) et (2.115) :

$$\dot{f} = (1 - f) \left(\frac{[\dot{u}_n]}{h} + 2\dot{p} \right) + A \dot{\varepsilon}, \quad (2.125)$$

$$\dot{\varepsilon} = \frac{1}{1 - f} \left(T_{nn} \frac{[\dot{u}_n]}{h} + T_{nt} \frac{[\dot{u}_t]}{h} + T_{ns} \frac{[\dot{u}_s]}{h} + (T_{tt} + T_{ss}) \dot{p} \right), \quad (2.126)$$

$$T_{tt} = T_{ss} = \frac{1}{q_2} H(\chi) - \frac{2}{9} D(\chi) \frac{1}{\dot{E}_{eq}} \left(\frac{[\dot{u}_n]}{h} - \dot{p} \right). \quad (2.127)$$

Une intégration en temps de ces équations est décrite dans (Nkoubou Kaptchouang *et al.*, 2021) (section 2.4) et n'est pas reprise ici par souci de concision. Une application numérique est proposée afin d'illustrer les capacités du nouveau modèle cohésif. Le modèle d'érouissage suivant est utilisé :

$$\sigma_y(\bar{\epsilon}) = \sigma_0(1 + K_y \bar{\epsilon})^{1/n_y}, \quad (2.128)$$

où σ_0 , K_y et n_y sont des constantes. Les paramètres matériaux sont donnés dans le tableau 2.2, où Y est le module de Young et ν le coefficient de Poisson.

Y	ν	σ_0	K_y	n_y			
210 GPa	0.3	470 MPa	35.0	4.5			
q_1	q_2	f_0	k	f_c	f_N	ϵ_N	s_N
1.5	1.0	0.0025	3.4	0.021	0.02	0.3	0.1

TABLE 2.2 – Propriétés matériaux utilisées pour l'application numérique.

Des conditions de taux de déformation imposé ou de direction de contrainte imposée sont traités dans (Nkoubou Kaptchouang *et al.*, 2021). Ici, le cas d'une direction de contrainte axisymétrique est présenté :

$$\Sigma(t) = k(t) \Sigma^0 = k(t) \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & r^* & 0 \\ 0 & 0 & r^* \end{bmatrix} \quad \text{avec } \frac{1}{2} \leq r^* < 1 \text{ constant}, \quad (2.129)$$

où Σ^0 est la direction de contrainte imposée et $k(t)$ une inconnue scalaire qui définit l'amplitude de la contrainte. L'algorithme de Michel *et al.* (1999) est utilisé. Il consiste à trouver $\mathbf{E}(t)$ et $k(t)$ à partir du système d'équations :

$$\begin{cases} \Sigma(t) = k(t) \Sigma^0 & (\text{modèle de comportement}) \\ \Sigma^0 : \mathbf{E}(t) = x \end{cases} \quad (2.130)$$

où x est un scalaire qui décrit le niveau de chargement. Une valeur constante et positive de \dot{x} est imposée et l'évolution de x est donnée par $x = \dot{x}t$. Des détails sur l'implémentation de ces conditions sont donnés dans (Nkoubou Kaptchouang *et al.*, 2021). L'évolution de R_n/σ_0 en fonction de E_{nn} (ou $[u_n]/h$) est tracée sur la figure 2.34 pour différentes valeurs de triaxialité des contraintes η_Σ . Cette figure montre le fort impact de la triaxialité des contraintes sur l'évolution de la contrainte cohésive normale. La valeur maximale de la contrainte cohésive normale augmente avec la triaxialité des contraintes et l'énergie cohésive (aire sous la courbe) diminue avec la triaxialité des contraintes. Comme attendu avec un modèle GTN, il ressort que plus la triaxialité des contraintes diminue, plus la zone cohésive devient ductile. Il est notable qu'une fois les paramètres du modèle GTN connus, le MZC est capable de prendre en compte cette dépendance à la triaxialité des contraintes sans introduire de dépendance empirique des paramètres du MZC à la triaxialité des contraintes. Cela constitue un avantage important du MZC proposé.

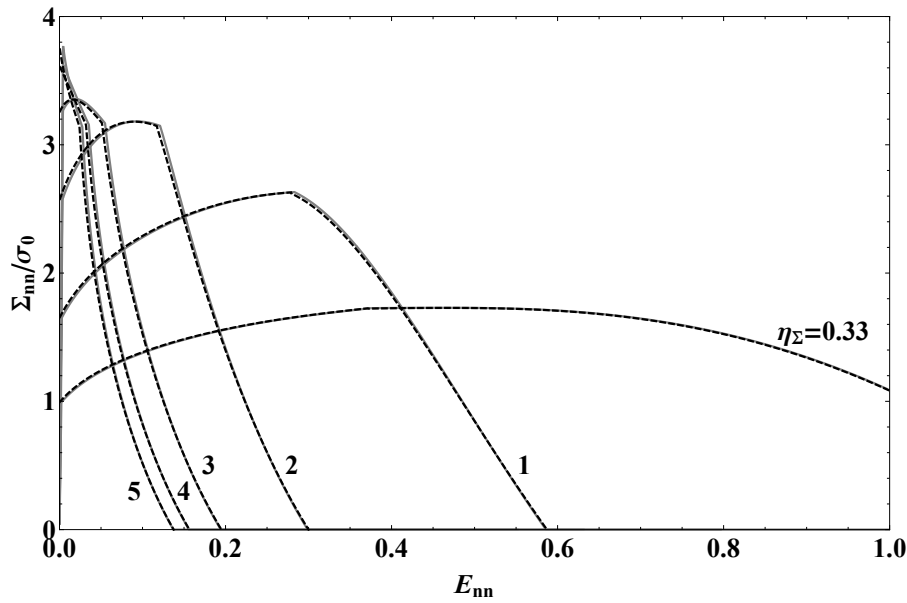


FIGURE 2.34 – Réponse du MZC (traits pointillés) et du point matériel GTN (traits pleins) pour différentes triaxialités des contraintes (contrainte axisymétrique) : évolution de R_n/σ_0 en fonction de E_{nn} .

Le MZC a été implémenté dans le logiciel XPER ("eXtended cohesive zone models and PERiodic homogenisation"). Ce code, développé à l'IRSN dans le cadre du MIST, est dédié à la simulation de la fissuration des matériaux hétérogènes sous chargements thermomécaniques (Perales *et al.*, 2008, 2010, 2022). Il est issu du couplage de plusieurs bibliothèques principales : PELICANS (IRSN, 2022) pour la partie éléments finis, LMGC90 (Dubois *et al.*, 2011) pour la résolution des zones cohésives et MATLIB (Stainier *et al.*, 2003) ou MFRONT (Helfer *et al.*, 2015) pour les lois de comportement volumiques. Ce logiciel couple la méthode des éléments finis à une méthode de dynamique des milieux divisés. Le code XPER est basé sur une stratégie de modélisation multi-contacts en utilisant la méthode de dynamique des contacts non régulière ("Non-Smooth Contact Dynamics", NSCD) : des modèles cohésifs sont introduits comme conditions aux limites mixtes entre chaque élément fini volumique. Chaque élément ou groupe d'éléments du maillage peut être considéré comme un corps indépendant et l'interface entre les corps suit un MZC sans régularisation, ni pénalisation. Le comportement à l'intérieur de chaque élément correspond à un comportement durcissant sans endommagement. L'endommagement est modélisé à l'interface entre les corps par le MZC.

Cette implémentation dans XPER a conduit à plusieurs modifications du MZC. Tout d'abord, il faut spécifier la façon dont la variable \dot{p} est mise à jour durant le calcul. Ce point est présenté ci-dessous. Ensuite, une modification du MZC est proposée pour le transformer en un MZC intrinsèque (modèle initialement extrinsèque). Ensuite, le MZC est enrichi pour garantir que le cas de la décharge (qui peut survenir dans un calcul de structure général) soit correctement traité. Enfin, le modèle a été mis en œuvre dans l'hypothèse d'un chargement proportionnel et la contrainte cohésive \mathbf{R} est estimée en utilisant la déformation cohésive \mathbf{E} au lieu de l'incrément de déformation cohésive ΔE . Cette approche est assez restrictive, mais du point de vue numérique, il a été observé qu'elle permet une intégration numérique plus stable du modèle cohésif.

La vitesse de déformation \dot{p} est estimée en utilisant une information provenant de l'élément fini esclave adjacent à la zone cohésive. Il est choisi de calculer \dot{p} en maintenant l'égalité entre la triaxialité du taux de déformation $\eta_{\mathbf{E}}$ dans la zone cohésive et celle $\eta_{\mathbf{E}}^{vol}$ calculée à partir de la contrainte dans l'élément fini esclave

adjacent à la zone cohésive. A partir de la règle de normalité, le modèle GTN conduit à :

$$\dot{\mathbf{E}} = \dot{\lambda} \left(\frac{q_1 q_2 f^*}{\sigma_y} \sinh \left(\frac{3}{2} q_2 \frac{\Sigma_m}{\sigma_y} \right) \mathbf{i} + \frac{3}{\sigma_y^2} \Sigma^d \right) \quad \text{avec} \quad \dot{\lambda} > 0. \quad (2.131)$$

En substituant dans cette expression le tenseur de contrainte moyen (noté Σ^{vol}) sur l'élément fini esclave adjacent à la zone cohésive, la triaxialité s'écrit :

$$\eta_{\dot{\mathbf{E}}}^{vol} = \frac{q_1 q_2 f^* \sinh \left(\frac{3}{2} q_2 \frac{\Sigma_m^{vol}}{\sigma_y} \right)}{2 \frac{\Sigma_{eq}^{vol}}{\sigma_y}}. \quad (2.132)$$

D'après (2.121), la triaxialité dans la zone cohésive s'écrit :

$$\eta_{\dot{\mathbf{E}}} = \frac{\frac{[\dot{u}_n]}{h} + 2\dot{p}}{2 \sqrt{\left(\frac{[\dot{u}_n]}{h} - \dot{p} \right)^2 + \frac{3}{4} \frac{[\dot{u}_t]^2}{h^2} + \frac{3}{4} \frac{[\dot{u}_s]^2}{h^2}}}. \quad (2.133)$$

En égalisant (2.132) et (2.133), la vitesse de déformation \dot{p} est estimée (voir Annexe A de (Nkoumbou Kaptchouang *et al.*, 2021)). Dans les simulations d'essais C(T) réalisées, il a été observé que la triaxialité résultante $\eta_{\dot{\mathbf{E}}}^{vol}$ diminue à mesure que l'endommagement augmente dans la zone cohésive. Comme le modèle ne prévoit qu'un faible endommagement à faible triaxialité, la rupture est artificiellement retardée. Afin de résoudre ce problème, la contrainte volumétrique Σ^{vol} est transférée à la zone cohésive jusqu'au début de la coalescence. Après détection de la coalescence, la valeur de Σ^{vol} est maintenue constante. La transformation du MZC en un modèle intrinsèque et le traitement de la décharge ne sont pas détaillés dans le présent document par souci de concision. Pour le modèle intrinsèque, l'idée générale est de multiplier le vecteur contrainte \mathbf{R} par une fonction positive croissante qui tend vers 1 lorsque l'ouverture augmente. Pour la décharge, l'idée générale est de considérer une décharge élastique linéaire vers l'origine. A cela est ajoutée une hypothèse d'irréversibilité de l'endommagement et de l'écroûissage. Les équations générales du MZC sont synthétisées à l'Annexe C de (Nkoumbou Kaptchouang *et al.*, 2021).

Une première application du MZC a été présentée dans (Nkoumbou Kaptchouang *et al.*, 2021). Elle concerne la simulation numérique de la propagation d'une fissure lors d'un essai de traction sur une éprouvette pré-entaillée de type C(T) en acier ferritique. Les simulations ont été réalisées en déformations planes. Par la suite, une autre application du MZC sur ce type d'essai a été présentée dans (Méité *et al.*, 2022) où les simulations réalisées sont tridimensionnelles. Par souci de concision, uniquement les résultats de (Méité *et al.*, 2022) sont présentés dans la sous-section suivante.

2.3.2 Application : simulation d'un essai de traction sur éprouvette pré-entaillée

*Les résultats présentés dans cette sous-section ont été obtenus en collaboration avec Mamadou Méité, Noé Brice Nkoumbou Kaptchouang, Yann Monerie et Frédéric Perales. Ils sont basés sur (Méité *et al.*, 2022).*

La longueur initiale de pré-fissure est notée a_0 et est fixée à 19,92 mm, tandis que $W = 40$ mm représente la largeur de l'échantillon (rapport a_0/W d'environ 0,5). L'épaisseur de l'échantillon est fixée à $B = 20$ mm (notations classiques). Des détails sur les dimensions de l'éprouvette et le maillage par éléments finis sont présentés sur la figure 2.35. Les axes du système de coordonnées global (x, y, z) sont respectivement le long de la direction de propagation de la fissure, de la direction de chargement et de l'épaisseur. Le plan $z = 0$ définit la section centrale de l'éprouvette, et $z = 10$ mm définit la surface latérale libre (voir figure 2.35). En utilisant les conditions de symétrie, seulement un quart de l'éprouvette pourrait être modélisé. Néanmoins, le code XPER ne

permet pas d'appliquer des conditions de symétrie sur les éléments cohésifs situés dans le plan de propagation de la fissure (en $y = 0$). Ainsi, une moitié d'éprouvette est modélisée en imposant un déplacement ($u_z = 0$) au niveau de la section centrale ($z = 0$).

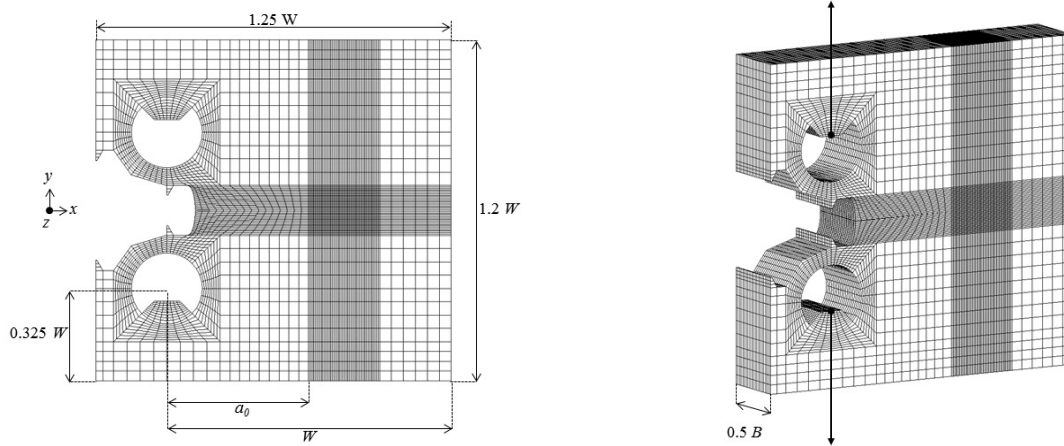


FIGURE 2.35 – Géométrie et maillage de l'éprouvette de type C(T) (demi-éprouvette) (Méité *et al.*, 2022).

Le maillage est raffiné sur une zone de $10 \times 7 \times 10 \text{ mm}^3$ devant la pointe de fissure. Le maillage des éléments dans cette zone centrale est de $0.2 \times 0.2 \times 0.5 \text{ mm}^3$ le long des axes (x, y, z) respectivement, tandis qu'un maillage plus grossier est utilisé en dehors de cette zone. Le modèle comporte 82803 nœuds et 74560 éléments hexaédriques à huit nœuds. Etant donné que le chemin de fissuration est connu a priori (propagation de fissure en mode I pur), les zones cohésives ne sont placées que sur le plan de la fissure et devant la pointe de la fissure. Quatre nœuds de contact par zone cohésive sont introduits. Le matériau entourant les zones cohésives est un solide élasto-plastique isotrope avec un modèle de plasticité de type J2. Le modèle d'écrouissage (2.128) est utilisé (à la fois pour le MZC et pour le domaine volumique environnant). Les valeurs des paramètres matériaux sont reportés dans le tableau 2.3 pour un acier ferritique (15NiCuMoNb5, désignation allemande WB36). Les calculs sont réalisés en petites déformations.

Y	ν	σ_0	K_y	n_y			
205 GPa	0.3	376 MPa	900	7.2			
q_1	q_2	f_0	k	f_c	f_N	ϵ_N	s_N
1.25	1.0	0.001	5	0.05	0.2	0.3	0.05

TABLE 2.3 – Propriétés matériaux utilisées pour l'application numérique de Méité *et al.* (2022).

Le paramètre h représentant l'épaisseur de la bande de location dans le MZC est fixé à $400 \mu\text{m}$. Les paramètres du MZC contrôlant la pente initiale (modèle intrinsèque) ne sont pas repris dans ce document par souci de concision. Les deux trous de passage des goupilles sont partiellement remplis par un domaine cône tronqué purement élastique et ayant les mêmes propriétés élastiques que le matériau de l'éprouvette. La composante verticale du déplacement sur les faces de ces cônes tronqués est imposée : u_y et $-u_y$ sont appliqués simultanément pour les cônes supérieurs et inférieurs respectivement (voir figure 2.35). Un pas de temps faible $\Delta t = 1.6 \cdot 10^{-8}$ s est utilisé pour le calcul. Comme toutes les lois de comportement utilisées sont indépendantes du temps, une vitesse élevée ($\dot{u}_y = 0,2 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$) est imposée afin de réaliser la simulation en un temps raisonnable. La masse

volumique est fixée à $7.8 \cdot 10^3 \text{ kg/m}^3$ (valeur standard pour un acier). Il est à noter que la simulation est assez coûteuse en terme de temps de calcul : approximativement 60 jours sur 40 cœurs (avec 10 Go de mémoire RAM).

La figure 2.36 montre la courbe macroscopique (force de réaction F_y) en fonction de l'ouverture de fissure ("Crack Opening displacement", COD, approché ici par $2U_y$) obtenue par la simulation. La simulation reproduit bien la baisse de la force typiquement observée lors des essais C(T).

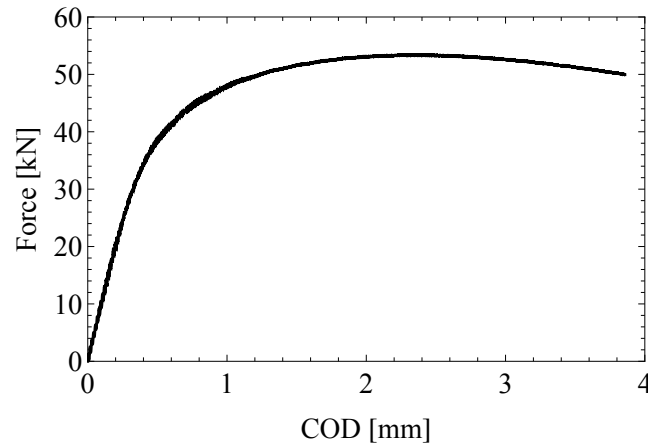


FIGURE 2.36 – Courbe macroscopique, force F_y en fonction de l'ouverture de fissure (COD approché par $2u_y$) obtenue par simulation numérique 3D d'un essai de type C(T) (Méité *et al.*, 2022).

Un point particulièrement intéressant est illustré sur la figure 2.37 qui montre la forme du front de fissure pour certaines valeurs de COD. Le front de fissure, initialement rectiligne selon l'épaisseur, se propage plus rapidement dans la section centrale de l'éprouvette que près des surfaces latérales libres. Pour une valeur donnée d'ouverture, l'extension de fissure Δa présente la valeur la plus élevée au niveau de la section centrale et diminue fortement en allant de la section centrale vers les surfaces latérales libres. Ce type de profil de fissure présentant un "effet tunnel" à travers l'épaisseur de l'éprouvette a été observé à la fois numériquement et expérimentalement pour des éprouvettes avec surfaces latérales lisses (voir par exemple l'analyse bibliographique de Méité *et al.* (2022) sur ce point).

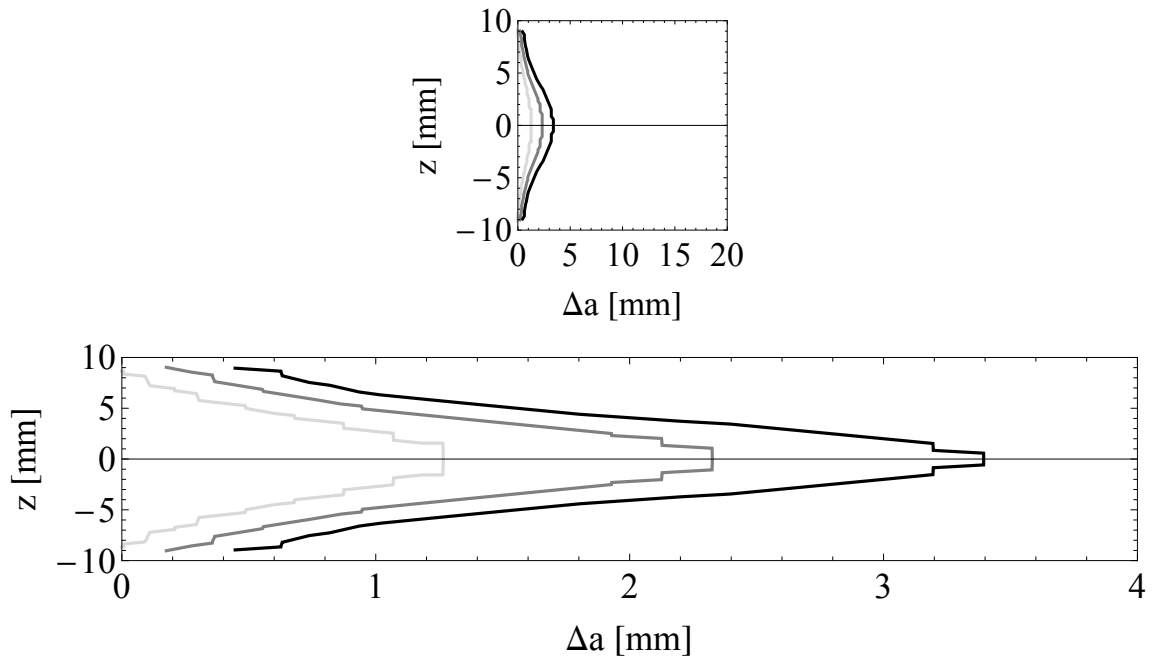


FIGURE 2.37 – Évolution du front de fissure (z en fonction de Δa). COD $\simeq 1.67$ mm, (gris clair), COD $\simeq 2.08$ mm (gris), COD $\simeq 2.5$ mm (noir). COD approché par $2 u_y$ (Méité *et al.*, 2022).

Un autre point particulièrement intéressant est illustré sur la figure 2.38 qui montre la triaxialité des contraintes en fonction de la position à travers l'épaisseur de l'éprouvette pour différentes valeurs de COD. Ici, la triaxialité est tracée en pointe de fissure maximale (à $a(t, z = 0)$). Il apparaît que la triaxialité des contraintes est relativement élevée au niveau de la section centrale et diminue fortement au niveau de la surface latérale libre. L'observation selon laquelle la fissure avance plus rapidement dans la section centrale que sur les surfaces latérales est ainsi liée à une triaxialité des contraintes plus élevée sur la section centrale que sur les surfaces latérales. Dans le modèle cohésif, l'endommagement est dû à la croissance des cavités, qui est contrôlée par la trace du taux de déformation plastique. Les valeurs élevées de triaxialité des contraintes observées ici doivent induire des valeurs élevées du taux de déformation dans le modèle cohésif, ce qui favorise la croissance de la cavité et l'endommagement.

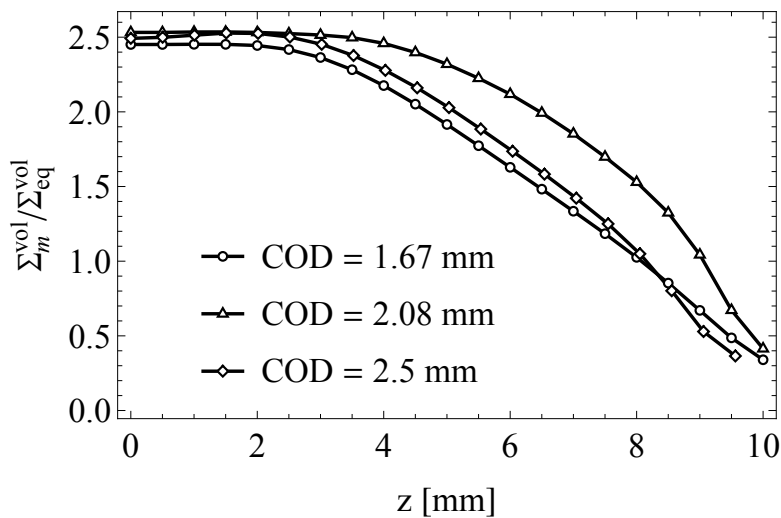


FIGURE 2.38 – Évolution de la triaxialité des contraintes en fonction de l'épaisseur en fond de fissure maximal (à $a(t, z = 0)$) pour différentes valeurs de COD (approché par $2 u_y$). (Méité *et al.*, 2022).

L'hétérogénéité des champs locaux conduit à diverses courbes de traction-séparation le long du front de fissure, comme cela est illustré sur la figure 2.39. Une contrainte cohésive maximale plus élevée est obtenue au niveau de la section centrale (points marqués "A") qu'au niveau de la surface latérale libre (points marqués "D"). De plus, au niveau de la section centrale, la contrainte cohésive maximale augmente entre les positions "1" et "2", puis semble se stabiliser entre les positions "2" et "3". Une tendance opposée est obtenue sur la surface latérale où le pic de contrainte cohésive diminue entre les positions "1" et "2" et semble ensuite se stabiliser entre les positions "2" et "3". Comme indiqué dans (Nkoumbou Kaptchouang *et al.*, 2021), une caractéristique importante du MZC proposé est que la forme de la réponse cohésive locale n'est pas donnée a priori mais découle directement du chargement et du modèle micromécanique choisi (le modèle GTN). De façon approchée, il est observé que, pour la section centrale, la forme de la réponse cohésive passe d'un modèle en forme de "porte" à un modèle plus triangulaire lors de la propagation de la fissure. Sur la surface latérale, la forme globale ne varie pas de manière significative mais la courbe semble plus aplatie et étalée. À partir de cette figure, l'énergie cohésive surfacique (approchée par l'aire sous la courbe) est calculée et reportée sur la figure 2.40. L'énergie cohésive surfacique est plus élevée sur la section centrale que sur la surface latérale. Sur la section centrale et la surface latérale, elle diminue entre les positions "1" et "2", puis semble se stabiliser entre les positions "2" et "3". Sur les points intermédiaires (points marqués "B" et "C"), elle augmente entre les positions "1" et "2" et semble ensuite se stabiliser entre les positions "2" et "3". Cela illustre le fait qu'après une phase d'initiation de la propagation de la fissure, la propagation de fissure se fait de façon stable.

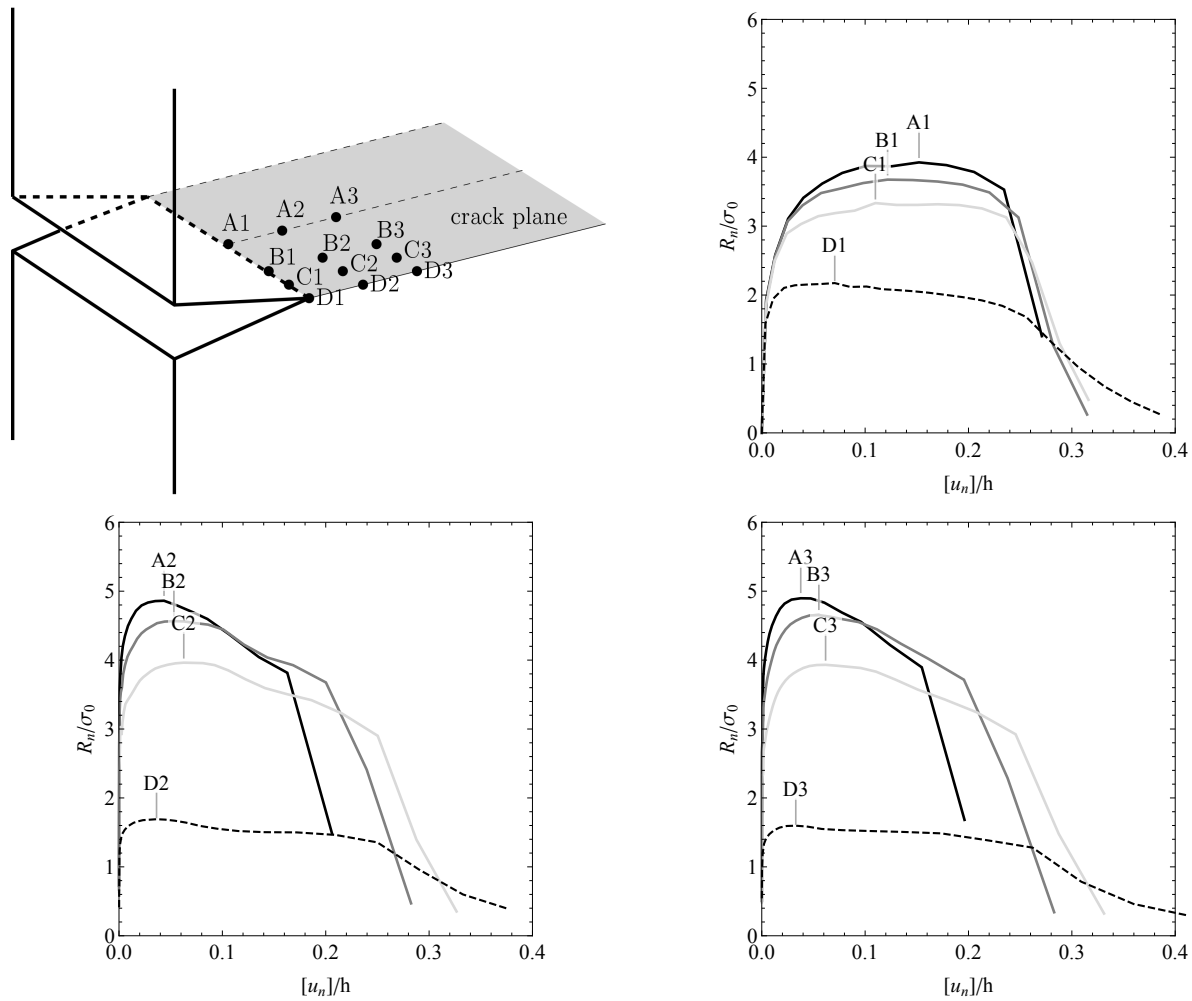


FIGURE 2.39 – Réponses cohésives locales pour différents points : contrainte cohésive normale en fonction du saut de déplacement normal (valeurs normalisées) (Méité *et al.*, 2022).

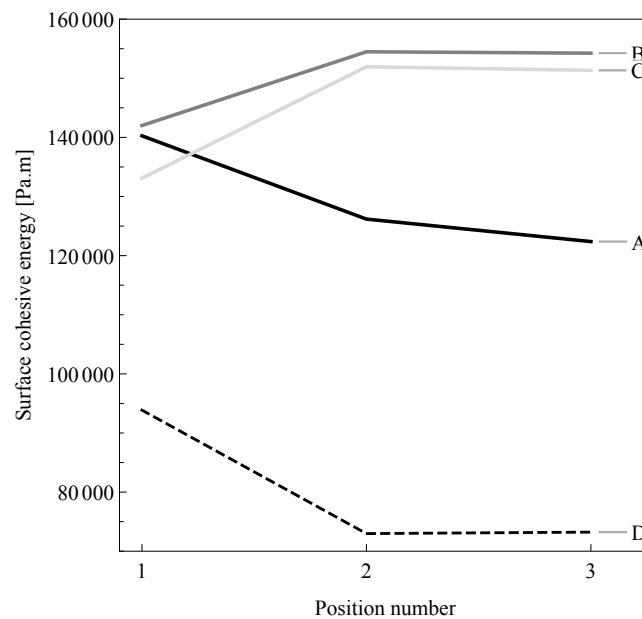


FIGURE 2.40 – Energie cohésive surfacique locale pour différents points (Méité *et al.*, 2022).

Une autre application du MZC a été effectuée sur une portion de pastille d'UO₂ en situation de RIA dans

(Nkoumbou Kaptchouang, 2019). Cette application a été prolongée dans (Tosi, 2020).

2.3.3 Application : simulation d'un fragment de pastille de dioxyde d'uranium en situation de RIA

Les résultats présentés dans cette sous-section ont été obtenus en collaboration avec Noé Brice Nkoumbou Kaptchouang, Clément Tosi, Yann Monerie et Frédéric Perales. Ils sont basés sur (Nkoumbou Kaptchouang, 2019) et (Tosi, 2020).

L'objectif est de simuler le comportement mécanique d'un fragment de pastille de combustible UO_2 soumis à un chargement thermique typique relatif à une situation de RIA, avec une modélisation explicite de sa fissuration. L'étude réalisée est basée sur l'essai REP-Na3. Un seul fragment de pastille (avec la portion de gaine correspondante), correspondant à un cinquième de pastille selon θ en coordonnées cylindriques (r, θ, z) , est modélisé. Des détails sur la géométrie considérée ainsi que sur les conditions aux limites imposées sont donnés sur la figure 2.41.

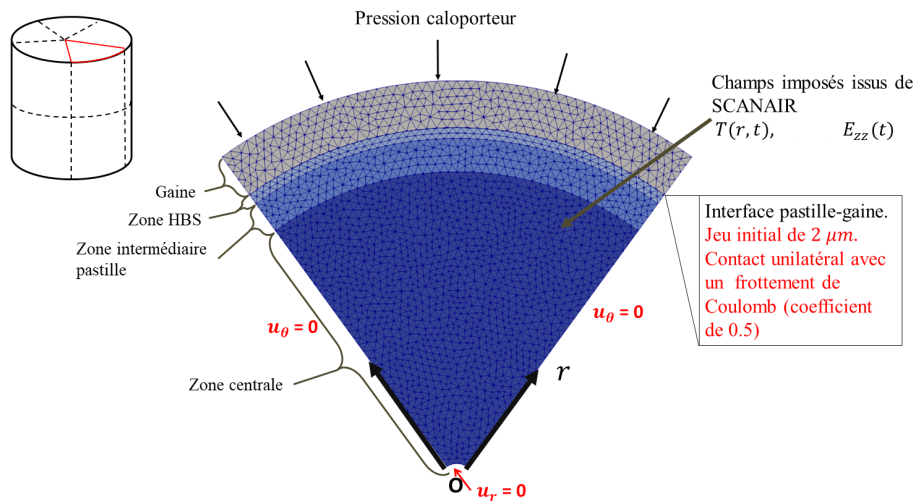


FIGURE 2.41 – Portion de combustible : maillage (taille de maille d'environ $100 \mu\text{m}$) et conditions aux limites d'après (Nkoumbou Kaptchouang, 2019).

Le comportement thermomécanique du crayon combustible lors de cet essai a été préalablement simulé par le code SCANAIR. Cette simulation donne accès à des informations locales dont certaines sont utilisées comme données d'entrée de chargement pour la présente simulation, comme :

- les champs de température T dans la pastille et dans la gaine,
- la pression du fluide caloporteur,
- la déformation axiale E_{zz} suivant l'axe z .

Dans (Nkoumbou Kaptchouang, 2019), la portion de combustible est divisée en 3 zones radiales (centrale, intermédiaire et périphérique ou "High Burnup Structure", HBS) et le champ de température est pris homogène par zone. Le champ de température est pris homogène dans la gaine. Dans (Tosi, 2020), afin d'obtenir une description plus précise, la portion de combustible est divisée en 11 zones radiales, la gaine en 2 zones radiales et le champ de température est pris homogène par zone. Il est rappelé que le profil de température est très fortement piqué en périphérie de pastille lors d'un RIA (voir figure 2.42). Les zones de température sont prises

plus fines vers la périphérie de la pastille que vers le centre.

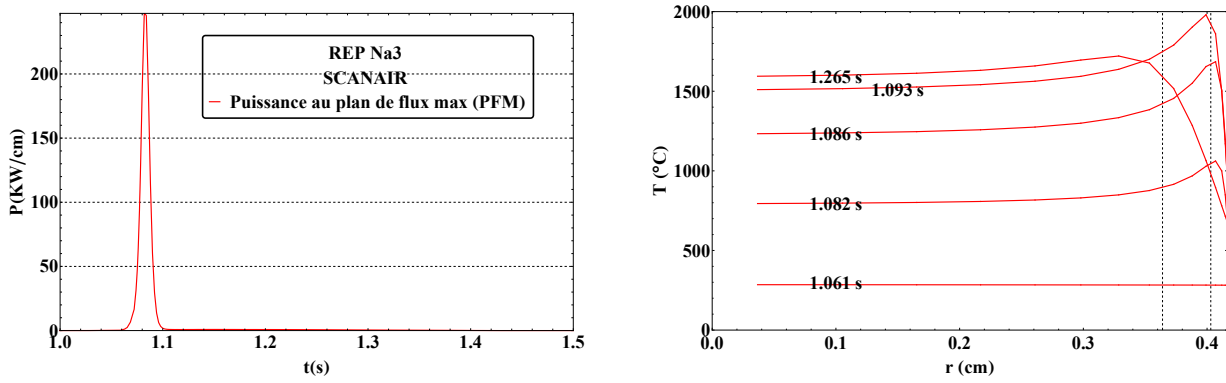


FIGURE 2.42 – Gauche : pulse de puissance au plan de flux max (PFM : section du combustible où la puissance est maximale) : puissance linéique en fonction du temps. Droite : profil radial de température au PFM de la pastille calculé par SCANAIR pour l’essai REP-Na3 (Nkoumbou Kaptchouang, 2019).

La simulation est effectuée en déformations planes généralisées avec XPER. Des fonctions analytiques sont recherchées et paramétrées afin de reproduire les profils de température dans les différentes zones et de déformation axiale obtenus avec SCANAIR. Ces fonctions analytiques sont utilisées dans le jeu de données XPER. Un jeu initial (à froid) de $2 \mu m$ est inséré entre la pastille et la gaine. La pression du fluide caloporteur calculée par SCANAIR est fixée à 3 bar. Un contact frottant de type Signorini-Coulomb est considéré entre la pastille et la gaine (coefficient de frottement pris à 0.5). La couche externe de Zircone (partie externe de gaine oxydée peu résistante mécaniquement) n’est pas modélisée.

La pastille est supposée élasto-plastique et des zones cohésives sont insérées entre toutes les mailles. La porosité est prise à 8 % en zone HBS (zone très poreuse) et à 4 % pour le reste de la pastille. La porosité considérée est ici due aux pores de fabrication résiduels et aux bulles intergranulaires d’irradiation. Elle est basée sur le jeu de données de la base de validation du code SCANAIR pour l’essai REP-Na3. Les propriétés élastiques proviennent de (Cappia *et al.*, 2016) et (Martin, 1989) et dépendent de la température, de la porosité et du taux de combustion (ce dernier est pris différent entre la zone HBS et le reste de la pastille). La déformation thermique est prise en compte par l’intermédiaire d’un coefficient de dilatation thermique (Popov *et al.*, 2000). Le critère de plasticité utilisé est celui de von Mises avec écrouissage linéaire. Ils sont paramétrés en fonction de la température en utilisant des résultats d’essais de compression de (Salvo, 2014). Le MZC présenté en 2.3.1 est utilisé. La transition fragile-ductile selon la température est modélisée en faisant évoluer la porosité de début de coalescence f_c en fonction de la température. Le coefficient k est pris élevé (rupture rapide considérée dès que le début de la coalescence est détecté). La fonction $f_c(T)$ a été calibrée de façon approximative sur la base d’essais de flexion de Canon *et al.* (1971). En dessous de $1100^\circ C$ le comportement est pris fragile (porosité f_c prise très proche de la porosité initiale f_0) et au-delà de $1100^\circ C$, le comportement est de plus en plus ductile avec la température (f_c augmente avec la température). La zone HBS maintient un comportement fragile durant la simulation (température toujours inférieure à $1100^\circ C$). L’estimation du paramètre h est délicate. La valeur du paramètre h est choisie pour qu’à basse température, on retrouve l’ordre de grandeur des ténacités obtenues par essais de microdureté (McDonald, 2014; Spino *et al.*, 1996). Dans le MZC, la pressurisation des pores est prise en compte par l’intermédiaire d’une loi d’état simplifiée avec une quantité de gaz fixe plus importante en zone HBS que dans le reste de la pastille (nombre de moles de gaz par unité de volume obtenu via SCANAIR).

La gaine est en Zircaloy 4 et son comportement est élasto-plastique parfait avec un critère de plasticité de von Mises et sans endommagement (pas de zones cohésives insérées entre les mailles). Les propriétés matériaux dépendent de la température. La déformation thermique est prise en compte par l'intermédiaire d'un coefficient de dilatation thermique. Les propriétés matériaux ont été tirées de la documentation de SCANAIR (Moal, 2012; Cazalis *et al.*, 2007).

De plus amples informations sur la modélisation du problème sont données dans (Nkoumbou Kaptchouang, 2019). Il est à noter que cette modélisation a nécessité une légère modification du MZC. Cela concerne la prise en compte de la pression P_b dans les cavités du MZC. Comme souligné en 2.1.1, la surface de charge du modèle GTN avec prise en compte de cette pression s'obtient en ajoutant P_b à la contrainte hydrostatique. Le MZC est alors repris en ajoutant P_b/σ_0 à T_{nn} , T_{tt} et T_{ss} dans les équations (2.123) et (2.127).

L'état de la portion de combustible obtenu à la fin de la simulation de Tosi (2020) est présenté sur la figure 2.43. Une telle simulation dure environ 50 heures sur 12 cœurs. Le profil de fissuration obtenu concorde qualitativement avec la micrographie post-essai de REP-Na3 et les observations suivantes sont effectuées :

- présence de nombreuses fissures radiales courtes en périphérie de pastille (dans la zone HBS) ;
- propagation d'une partie de ces fissures radiales vers le centre de la pastille ;
- présence de fissures orthoradiales à l'interface entre différentes zones de température ;
- présence d'une forte concentration de fissures radiales dans la zone de température numéro 8 (indiquée sur la figure 2.43).

Tout d'abord, un point particulièrement important est qu'il a été observé que les premières fissures radiales courtes s'initient dans la zone HBS lors de la phase de montée en température, puis la propagation des fissures dans la zone plus centrale se fait lors de la phase de retour à froid. Ensuite, la forte concentration de fissures dans la zone de température numéro 8 est sûrement due à un fort gradient thermique entre cette zone et les zones voisines. En effet, il a été observé à posteriori que la fonction analytique utilisée dans cette zone pour décrire l'évolution de la température avec le temps s'écartait fortement des résultats SCANAIR à partir de $t = 1.4$ s environ. Cette erreur peut expliquer la forte fissuration de cette zone. Enfin, un calcul approché de la déformation circonférentielle de la gaine $\epsilon_{\theta\theta}$ a été effectué et l'ordre de grandeur de la valeur expérimentale a été retrouvée. Ainsi, malgré un nombre important de simplifications apportées lors la phase de modélisation du problème physique, les résultats de simulation conduisent à des distributions spatiales de fissures cohérentes avec les micrographies. Comme spécifié dans (Nkoumbou Kaptchouang, 2019), il s'avère que les facteurs au premier ordre de l'initiation des fissures radiales secondaires sont le gradient thermique important en périphérie de pastille et l'état dégradé de la périphérie des pastilles (zone HBS).

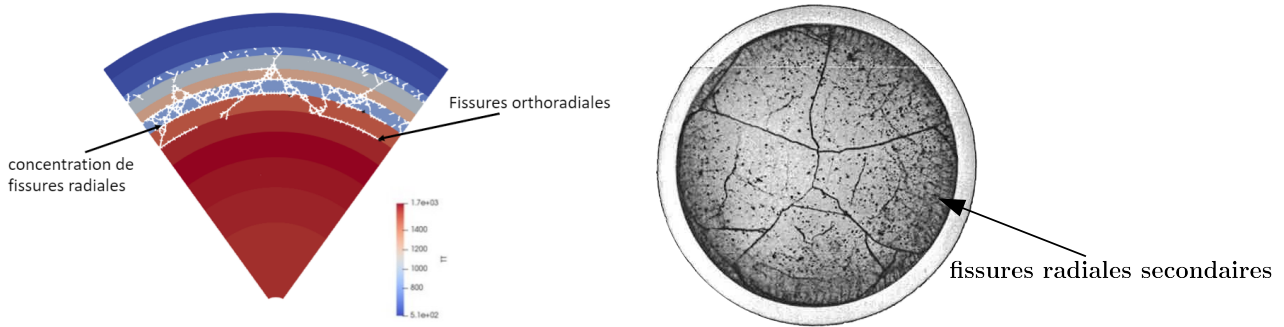


FIGURE 2.43 – Gauche : faciès de fissure en fin de simulation (les points blancs sont les zones cohésives rompues) (Tosi, 2020). Droite : micrographie après essai REP-Na3 d'après (Lespiaux *et al.*, 1997).

2.4 Viscoplasticité des matériaux poreux avec effets d'amas : application au MOX

*Les résultats présentés dans cette section ont été obtenus en collaboration avec Kajetan Wojtacki, Pierre Suquet, Hervé Moulinec et Guylaine Boittin. Ils sont basés sur (Wojtacki *et al.*, 2020).*

Ce travail concerne le comportement viscoplastique du combustible MOX. Le MOX est un combustible obtenu à partir d'un mélange d'oxyde de plutonium et d'oxyde d'uranium (naturel, appauvri ou issu d'un retraitement). Le MOX est utilisé en REP en France depuis 1987 (Oudinet *et al.*, 2008). Ce matériau présente une microstructure particulière qui évolue avec l'irradiation (Noirot *et al.*, 2008). Notamment, comme pour le combustible UO_2 , l'accumulation de gaz de fission aboutit à la création de bulles sous pression dans le matériau. Ces changements microstructuraux ont des conséquences sur les propriétés physiques de la pastille de combustible et par conséquent sur le chargement imposé à la gaine (première barrière de sûreté). Son comportement viscoplastique est généralement basé sur des essais de fluage à différentes températures et contraintes de compression constantes imposées. Lors d'un tel essai, la réponse du matériau est d'abord une déformation élastique, suivie d'une phase où la déformation augmente de façon non linéaire (fluage "primaire"), jusqu'à ce que la vitesse de déformation se stabilise (fluage "secondaire" ou "stationnaire") (Routbort *et al.*, 1972). Ce travail s'intéresse au régime de fluage secondaire uniquement. Il a pour but d'estimer à la fois numériquement et analytiquement l'effet des bulles d'irradiation (réparties en amas) sur la vitesse de déformation d'un combustible MOX irradié à haute température, $1573 \text{ K} \leq T \leq 2473 \text{ K}$, et forte contrainte, $10 \text{ MPa} \leq \Sigma \leq 100 \text{ MPa}$, dans la gamme des conditions qui pourraient être rencontrées dans une pastille lors d'un éventuel RIA (Suzuki *et al.*, 2008). Des simulations numériques en champs complets utilisant une méthode à base de FFT et un modèle analytique sont proposés.

La microstructure du MOX dépend de son procédé de fabrication. Ce travail s'intéresse au MOX MIMAS ("MIcronized MAster blend"). Il consiste en une micronisation d'un mélange de poudres de dioxyde d'uranium et de dioxyde de plutonium, suivi d'une dilution avec du dioxyde d'uranium pour atteindre la teneur en plutonium visée (voir (White *et al.*, 2001) et (Fisher *et al.*, 2002) pour de plus amples informations sur les procédés). La microstructure obtenue dépend aussi des caractéristiques des poudres de dioxyde d'uranium employées, qui peuvent être produites par la voie dite AUC ("Ammonium Uranate Carbonyl", carbonate d'ammonium-uranyle) et la voie dite ADU ("Ammonium DiUranate", diuranate d'ammonium). Ce procédé de fabrication conduit à

un matériau comportant des amas riches en plutonium. Le MIMAS-AUC présente plutôt une microstructure biphasée avec des agglomérats riches en Pu et une matrice avec un contenu mixte de dioxyde d'uranium et de dioxyde de plutonium. Le MIMAS-ADU présente plutôt une microstructure triphasée avec des agglomérats riches en Pu, une matrice riche en UO_2 et une phase de revêtement à teneur intermédiaire en Pu (White *et al.*, 2001). Pendant l'irradiation, les larges agglomérats riches en Pu deviennent très poreux due à l'accumulation de gaz de fission et l'apparition de bulles d'irradiation (Noirot *et al.*, 2008).

La taille maximale des amas riches en Pu rapportée dans (Fisher *et al.*, 2002) est d'environ $150 \mu\text{m}$ pour le combustible MOX MIMAS. D'après (White *et al.*, 2001) et (Fisher *et al.*, 2002), la fraction surfacique des amas riches en Pu est d'environ 0.11 pour le MIMAS-ADU et 0.25 pour le MIMAS-AUC. Une étude de covariogramme est effectuée sur six images de MOX MIMAS-ADU données dans (Largenton, 2012). Ces images ont été binarisées pour extraire les amas riches en Pu et pour générer les covariogrammes de ces inclusions. La figure 2.44 montre les moyennes sur les six images des covariances ($C(X, \mathbf{h})$) donne la probabilité qu'un point arbitraire de la phase X et sa translation selon le vecteur \mathbf{h} appartiennent à X le long de trois directions différentes (x , y et la diagonale de l'image). Puisque la covariance est similaire selon toutes les directions étudiées, il est supposé que les amas riches en plutonium sont distribués de manière isotrope dans le combustible. Cette étude de covariance s'est révélée être en accord avec la littérature : la fraction surfacique des amas $\bar{\varphi}_c = C(X, \mathbf{0})$ vaut environ 0.12 et la taille caractéristique moyenne des amas \bar{d}_c (premier minimum de la fonction) vaut environ $100 \mu\text{m}$ (le symbole $\bar{\cdot}$ représente la moyenne sur les six images).

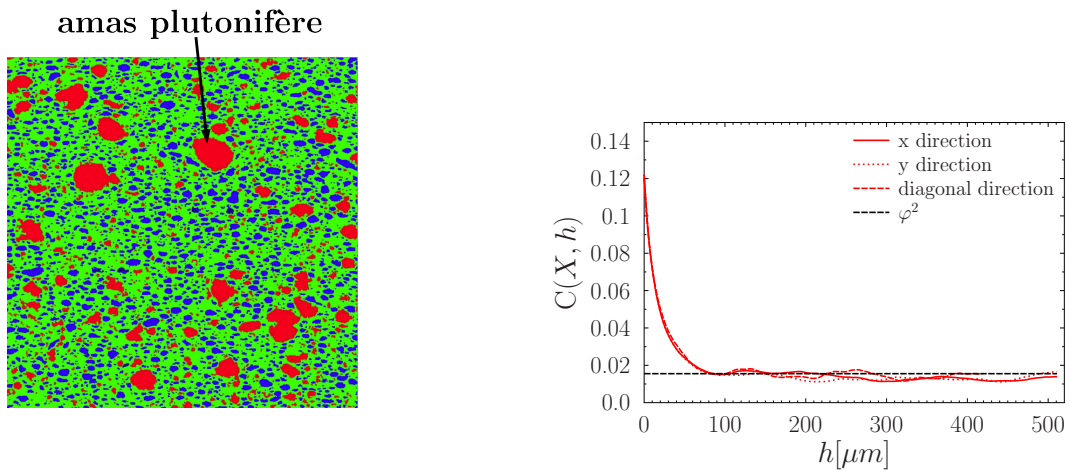


FIGURE 2.44 – Distribution des amas riches en Pu dans du MOX MIMAS-ADU. Gauche : carte de concentration en Pu de (Largenton, 2012) où les amas plutonifères sont en rouge. Droite : covariogramme de (Wojtacki *et al.*, 2020).

Concernant les bulles d'irradiation dans les larges amas de Pu, il a été observé que leur taille varie en fonction de leur position radiale dans la pastille (voir figure 2.45) et en fonction du taux de combustion local (Noirot *et al.*, 2008). Les bulles les plus grosses sont observées dans la zone centrale de la pastille (tailles maximales observées comprises entre 50 et $80 \mu\text{m}$ (Fisher *et al.*, 2002; Noirot *et al.*, 2008)). Elles ont aussi tendance à grossir avec le taux de combustion. La porosité des amas dépend de leur position et du taux de combustion local : la porosité augmente en fonction du rayon vers la zone centrale de la pastille et en fonction du taux de combustion. La porosité maximale trouvée dans les amas est de 34 % dans (Noirot *et al.*, 2008).

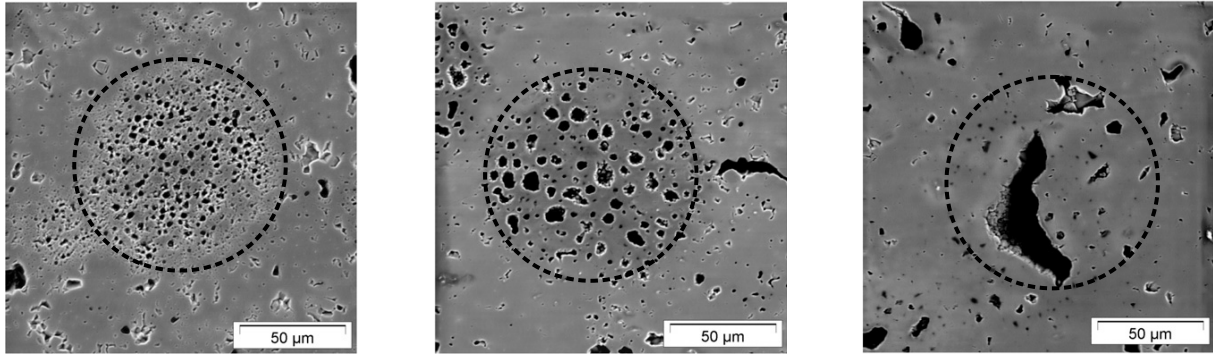
périphérie : $0.9R$ mi-rayon : $0.5R$ centre : $0R$

FIGURE 2.45 – Apparition des bulles d’irradiation dans les larges amas riches en Pu : la taille des bulles augmente vers le centre de la pastille (d’après (Noirot *et al.*, 2008)).

En tenant compte de ces informations morphologiques, une microstructure simplifiée est considérée pour réaliser les simulations numériques par FFT. Un matériau constitué de deux phases est considéré, avec des cavités regroupées en amas plongées dans une matrice. Des amas de forme sphérique et de taille unique sont répartis de manière aléatoire dans le matériau. Des pores sphériques et de taille unique sont distribués de manière aléatoire à l’intérieur des amas. Les différentes microstructures sont générées selon les paramètres suivants :

- porosité dans les amas : $p_c \in \{0.1, 0.3\}$,
- diamètre des pores : $d_p \in \{4, 8, 16, 32\} \mu\text{m}$,
- fraction volumique d’amas dans le volume total $\varphi_c = 0.15$,
- diamètre des amas : $d_c = 100 \mu\text{m}$,
- nombre d’amas : $n_c = 13$.

Par manque d’information et de résultats expérimentaux sur le comportement des différentes phases, un seul modèle de comportement est attribué à toute la matrice entourant les cavités. Il est généralement admis que le fluage stationnaire du combustible MOX résulte de deux mécanismes de fluage, à savoir le fluage par diffusion et le fluage par dislocation. L’identification des paramètres matériaux pour le fluage stationnaire du combustible MOX a été réalisée par Routbort *et al.* (1972); Routbort et Voglewede (1973), et Roberts et Voglewede (1973). La dépendance de la vitesse de fluage en fonction de la contrainte est décrite par la superposition d’un écoulement visqueux linéaire et d’une relation de fluage en loi de puissance. Dans les modèles proposés, la température maximale dans le domaine de validité est d’environ $T_{max} \approx 2000$ K. Une amélioration du modèle pour les hautes températures a ensuite été proposée par Slagle *et al.* (1984) qui a ajouté un troisième terme pour augmenter la précision du modèle jusqu’à $T_{max} = 2900$ K. Le modèle de comportement en unidimensionnel de Slagle *et al.* (1984) s’écrit :

$$\dot{\varepsilon}^{vp} = \frac{A_1}{d_g^2} e^{-Q_1/(RT)} \sigma^{n_1} + \left(B_2 e^{-Q_2/(RT)} + B_3 e^{-Q_3/(RT)} \right) \sigma^{n_2}, \quad (2.134)$$

avec : $\dot{\varepsilon}^{vp}$ [1/s] le taux de déformation, σ [MPa] la contrainte, R [J/(mol.K)] la constante des gaz parfaits (8.3144598 J/(mol.K)), d_g [μm] la taille de grain. Les Q_i [J/mol] sont les énergies d’activation et A_1 , B_2 , B_3 dépendent de la densité et du ratio oxygène-métal. Les paramètres utilisés sont donnés dans le tableau 2.4.

A_1	B_2	B_3
$\mu\text{m}^2 \cdot \text{MPa}^{-n_1} \cdot \text{s}^{-1}$	$\text{MPa}^{-n_2} \cdot \text{s}^{-1}$	$\text{MPa}^{-n_2} \cdot \text{s}^{-1}$
8.97×10^5	900	2.87×10^{17}
Q_1	Q_2	Q_3
J/mol	J/mol	J/mol
387300	572700	1256108
d_g	n_1	n_2
μm	—	—
20	1	4.4

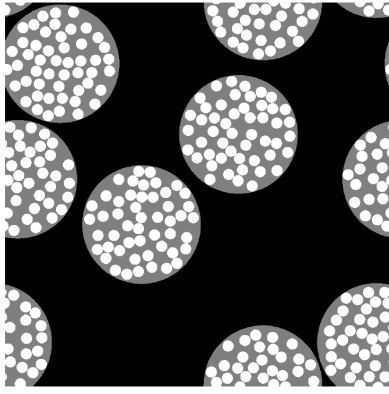
TABLE 2.4 – Paramètres matériaux de (2.134) utilisés dans (Wojtacki *et al.*, 2020).

Une version tridimensionnelle de ce modèle de comportement (2.134) a été implémentée dans CraFT. L'implémentation est basée sur l'ajout d'une partie élastique linéaire isotrope, sur un schéma implicite pour l'intégration en temps et sur l'introduction d'un prédicteur élastique (voir section 4 de (Wojtacki *et al.*, 2020) pour plus d'informations). La matrice étant incompressible (loin dans le domaine plastique), l'effet d'une pression P_b dans les pores est obtenu en remplaçant la contrainte hydrostatique macroscopique Σ_m obtenu dans le cas drainé (i.e. dans le cas où $P_b = 0$) par $\Sigma_m + P_b$ (résultat déjà utilisé précédemment en 2.3.3). Ainsi, l'étude est réalisée dans le cas drainé $P_b = 0$ sans perte de généralité.

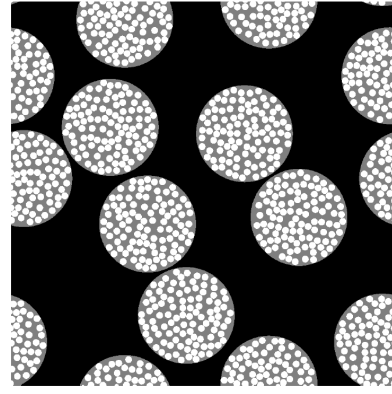
Des algorithmes particuliers ont été développés afin de générer les images périodiques pour les simulations numériques par FFT. L'algorithme procède en deux étapes qui génèrent des objets monodispersés en taille :

- un algorithme inspiré de l'algorithme de Metropolis est utilisé pour placer de manière aléatoire n_c amas sphériques sans interpénétration et qui occupent une fraction de φ_c du volume total. L'algorithme proposé fonctionne comme suit. Tout d'abord, un ensemble de centres de sphères est placé dans le volume de façon (pseudo) aléatoire (avec interpénétration possible). Ensuite, une sphère est tirée (pseudo) aléatoirement parmi cet ensemble et elle est déplacée (pseudo) aléatoirement dans une "boite" autour de sa position initiale. Si la nouvelle position est plus adéquat (i.e. si la sphère intersecte moins les sphères voisines selon un certain critère incluant une petite agitation), alors elle est conservée. Sinon, elle est rejetée. Cette opération est répétée (tirage d'une sphère, déplacement de la sphère et conservation du déplacement s'il améliore la "grandeur" test) jusqu'à ce qu'il n'y ait plus d'intersection entre sphères.
- ensuite, le même algorithme est utilisé pour distribuer aléatoirement à l'intérieur de chaque amas n_p pores sphériques sans interpénétration et qui occupent une fraction p_c du volume de l'amas.

Enfin, en disposant d'un tableau avec les positions et les rayons des amas et des pores, une image de la microstructure est générée selon la résolution spatiale souhaitée. La figure 2.46 montre des exemples 2D de microstructures générées.



$$n_c = 5, \varphi_c = 0.45, n_p = 50, p_c = 0.2$$



$$n_c = 10, \varphi_c = 0.5, n_p = 100, p_c = 0.25$$

FIGURE 2.46 – Exemples 2D de cellules unitaires périodiques générées : pores (blanc), amas (gris) et matrice (noir) (Wojtacki *et al.*, 2020).

Une seule distribution spatiale des amas a été utilisée dans l'étude pour toutes les microstructures générées avec les paramètres suivants : $n_c = 13$, $\varphi_c = 0.15$, $d_c = 100 \mu\text{m}$ et taille du volume total $L_{RVE} \approx 360 \mu\text{m}$. Cette distribution a été sélectionnée suite à une étude de covariogrammes sur 2000 tirages. La distribution des amas est représentée sur la figure 2.47.

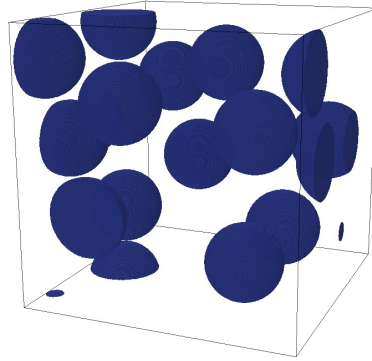


FIGURE 2.47 – Distribution des amas utilisée pour générer les cellules périodiques pour les simulations par FFT (Wojtacki *et al.*, 2020).

Les paramètres pour les différentes microstructures utilisées dans cette étude sont donnés dans le tableau 2.5. La porosité totale vaut $f = p_c \varphi_c$. Deux microstructures additionnelles ont été étudiées : ces microstructures (appelées 1.0 et 2.0) correspondent à des cellules unitaires cubiques contenant une unique cavité avec une porosité f égale à 0.015 et 0.045 respectivement.

Micro.	d_c [μm]	d_p [μm]	p_c	n_p	f
1.0	–	–	–	1	0.015
1.1	100	32	0.1	3	0.015
1.2	100	16	0.1	24	0.015
1.3	100	8	0.1	195	0.015
1.4	100	4	0.1	1563	0.015
2.0	–	–	–	1	0.045
2.1	100	32	0.3	9	0.045
2.2	100	16	0.3	73	0.045
2.3	100	8	0.3	586	0.045

TABLE 2.5 – Résumé des paramètres pour les différentes microstructures utilisées dans les simulations par FFT.

La figure 2.48 montre un amas pour chaque microstructure.

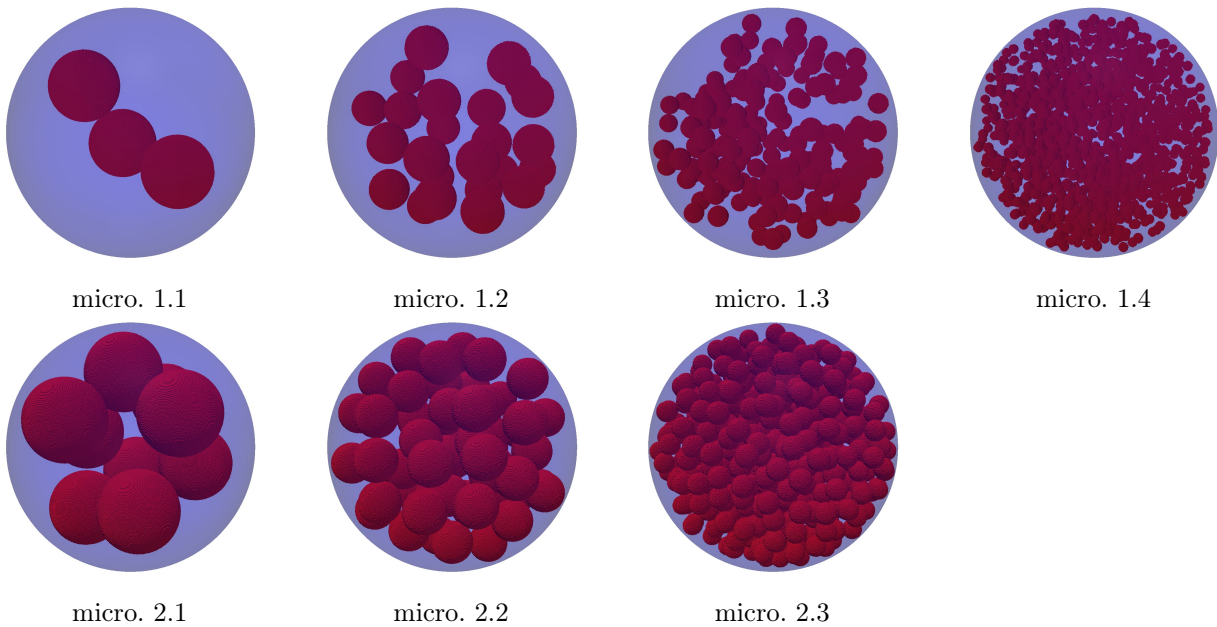


FIGURE 2.48 – Illustration des amas poreux pour chaque microstructure utilisée dans les simulations par FFT (Wojtacki *et al.*, 2020).

La méthode dite "de base" est utilisée pour les simulations numériques par FFT (Moulinec et Suquet, 1998). Les simulations numériques réalisées ont pour but de simuler des essais de fluage. La contrainte macroscopique est imposée et la réponse du matériau est décrite par l'évolution de la déformation macroscopique en fonction du temps. L'évolution de la vitesse de déformation en fonction du temps est obtenue à partir de celle de la déformation en utilisant une formule approchée à cinq points d'appuis. Après un régime transitoire (dont la durée varie avec la température, le chargement mécanique et dans une moindre mesure, avec l'échantillon considéré), la vitesse de déformation macroscopique se stabilise et reste approximativement constante. Un critère est défini pour déterminer le moment où la vitesse déformation macroscopique peut être considérée comme stabilisée (de plus amples détails sont donnés dans (Wojtacki *et al.*, 2020)). La résolution spatiale est fixée en étudiant deux microstructures simplifiée comportant un unique amas situé au centre de l'image, avec une fraction volumique de 15 %, dans lequel 10 pores sont placés de manière aléatoire, et pour lesquelles les porosités totales sont de 1.5

% et 4.5 % respectivement. Une compression uniaxiale est imposée ($\Sigma = -\Sigma \mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1$), pour une valeur donnée de température et de contrainte ($T = 2473$ K, $\Sigma = 100$ MPa). Un bon compromis entre précision et temps de calcul est obtenu en sélectionnant une résolution de 29 et 42 voxels par diamètre de pore pour une porosité de 1.5 % et 4.5 % respectivement. Cela permet de fixer les tailles en voxels des différentes microstructures. La matrice de tests pour les simulations comporte dix valeurs de températures et dix valeurs de contrainte :

$$\begin{aligned} \text{Température : } T \text{ [K]} &\in \{1573, 1673, \dots, 2473\}, \\ \text{Contrainte : } \Sigma \text{ [MPa]} &\in \{10, 20, \dots, 100\}. \end{aligned} \quad (2.135)$$

La contrainte imposée est de type compression uniaxiale (essai de fluage) :

$$\text{Uniaxial : } \Sigma = \Sigma (-\mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1). \quad (2.136)$$

Quelques essais de fluage supplémentaires, sous contrainte purement hydrostatique ou purement déviatorique axisymétrique, sont réalisés afin d'ajuster le modèle semianalytique présenté ci-après. Ces simulations supplémentaires ont été effectuées à la température $T = 1973$ K et à un seul niveau de contrainte pour toutes les microstructures générées. Les contraintes purement hydrostatiques ou purement déviatoriques axisymétriques imposées sont de la forme :

$$\begin{aligned} \text{Hydrostatique : } \Sigma &= \Sigma (-\mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_2 - \mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_3), \\ \text{Déviatorique : } \Sigma &= \Sigma \left(-\frac{2}{3} \mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1 + \frac{1}{3} \mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_2 + \frac{1}{3} \mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_3 \right). \end{aligned} \quad (2.137)$$

Des informations détaillées sur les microstructures et les différentes conditions de chargement sont résumées dans le tableau 6 de (Wojtacki *et al.*, 2020) et ne sont pas reprises ici par souci de concision. Il est notable que les calculs sur la plus grande microstructure (micro. 1.4, 2592^3 voxels) ont été effectués avec environ 4 To de mémoire RAM et 1296 cœurs (calculs réalisés sur un super-calculateur du CCRT - Centre de Calcul Recherche et Technologie du CEA).

Le modèle analytique est obtenu par une approche micromécanique. La matrice suit un potentiel en taux de déformation avec deux mécanismes de fluage :

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}} = \frac{\partial \psi}{\partial \boldsymbol{\sigma}}(\boldsymbol{\sigma}), \quad \psi(\boldsymbol{\sigma}) = \psi_1(\boldsymbol{\sigma}) + \psi_n(\boldsymbol{\sigma}), \quad (2.138)$$

avec

$$\psi_1(\boldsymbol{\sigma}) = \frac{1}{2} \mathcal{A} \boldsymbol{\sigma}_{eq}^2, \quad \psi_n(\boldsymbol{\sigma}) = \frac{1}{n+1} \mathcal{B} \boldsymbol{\sigma}_{eq}^{n+1}, \quad (2.139)$$

et

$$\mathcal{A} = \frac{A_1}{d_g^2} e^{-Q_1/(RT)}, \quad \mathcal{B} = B_2 e^{-Q_2/(RT)} + B_3 e^{-Q_3/(RT)}. \quad (2.140)$$

Le taux de déformation effectif dérive d'un potentiel effectif en taux de déformation (Ponte Castañeda et Suquet, 1998) :

$$\dot{\mathbf{E}} = \frac{\partial \Psi}{\partial \Sigma}(\Sigma) \quad \text{avec} \quad \Psi(\Sigma) = \inf_{\boldsymbol{\sigma} \in \bar{\mathcal{S}}(\Sigma)} \langle \psi(\boldsymbol{\sigma}) \rangle, \quad (2.141)$$

où $\bar{\mathcal{S}}(\Sigma)$ désigne l'ensemble des tenseurs de contrainte statiquement admissible, $\text{div} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ dans V , $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}$ anti-périodique avec \mathbf{n} la normale sortante au bord de V et $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = \Sigma$. Les deux potentiels macroscopiques suivants sont ensuite définis :

$$\Psi_1(\Sigma) = \inf_{\boldsymbol{\sigma} \in \bar{\mathcal{S}}(\Sigma)} \langle \psi_1(\boldsymbol{\sigma}) \rangle \quad \text{et} \quad \Psi_2(\Sigma) = \inf_{\boldsymbol{\sigma} \in \bar{\mathcal{S}}(\Sigma)} \langle \psi_2(\boldsymbol{\sigma}) \rangle. \quad (2.142)$$

Les contraintes $\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\sigma}_1, \boldsymbol{\sigma}_n$ sont les champs de contrainte solution des problèmes variationnels (2.141) et (2.142). Le principe variationnel (2.142) donne :

$$\langle \psi_1(\boldsymbol{\sigma}) \rangle \geq \langle \psi_1(\boldsymbol{\sigma}_1) \rangle, \quad \langle \psi_n(\boldsymbol{\sigma}) \rangle \geq \langle \psi_n(\boldsymbol{\sigma}_n) \rangle, \quad (2.143)$$

et donc :

$$\Psi(\boldsymbol{\Sigma}) = \langle \psi_1(\boldsymbol{\sigma}) \rangle + \langle \psi_n(\boldsymbol{\sigma}) \rangle \geq \langle \psi_1(\boldsymbol{\sigma}_1) \rangle + \langle \psi_n(\boldsymbol{\sigma}_n) \rangle = \Psi_1(\boldsymbol{\Sigma}) + \Psi_n(\boldsymbol{\Sigma}). \quad (2.144)$$

Cela montre que $\Psi_1 + \Psi_n$ est une borne inférieure pour le potentiel Ψ . Ensuite, en suivant [Leblond *et al.* \(1994\)](#) et en utilisant le fait que ψ_1 et ψ_n sont des potentiels en "loi puissance", Ψ_1 et Ψ_n peuvent être écrits sous la forme suivante :

$$\Psi_1(\boldsymbol{\Sigma}) = \psi_1(\Lambda_1), \quad \Psi_n(\boldsymbol{\Sigma}) = \psi_n(\Lambda_n), \quad (2.145)$$

où Λ_1 et Λ_n sont des fonctions positives homogènes de degré 1 en $\boldsymbol{\Sigma}$. Pour simplifier les notations, ψ_1 et ψ_n , qui ont été introduits en (2.139) comme des fonctions du tenseur $\boldsymbol{\sigma}$, sont considérées en (2.145) comme des fonctions du scalaire $\boldsymbol{\sigma}_{eq}$. Le scalaire $\Lambda_n(\boldsymbol{\Sigma})$ est obtenu en résolvant cette équation de ([Leblond *et al.*, 1994](#)) (modèle Leblond-Perrin-Suquet, LPS) :

$$\mathcal{F}_{LPS}(Q, M) = 0, \quad (2.146)$$

où

$$\mathcal{F}_{LPS}(Q, M) = \left(1 + \frac{2}{3}f\right)Q^2 + f \left(h(M) + \frac{n+1}{n-1} \frac{1}{h(M)} \right) - 1 - \frac{n-1}{n+1} f^2, \quad (2.147)$$

$$Q = \frac{\Sigma_{eq}}{\Lambda_n}, \quad M = \frac{\Sigma_m}{\Lambda_n}, \quad h(M) = \left(1 + \frac{1}{n} \left(\frac{3|M|}{2} \right)^{\frac{n+1}{n}} \right)^n, \quad (2.148)$$

(attention : h est ici une fonction et non une longueur comme définie précédemment), Λ_1 est déterminé par (2.146) avec $n = 1$ (f est la porosité),

$$\Lambda_1 = \left(\frac{9}{4} \frac{f}{1-f} \Sigma_m^2 + \frac{1 + \frac{2}{3}f}{1-f} \Sigma_{eq}^2 \right)^{1/2}. \quad (2.149)$$

Il n'y a pas d'expression analytique pour Λ_n lorsque $n \neq 1$ et l'équation (2.146) est résolue numériquement avec une méthode de Newton-Raphson. Enfin, le taux de déformation donné par le potentiel macroscopique $\Psi_1 + \Psi_n$ s'écrit :

$$\dot{\boldsymbol{E}} = \left[\psi_1'(\Lambda_1) \frac{\partial \Lambda_1}{\partial \boldsymbol{\Sigma}} + \psi_n'(\Lambda_n) \frac{\partial \Lambda_n}{\partial \boldsymbol{\Sigma}} \right]. \quad (2.150)$$

$\partial \Lambda_n / \partial \boldsymbol{\Sigma}$ est obtenu en dérivant (2.146) par rapport à $\boldsymbol{\Sigma}$:

$$\frac{\partial \Lambda_n}{\partial \boldsymbol{\Sigma}} = \frac{\Lambda_n}{\frac{\partial \mathcal{F}_{LPS}}{\partial M} \Sigma_m + \frac{\partial \mathcal{F}_{LPS}}{\partial Q} \Sigma_{eq}} \left(\frac{1}{3} \frac{\partial \mathcal{F}_{LPS}}{\partial M} \mathbf{i} + \frac{3}{2} \frac{\partial \mathcal{F}_{LPS}}{\partial Q} \frac{\boldsymbol{\Sigma}_d}{\Sigma_{eq}} \right). \quad (2.151)$$

Ce modèle analytique est comparé aux résultats numériques par FFT. Comme en 2.1.4 et 2.1.5, les résultats des simulations numériques par FFT sont comparées au résultat du modèle analytique avec une porosité modifiée f^* , prise ici de la forme qf . Le paramètre q a été identifié à partir des simulations réalisées à 1973 K pour toutes les microstructures (1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 2.1, 2.2, 2.3) sous chargement hydrostatique et déviatorique (2.137), avec

$\Sigma = 30$ MPa (chargement hydrostatique) et $\Sigma = 45$ MPa (chargement déviatorique). Le résultat de cette identification est le suivant :

$$q = 1.28 \text{ lorsque } f = 0.015, \quad q = 1.35 \text{ lorsque } f = 0.045. \quad (2.152)$$

Ces valeurs de q sont ensuite utilisées, sans aucun autre ajustement, pour simuler les essais de compression uniaxiale pour différents niveaux de contrainte et pour différentes températures. Les comparaisons avec les simulations en champs complets sont présentées sur les figures 2.49 et 2.50. L'accord est tout à fait satisfaisant sur toute la gamme de contraintes et de températures étudiées.

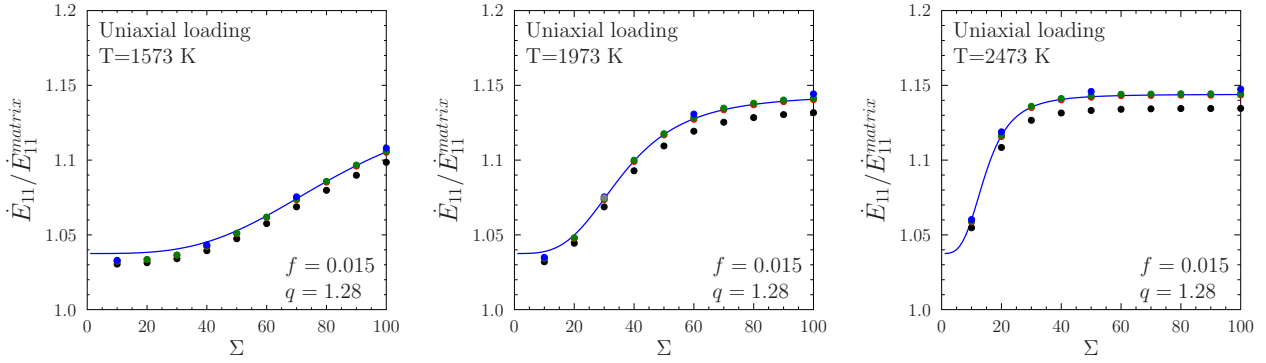


FIGURE 2.49 – Compression uniaxiale. Porosité $f = 0.015$. Comparaison entre le modèle (2.150) (trait plein) et les simulations par FFT (points). Microstructure 1.0 (point noir), 1.1 (rouge), 1.2 (vert), 1.3 (bleu), 1.4 (gris). \dot{E}_{11}^{matrix} est le taux de déformation équivalent dans le matériau dense. Évolution du taux de déformation \dot{E}_{11} normalisé en fonction de la contrainte Σ (Wojtacki *et al.*, 2020).

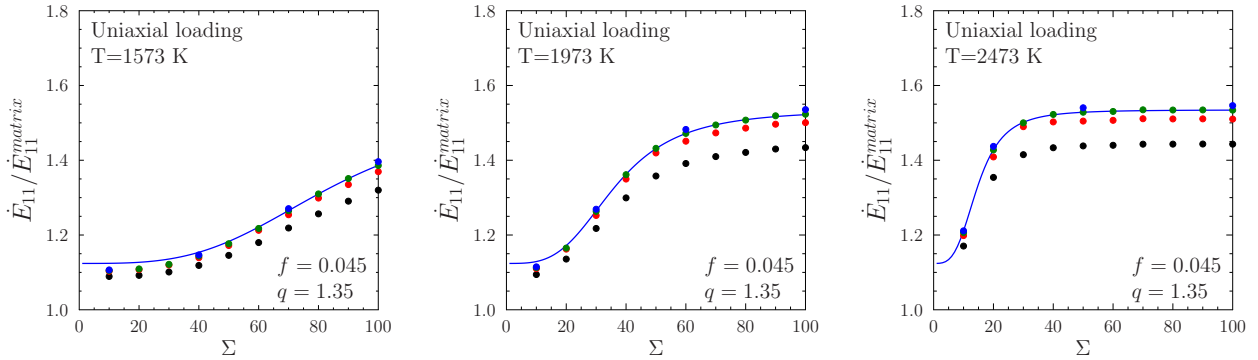


FIGURE 2.50 – Compression uniaxiale. Porosité $f = 0.045$. Comparaison entre le modèle (2.150) (trait plein) et les simulations par FFT (points). Microstructure 2.0 (point noir), 2.1 (rouge), 2.2 (vert), 2.3 (bleu). \dot{E}_{11}^{matrix} est le taux de déformation équivalent dans le matériau dense. Évolution du taux de déformation \dot{E}_{11} normalisé en fonction de la contrainte Σ (Wojtacki *et al.*, 2020).

Il peut être observé sur ces figures que la présence de cavités entraîne une augmentation de la vitesse de déformation effective et donc a tendance à assouplir le matériau. De plus, il ressort que dans le régime de forte contrainte (principalement associé au terme non linéaire de la loi viscoplastique de la matrice), le matériau est plus sensible aux cavités que dans le régime de faible contrainte (principalement associé au terme linéaire de la

loi viscoplastique de la matrice). De plus, il ressort que l'effet des cavités tend à saturer pour une contrainte élevée ou une contrainte faible et que la zone de transition entre ces deux régimes dépend de la température. A partir des simulations par FFT, il est observé que le regroupement des cavités en amas n'a qu'un impact assez limité sur la vitesse de déformation effective de ce matériau poreux. Néanmoins, l'influence globale des cavités sur la vitesse de déformation effective est importante : une vitesse de déformation jusqu'à 50 % plus élevée que dans le cas dense a été obtenue. Cela montre que la porosité joue un rôle important dans le comportement en fluage de ce matériau. Le modèle analytique obtenu est implémentable dans un code de calcul de structure (SCANAIR ou XPER) pour décrire le comportement viscoplastique du combustible MOX MIMAS avec des bulles d'irradiation regroupées en amas.

2.5 Viscoplasticité des matériaux poreux et plasticité cristalline : application au MOX

Les résultats présentés dans cette section ont été obtenus en collaboration avec Luc Portelette, Hervé Moulinec et Mihail Garajeu. Ils sont basés sur (Portelette et al., 2022).

Dans la modélisation de la sous-section précédente 2.4, l'utilisation d'un comportement viscoplastique isotrope pour la matrice entourant les cavités est valable lorsque les cavités sont plus grandes que les grains environnants et lorsque l'orientation cristallographique des grains dans le polycristal environnant est aléatoire (distribution isotrope des orientations). Néanmoins, lorsque les cavités et les grains sont de tailles comparables, l'hypothèse d'isotropie n'est motivée que si l'anisotropie introduite par les grains reste modérée. L'objectif de la présente étude est d'analyser l'effet de l'anisotropie due aux grains entourant les pores sur le comportement viscoplastique effectif du combustible MOX MIMAS (en fluage stationnaire). Le cas particulier de pores et de grains de tailles similaires est étudié. Le comportement anisotrope des grains est modélisé par le modèle de comportement en plasticité cristalline de Portelette et al. (2018). Contrairement à l'étude précédente (Wojtacki et al., 2020), où des simulations avec plusieurs amas poreux plongés dans une matrice ont été effectuées, ici, les simulations ne sont réalisées que sur des microstructures représentatives d'amas poreux uniquement.

Les gaz de fission exercent une pression interne à l'intérieur des bulles, ce qui tend à arrondir leur forme. C'est pourquoi, en première approximation pour la modélisation, il peut être considéré que les cavités sont de forme sphérique. Cependant, cela reste une approximation et des écarts par rapport à la sphéricité des bulles sont tout à fait possibles. Par conséquent, deux formes distinctes de pores sont considérées (sphérique et polyédrique) dans cette étude. Cela permet d'estimer l'effet de la forme des pores sur le résultat.

Une campagne de simulations par FFT est réalisée sur des polycristaux poreux.

Noirot et al. (2008) montrent que, dans les amas riches en Pu situés près de la périphérie de la pastille, les bulles et les grains peuvent être de tailles similaires. Le taux de combustion local estimé est d'environ 100 GWj/t dans cette zone, ce qui correspond à une fraction volumique maximale de pores dans les amas (notée ici f_p) d'environ 15 %. Par conséquent, les simulations ont été effectuées sur des polycristaux dont la porosité varie de 0 (cas dense) à 15 %, par pas de 5 %.

Pour identifier l'effet potentiel de la taille relative des pores par rapport à la taille des grains, deux cas différents ont été traités :

- le diamètre des pores est approximativement égal aux diamètres des grains, $d_p \approx d_g$,
- le diamètre des pores est approximativement deux fois plus grand que le diamètre des grains, $d_p \approx 2 d_g$.

Un unique pavage de type Poisson-Voronoi est considéré pour le polycristal avec un unique tirage des orientations des grains. Une étude de convergence au nombre de grains et au nombre de voxels a été effectuée et a conduit à considérer $n_s = 1000$ grains et 500^3 voxels (voir Annexe A de (Portelette *et al.*, 2022)).

Le volume moyen V_g des grains dans le pavage de Voronoi est donné par V/n_s , où $V = 1$ est le volume de la cellule unitaire. Le diamètre moyen des grains d_g , défini comme le diamètre d'une sphère équivalente de même volume V_g , est donc donné par $(6 V_g/\pi)^{1/3}$.

Sans entrer dans les détails, les principaux types de microstructures suivants sont générés :

- Cavités sphériques : des sphères non interpénétrables et monodispersées en taille sont placées de manière aléatoire dans le polycristal dense. Les microstructures obtenues sont appelées "microstructures de type Voronoi avec cavités sphériques".
- Cavités polyédriques : pour générer des microstructures avec des cavités polyédriques, certains grains particuliers du polycristal sont simplement considérés comme des vides et sont appelés "grains vides" dans la suite. Un nombre donné de grains vides est simplement sélectionné de façon aléatoire parmi les grains du polycristal dense initial. Cette procédure ne peut être utilisée que dans le cas où les tailles de grains et de pores sont identiques ($d_p \approx d_g$). Cette méthode ne permet pas de contrôler la porosité. Les microstructures obtenues sont appelées "microstructures de type Voronoi à cavités polyédriques".
- Cavités polyédriques : afin d'obtenir des microstructures avec une distribution des centres des cavités proche de celle des microstructures de type Voronoi avec cavités sphériques, deux étapes sont définies. Premièrement, les grains du polycristal dense initial qui contiennent les centres des cavités sphériques sont sélectionnés. Les germes de ces grains sont les germes des grains vides. Ensuite, un pavage de type Laguerre est effectué. La procédure consiste à fixer le temps de nucléation des germes des grains vides à 0 et le temps de nucléation des autres grains à 1 et à ajuster le taux de croissance des germes pour atteindre la porosité voulue. Les microstructures obtenues sont appelées "microstructures de type Laguerre à cavités polyédriques".

Des exemples de microstructures sont donnés sur la figure 2.51 .

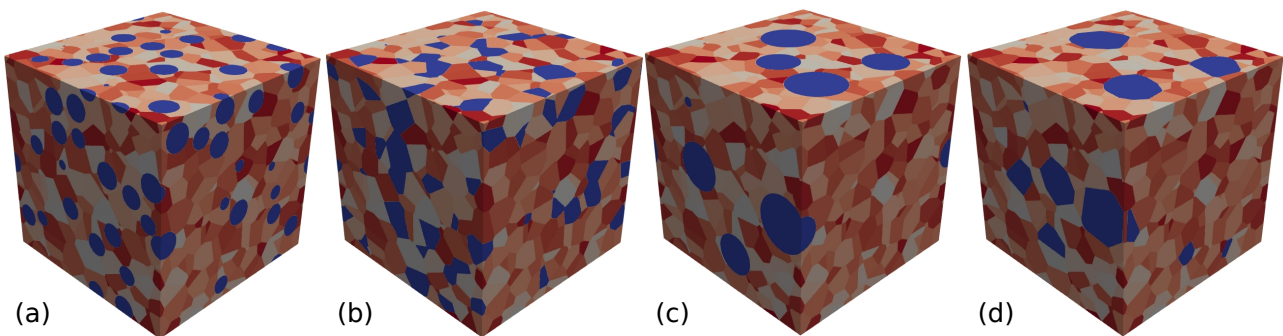


FIGURE 2.51 – Microstructures polycristallines avec 15 % de porosité (cavités en bleu) (a) cavités sphériques $d_p = d_g$, (b) cavités polyédrales $d_p \approx d_g$, (c) cavités sphériques $d_p \approx 2 d_g$, (d) cavités polyédrales $d_p \approx 2 d_g$ (Portelette *et al.*, 2022).

En l'absence des résultats expérimentaux sur monocristaux disponibles pour le combustible MOX, le modèle de plasticité cristalline de Portelette *et al.* (2018), initialement proposé pour les monocristaux d' UO_2 , est utilisé pour décrire le comportement des grains. Cette hypothèse est justifiée par le fait que les combustibles MOX et UO_2 présentent un comportement viscoplastique effectif assez similaire et que le PuO_2 et l' UO_2 ont la même

structure cristalline. Les plans cristallographiques sont identifiés par leurs vecteurs normaux $\mathbf{n}^{(s)}$. Pendant le processus de glissement des dislocations, une déformation de cisaillement est produite le long des directions $\mathbf{m}^{(s)}$ colinéaires aux vecteurs de Burgers de type $1/2\langle 110 \rangle$. Chaque paire $[\mathbf{m}^{(s)}](\mathbf{n}^{(s)})$ définit un système de glissement. Dans un réseau de fluorine, il existe trois familles de systèmes de glissement, nommées familles *I*, *II* et *III* et correspondant respectivement aux plans de glissement $\{100\}$, $\{110\}$ et $\{111\}$. Il y a donc 24 systèmes de glissement dont 6 systèmes pour la famille *I*, 6 systèmes pour la famille *II* et 12 systèmes pour la famille *III*. Dans l' UO_2 , le rôle de la troisième famille semble moins important que les autres et reste encore mal compris : il n'est pas considéré dans cette étude (voir (Portelette *et al.*, 2018)). Le tenseur de contrainte de Cauchy $\boldsymbol{\sigma}$ est lié au tenseur de déformation élastique $\boldsymbol{\varepsilon}^e$ par l'intermédiaire du tenseur de rigidité \mathbf{C} :

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}^e. \quad (2.153)$$

Le tenseur de déformation élastique $\boldsymbol{\varepsilon}^e$ est obtenu par différence entre le tenseur de déformation totale, $\boldsymbol{\varepsilon}$, et le tenseur de déformation viscoplastique, $\boldsymbol{\varepsilon}^{vp}$:

$$\boldsymbol{\varepsilon}^e = \boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^{vp}. \quad (2.154)$$

Le taux de déformation viscoplastique est la somme des taux de glissement, $\dot{\gamma}^{(s)}$, de chaque système s , portés par les tenseurs de Schmid $\boldsymbol{\mu}^{(s)}$:

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{vp} = \sum_{s=1}^{12} \dot{\gamma}^{(s)} \boldsymbol{\mu}^{(s)} = \sum_{s=1}^6 \dot{\gamma}^{(s)} \boldsymbol{\mu}^{(s)} + \sum_{s=7}^{12} \dot{\gamma}^{(s)} \boldsymbol{\mu}^{(s)}, \quad (2.155)$$

$$\boldsymbol{\mu}^{(s)} = \frac{1}{2} (\mathbf{n}^{(s)} \otimes \mathbf{m}^{(s)} + \mathbf{m}^{(s)} \otimes \mathbf{n}^{(s)}). \quad (2.156)$$

L'évolution du taux de glissement selon chaque système de glissement s , est donnée par l'équation (2.157). Pour tenir compte de la dépendance à la température, T , une énergie d'activation, ΔH_0^i , est définie pour chaque famille de glissement i . Pour chaque famille de systèmes de glissement, un pré-facteur $\dot{\gamma}_0^i$ est introduit comme paramètre, ainsi qu'une contrainte de cisaillement résolue de référence τ_0^i :

$$\dot{\gamma}^{(s)} = \dot{\gamma}_0^i \exp\left(-\frac{\Delta H_0^i}{k_b T}\right) \left(\cosh\left(\frac{\tau^{(s)}}{\tau_0^i}\right) - 1\right) \text{sign}(\tau^{(s)}). \quad (2.157)$$

où $k_b = 8.618 \cdot 10^{-5} \text{ eV.K}^{-1}$ est la constante de Boltzmann. La contrainte de cisaillement résolue $\tau^{(s)}$ est définie comme la projection de la contrainte sur le système de glissement s :

$$\tau^{(s)} = \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\mu}^{(s)}. \quad (2.158)$$

Pour chaque famille de glissement, les trois paramètres ($\dot{\gamma}_0^i$, ΔH_0^i , τ_0^i) sont ajustés afin de correspondre aux expériences de Routbort *et al.* (1972) menées sur du combustible MOX dans le régime de mouvement des dislocations (voir Annexe C de Portelette *et al.* (2022) pour plus de détails). Les paramètres obtenus sont donnés dans le tableau 2.6.

	$1/2\langle 110 \rangle\{100\}$	$1/2\langle 110 \rangle\{110\}$
$\dot{\gamma}_0$ [s^{-1}]	5.22×10^8	1.52×10^8
ΔH_0 [eV]	5.71	5.22
τ_0 [MPa]	4.86	17.2

TABLE 2.6 – Parameters of the crystal plasticity model.

Les équations du modèle de comportement ont été implémentées dans CraFT (schéma implicite pour l'intégration en temps). La méthode dite "de base" est utilisée pour les simulations. La plage de température étudiée s'étend de 1400°C à 1700°C et celle du taux de déformation de 10^{-7} s^{-1} à 10^{-4} s^{-1} . Un chargement en direction de contrainte macroscopique axisymétrique est imposé :

$$\boldsymbol{\Sigma}^0 = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & c^0 & 0 \\ 0 & 0 & c^0 \end{bmatrix} \quad (2.159)$$

où, c^0 est un scalaire entre -1 et $0,5$ pour contrôler la triaxialité de la contrainte. Le chargement est appliqué jusqu'à ce que la déformation $|E| = |\boldsymbol{E} : \boldsymbol{\Sigma}^0|$ atteigne 1.5 %. La contrainte macroscopique obtenue à la fin du calcul est désignée par $\bar{\boldsymbol{\Sigma}}$. Le cas de la compression uniaxiale est tout d'abord étudié.

La figure 2.52 (a) montre l'évolution de la contrainte $|\bar{\Sigma}_{11}|$ en fonction de la porosité f_p pour différentes valeurs de température et de taux de déformation. Des microstructures avec des pores et des grains de taille similaire sont considérées. Des microstructures de type Voronoï avec cavités sphériques, des microstructures de type Laguerre avec cavités polyédriques et des microstructures de type Voronoï avec cavités polyédriques sont considérées. Une évolution quasi-linéaire de la contrainte en fonction de la porosité est observée. Les lignes en pointillés correspondent à des fonctions linéaires (ajustées par régression par la méthode des moindres carrés) : elles ont été ajoutées pour mettre en évidence les différences entre les résultats obtenus sur les microstructures avec cavités sphériques et sur les microstructures avec cavités polyédriques. Il est observé que la pente est la plus forte pour la température la plus basse et pour le taux de déformation le plus élevé. Il apparaît aussi que les simulations avec cavités polyédriques induisent systématiquement plus de souplesse que les simulations avec cavités sphériques.

Les résultats pour les microstructures avec $d_p \approx d_g$ et $d_p \approx 2d_g$ sont présentés pour 1400°C et 10^{-7} s^{-1} sur la figure 2.52 (b). Premièrement, il apparaît que les écarts de contrainte dus aux différents tirages des microstructures restent faibles. Les écarts semblent légèrement plus élevés pour les microstructures avec cavités polyédriques que pour les microstructures avec cavités sphériques. De plus, les écarts obtenus à partir des différents tirages pour un type de microstructure donné augmentent avec la taille relative des pores. En effet, l'augmentation de la taille relative des pores tend à diminuer le nombre de pores dans la cellule unitaire, ce qui induit une baisse de représentativité. Deuxièmement, les résultats obtenus à partir des microstructures de type Laguerre et de type Voronoï avec des cavités polyédriques sont relativement alignés, ce qui montre une certaine équivalence entre les deux approches. Il est rappelé que la porosité n'est pas contrôlée pour les microstructures de type Voronoï avec des cavités polyédriques. Ainsi, sur cette figure, les points associés à ces microstructures ont des porosités légèrement dispersées par rapport aux porosités souhaitées (5, 10 ou 15 %). Troisièmement, il est observé que lorsque la taille relative des cavités augmente, les contraintes obtenues à partir des microstructures à cavités polyédriques tendent vers les contraintes obtenues à partir des microstructures à cavités sphériques. Au final, on observe que l'effet de la taille relative des cavités par rapport à la taille des grains est négligeable pour les microstructures à cavités sphériques (moins de 1 MPa d'écart absolu et moins de 1 % d'écart relatif). Il semble être plus prononcé pour les microstructures avec des cavités polyédriques (écart relatif maximal d'environ 5 %).

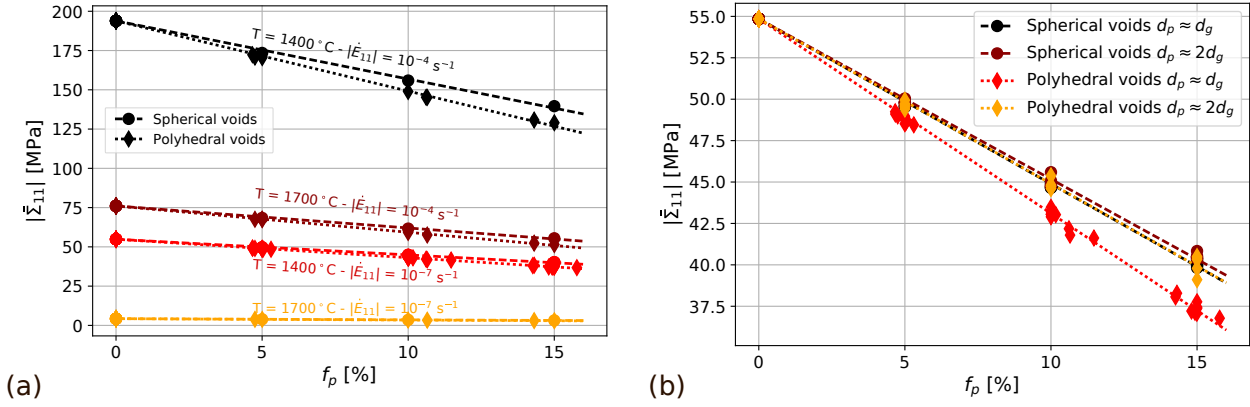


FIGURE 2.52 – Évolution de la contrainte en fonction de la porosité pour des microstructures de type Voronoï avec cavités sphériques, des microstructures de type Laguerre avec cavités polyédriques et des microstructures de type Voronoï avec cavités polyédriques, soumises à une compression uniaxiale (les lignes pointillées sont des fonctions de régression linéaire). (a) $d_p \approx d_g$ pour différentes température et taux de déformation, (b) $d_p \approx d_g$ et $d_p \approx 2d_g$ pour $T = 1400^\circ\text{C}$ et $|\dot{E}_{11}| = 10^{-7} \text{ s}^{-1}$ (Portelette *et al.*, 2022).

La figure 2.53 montre la contrainte macroscopique équivalente en fonction de la contrainte macroscopique hydrostatique obtenues en fin de simulation pour différentes triaxialités de contrainte macroscopique. Des microstructures de type Voronoï avec cavités sphériques et des microstructures de type Laguerre avec cavités polyédriques sont considérées.

Sur la figure 2.53 (a), il est observé que plus la triaxialité des contraintes est élevée (en valeur absolue), plus la différence entre les contraintes obtenues avec les deux types de microstructures est élevée. Sur la figure 2.53 (b), il est observé que l'adoucissement déjà observé en compression uniaxiale et dû à la porosité se retrouve pour d'autres conditions de chargement et qu'il augmente avec la triaxialité de la contrainte. Sur la figure 2.53 (c), il est observé que l'effet de la taille relative des pores reste faible pour les microstructures avec des cavités sphériques, pour toutes les triaxialités de contrainte étudiées, ce qui indique un effet mineur de la cristallinité et de l'anisotropie des grains sur la réponse viscoplastique effective. Pour les microstructures avec des cavités polyédriques, il est plus prononcé et il augmente avec la triaxialité de la contrainte. De plus, lorsque $d_p \approx 2d_g$, le comportement des microstructures avec des cavités polyédriques tend vers celui des microstructures avec des cavités sphériques. Dans le cas des cavités polyédriques, l'augmentation de la taille relative des cavités conduit à des cavités globalement plus sphériques. Cela peut expliquer pourquoi les courbes de la figure 2.53 (c) correspondant aux cavités sphériques et aux cavités polyédriques avec $d_p \approx 2d_g$ sont proches les unes des autres. Les différences observées entre la courbe correspondant au polycristal à cavités polyédriques avec $d_p \approx d_g$, et les autres courbes, notamment pour une forte triaxialité de contrainte, sont plus difficiles à expliquer. La discussion dans (Portelette *et al.*, 2022) tend à indiquer que cet effet est dû à la forme même des cavités, qui conduit à des distributions de champs locaux de contrainte et de déformation très différents.

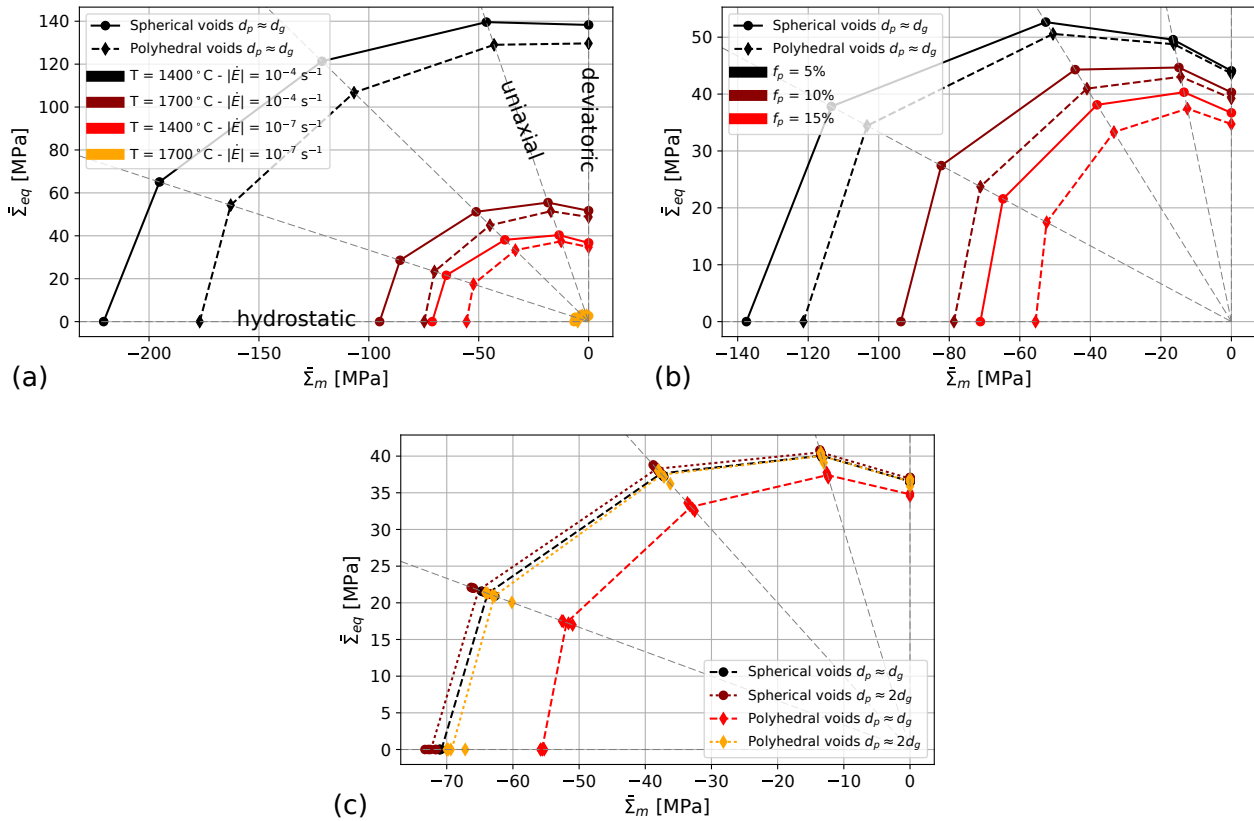


FIGURE 2.53 – Contrainte équivalente en fonction de la contrainte hydrostatique pour des microstructures de type Voronoï avec cavités sphériques et des microstructures de type Laguerre avec cavités polyédriques (les lignes en pointillés sont des interpolations entre les valeurs moyennes obtenues pour chaque taux de triaxialité) : (a) pour différentes températures et taux de déformation avec $d_p \approx d_g$ et $f_p = 15\%$, (b) pour différentes porosités avec $d_p \approx d_g$, $T = 1400^\circ\text{C}$, et $|\dot{E}| = 10^{-7} \text{ s}^{-1}$, (c) pour $d_p \approx d_g$ et $d_p \approx 2d_g$ avec $f_p = 15\%$, $T = 1400^\circ\text{C}$, et $|\dot{E}| = 10^{-7} \text{ s}^{-1}$ (Portelette *et al.*, 2022).

D'après la figure 2.52, il semble que le cas des cavités polyédriques et $d_p \approx d_g$ peut être déduit du cas des cavités sphériques en multipliant la porosité par une simple constante (notée q). Cela peut servir à étendre le modèle analytique développé dans (Wojtacki *et al.*, 2020) (et présenté en 2.4) pour les cavités sphériques aux cavités polyédriques lorsque la taille des cavités est similaire à celle des grains. L'identification de la valeur de q n'est pas reprise ici par souci de concision. Elle conduit à la valeur de $q = 1.3$ et les résultats obtenus sont montrés sur la figure 2.54. Ainsi, multiplier la porosité par q dans le modèle analytique donne une estimation lorsque les pores sont polyédriques avec une taille proche de celle des grains.

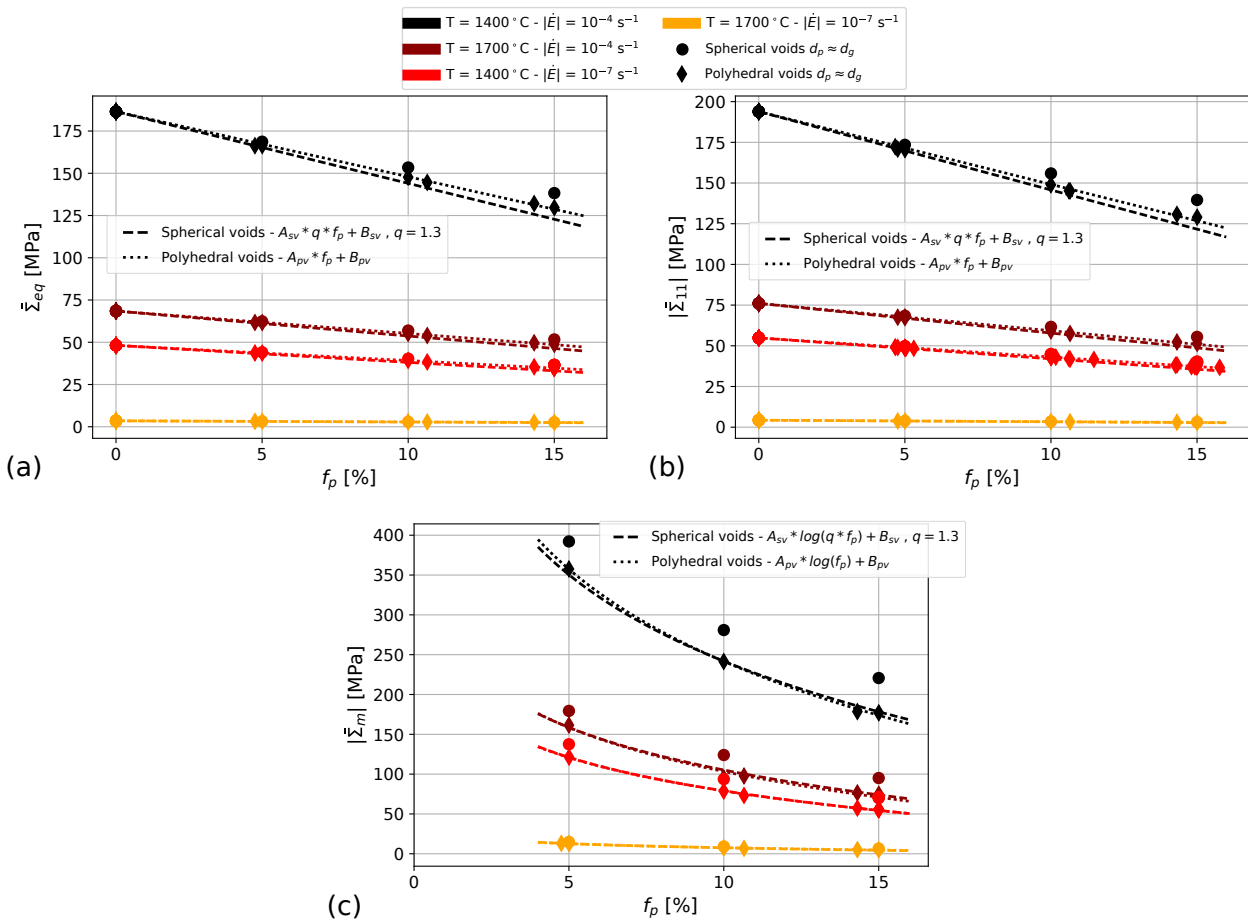


FIGURE 2.54 – Contrainte en fonction de la porosité pour différentes températures et taux de déformation et $d_p \approx d_g$ pour des microstructures de type Voronoï avec cavités sphériques, des microstructures de type Laguerre avec cavités polyédriques et des microstructures de type Voronoï avec cavités polyédriques sous chargement (a) purement déviatorique, (b) de compression uniaxiale, (c) purement hydrostatique en compression.

Chapitre 3

Les internes de cuve en aciers inoxydables austénitiques

Ce travail s'inscrit dans le cadre des recherches menées à l'IRSN concernant le vieillissement des internes de cuve dans les REP. Il est rappelé que le terme "vieillessement" est relatif à l'ensemble des mécanismes liés au temps qui tendent à faire perdre aux matériels leurs caractéristiques initiales (Hutin, 2006). Les internes de cuve (voir figure 3.1) correspondent à l'ensemble des matériels présents à l'intérieur de la cuve, à l'exception des assemblages de combustible avec leurs grappes de commande et des dispositifs d'instrumentation (Hutin, 2006). Ils assurent des fonctions essentielles comme le support du cœur, le guidage des grappes de commande et de l'instrumentation, la canalisation et distribution de l'eau de refroidissement dans le cœur et éventuellement (si équipé d'un écran thermique) la protection de la paroi de la cuve contre le rayonnement neutronique (Boiron et Monnier, 1995). Ils sont principalement composés d'aciers inoxydables austénitiques de nuances 304 et 304L hypereutectés (SA pour "Solution Annealed") ou de nuances 316 et 316L écrouis à froid (CW pour "Cold Worked", L signifiant Low carbon) (Boiron et Monnier, 1995). Les aciers de type 304 sont principalement utilisés pour les pièces massives, tandis que les aciers de type 316 sont principalement utilisés pour les éléments de visserie (Pokor, 2002; Zouari, 2012).

Des estimations des conditions d'environnement (en terme de température, fluence, dose) pour les internes de cuve peuvent être trouvées dans la littérature (voir par exemple (IAEA, 1999)). Il ressort que pour un interne donné, les conditions d'environnement dépendent de sa position dans le cœur. Les internes de cuve dits inférieurs (dont l'enveloppe de cœur, la plaque inférieure de cœur, les plaques de cloisonnement, le supportage secondaire et éventuellement l'écran thermique, (Boiron et Monnier, 1995), voir figure 3.1) ont des températures estimées comprises entre 280°C et 380°C et leur dose maximale d'irradiation en 40 ans est évaluée à environ 100 dpa (déplacement par atomes) (Han, 2012). De façon générale, les conditions d'environnement de ces internes en REP peuvent induire une modification de la microstructure et microchimie de ces aciers, qui fait évoluer leurs propriétés mécaniques (Chopra et Rao, 2011). De plus, ces conditions peuvent varier à l'intérieur même des composants (voir l'exemple donné sur la figure 3.2). Ainsi, les conditions d'environnement et la modification des propriétés mécaniques qui en résulte dépendent de la position dans le cœur des composants et aussi du point considéré à l'intérieur même des composants qui deviennent hétérogènes en termes de propriétés mécaniques. Cela justifie la recherche de modèles pour évaluer l'influence d'une utilisation prolongée de ces internes en réacteur sur leurs propriétés mécaniques.

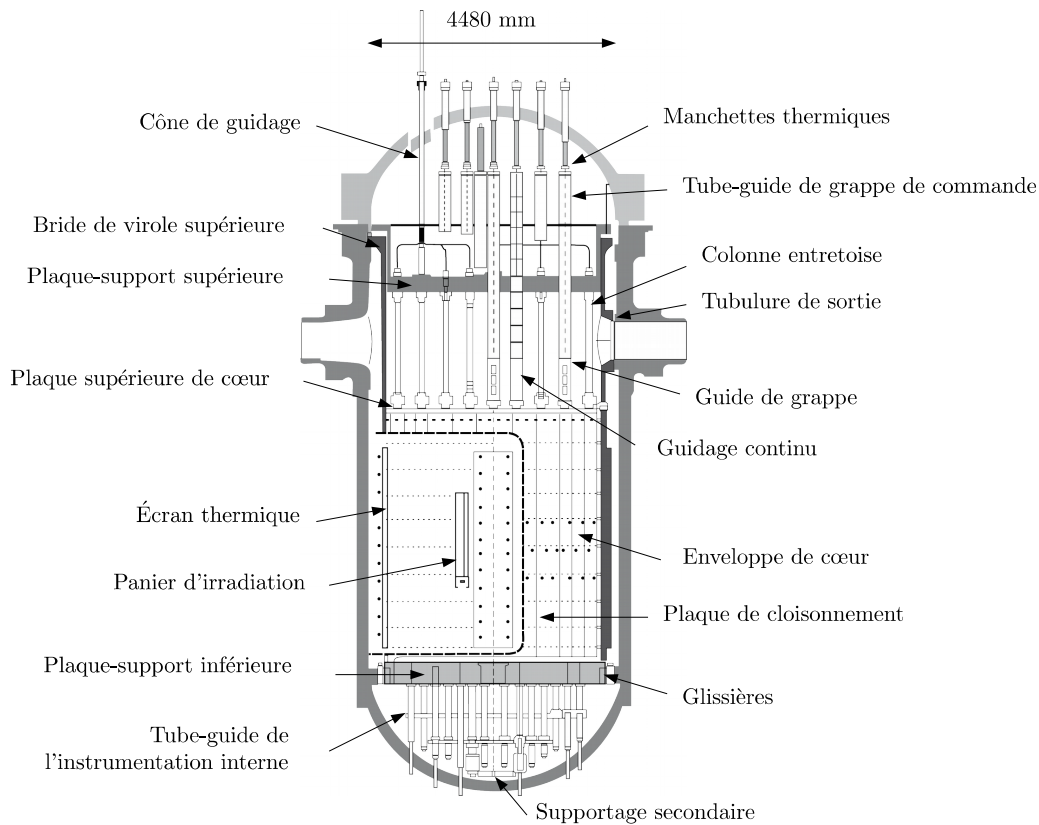


FIGURE 3.1 – Vue générale des équipements des internes de cuve dans un REP de type 1450 MW. Représentation de S. Joëssel dans (Joëssel, 2018) d'après (Boiron et Monnier, 1995).

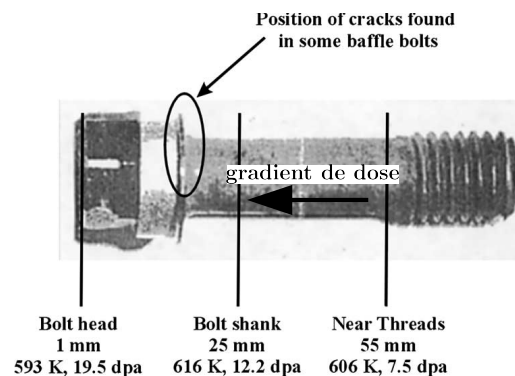


FIGURE 3.2 – Vis utilisée dans l'assemblage entre une plaque de cloisonnement et un renfort extraite du REP de Tihange 1 (Belgique) en acier inoxydable austénitique de nuance CW316 : estimation d'un gradient de dose et de température le long de la vis (d'après (Edwards *et al.*, 2003)).

Les effets d'irradiation correspondent à un des mécanismes de vieillissement pouvant affecter les internes de cuve. Ils comprennent le durcissement sous irradiation et le gonflement sous irradiation de ces aciers. L'irradiation entraîne un durcissement et une diminution de l'érouissage de ces matériaux, comme cela est illustré sur la figure 3.3. D'après l'analyse bibliographique de Garner (2012), les mécanismes de durcissement semblent saturer pour une dose inférieure à 10 dpa.

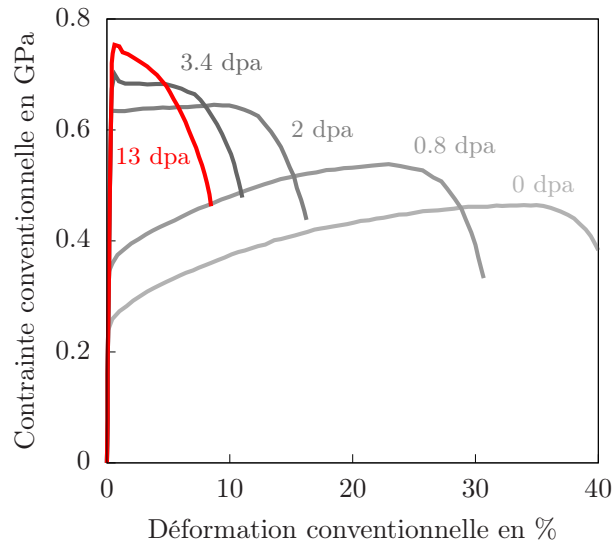


FIGURE 3.3 – Courbes de traction sur des aciers 304L hypertrempés vierges ou irradiés à 330°C dans le réacteur expérimental OSIRIS (France), déformés à la vitesse de $3 \cdot 10^{-4}$ /s à la température de 330°C, essais de Pokor présentés dans (Han, 2012). La dose d’irradiation est indiquée en dpa (Joëssel, 2018).

Concernant le gonflement d’irradiation, de nombreuses observations d’augmentation de volume d’aciers austénitiques sous l’effet de l’irradiation dans les réacteurs à neutrons rapides ont été rapportées dans la littérature (voir l’analyse bibliographique de Garner (2012)). Ce phénomène de gonflement est sensible à plusieurs paramètres dont la composition chimique, les traitements thermique et mécanique, la température d’irradiation, la dose, le taux de dose, le spectre d’irradiation. Il ressort que le gonflement d’irradiation est globalement un mécanisme à seuil, avec une période d’incubation, suivie d’un taux de croissance stable de l’ordre de 1% par dpa. L’analyse bibliographique de Garner *et al.* (2004) indique la potentialité d’un gonflement pour certains internes en conditions REP et pour des doses élevées.

Plusieurs modèles ont été récemment développés pour décrire le comportement viscoplastique des aciers inoxydables austénitiques irradiés (Han, 2012), (Monnet et Mai, 2019) (notamment développé dans le cadre des projets européens PERFECT, PERFORM60 et SOTERIA). Ces modèles se placent à l’échelle polycristalline (ces aciers sont des matériaux polycristallins, voir figure 3.4)) et utilisent des modèles de plasticité cristalline pour décrire le comportement des grains. Ces modèles sont particulièrement intéressants car ils prennent en compte plusieurs types de défauts d’irradiation à l’échelle microscopique (modifications microstructurales dues à l’irradiation) et leurs évolutions avec le chargement mécanique.

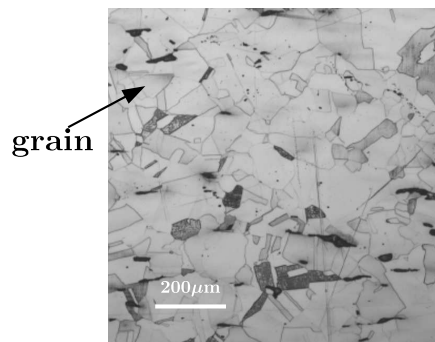


FIGURE 3.4 – Structure polycristalline d’un acier inoxydable austénitique de nuance 316L (d’après (Ming *et al.*, 2016)).

Les modifications microstructurales dues à l'irradiation sont extrêmement variées et entraînent notamment le durcissement et le gonflement des aciers inoxydables austénitiques à l'échelle macroscopique. Les effets de l'irradiation à l'échelle microscopique ont été synthétisés dans l'analyse bibliographique de la thèse de [Joëssel \(2018\)](#). Le lecteur est invité à consulter ce document et les références associées pour plus d'informations. Néanmoins, les éléments suivants sont rappelés :

- pour les aciers inoxydables austénitiques de nuances SA304L et CW316, les expériences indiquées par [Pokor *et al.* \(2004\)](#) dans le réacteur à neutrons rapides BOR-60 (Russie) à une température de 320°C (proche de celles en conditions REP) montrent une diminution de la densité des dislocations avec la dose d'irradiation jusqu'à une valeur seuil. Les dislocations sont observables au microscope électronique à transmission (MET) (voir figure 3.5). À température de fonctionnement des internes et sous chargement mécanique, les dislocations sont mobiles : elles se déplacent et propagent la plasticité dans le matériau à l'échelle macroscopique.
- des boucles de dislocations, appelées boucles de Frank, sont créées durant l'irradiation (voir figure 3.6). Ces boucles de Frank peuvent s'observer pour une dose d'irradiation inférieure à 1 dpa (voir par exemple les résultats de [Pokor *et al.* \(2004\)](#) sur un acier de nuance SA304L irradié à 0.8 dpa à la température de 330°C dans le réacteur expérimental OSIRIS). Leur densité et leur taille augmentent avec la dose et une tendance à la saturation est observée pour une dose autour de 5 à 10 dpa (voir ([Bruemmer *et al.*, 1999](#)) sur des aciers de nuances 304 et 316 irradiés dans un réacteur à eau légère). À température de fonctionnement des internes et sous chargement mécanique, les boucles de dislocations sont des obstacles aux dislocations mobiles : elles entraînent un durcissement du matériau à l'échelle macroscopique.
- l'apparition de cavités dans la microstructure impliquant du gonflement à l'échelle macroscopique dépend de nombreux paramètres comme la composition chimique et les traitements thermomécaniques du matériau, la température, la dose d'irradiation, le spectre d'irradiation, le taux de dose d'irradiation ([Garner *et al.*, 2004](#)). La présence d'hélium favorise leur nucléation et leur stabilisation : d'après [Han \(2012\)](#), les atomes d'hélium (obtenus par transmutation) jouent un rôle important comme catalyseur pour le regroupement des lacunes qui migrent par diffusion dans le matériau, ce qui est considéré comme une source de germination de cavités. Les cavités dites vides croissent par absorption de lacunes. Dans un premier temps, elles participent au durcissement du matériau, puis, lorsqu'elles sont suffisamment nombreuses et de taille suffisamment importante, elles ont pour effet de détériorer les propriétés élastiques du matériau (diminution des modules élastiques), accompagné d'une perte de résistance et d'une fragilisation ([Garner, 2012](#)). De nombreuses observations de cavités ont été effectuées sur des aciers inoxydables irradiés dans des réacteurs à neutrons rapides (voir figure 3.7). Dans le réacteur à neutrons rapides BOR-60 (Russie), des niveaux de gonflement importants ont été mesurés sur un acier inoxydable austénitique russe (gonflement estimé jusqu'à 30% environ par mesure de densité ([Neustroev et Garner, 2008](#))).

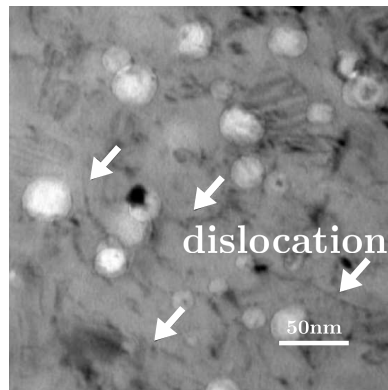


FIGURE 3.5 – Dislocations dans un acier de nuance 304L hypertempé irradié à 36 dpa à 390°C dans le réacteur à neutrons rapides PHENIX (France) (d’après (Renault *et al.*, 2012)).

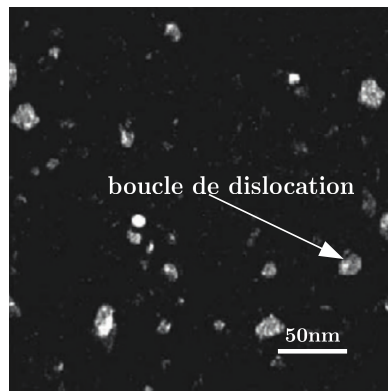


FIGURE 3.6 – Boucles de dislocations dans un acier CW316 d’interne irradié à 33 dpa en REP à la température de 290°C (d’après (Edwards *et al.*, 2009)).

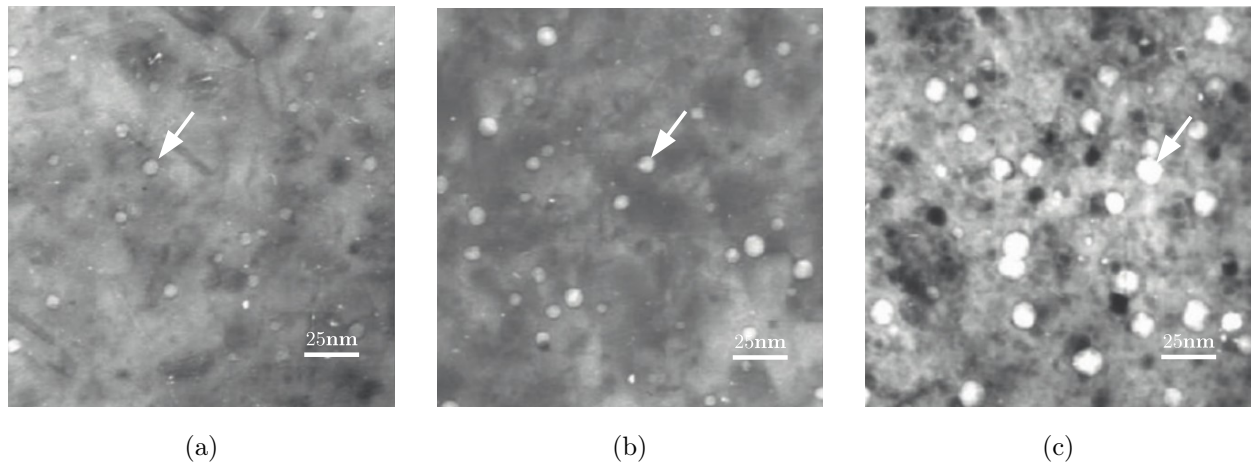


FIGURE 3.7 – Cavités dans un acier 12X18H9 irradié pendant 27 ans à 320 – 330°C dans le réacteur à neutrons rapides BOR-60 (Russie) (d’après (Garner *et al.*, 2006)). (a) : 3 dpa. (b) : 6.5 dpa. (c) : 22 dpa.

L’objectif appliqué du travail de thèse de Joëssel (2018) et de la contribution IRSN-LMA au projet européen SOTERIA (Vincent *et al.*, 2020) est de proposer un modèle micromécanique pour quantifier simultanément les effets du durcissement d’irradiation et de la présence potentielle de cavités intragranulaires correspondant à de forts niveaux d’irradiation sur le comportement élasto-plastique. Ni la rupture, ni les fortes déformations avec endommagement (changement de forme des cavités et de la porosité) ne sont étudiées dans ce travail. Le

modèle doit être capable de décrire l'évolution des propriétés élastiques (raideur) et de la contrainte maximale (résistance) en fonction de la porosité. Un fort niveau d'irradiation correspond ici à une dose supérieure à 13 dpa, lorsqu'il peut être supposé qu'il y a eu à la fois saturation des mécanismes de durcissement dus à l'irradiation et présence de larges cavités intragranulaires (gonflement).

Un modèle pour décrire le comportement élasto-viscoplastique d'un polycristal poreux (avec cavités intragranulaires) est recherché. Afin d'obtenir un modèle analytique qui soit aisément intégrable dans un code de calcul de structures, plusieurs hypothèses sont formulées. Les aciers inoxydables austénitiques sont considérés comme des agrégats aléatoires de monocristaux, ou grains, à interface parfaite entre grains, contenant des micro-cavités sphériques. Uniquement des cavités de grande taille, dus à des niveaux d'irradiation élevés, sont considérées dans cette étude. Les grains sont supposés être de taille similaire inférieure à la taille de l'agrégat et les cavités sont supposées être plus petites que les grains. Le modèle suppose que les agrégats ne sont pas texturés et que la dispersion des pores est isotrope à l'intérieur des grains. Cette hypothèse est justifiée par une observation de [Renault *et al.* \(2012\)](#) sur un acier austénitique de nuance SA304L irradié, dans lequel la distribution spatiale des cavités s'est avérée être plutôt homogène. La modélisation globale du problème est schématisée sur la figure 3.8.

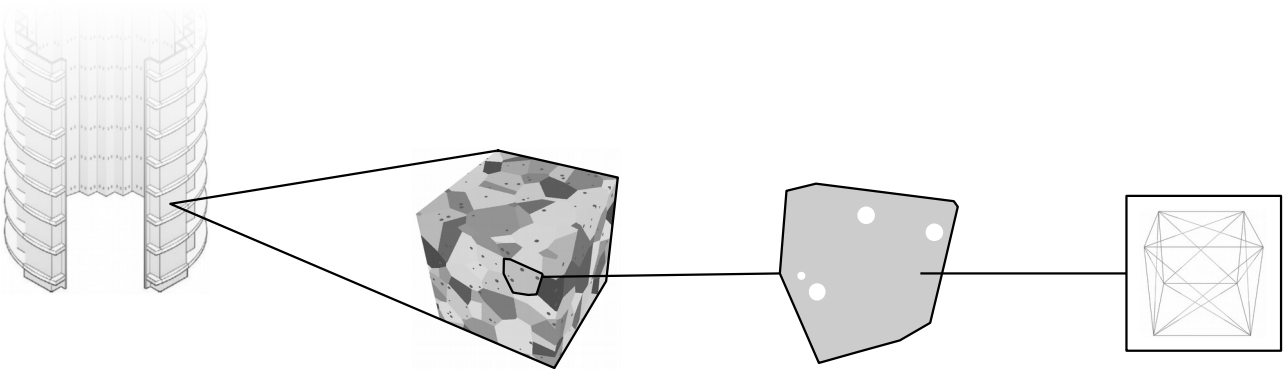


FIGURE 3.8 – Représentation schématique de la modélisation du problème physique. De gauche à droite : composant en acier inoxydable austénitique fortement irradié, polycristal poreux (grains répartis et orientés de manière aléatoire), monocristal poreux (cavités réparties de manière aléatoire) et structure cristalline (agencement du réseau atomique de type cubique à faces centrées) ([Joëssel, 2018](#)).

La section 3.1 présente le travail réalisé sur le comportement viscoplastique des polycristaux poreux. Une démarche de double changement d'échelles (illustrée sur la figure 3.9) est mise en œuvre. Dans une première étape, le comportement viscoplastique d'un monocristal poreux où les cavités sphériques sont distribuées de manière uniforme est recherché. La deuxième étape a pour objectif d'obtenir un modèle pour un polycristal où les grains sont distribués de manière aléatoire et suivent le modèle de comportement viscoplastique pour monocristal poreux élaboré à la première étape.

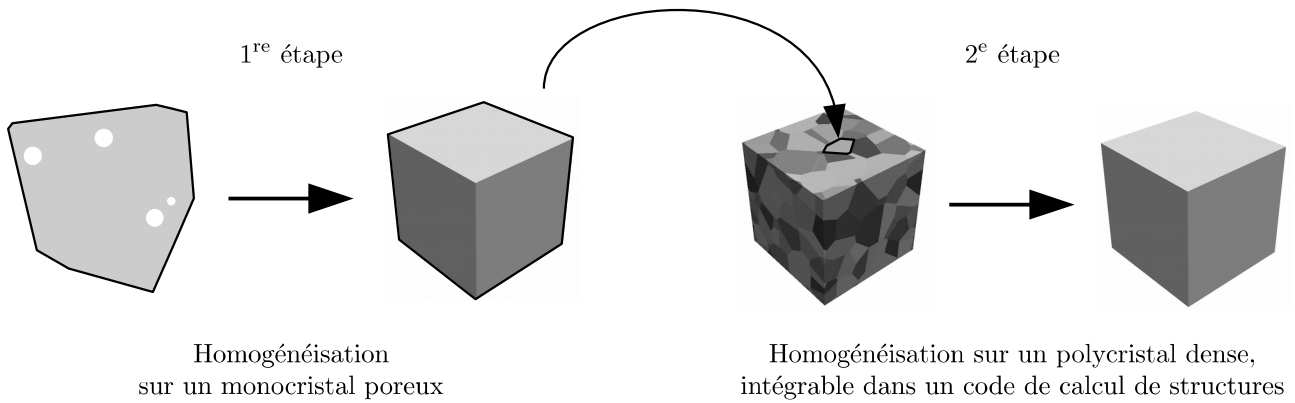


FIGURE 3.9 – Représentation schématique de la démarche de double changement d'échelles. Le premier changement d'échelle consiste à modéliser le comportement effectif d'un monocristal poreux. Le deuxième changement d'échelle consiste à modéliser le comportement effectif d'un polycristal où chaque grain se comporte comme un monocristal poreux homogénéisé (Joëssel, 2018).

Dans la section 3.2, le modèle complet en élasto-viscoplasticité est présenté pour un un acier inoxydable austénitique fortement irradié de nuance SA304L à 330°C. Des résultats de référence sont générés par des simulations numériques en champs complets à base de FFT pour des polycristaux denses et poreux avec la loi de plasticité cristalline de Han (2012). Ces résultats sont calibrés avec des données expérimentales disponibles dans la littérature, puis utilisés pour estimer la pertinence du modèle micromécanique proposé.

Pour le comportement viscoplastique d'un monocristal poreux, d'autres modèles que celui présenté en 3.1 sont proposés dans la thèse de Joëssel (2018) : le modèle où le monocristal poreux est idéalisé comme un assemblage de sphères creuses (comme dans le modèle présenté en 3.1 mais sans la majoration du potentiel local de la matrice) et le modèle où le monocristal poreux est idéalisé comme un laminé de rang infini obéissant à un procédé de laminage isotrope. Notamment plusieurs types de structure cubique pour le cristal sont considérées. Ces modèles ne sont pas entièrement repris ici par souci de concision. Néanmoins, pour un chargement purement hydrostatique, le résultat obtenu dans le cas du monocristal poreux idéalisé comme un laminé de rang infini est utilisé dans la section 3.1 pour le polycristal poreux. Par conséquent, le travail réalisé autour de ce résultat particulier est présenté à la section 3.3.

3.1 Viscoplasticité d'un polycristal poreux

Les résultats présentés dans cette section ont été obtenus en collaboration avec Louis Joëssel, Mihail Garajeu et Martin Idiart. Ils sont basés sur (Joëssel, 2018) et (Vincent et al., 2020).

Le comportement viscoplastique macroscopique (plus exactement la vitesse de déformation viscoplastique macroscopique) est estimé par un modèle basé sur la définition d'une surface de jauge pour un polycristal poreux avec des cavités intragranulaires. Les grains ont une structure de type cubique à faces centrées (CFC, cas des aciers inoxydables austénitiques traités ici).

Tout d'abord, un résultat de Leblond *et al.* (1994) est rappelé dans le cas d'un matériau poreux isotrope avec une matrice viscoplastique décrite par une simple loi de Norton d'exposant n et des cavités sphériques (porosité f). Dans ce travail, le comportement local de la matrice suit un potentiel en contrainte ψ de la forme :

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{vp} = \frac{\partial \psi}{\partial \boldsymbol{\sigma}}(\boldsymbol{\sigma}) \quad \text{avec} \quad \psi(\boldsymbol{\sigma}) = \frac{\dot{\varepsilon}_0 \sigma_0}{n+1} \left(\frac{\sigma_{eq}}{\sigma_0} \right)^{n+1}, \quad (3.1)$$

où $\dot{\varepsilon}_0$ et σ_0 sont des constantes. La réponse macroscopique peut être caractérisée par un potentiel de dissipation effectif Ψ tel que (Ponte Castañeda et Suquet, 1998) :

$$\dot{\mathbf{E}}^{vp} = \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\Sigma}}(\boldsymbol{\Sigma}), \quad (3.2)$$

où Ψ , dans le cas présent, est une fonction homogène de degré $n+1$ qui peut être écrite sous la forme :

$$\Psi(\boldsymbol{\Sigma}) = \frac{\dot{\varepsilon}_0 \sigma_0}{n+1} \left(\frac{|\Lambda(\boldsymbol{\Sigma})|}{\sigma_0} \right)^{n+1}. \quad (3.3)$$

$\Lambda(\boldsymbol{\Sigma})$ est une fonction homogène de degré 1 en $\boldsymbol{\Sigma}$. Les surfaces de jauge sont des surfaces équipotentielles utilisées pour caractériser le domaine des contraintes statiquement admissibles. Elles caractérisent complètement la réponse effective et correspondent aux surfaces de charge en plasticité (Leblond *et al.*, 1994). La surface de jauge effective est définie par :

$$\mathcal{S}_{LPS} = \{\bar{\boldsymbol{\Sigma}} : \Psi(\bar{\boldsymbol{\Sigma}}) = \frac{\sigma_0^{-n} \dot{\varepsilon}_0}{n+1}\}. \quad (3.4)$$

Leblond *et al.* (1994) ont proposé une estimation de la surface de jauge effective sous la forme générique suivante :

$$\frac{1}{\beta} (\Sigma_{eq}/\Lambda)^2 + f \left(h(\Sigma_m/\Lambda) + \frac{n-1}{n+1} h^{-1}(\Sigma_m/\Lambda) \right) = 1 + \frac{n-1}{n+1} f^2, \quad (3.5)$$

où la fonction h est donnée par :

$$h(x) = \left(1 + \frac{|x|^{1+\frac{1}{n}}}{\alpha n} \right)^n \quad (3.6)$$

et où α et β sont des fonctions de n et f respectivement (modèle LPS déjà introduit et utilisé en 2.4, attention : α et β ne désignent pas les fonctions introduites en 2.1). Les équations (3.5) et (3.6) donnent la valeur de la fonction $\Lambda(\boldsymbol{\Sigma})$ pour tout tenseur $\boldsymbol{\Sigma}$ (le tenseur normalisé $\bar{\boldsymbol{\Sigma}} = \boldsymbol{\Sigma}/\Lambda(\boldsymbol{\Sigma})$ appartient à la surface de jauge effective).

Après ce rappel, le cas d'un polycristal poreux à grains CFC et à cavités sphériques intragranulaires (distribution isotrope) est considéré. Dans chaque grain du polycristal, le matériau entourant les cavités est régi par le potentiel de contrainte suivant ($n \geq 1$) :

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{vp} = \frac{\partial \psi}{\partial \boldsymbol{\sigma}}(\boldsymbol{\sigma}) \quad \text{avec} \quad \psi(\boldsymbol{\sigma}) = \frac{\dot{\gamma}_0 \tau_0}{n+1} \sum_{s=1}^{12} \left(\frac{|\boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\mu}^{(s)}|}{\tau_0} \right)^{n+1}, \quad (3.7)$$

où $\dot{\gamma}_0$ et τ_0 sont deux constantes et où les $\boldsymbol{\mu}^{(s)}$ correspondent aux tenseurs de Schmid pour les 12 systèmes de glissements des cristaux CFC $\{111\}\langle 110 \rangle$. Pour rappel, chaque $\boldsymbol{\mu}^{(s)}$ est obtenu par le produit tensoriel symétrisé des deux vecteurs unitaires : $\mathbf{n}^{(s)}$ normal au plan de glissement du système s et $\mathbf{m}^{(s)}$ le long de la direction de glissement du système s . Ce potentiel correspond à une simple loi puissance sans écrouissage. Puisque le potentiel ψ dans (3.7) est une fonction positivement homogène de degré $n+1$ en $\boldsymbol{\sigma}$ (comme dans le cas précédent), le potentiel de dissipation effectif Ψ peut être écrit sous la forme suivante :

$$\Psi(\boldsymbol{\Sigma}) = \frac{\dot{\gamma}_0 \tau_0}{n+1} \left(\frac{|\Lambda(\boldsymbol{\Sigma})|}{\tau_0} \right)^{n+1}, \quad (3.8)$$

où $\Lambda(\Sigma)$ est une fonction homogène de degré 1 en Σ . Comme dans le cas précédent, la surface de jauge est définie de la façon suivante :

$$\mathcal{S}_J = \{\bar{\Sigma} : \Psi(\bar{\Sigma}) = \frac{\tau_0^{-n} \dot{\gamma}_0}{n+1}\} \quad (3.9)$$

et une estimation de la surface de jauge (3.9) conduit à une estimation du potentiel effectif (3.8).

Le modèle proposé est basé sur un double changement d'échelles. Tout d'abord, une estimation pour les monocristaux poreux de type CFC est recherchée. Dans ce premier changement d'échelles, le monocristal poreux est idéalisé comme un assemblage de sphères creuses (assemblage d'un nombre infini de sphères creuses homothétiques remplissant tout le volume). Ensuite, cette estimation pour un monocristal poreux est utilisée avec une hypothèse de type Voigt (vitesse de déformation homogène dans le polycristal) pour obtenir un modèle pour le comportement effectif du polycristal. Pour un chargement purement hydrostatique, ce modèle prédit que l'orientation du cristal cubique n'a pas influence : l'estimation obtenue est équivalente à celle du monocristal poreux sous chargement hydrostatique. Une surface de jauge analytique de type (Leblond *et al.*, 1994) est ensuite dérivée de ce résultat. La fonction α est ajustée afin de retrouver la contrainte hydrostatique obtenue dans (Joëssel *et al.*, 2018), dans lequel le monocristal poreux est idéalisé comme un laminé de rang infini obéissant à un procédé de laminage isotrope. Cette estimation basée sur les laminés s'est avérée supérieure aux estimations plus classiques basées sur les assemblages de sphères creuses. Ensuite, la fonction β est ajustée afin de retrouver la contrainte équivalente obtenue avec le modèle de Liu et Ponte Castañeda (2004) dans le cas d'un polycristal dense ($f = 0$). Les deux étapes de changement d'échelles sont présentées ci-dessous.

Un VER comprenant distribution uniforme de cavités et une matrice cristalline de type CFC est considéré. La matrice est identifiée comme la phase $r = 1$ et les cavités sont identifiées comme la phase $r = 2$. Le comportement de la matrice est purement viscoplastique. Les domaines occupés par la matrice, les cavités et le VER sont notés respectivement $\Omega^{(1)}$, $\Omega^{(2)}$ et V . La réponse viscoplastique de la matrice est caractérisée par un potentiel convexe ψ de la forme (3.7). Le potentiel ψ est mis sous la forme :

$$\psi(\boldsymbol{\sigma}) = \frac{\tau_0 \dot{\gamma}_0}{n+1} \sum_{s=1}^{12} \left(\frac{\boldsymbol{\sigma}}{\tau_0} : \boldsymbol{\mu}^{(s)} \otimes \boldsymbol{\mu}^{(s)} : \frac{\boldsymbol{\sigma}}{\tau_0} \right)^{(n+1)/2}. \quad (3.10)$$

Le comportement viscoplastique de la matrice peut être décrit par le potentiel de dissipation dual ϕ (transformée de Legendre de ψ) :

$$\phi(\dot{\boldsymbol{\epsilon}}^{vp}) = \sup_{\boldsymbol{\sigma}} \{ \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\epsilon}}^{vp} - \psi(\boldsymbol{\sigma}) \}. \quad (3.11)$$

La réponse macroscopique peut être caractérisée par un potentiel de dissipation effectif Φ tel que (voir par exemple (Ponte Castañeda et Suquet, 1998)) :

$$\Sigma = \frac{\partial \Phi}{\partial \dot{\boldsymbol{E}}^{vp}}(\dot{\boldsymbol{E}}^{vp}), \quad (3.12)$$

$$\Phi(\dot{\boldsymbol{E}}^{vp}) = (1-f) \min_{\dot{\boldsymbol{\epsilon}}^{vp} \in \mathcal{K}(\dot{\boldsymbol{E}}^{vp})} \frac{1}{|\Omega^{(1)}|} \int_{\Omega^{(1)}} \phi(\dot{\boldsymbol{\epsilon}}^{vp}(\boldsymbol{x})) dV. \quad (3.13)$$

Avec la notation $\langle \cdot \rangle_{\Omega^{(1)}}$ pour la moyenne sur $\Omega^{(1)}$, cela s'écrit :

$$\Phi(\dot{\boldsymbol{E}}^{vp}) = (1-f) \min_{\dot{\boldsymbol{\epsilon}}^{vp} \in \mathcal{K}(\dot{\boldsymbol{E}}^{vp})} \langle \phi(\dot{\boldsymbol{\epsilon}}^{vp}) \rangle_{\Omega^{(1)}}, \quad (3.14)$$

où $f = |\Omega^{(2)}|/|V|$ est la porosité. $\mathcal{K}(\dot{\mathbf{E}}^{vp})$ est l'ensemble des taux de déformation cinématiquement admissible :

$$\mathcal{K}(\dot{\mathbf{E}}^{vp}) = \left\{ \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{vp} \in \mathcal{T} \mid \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{vp}(\mathbf{x}) = \text{grad}_s \dot{\mathbf{u}}(\mathbf{x}) \text{ dans } V \wedge \dot{\mathbf{u}} = \dot{\mathbf{E}}^{vp} \cdot \mathbf{x} \text{ sur } \partial V \right\}, \quad (3.15)$$

où grad_s est le gradient symétrisé et \mathcal{T} est l'ensemble des tenseurs symétriques du deuxième ordre. Une estimation du potentiel de dissipation effectif Φ peut être obtenue à partir de (3.14) en suivant une approche de type Gurson (Gurson, 1977). Le tenseur d'ordre 4 suivant est introduit :

$$\mathbf{M} = \frac{1}{\tau_0} \sum_{s=1}^{12} \boldsymbol{\mu}^{(s)} \otimes \boldsymbol{\mu}^{(s)}. \quad (3.16)$$

En utilisant la propriété générale suivante pour une fonction convexe $v(x)$:

$$\sum_{k=1}^K \lambda_k v(x_k) \geq v\left(\sum_{k=1}^K \lambda_k x_k\right) \quad \text{pour} \quad \sum_{k=1}^K \lambda_k = 1, \quad (3.17)$$

le potentiel convexe ψ peut être borné par :

$$\psi(\boldsymbol{\sigma}) \geq \psi_-(\boldsymbol{\sigma}) = \frac{12 \tau_0 \dot{\gamma}_0}{n+1} \left(\frac{1}{12 \tau_0} \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{M} : \boldsymbol{\sigma} \right)^{(n+1)/2}. \quad (3.18)$$

En dérivant cette expression par rapport à $\boldsymbol{\sigma}$, cela conduit à :

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{vp} = \dot{\gamma}_0 \left(\frac{1}{12 \tau_0} \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{M} : \boldsymbol{\sigma} \right)^{(n-1)/2} \mathbf{M} : \boldsymbol{\sigma}. \quad (3.19)$$

En introduisant \mathbf{L} le pseudo-inverse de \mathbf{M} tel que $\mathbf{M} : \mathbf{L} : \mathbf{M} = \mathbf{M}$, cela donne :

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{vp} : \mathbf{L} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{vp} = 12 \tau_0 \dot{\gamma}_0^2 \left(\frac{1}{12 \tau_0} \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{M} : \boldsymbol{\sigma} \right)^n \quad (3.20)$$

et

$$\frac{1}{12 \tau_0} \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{M} : \boldsymbol{\sigma} = \left(\frac{1}{12 \tau_0 \dot{\gamma}_0^2} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{vp} : \mathbf{L} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{vp} \right)^{1/n}. \quad (3.21)$$

Le potentiel ψ_- est homogène de degré $n+1$ en $\boldsymbol{\sigma}$. Cela implique que $\boldsymbol{\sigma} : \partial_{\boldsymbol{\sigma}} \psi_-(\boldsymbol{\sigma}) = (n+1)\psi_-(\boldsymbol{\sigma})$ et $\boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{vp} = (n+1)\psi_-(\boldsymbol{\sigma})$. En tenant compte de l'incompressibilité de la matrice et des expressions (3.21) et (3.18), le potentiel de dissipation peut être borné par :

$$\phi(\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{vp}) \leq \phi_+(\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{vp}) = \begin{cases} \frac{12 \tau_0 \dot{\gamma}_0}{m+1} \left(\frac{1}{12 \tau_0 \dot{\gamma}_0^2} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{vp} : \mathbf{L} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{vp} \right)^{(m+1)/2} & \text{si } \text{Tr}(\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{vp}) = 0 \\ +\infty & \text{sinon} \end{cases} \quad (3.22)$$

où $m = 1/n$. Le tenseur d'ordre quatre \mathbf{M} est cubique et peut être mis sous la forme suivante, en considérant les tenseurs d'ordre quatre \mathbf{I} , \mathbf{J} , \mathbf{S} de composantes :

$$I_{ijkl} = 1/2 (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}), \quad (3.23)$$

$$J_{ijkl} = 1/3 \delta_{ij} \delta_{kl}, \quad (3.24)$$

$$S_{ijkl} = \delta_{ri} \delta_{rj} \delta_{rk} \delta_{rl}, \quad (3.25)$$

où δ est le symbole de Kronecker. Deux tenseurs d'ordre quatre supplémentaires sont introduits : $\mathbf{K}_a = \mathbf{S} - \mathbf{J}$ et $\mathbf{K}_b = \mathbf{I} - \mathbf{S}$, de sorte que chaque tenseur cubique d'ordre 4 puisse être décomposé en \mathbf{J} , \mathbf{K}_a et \mathbf{K}_b . Les calculs conduisent aux expressions suivantes pour \mathbf{M} et \mathbf{L} :

$$\mathbf{M} = \frac{2}{\tau_0} \mathbf{K}_a + \frac{2}{3\tau_0} \mathbf{K}_b, \quad \mathbf{L} = \frac{\tau_0}{2} \mathbf{K}_a + \frac{3\tau_0}{2} \mathbf{K}_b. \quad (3.26)$$

Il peut être remarqué que le potentiel ϕ_+ dans (3.22) avec cette expression de \mathbf{L} ne dépend plus explicitement des tenseurs de Schmid. Le présent modèle suit une approche de type Gurson (Gurson, 1977). Elle consiste à utiliser le principe variationnel (3.13) avec des champs de vitesse particuliers, ce qui conduit à une borne supérieure pour le potentiel effectif. Le VER est considéré comme un assemblage d'un nombre infini de sphères creuses homothétiques. Le potentiel effectif est borné en utilisant le champ de vitesse suivant dans une sphère donnée :

$$\dot{\mathbf{u}}(\mathbf{x}) = \dot{E}_m \frac{b^3}{r^2} \boldsymbol{\xi} + \dot{\mathbf{E}}^d \cdot \mathbf{x}, \quad (3.27)$$

où b est le rayon de la sphère, $r = |\mathbf{x}|$, $\boldsymbol{\xi} = \mathbf{x}/|\mathbf{x}|$, et \mathbf{x} est le vecteur position par rapport au centre de la sphère. Pour alléger les expressions, $\dot{\mathbf{E}}^{vp}$ est remplacé ici par $\dot{\mathbf{E}}$. Le taux de déformation s'écrit :

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}} = -3\dot{E}_m \frac{b^3}{r^3} \boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi} + \dot{\mathbf{E}}^d, \quad (3.28)$$

où \otimes_d est la partie déviatorique du produit tensoriel. Le potentiel effectif est alors borné par :

$$\Phi(\dot{\mathbf{E}}) \leq \frac{1-f}{(4/3)\pi(b^3-a^3)} \int_S \int_a^b \phi \left(-3\dot{E}_m \frac{b^3}{r^3} \boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi} + \dot{\mathbf{E}}^d \right) r^2 dr dS(\boldsymbol{\xi}), \quad (3.29)$$

où S est la sphère unité (attention : S ne désigne pas la surface cohésive introduite en 2.3.1) et a est le rayon de la cavité avec $f = (a/b)^3$ (attention : a et b ne désignent pas les longueurs définies en 2.1.5). En utilisant l'inégalité (3.22), cela conduit à :

$$\Phi(\dot{\mathbf{E}}) \leq \frac{1}{(4/3)\pi b^3} \int_S \int_a^b \phi_+ \left(-3\dot{E}_m \frac{b^3}{r^3} \boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi} + \dot{\mathbf{E}}^d \right) r^2 dr dS(\boldsymbol{\xi}) \quad (3.30)$$

ou

$$\Phi(\dot{\mathbf{E}}) \leq \frac{1}{(4/3)\pi b^3} \int_S \int_a^b \frac{12\tau_0\dot{\gamma}_0}{m+1} \left(\frac{1}{12\tau_0\dot{\gamma}_0^2} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} : \mathbf{L} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} \right)^{(m+1)/2} r^2 dr dS(\boldsymbol{\xi}). \quad (3.31)$$

L'expression de droite est ensuite bornée en appliquant l'inégalité de Cauchy-Schwarz à cette intégrale de surface :

$$\Phi(\dot{\mathbf{E}}) \leq \frac{1}{(4/3)\pi b^3} \int_a^b (4\pi)^{(1-m)/2} \frac{12\tau_0\dot{\gamma}_0}{m+1} \left(\int_S \frac{1}{12\tau_0\dot{\gamma}_0^2} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} : \mathbf{L} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} dS(\boldsymbol{\xi}) \right)^{(m+1)/2} r^2 dr. \quad (3.32)$$

En utilisant le champ de vitesse (3.28) dans cette expression, cela donne :

$$\Phi(\dot{\mathbf{E}}) \leq \frac{12\tau_0\dot{\gamma}_0}{m+1} \int_f^1 \left(\frac{1}{12\tau_0\dot{\gamma}_0^2} 9\dot{E}_m^2 \frac{\kappa}{y^2} + \frac{1}{12\tau_0\dot{\gamma}_0^2} \dot{\mathbf{E}}^d : \mathbf{L} : \dot{\mathbf{E}}^d \right)^{(m+1)/2} dy, \quad (3.33)$$

où $\kappa = (11/15)\tau_0$.

Pour la deuxième transition d'échelles, le domaine V est constitué du polycristal idéalisé comme un matériau hétérogène à N phases (domaines $\Omega^{(r)}$, fractions volumiques $c^{(r)}$) décrites par le comportement effectif d'un monocristal poreux. Une orientation aléatoire est considérée pour chaque phase du polycristal. Le potentiel local

$\phi^{(r)}$ dans chaque phase r est obtenu par la première transition d'échelle et correspond à l'expression de droite dans (3.33). Comme précédemment, le potentiel effectif en vitesse de déformation s'écrit :

$$\Phi(\dot{\mathbf{E}}) = \min_{\dot{\mathbf{e}} \in \mathcal{K}(\dot{\mathbf{E}})} \sum_{r=1}^N c^{(r)} \left\langle \phi^{(r)}(\dot{\mathbf{e}}) \right\rangle_{\Omega^{(r)}}. \quad (3.34)$$

En utilisant une hypothèse de type Voigt (taux de déformation homogène dans tout le volume), cela donne :

$$\Phi(\dot{\mathbf{E}}) \leq \sum_{r=1}^N c^{(r)} \left\langle \phi^{(r)}(\dot{\mathbf{E}}) \right\rangle_{\Omega^{(r)}}. \quad (3.35)$$

Dans cette expression, le tenseur $\dot{\mathbf{E}}$ doit être exprimé dans la base locale de chaque phase r . Pour chaque phase r , il existe un tenseur du deuxième ordre $\mathbf{Q}^{(r)}$ tel que

$$\phi^{(r)}(\dot{\mathbf{E}}) = \phi^{(0)}(\mathbf{Q}^{(r)} \cdot \dot{\mathbf{E}} \cdot (\mathbf{Q}^{(r)})^T), \quad (3.36)$$

où

$$\phi^{(0)}(\dot{\mathbf{e}}) = \frac{12\tau_0\dot{\gamma}_0}{m+1} \int_f^1 \left(\frac{1}{12\tau_0\dot{\gamma}_0^2} 9\dot{\mathbf{e}}_m^2 \frac{\kappa}{y^2} + \frac{1}{12\tau_0\dot{\gamma}_0^2} \dot{\mathbf{e}}^d : \mathbf{L} : \dot{\mathbf{e}}^d \right)^{(m+1)/2} dy. \quad (3.37)$$

Pour une distribution statistiquement uniforme des grains et pour un nombre infini de grains, le VER peut être considéré comme un volume de forme sphérique dans lequel chaque point correspond à un grain. Le potentiel (3.35) peut alors être évalué par intégration sur la sphère unité S :

$$\Phi(\dot{\mathbf{E}}) \leq \left\langle \phi^{(0)}(\mathbf{Q} \cdot \dot{\mathbf{E}} \cdot \mathbf{Q}^T) \right\rangle_S, \quad (3.38)$$

où la notation suivante est utilisée $\langle x \rangle_S = 1/(4\pi) \int_S x dS$. Cela donne :

$$\Phi(\dot{\mathbf{E}}) \leq \frac{\tau_0\dot{\gamma}_0}{m+1} \int_f^1 \left\langle \left(\frac{1}{\dot{\gamma}_0^2} 9\dot{\mathbf{E}}_m^2 \frac{\kappa^*}{y^2} + \frac{1}{\dot{\gamma}_0^2} \dot{\mathbf{E}}^d(\mathbf{Q}) : \mathbf{L}^* : \dot{\mathbf{E}}^d(\mathbf{Q}) \right)^{(m+1)/2} \right\rangle_S dy, \quad (3.39)$$

où $\kappa^* = (12^{(1-m)/(m+1)}/\tau_0)\kappa$ et $\mathbf{L}^* = (12^{(1-m)/(m+1)}/\tau_0)\mathbf{L}$. L'inégalité de Cauchy-Schwarz est ensuite utilisée :

$$\Phi(\dot{\mathbf{E}}) \leq \frac{\tau_0\dot{\gamma}_0}{m+1} \int_f^1 \left(\frac{1}{\dot{\gamma}_0^2} 9\dot{\mathbf{E}}_m^2 \frac{\kappa^*}{y^2} + \frac{1}{\dot{\gamma}_0^2} \left\langle \dot{\mathbf{E}}^d(\mathbf{Q}) : \mathbf{L}^* : \dot{\mathbf{E}}^d(\mathbf{Q}) \right\rangle_S \right)^{(m+1)/2} dy. \quad (3.40)$$

En considérant $\dot{\mathbf{E}}^d(\mathbf{Q}) : \mathbf{L}^* : \dot{\mathbf{E}}^d(\mathbf{Q}) = \dot{\mathbf{E}}^d : \mathbf{L}^*(\mathbf{Q}) : \dot{\mathbf{E}}^d$ avec un résultat de Gatt *et al.* (2005) pour obtenir la moyenne sur les orientations d'un tenseur d'ordre quatre, cela donne :

$$\left\langle \dot{\mathbf{E}}^d : \mathbf{L}^*(\mathbf{Q}) : \dot{\mathbf{E}}^d \right\rangle_S = \frac{33}{20} 12^{(1-m)/(m+1)} \dot{\mathbf{E}}_{eq}^2. \quad (3.41)$$

Enfin (3.40) s'écrit :

$$\Phi(\dot{\mathbf{E}}) \leq \frac{\tau_0\dot{\gamma}_0}{m+1} \int_f^1 \left(\frac{1}{\dot{\gamma}_0^2} 9\dot{\mathbf{E}}_m^2 \frac{\kappa^*}{y^2} + \frac{1}{\dot{\gamma}_0^2} q^* \dot{\mathbf{E}}_{eq}^2 \right)^{(m+1)/2} dy, \quad (3.42)$$

où $q^* = (33/20)12^{(1-m)/(m+1)}$.

Dans le cas plastique parfait ($m \rightarrow 0$), l'inégalité (3.42) s'écrit :

$$\Phi(\dot{\mathbf{E}}) \leq \tau_0 \int_f^1 \left(9\dot{\mathbf{E}}_m^2 \frac{\kappa^*}{y^2} + q^* \dot{\mathbf{E}}_{eq}^2 \right)^{1/2} dy. \quad (3.43)$$

La surface de charge associée à ce potentiel effectif en taux de déformation s'écrit :

$$\frac{1}{q^*} \left(\frac{\Sigma_{eq}}{\tau_0} \right)^2 + 2f \cosh \left(\frac{1}{\sqrt{\kappa^*}} \frac{\Sigma_m}{\tau_0} \right) - 1 - f^2 = 0. \quad (3.44)$$

Ce résultat peut être trouvé directement en utilisant un lemme donné dans (Gărăjeu et Suquet, 1997) (Annexe A). Par analogie avec (Leblond *et al.*, 1994), il est alors proposé d'étendre cette surface de charge de plasticité à la surface de jauge suivante en viscoplasticité :

$$\frac{1}{q^*} \frac{\Sigma_{eq}^2}{\Lambda^2} + f \left(h^* \left(\frac{\Sigma_m}{\Lambda} \right) + \frac{n-1}{n+1} (h^*)^{-1} \left(\frac{\Sigma_m}{\Lambda} \right) \right) - 1 - \frac{n-1}{n+1} f^2 = 0, \quad (3.45)$$

où

$$h^*(x) = \left(1 + \frac{1}{n} \left| \frac{1}{\sqrt{\kappa^*}} x \right|^{1+\frac{1}{n}} \right)^n. \quad (3.46)$$

Pour deux cas particuliers, des estimations précises existent : les polycristaux denses sous chargement de cisaillement pur (Liu et Ponte Castañeda, 2004) et les polycristaux poreux sous chargement hydrostatique pur (Joëssel *et al.*, 2018). La surface de jauge ci-dessus ne permet pas de retrouver ces estimations mais elle peut être facilement modifiée pour y parvenir. Premièrement, le coefficient κ^* dans h^* est ajusté afin de retrouver la contrainte hydrostatique prédite par l'estimation de Joëssel *et al.* (2018), dans laquelle le monocristal poreux a été idéalisé comme un laminé de rang infini obéissant à un procédé de laminage isotrope. Deuxièmement, q^* est ajusté afin de correspondre à la contrainte de cisaillement prédite par le modèle d'homogénéisation de Liu et Ponte Castañeda (2004) (basé sur un composite linéaire de comparaison) pour des polycristaux totalement denses ($f = 0$). En conclusion, la surface de jauge s'exprime comme suit :

$$\left(\frac{1}{\tilde{\sigma}_0/\tau_0} \right)^{2n/(n+1)} \frac{\Sigma_{eq}^2}{\Lambda^2} + f \left(h^{**} \left(\frac{\Sigma_m}{\Lambda} \right) + \frac{n-1}{n+1} (h^{**})^{-1} \left(\frac{\Sigma_m}{\Lambda} \right) \right) - 1 - \frac{n-1}{n+1} f^2 = 0, \quad (3.47)$$

où

$$h^{**}(x) = \left(1 + \frac{1}{n} \frac{1}{\alpha_{LAM}/\tau_0} |x|^{1+\frac{1}{n}} \right)^n. \quad (3.48)$$

Les équations (3.2) et (3.8) conduisent à :

$$\dot{\mathbf{E}}^{vp} = \dot{\gamma}_0 \left(\frac{|\Lambda|}{\tau_0} \right)^n \text{sign}(\Lambda) \frac{\partial \Lambda}{\partial \Sigma}. \quad (3.49)$$

La définition de la surface de jauge (3.9) avec cette relation :

$$\frac{\partial \mathcal{S}_J}{\partial \bar{\Sigma}} \frac{\partial \bar{\Sigma}}{\partial \Sigma} = 0, \quad (3.50)$$

conduit à l'égalité suivante :

$$\frac{\partial \Lambda}{\partial \Sigma} = \frac{\Lambda}{\Sigma} \frac{\partial \mathcal{S}_J}{\partial \bar{\Sigma}} \frac{\partial \bar{\Sigma}}{\partial \Sigma}. \quad (3.51)$$

Ainsi, l'équation (3.49) s'écrit :

$$\dot{\mathbf{E}}^{vp} = \dot{\gamma}_0 \left(\frac{|\Lambda|}{\tau_0} \right)^n \frac{1}{\Sigma} \frac{\partial \mathcal{S}_J}{\partial \bar{\Sigma}} \frac{\partial \bar{\Sigma}}{\partial \Sigma} \text{sign}(\Lambda). \quad (3.52)$$

En développant

$$\frac{\partial \mathcal{S}_J}{\partial \bar{\Sigma}} = \frac{1}{3} \frac{\partial \mathcal{S}_J(\bar{\Sigma}_m \mathbf{i})}{\partial \bar{\Sigma}_m} \mathbf{i} + \frac{\partial \mathcal{S}_J(\bar{\Sigma}_d)}{\partial \bar{\Sigma}_d} \quad (3.53)$$

avec

$$\frac{\partial \mathcal{S}_J(\bar{\Sigma}_m \mathbf{i})}{\partial \bar{\Sigma}_m} = f \left(h^{**'}(\bar{\Sigma}_m) - \frac{n-1}{n+1} (h^{**})^{-2}(\bar{\Sigma}_m) h^{**'}(\bar{\Sigma}_m) \right), \quad (3.54)$$

$$\frac{\partial \mathcal{S}_J(\bar{\Sigma}_d)}{\partial \bar{\Sigma}_d} = 3 \left(\frac{1}{\tilde{\sigma}_0/\tau_0} \right)^{2n/(n+1)} \bar{\Sigma}_d, \quad (3.55)$$

$$h^{**'}(x) = \frac{1}{\alpha_{LAM}/\tau_0} \frac{n+1}{n} \left(1 + \frac{1}{\alpha_{LAM}/\tau_0} \frac{1}{n} |x|^{1+\frac{1}{n}} \right)^{n-1} |x|^{\frac{1}{n}} \text{sign}(x), \quad (3.56)$$

cela conduit à l'expression finale de $\dot{\mathbf{E}}^{vp}$. Les équations du modèle final sont synthétisées ci-dessous. Pour alléger les notations, α_{LAM}/τ_0 et $(\tilde{\sigma}_0/\tau_0)^{2n/(n+1)}$ sont respectivement notés α et β dans les équations (3.58) et (3.59). La fonction h^{**} coïncide avec la fonction h dans l'expression (3.59). Pour un futur ajustement (section 3.2), la porosité f est simplement remplacée par une porosité modifiée f^* de la forme qf (avec q un paramètre).

$$\dot{\mathbf{E}}^{vp} = \dot{\gamma}_0 \left| \frac{\Lambda}{\tau_0} \right|^n \frac{\frac{f^*}{3} \left(1 - \frac{n-1}{n+1} h^{-2}(\Sigma_m/\Lambda) \right) h'(\Sigma_m/\Lambda) \mathbf{i} + \frac{3}{\beta} (\Sigma^d/\Lambda) \text{sign}(\Lambda)}{f^* \left(1 - \frac{n-1}{n+1} h^{-2}(\Sigma_m/\Lambda) \right) h'(\Sigma_m/\Lambda) (\Sigma_m/\Lambda) + \frac{2}{\beta} (\Sigma_{eq}/\Lambda)^2}, \quad (3.57)$$

$$\frac{1}{\beta} (\Sigma_{eq}/\Lambda)^2 + f^* \left(h(\Sigma_m/\Lambda) + \frac{n-1}{n+1} h^{-1}(\Sigma_m/\Lambda) \right) = 1 + \frac{n-1}{n+1} f^{*2}, \quad (3.58)$$

$$h(x) = \left(1 + \frac{|x|^{1+\frac{1}{n}}}{\alpha n} \right)^n. \quad (3.59)$$

Le tableau 3.1 indique des valeurs numériques de α et β pour quelques exposants de fluage (dans le cas des cristaux CFC).

n	1	2	3	5	10	15
α	0.651	1.165	1.397	1.597	1.743	1.789
β	1.502	2.732	3.586	4.541	5.457	5.793

TABLE 3.1 – Valeurs de α et β pour la surface de jauge (3.58) et pour plusieurs valeurs de n .

3.2 Application : modèle complet en élasto-viscoplasticité

Les résultats présentés dans cette section ont été obtenus en collaboration avec Hervé Moulinec, Louis Joëssel, Mihail Garajeu et Martin Idiart. Ils sont basés sur (Vincent et al., 2020).

Le modèle développé en 3.1 est utilisé pour les aciers SA304L avec les hypothèses spécifiées en introduction du chapitre 3.

La déformation locale dans les grains ε est supposée être la somme d'une partie élastique ε^{el} et d'une partie viscoplastique due aux glissements $\gamma^{(s)}$ le long des douze systèmes de glissement des CFC. La vitesse de déformation totale s'écrit :

$$\dot{\varepsilon} = \dot{\varepsilon}^{el} + \sum_{s=1}^{12} \dot{\gamma}^{(s)} \boldsymbol{\mu}^{(s)} \quad (3.60)$$

avec :

$$\dot{\varepsilon}^{el} = \mathbf{S} : \dot{\boldsymbol{\sigma}} \quad \text{and} \quad \dot{\gamma}^{(s)} = \dot{\gamma}_0 \left| \frac{\boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\mu}^{(s)}}{\tau_0} \right|^n \text{sign}(\boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\mu}^{(s)}). \quad (3.61)$$

Le tenseur de souplesse élastique \mathbf{S} est pris sous la forme (attention : différent du tenseur d'ordre 4 \mathbf{S} introduit en 3.1) :

$$\mathbf{S} = \frac{1}{3k} \mathbf{J} + \frac{1}{2\mu} \mathbf{K}. \quad (3.62)$$

La réponse microscopique est donc entièrement caractérisée par les modules de compressibilité et de cisaillement k et μ , l'exposant de fluage n , la cission de référence τ_0 et le taux de déformation de référence $\dot{\gamma}_0$. Ce modèle de comportement néglige l'anisotropie élastique, le durcissement plastique et la variabilité de la cission de référence selon les différents systèmes de glissement. Ces simplifications sont introduites afin d'obtenir un modèle analytique avec un nombre limité de paramètres à identifier.

Pour la réponse macroscopique, le modèle proposé néglige tout couplage élasto-plastique, de sorte que la vitesse de déformation macroscopique $\dot{\mathbf{E}}$ est la somme d'une partie élastique $\dot{\mathbf{E}}^{el}$ et d'une partie viscoplastique $\dot{\mathbf{E}}^{vp}$:

$$\dot{\mathbf{E}} = \dot{\mathbf{E}}^{el} + \dot{\mathbf{E}}^{vp}. \quad (3.63)$$

La dépendance de chaque terme par rapport au tenseur des contraintes macroscopiques Σ est obtenue de la façon suivante.

Plusieurs modèles micromécaniques pour décrire les propriétés élastiques effectives des aciers inoxydables austénitiques avec gonflement d'irradiation sont proposés dans (Berndt et Sevostianov, 2014). Dans ce travail, les cavités dues à l'irradiation sont supposées être distribuées de façon aléatoire, de forme sphérique et plongées dans une matrice élastique isotrope. Dans (Berndt et Sevostianov, 2014), les méthodes classiques suivantes sont testées : le modèle dilué, la borne supérieure de Hashin-Shtrikman (Hashin et Shtrikman, 1963) avec la matrice prise comme milieu de référence (résultat qui coïncide avec le modèle de Mori-Tanaka (Mori et Tanaka, 1973) dans le cas présent), le modèle différentiel, le modèle auto-cohérent (voir (François *et al.*, 2012) entre autres pour une description de ces différents modèles). Les résultats sont comparés aux résultats expérimentaux de Balachov *et al.* (2004). Il est montré que, pour le module de Young effectif, tous les modèles conduisent à des approximations raisonnables vis à vis des résultats expérimentaux : aucun modèle ne peut être véritablement privilégié par rapport aux autres. Dans le présent travail, il est décidé d'utiliser la borne supérieure de Hashin et Shtrikman pour estimer l'effet des cavités sur les propriétés élastiques de l'acier inoxydable austénitique SA304L irradié. Le tenseur de souplesse effectif est donné dans (3.65).

Concernant la partie viscoplastique, le modèle présenté en 3.1 est utilisé.

Au final, les équations du modèle analytique se synthétisent sous la forme suivante :

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{E}}^{el} = \tilde{\mathbf{S}} : \dot{\Sigma} \\ \dot{\mathbf{E}}^{vp} = \dot{\gamma}_0 \left| \frac{\Lambda}{\tau_0} \right|^n \frac{\frac{f^*}{3} \left(1 - \frac{n-1}{n+1} h^{-2} (\Sigma_m/\Lambda) \right) h' (\Sigma_m/\Lambda) \mathbf{i} + \frac{3}{\beta} (\Sigma^d/\Lambda)}{f^* \left(1 - \frac{n-1}{n+1} h^{-2} (\Sigma_m/\Lambda) \right) h' (\Sigma_m/\Lambda) (\Sigma_m/\Lambda) + \frac{2}{\beta} (\Sigma_{eq}/\Lambda)^2} \text{sign}(\Lambda), \end{cases} \quad (3.64)$$

avec :

$$\tilde{\mathbf{S}} = \frac{1}{3\tilde{k}} \mathbf{J} + \frac{1}{2\tilde{\mu}} \mathbf{K}, \quad (3.65)$$

$$\tilde{k} = k - f \frac{k}{1 - (1-f) \frac{k}{k+k^*}}, \quad \tilde{\mu} = \mu - f \frac{\mu}{1 - (1-f) \frac{\mu}{\mu+\mu^*}}, \quad k^* = \frac{4}{3}\mu, \quad \mu^* = \frac{\mu}{6} \frac{9k + 8\mu}{k + 2\mu}. \quad (3.66)$$

Le facteur de jauge Λ est solution de l'équation non-linéaire (3.58) avec la fonction h donnée en (3.59). Ces équations permettent de caractériser complètement la réponse élasto-viscoplastique de l'agrégat polycristallin poreux pour tout chargement multi-axial. La rigidité effective est estimée par les expressions (3.66) (le module de Young effectif est donné par $\tilde{E} = 9\tilde{k}\tilde{\mu}/(\tilde{\mu} + 3\tilde{k})$), tandis que la résistance effective est estimée par la contrainte d'écoulement loin dans le domaine plastique.

Des résultats de référence sont ensuite générés par des simulations numériques en champs complets à base de FFT.

Contrairement au modèle analytique, le modèle pour les simulations numériques considère des agrégats périodiques de grains obtenus par pavage de Voronoï et contenant une distribution isotrope de cavités sphériques. La figure 3.10 montre les différentes cellules unitaires utilisées dans cette étude. Ces cellules contiennent 512 grains et un nombre variable de cavités intragranulaires de taille unique. Le même pavage de Voronoï est utilisé pour toutes ces microstructures. Pour des niveaux de porosité de 0.02 ou 0.04, trois cas distincts pour la position des centres des cavités sont considérés. Pour chacune de ces microstructures, la porosité sur l'ensemble du volume et le nombre de cavités dans le volume total sont imposés. Il est à noter que les cavités sont toujours de même taille et sont situés entièrement à l'intérieur des grains. Les centres des cavités sont supposés être distribués aléatoirement à l'intérieur des grains. Le nombre précis de grains employés découle d'une étude paramétrique rapportée dans l'Annexe B de (Vincent *et al.*, 2020). Un résumé de ces paramètres microstructuraux est donné dans le tableau 3.2.

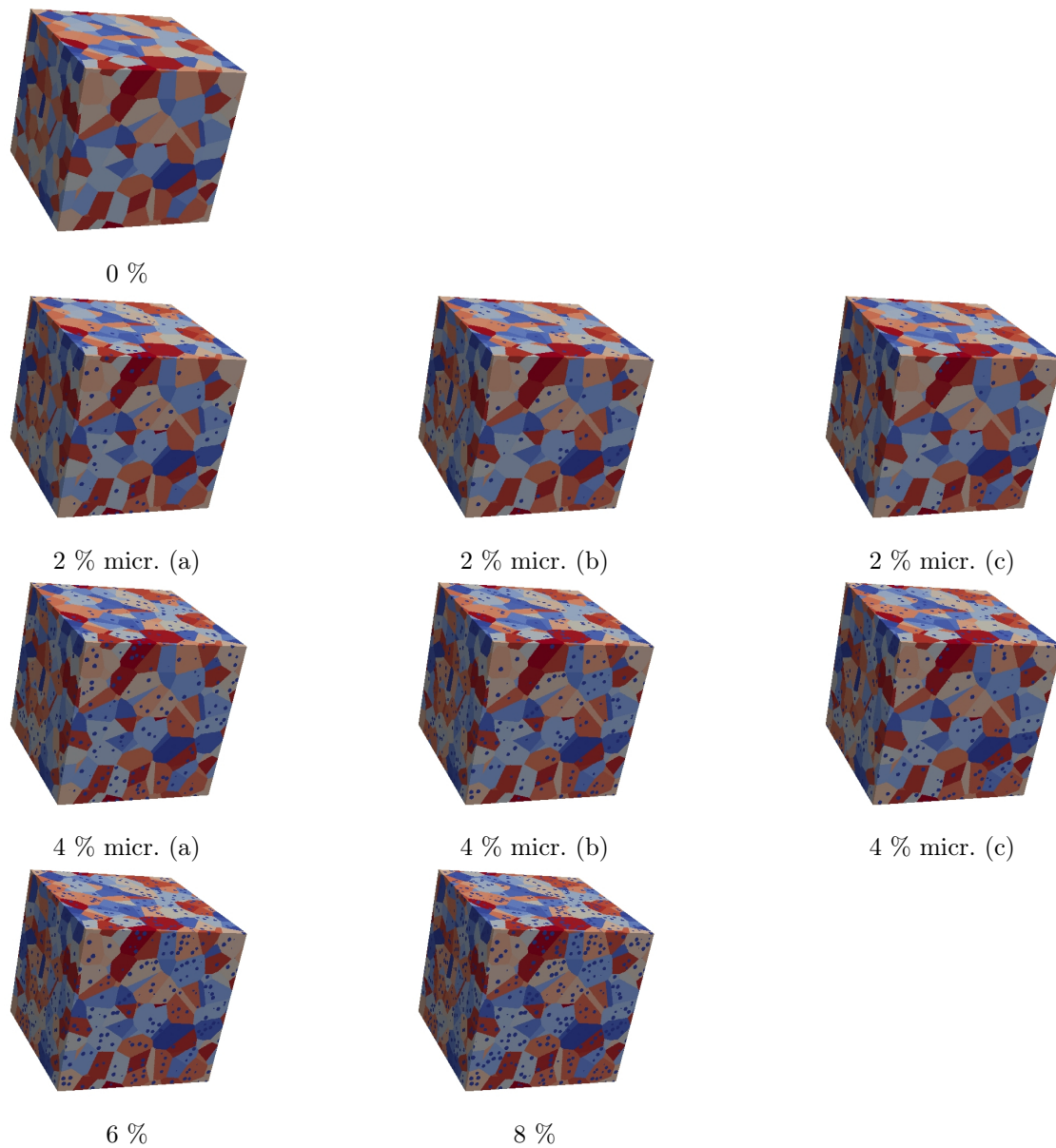


FIGURE 3.10 – Microstructures utilisées pour les simulations numériques avec différentes porosités et nombres de cavités. Trois distributions différentes de cavités sont considérées pour les microstructures de porosité 2 % et 4 % (Vincent *et al.*, 2020).

Porosité f	Nombre de cavités	Nombre moyen de cavités par grain	Nombre approché de voxels par cavité
0	0	0	–
0.02	2048	4	1310
0.04	4096	8	1310
0.06	6144	12	1310
0.08	8192	16	1310

TABLE 3.2 – Description des microstructures.

Le comportement local des grains est modélisé par une loi de plasticité cristalline à base physique récemment développée par Han (2012); Tanguy *et al.* (2013) et spécifiquement dédiée aux aciers SA304L irradiés à 330°C.

Cette loi de plasticité cristalline a été utilisée par [Hure et al. \(2016\)](#) pour étudier la distribution des contraintes intergranulaires dans les aciers inoxydables irradiés et par [Ling et al. \(2017\)](#) pour l'étude de la croissance et de la coalescence des cavités dans les monocristaux cubiques à faces centrées.

Cette loi de plasticité cristalline a aussi été utilisée par [Shawish et al. \(2020\)](#) pour effectuer une comparaison entre les simulations par éléments finis et les méthodes à base de FFT. *Les résultats présentés dans (Shawish et al., 2020) ont été obtenus en collaboration avec Samir El Shawish, Hervé Moulinec, Leon Cizelj et Lionel Gélébart. Ils ne sont pas repris dans cette section par souci de concision.* Ce travail a montré une convergence à la discrétisation spatiale plus lente pour la méthode par éléments finis que pour la méthode par FFT lors de la comparaison des réponses d'un polycristal à 100 grains en traction. Cela peut induire une surestimation des contraintes maximales aux joints de grain avec l'approche par éléments finis (éléments linaires), ce qui soulève la question d'un éventuel sur-conservatisme employé dans l'approche par éléments finis pour détecter l'initiation de fissures dans les aciers inoxydables irradiés. Il est également apparu que la convergence à la discrétisation spatiale avec la méthode à base de FFT est pratiquement indépendante de la déformation macroscopique appliquée et de la taille de l'agrégat (en nombre de grains). Cette étude a montré la pertinence de la méthode à base de FFT pour ce type d'acier.

La loi de plasticité prend la forme additive (3.60) pour la déformation totale mais les vitesses de glissement sont données par :

$$\dot{\gamma}^{(s)} = \left\{ \frac{|\boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\mu}^{(s)}| - \tau_c^{(s)}}{K_0} \right\}^n \text{sign}(\boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\mu}^{(s)}), \quad (3.67)$$

où K_0 est un paramètre de Norton et $\{\cdot\}$ sont les crochets Macaulay. Les $\tau_c^{(s)}$ représentent les contraintes de cisaillement résolues critiques qui évoluent avec la déformation plastique selon une loi de durcissement de la forme suivante :

$$\tau_c^{(s)} = \bar{\tau}_0 + \tau_a \exp\left(-\frac{|\dot{\gamma}^{(s)}|}{\bar{\gamma}_0}\right) + \bar{\mu} \sqrt{\sum_{u=1}^{12} a_{su} r_D^{(u)}} + \alpha_L \bar{\mu} \sqrt{\sum_{p=1}^4 r_L^{(p)}}, \quad (3.68)$$

où les variables internes $r_D^{(s)}$ et $r_L^{(p)}$ représentent, respectivement, les densités normalisées de dislocations se déplaçant selon les douze directions cristallographiques $\{111\}\langle 110 \rangle$ et de boucles de Frank définies sur les quatre plans cristallographiques $\{111\}$, qui, à leur tour, évoluent avec la déformation plastique selon les équations :

$$\dot{r}_D^{(s)} = \left(\frac{1}{\bar{\kappa}} \sqrt{\sum_{u=1}^{12} b_{su} r_D^{(u)}} + \frac{1}{\bar{\kappa}} \sqrt{K_{dl} \sum_{p=1}^4 r_L^{(p)} - G_c r_D^{(s)}} \right) |\dot{\gamma}^{(s)}| \quad (3.69)$$

$$\dot{r}_L^{(p)} = -A_L (r_L^{(p)} - r_L^{sat}) \left(\sum_{s \in \text{plan } p} |\dot{\gamma}^{(s)}| \right) \left(\sum_{s \in \text{plan } p} r_D^{(s)} \right). \quad (3.70)$$

Contrairement à la loi microscopique utilisée pour le modèle analytique, cette loi tient compte de l'anisotropie élastique et d'un écrouissage. L'anisotropie élastique est prise en compte par un tenseur d'élasticité cubique $\mathbf{C} = \mathbf{S}^{-1}$ et l'écrouissage est pris en compte via douze densités de dislocation et quatre densités de boucle de Frank. Les cissions critiques résolues sont couplées aux densités de dislocation via une matrice d'interaction entre dislocations a_{su} (matrice 12x12 avec 6 paramètres indépendants, forme générale spécifiée dans le tableau 3.4), tandis que les densités de dislocation sont couplées via une matrice b_{su} (matrice 12x12) indiquée dans le tableau 3.3. Initialement, les densités de dislocation normalisées sont prises de même valeur r_D^0 pour tous les

systèmes de glissement et les densités de boucle de Frank normalisées sont prises de même valeur r_L^0 pour tous les plans de glissement. Pour tenir compte d'un mécanisme de désancrage des dislocations, un glissement de référence $\bar{\gamma}_0$ a été introduit pour ajuster la vitesse de l'avalanche après le désancrage des dislocations. Pour une description détaillée du fondement physique de cette loi de plasticité cristalline, le lecteur est invité à consulter (Han, 2012; Tanguy *et al.*, 2013; Hure *et al.*, 2016).

C_{11}	C_{12}	C_{44}	$\bar{\mu}$	K_0	τ_a	n	G_c
199 GPa	136 GPa	105 GPa	65.5 GPa	10 MPa $s^{1/n}$	61.2 MPa	15	10.4
$\bar{\kappa}$	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6	
42.8	0.124	0.124	0.070	0.625	0.137	0.122	
b_{ii}	$b_{ij} \ i \neq j$	r_D^0	r_L^0	K_{dl}	α_L	A_L	r_L^{sat}
0	1	$1.03 \cdot 10^{-11}$	$4.9 \cdot 10^{-6}$	$2.50 \cdot 10^{-7}$	0.57	$5.548 \cdot 10^8$	$3.234 \cdot 10^{-6}$

TABLE 3.3 – Paramètres de la loi de plasticité cristalline de Han (2012) pour l'acier SA304L à 330°C irradié à 13 dpa.

k	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
1	a_1	a_2	a_2	a_4	a_5	a_5	a_5	a_6	a_3	a_5	a_3	a_6
2	a_2	a_1	a_2	a_5	a_3	a_6	a_4	a_5	a_5	a_5	a_6	a_3
3	a_2	a_2	a_1	a_5	a_6	a_3	a_5	a_3	a_6	a_4	a_5	a_5
4	a_1	a_5	a_5	a_1	a_2	a_2	a_6	a_5	a_3	a_6	a_3	a_5
5	a_5	a_3	a_6	a_2	a_1	a_2	a_3	a_5	a_6	a_5	a_5	a_4
6	a_5	a_6	a_3	a_2	a_2	a_1	a_5	a_4	a_5	a_3	a_6	a_5
7	a_5	a_4	a_5	a_6	a_3	a_5	a_1	a_2	a_2	a_6	a_5	a_3
8	a_6	a_5	a_3	a_5	a_5	a_4	a_2	a_1	a_2	a_3	a_3	a_6
9	a_3	a_5	a_6	a_3	a_6	a_5	a_3	a_2	a_1	a_5	a_4	a_5
10	a_5	a_5	a_4	a_6	a_5	a_3	a_6	a_3	a_5	a_1	a_2	a_3
11	a_3	a_6	a_5	a_3	a_5	a_6	a_5	a_5	a_4	a_2	a_1	a_2
12	a_6	a_3	a_5	a_5	a_4	a_5	a_3	a_6	a_5	a_2	a_2	a_1

TABLE 3.4 – Forme générale de la matrice d'interaction entre dislocations \mathbf{a} .

La méthode dite "de base" est utilisée pour les simulations numériques par FFT (Moulinec et Suquet, 1998) (utilisation du code CraFT et d'un schéma implicite pour l'intégration en temps de la loi de plasticité cristalline, simulations en direction de contrainte macroscopique imposée). Le nombre de voxels pour la discrétisation spatiale dans la cellule unitaire (512^3 voxels) découle d'une étude paramétrique présentée à l'Annexe B de (Vincent *et al.*, 2020) : cela donne en moyenne 64^3 voxels par grain et environ 1310 voxels par cavité.

Les calculs en traction simple sont obtenus en fixant une direction de contrainte macroscopique avec une seule composante non-nulle $\Sigma_{33} > 0$, en appliquant une vitesse de déformation $\dot{E}_{33} = 3 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ jusqu'à ce que E_{33} atteigne 3×10^{-2} . Les calculs en chargement purement hydrostatique sont obtenus en prenant Σ^0 égal au tenseur d'identité, en appliquant un taux de déformation hydrostatique $\dot{E}_m = (\dot{E}_{11} + \dot{E}_{22} + \dot{E}_{33})/3 = 3 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ jusqu'à

ce que E_m atteint 3×10^{-2} . Les calculs avec différents taux de triaxialité des contraintes macroscopiques sont obtenus en imposant :

$$\Sigma^0 = \begin{pmatrix} \Sigma_{11}^0 & 0 & 0 \\ 0 & \Sigma_{11}^0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{avec} \quad 0 \leq \Sigma_{11}^0 \leq 1, \quad (3.71)$$

et en appliquant le taux $\Sigma_{11}^0 \dot{E}_{11} + \Sigma_{11}^0 \dot{E}_{22} + \dot{E}_{33} = 9 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ jusqu'à ce que la valeur de $\Sigma_{11}^0 E_{11} + \Sigma_{11}^0 E_{22} + E_{33}$ atteigne 9×10^{-2} . Un autre état de contrainte avec cisaillement simple est étudié en imposant :

$$\Sigma^0 = \begin{pmatrix} 1 & \Sigma_{12}^0 & 0 \\ \Sigma_{12}^0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{avec} \quad 0 \leq \Sigma_{12}^0 \leq 1.732, \quad (3.72)$$

et en appliquant le taux $\dot{E}_{11} + \dot{E}_{22} + \dot{E}_{33} + 2\Sigma_{12}^0 \dot{E}_{12} = 9 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ jusqu'à ce que la valeur de $E_{11} + E_{22} + E_{33} + 2\Sigma_{12}^0 E_{12}$ atteigne 9×10^{-2} .

Tout d'abord, le modèle numérique (pour les simulations par FFT) est calibré par comparaison avec des résultats expérimentaux disponibles pour aciers sans cavité (sans gonflement d'irradiation). Pour cela, toutes les valeurs des paramètres matériaux de Han (2012) sont utilisées à l'exception de $\bar{\gamma}_0$ et $\bar{\tau}_0$. Les valeurs retenues sont indiquées dans le tableau 3.3 (où les constantes élastiques sont données en notation Voigt). Un exposant de fluage relativement élevé est fixé pour représenter une faible sensibilité à la vitesse de déformation. Les paramètres restants $\bar{\gamma}_0$ et $\bar{\tau}_0$ sont ajustés sur des courbes de traction d'aciers SA304L irradiés à environ 300°C et pour des niveaux d'irradiation élevés (au moins 10 dpa) rapportés par Han (2012); Hure *et al.* (2016); Chen *et al.* (2014). La figure 3.11 permet de comparer ces courbes de traction avec les prédictions numériques obtenues avec $\bar{\gamma}_0 = 0.5$ et $\bar{\tau}_0 = 58 \text{ MPa}$. Une bonne adéquation est observée entre les prédictions numériques avec ces valeurs pour $\bar{\gamma}_0$ et $\bar{\tau}_0$ et les courbes de traction expérimentales. Sur la figure 3.11, il peut être observé que les courbes de traction expérimentales présentent un léger adoucissement juste après la contrainte maximale. En suivant Han (2012), cet adoucissement n'est pas dû à la striction de l'éprouvette de traction ou à l'endommagement ductile, mais plutôt à une dynamique particulière des dislocations. La loi de plasticité cristalline de Han (2012) présentée ci-dessus est capable de reproduire un tel pic (ou crochet) en utilisant un choix approprié de ses paramètres. En effet, $\bar{\gamma}_0$ ajuste la vitesse de l'avalanche après le désancrage des dislocations et donc la diminution de sa valeur augmente la valeur du pic sur la courbe de contrainte-déformation effective du polycristal, tandis que $\bar{\tau}_0$ ajuste le niveau de contrainte maximale. Cependant, les résultats numériques obtenus avec des pics bien définis se sont avérés fortement dépendants de la discrétisation spatiale du polycristal. Ainsi, il a été choisi d'adopter une description qui fait correspondre les niveaux de contraintes maximales à ceux qui apparaissent loin dans le régime plastique (voir figure 3.11).

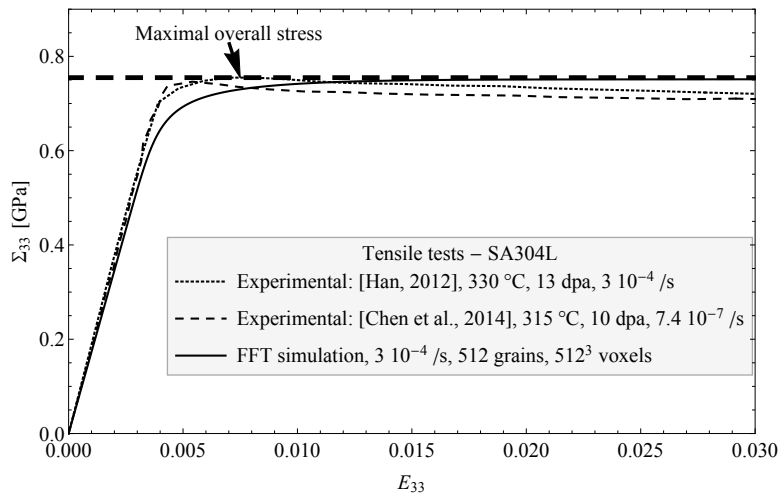


FIGURE 3.11 – Courbes de traction simple. Comparaison entre les résultats expérimentaux et les simulations numériques par FFT (Vincent *et al.*, 2020).

Le modèle calibré est ensuite utilisé pour générer des résultats de référence pour les matériaux poreux. La figure 3.12 montre les courbes de traction obtenues avec les différentes microstructures présentées sur la figure 3.10. Comme attendu, la porosité intragranulaire réduit le module de Young effectif et la contrainte effective maximale. Il est observé que les trois microstructures présentant une porosité de 2 % (les microstructures (a), (b) et (c) de la figure 3.10) conduisent à des courbes de traction très proches : les courbes en trait plein, en pointillés et en tirets sur la figure 3.12 ne sont pas discernables visuellement. Une conclusion similaire est obtenue pour la porosité de 4 %. Cela confirme la bonne représentativité de la distribution des cavités dans la cellule unitaire. De ces courbes sont extraites les évolutions du module de Young et de la contrainte maximale avec le gonflement.

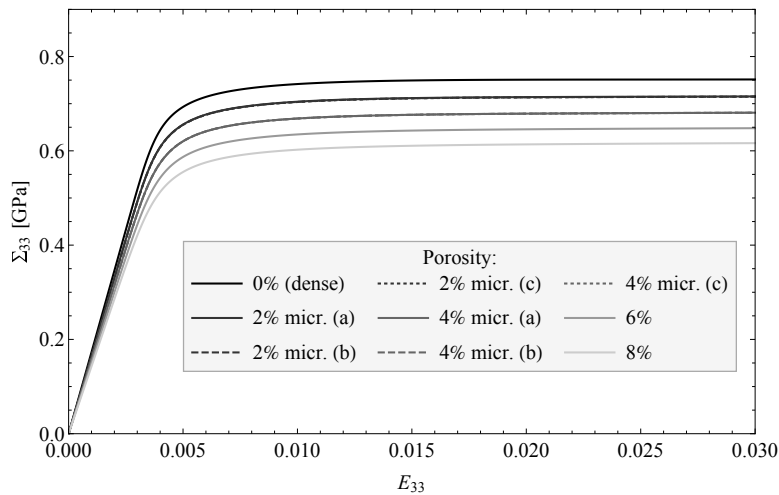


FIGURE 3.12 – Résultat des simulations numériques par FFT dans le cas de la traction simple sur les microstructures de la figure 3.10 (Vincent *et al.*, 2020).

L'évolution du module de Young effectif \tilde{E} en fonction du gonflement est représentée sur la figure 3.13 avec les résultats expérimentaux de Balachov *et al.* (2004) et Ershova *et al.* (2008) obtenus sur un acier austénitique russe écroui à froid. Ici, le gonflement est défini en fonction de la porosité f par $f/(1-f)$ et \tilde{E}_0 désigne le module de Young pour le matériau dense. Les échantillons testés ont été découpés dans des tubes de gainage de combustibles qui avaient été irradiés dans le réacteur à neutrons rapides BN-600. Le modèle numérique s'avère

être en bonne adéquation avec les expériences. D'après les simulations, un niveau de porosité de 8 % entraîne une réduction de 15 % du module de Young.

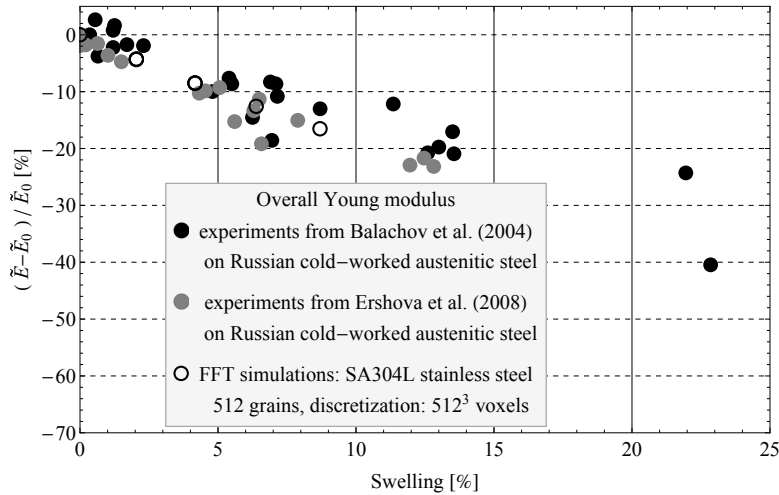


FIGURE 3.13 – Module de Young effectif en fonction du gonflement (Vincent *et al.*, 2020).

L'évolution de la contrainte effective maximale \tilde{R}_m est reportée sur la figure 3.14 avec des résultats expérimentaux de Neustroev et Garner (2008) obtenus sur un acier inoxydable austénitique russe Kh18H10T. Les échantillons testés proviennent d'un composant irradié dans le réacteur à neutrons rapides BOR-60. Il est mentionné ici que l'acier Kh18H10T est le principal matériau de construction des internes des réacteurs à eau russes et que l'analogue occidental le plus proche de ce matériau est l'acier inoxydable de nuance 321 (Neustroev et Garner, 2008). Les résultats reportés sur la figure 3.14 correspondent à des tests effectués à ou proche de la température d'irradiation, de 360°C à 430°C. De nouveau, il est observé que le modèle numérique est en bonne adéquation avec les expériences. D'après les simulations, un niveau de porosité de 8 % entraîne une réduction de 20 % de la contrainte maximale.

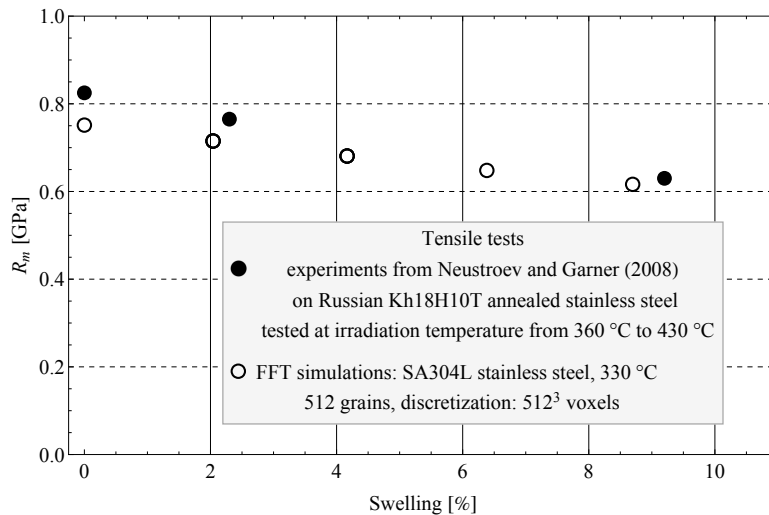


FIGURE 3.14 – Contrainte effective maximale en fonction du gonflement (Vincent *et al.*, 2020).

Les simulations numériques par FFT sont ensuite utilisées pour évaluer la pertinence du modèle analytique pour reproduire la réponse d'un acier de nuance SA304L à 330°C. Tout d'abord, les paramètres du modèle analytique sont déterminés en utilisant la réponse en traction du polycristal dense prédite par FFT. Les équations

du modèle analytique (3.63) et (3.64) sont intégrées en temps avec une méthode de Runge-Kutta à pas de temps adaptatif. À chaque itération, la valeur de $|\Lambda|$ est obtenue en résolvant l'équation non linéaire (3.58) avec une méthode de Newton. Selon Han (2012), les coefficients d'élasticité sont fixés à $k = 156.7$ GPa et $\mu = 65.7$ GPa. L'exposant de fluage n est quant à lui fixé à la même valeur que dans le modèle numérique (i.e. pour les simulations FFT), c'est-à-dire $n = 15$ et la vitesse de déformation de référence est fixée à $\dot{\gamma}_0 = 1 \text{ s}^{-1}$. Pour cet exposant de fluage, les coefficients α et β valent 1.789 et 5.793 respectivement. Enfin, la valeur de la contrainte d'écoulement τ_0 est calibrée en confrontant les réponses du modèle analytique et de la simulation numérique par FFT. La valeur $\tau_0 = 498$ MPa est retenue et le résultat est illustré sur la figure 3.15. L'ensemble des paramètres du modèle analytique est résumé dans le tableau 3.5.

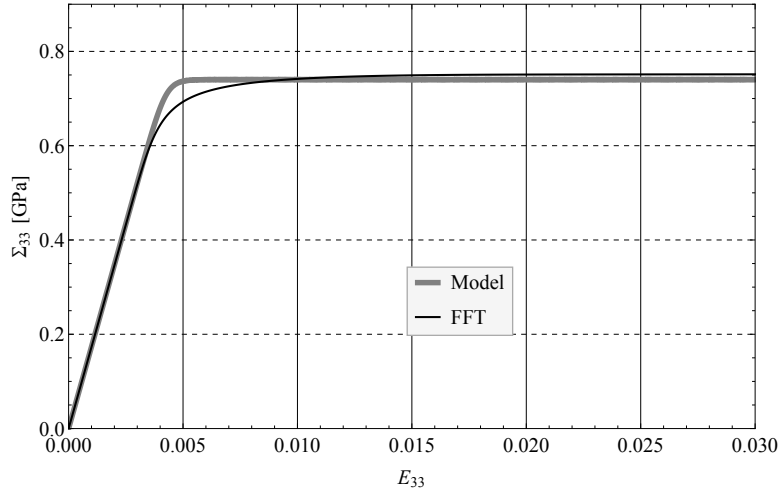


FIGURE 3.15 – Courbes de traction : comparaison entre les prédictions du modèle analytique et des simulations numériques par FFT (Vincent *et al.*, 2020).

k	μ	n	$\dot{\gamma}_0$	τ_0	α	β	q
156.7 GPa	65.7 GPa	15	1 s^{-1}	498 MPa	1.789	5.793	2

TABLE 3.5 – Paramètres du modèle analytique.

Après avoir calibré le modèle analytique sur la réponse du polycristal dense, les prédictions du modèle analytique sont comparées aux simulations par FFT dans le cas des polycristaux poreux. Les figures 3.16 et 3.17 montrent les comparaisons pour le module de Young effectif et le module de compressibilité effectif en fonction de la porosité. Il est rappelé que, compte tenu de l'isotropie globale du polycristal poreux, ces deux paramètres caractérisent complètement la réponse élastique effective. Il est observé que l'accord est tout à fait satisfaisant sur toute la gamme des porosités considérée. Les simulations numériques par FFT utilisées pour calculer le module de compressibilité effectif sont celles réalisées dans le cas du chargement purement hydrostatique.

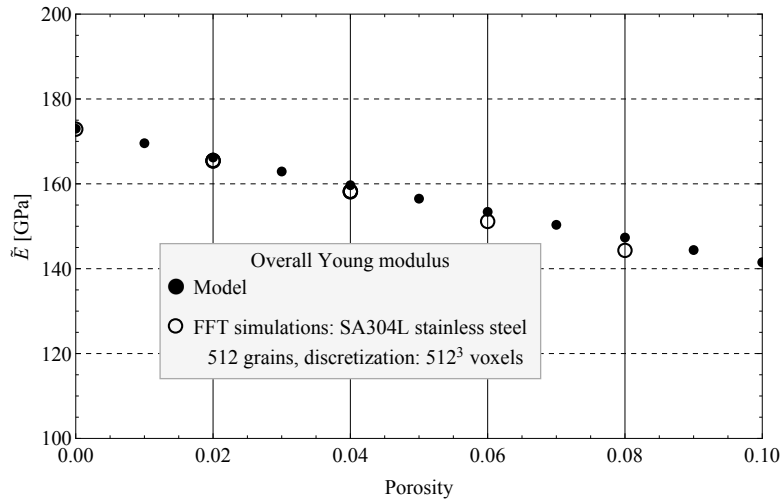


FIGURE 3.16 – Évolution du module de Young effectif en fonction de la porosité : modèle micromécanique et simulations numériques par FFT (Vincent *et al.*, 2020).

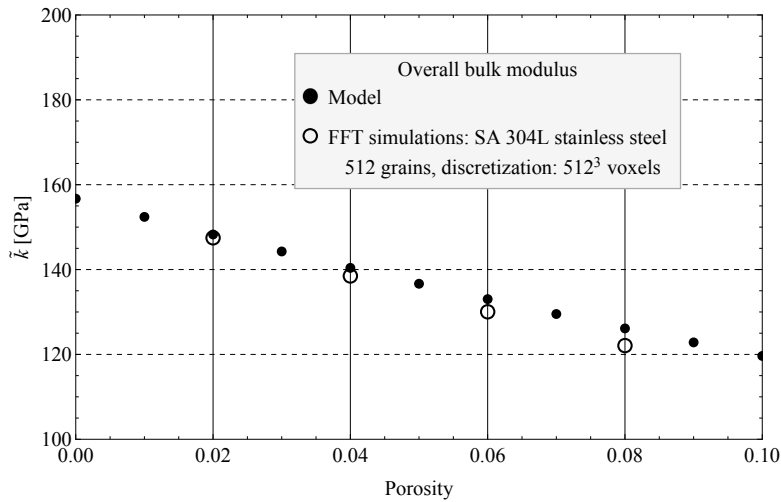


FIGURE 3.17 – Évolution du coefficient de compressibilité effectif en fonction de la porosité : modèle micromécanique et simulations numériques par FFT (Vincent *et al.*, 2020).

La partie viscoplastique du modèle analytique contient un paramètre supplémentaire q introduit dans la définition de la porosité modifiée f^* . Une valeur appropriée de q est identifiée en comparant les prédictions du modèle analytique et des simulations par FFT de la contrainte effective maximale sous traction uniaxiale. Cela conduit à retenir $q = 2$. Les résultats sont montrés sur la figure 3.18. Il convient de rappeler que le modèle analytique ne tient compte d'aucun adoucissement plastique : la contrainte maximale reportée sur cette figure correspond en fait au niveau de contrainte obtenu en fin de simulation (loin dans le domaine plastique). Étant donné la valeur élevée de l'exposant de fluage, ce niveau de contrainte est quasiment insensible à la vitesse de déformation (du moins dans la gamme de vitesses de déformation considérées ici). Après avoir déterminé ce dernier paramètre, aucun autre ajustement n'est finalement nécessaire : le modèle analytique fournit alors un outil de prédiction de la réponse du matériau pour toute condition de chargement. La figure 3.19 montre une comparaison entre le modèle analytique et numérique pour la contrainte effective maximale sous traction hydrostatique. Il est observé que les prédictions du modèle analytique restent précises pour cette condition de chargement dans toute la gamme des porosités considérée. Pour confirmer la précision du modèle analytique pour des conditions de chargement plus générales, d'autres comparaisons sont reportées pour différents états

de contrainte macroscopique. Les contraintes macroscopiques hydrostatiques et équivalentes obtenues à la fin des simulations sur un polycristal poreux sont représentées sur les figures 3.20 et 3.21. De nouveau, l'accord est satisfaisant sur toute la gamme des états de contrainte étudiée.

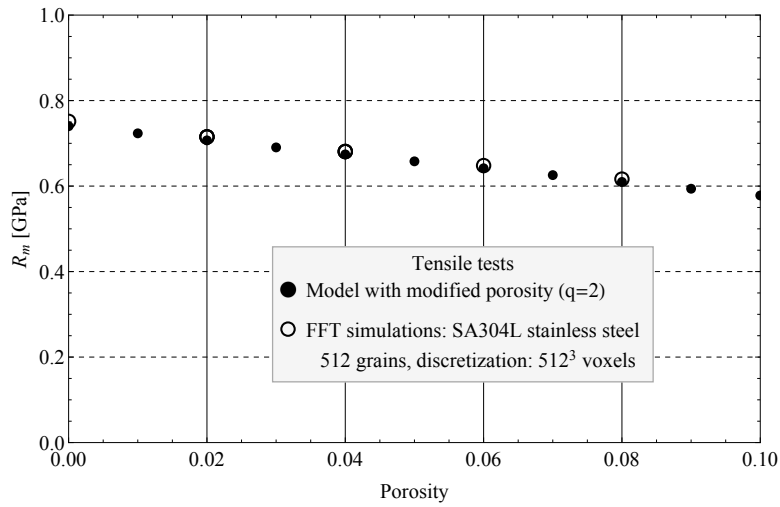


FIGURE 3.18 – Contrainte effective maximale sous traction uni-axiale en fonction de la porosité : modèle micromécanique et simulations numériques par FFT (Vincent *et al.*, 2020).

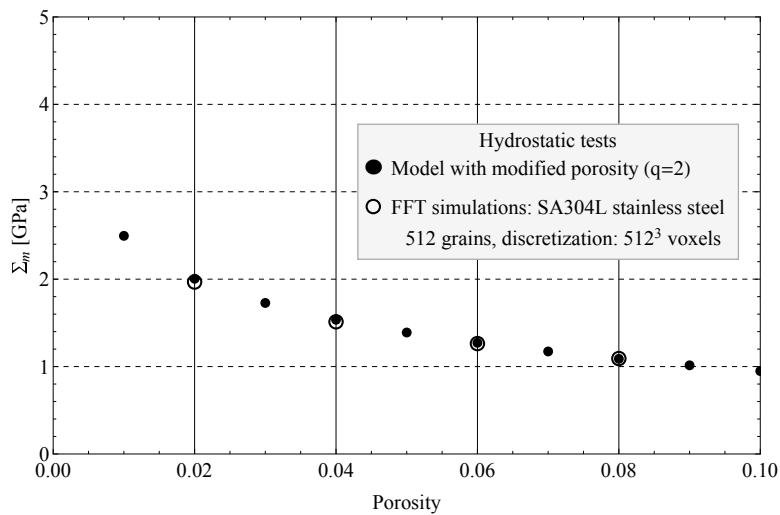


FIGURE 3.19 – Contrainte effective maximale sous traction hydrostatique en fonction de la porosité : modèle micromécanique et simulations numériques par FFT (Vincent *et al.*, 2020).

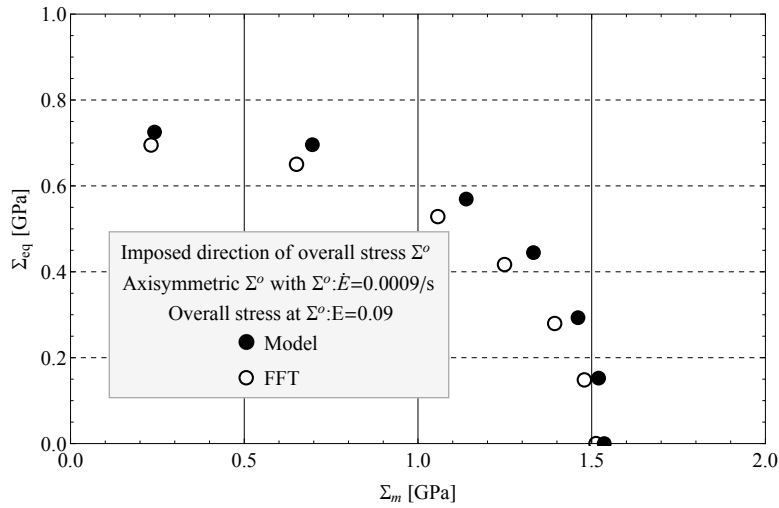


FIGURE 3.20 – Direction de contrainte macroscopique Σ^o axisymétrique selon (3.71). Contraintes macroscopiques hydrostatiques et équivalentes obtenues en fin de simulation. Comparaison entre le modèle micromécanique et les simulations par FFT. Simulations par FFT réalisées sur la microstructure (a) avec 4 % de porosité de la Figure 3.10 (Vincent *et al.*, 2020).

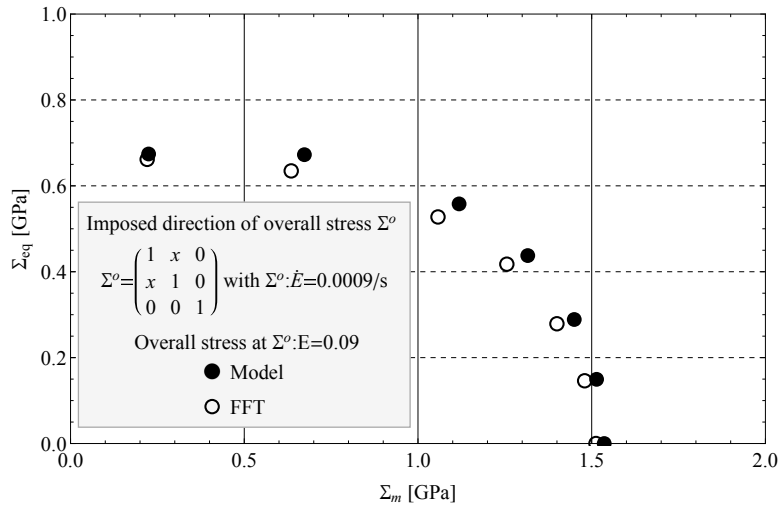


FIGURE 3.21 – Direction de contrainte macroscopique Σ^o avec cisaillement simple selon (3.72). Contraintes macroscopiques hydrostatiques et équivalentes obtenues en fin de simulation. Comparaison entre le modèle micromécanique et les simulations par FFT. Simulations par FFT réalisées sur la microstructure (a) avec 4 % de porosité de la Figure 3.10 (Vincent *et al.*, 2020).

3.3 Viscoplasticité d'un monocristal poreux sous chargement purement hydrostatique

Les résultats présentés dans cette section ont été obtenus en collaboration avec Louis Joëssel, Mihail Garajeu et Martin Idiart. Ils sont basés sur (Joëssel, 2018) et (Joëssel et al., 2018).

Plusieurs modèles ont été développés récemment pour prendre en compte l'anisotropie cristalline de la matrice d'un monocristal poreux en viscoplasticité. Le lecteur est invité à consulter l'analyse bibliographique de Joëssel (2018) et les références associées pour plus d'informations. Notamment, les modèles de Han *et al.* (2013) et de Paux *et al.* (2015) dans le cas plastique et les modèles de Mbiakop *et al.* (2015) et Song et Ponte Castañeda (2017) dans le cas viscoplastique sont présentés. Ces modèles font apparaître qu'à chaque fois le cas du chargement purement hydrostatique nécessite un traitement particulier. Cela a justifié la recherche d'un

nouveau modèle pour un monocristal viscoplastique contenant une distribution isotrope de cavités soumis à un chargement purement hydrostatique. L'objectif est de proposer une référence pour ajuster des modèles de comportement plus généraux (comme celui présenté en 3.1).

La première approche consiste à idéaliser le monocristal poreux comme un assemblage de sphères creuses (approche dite HSA pour "Hollow Sphere Assemblage"), puis à borner le potentiel de dissipation effectif en utilisant un champ de vitesse sphérique. Cette approche est similaire à celle présentée en 3.1 pour le monocristal poreux mais sans utiliser la majoration du potentiel local de la matrice. Cette approche s'est révélée peu pertinente dans le cas du chargement purement hydrostatique et n'est pas présentée dans ce document par souci de concision.

La seconde approche consiste à idéaliser le monocristal poreux comme un laminé de rang infini obéissant à un procédé de laminage isotrope (approche dite LAM pour laminé). Le comportement de ce type de microstructure, initialement proposé par deBotton (2005) en deux dimensions puis généralisé par Idiart (2008), peut être obtenu de manière exacte par un potentiel de dissipation. Un point particulièrement intéressant est que pour un chargement purement hydrostatique, ces laminés ont la même réponse exacte qu'un assemblage de sphères creuses lorsque la distribution des cavités et le comportement de la matrice sont isotropes (voir Idiart (2007, 2008)). Cependant, contrairement à l'approche précédente, cette approche conduit à un résultat exact pour ces laminés même lorsque la matrice est anisotrope. Cette étude cherche donc à estimer si cette approche peut conduire à un résultat intéressant pour les monocristaux poreux (à matrice anisotrope).

Pour la matrice, plusieurs types de symétries cubiques sont considérées dans (Joëssel, 2018) et (Joëssel *et al.*, 2018), ainsi que les cas viscoplastique, plastique et linéaire. Par souci de concision, uniquement le cas des CFC en viscoplasticité est considéré dans ce rapport (en accord avec les sections 3.1 et 3.2). Le problème du monocristal poreux posé en 3.1 est repris (équations (3.10) à (3.15)).

Comme synthétisé dans Joëssel (2018), un laminé séquencé s'obtient par construction itérative de stratification de matériaux laminés (qui eux même ont été obtenus par un procédé de laminage d'ordre inférieur) avec d'autres matériaux laminés, ou directement avec les phases homogénéisées du matériau multi-phasé, de manière à produire une microstructure hiérarchique de complexité croissante. Le rang du laminé est le nombre d'opérations de laminage requises pour obtenir le laminé séquencé final. Un laminé séquencé à deux phases de type matrice-inclusion peut être construit en stratifiant à chaque étape le laminé avec la phase matricielle comme cela est illustré sur la figure 3.22.

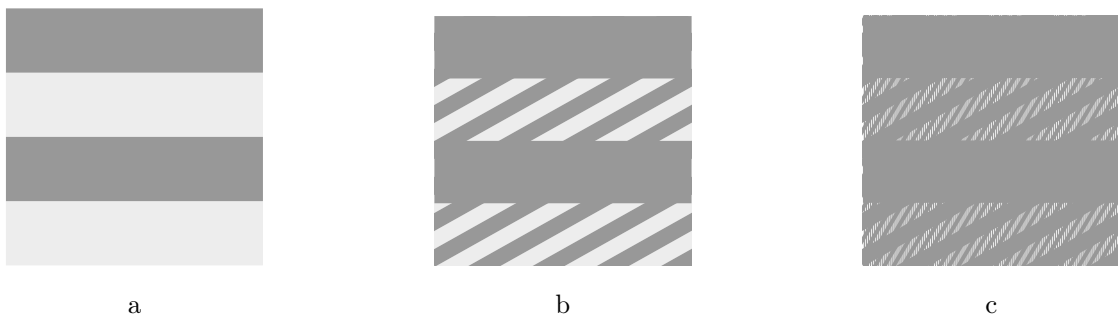


FIGURE 3.22 – a : laminé séquencé d'ordre 1. b : laminé séquencé d'ordre 2. c : laminé séquencé d'ordre 3 (Joëssel, 2018).

La construction d'un laminé de rang infini à partir d'un laminé séquencé de rang N devient possible en considérant une concentration de matrice infinitésimale. La microstructure s'apparente alors à des membranes

infiniment fines enclavant la phase d'inclusion. Ce cas permet la linéarisation de l'expression du potentiel effectif d'un laminé séquencé de rang N , puis le passage à la limite $N \rightarrow \infty$. Ensuite, un laminé de rang infini avec une concentration finie de matrice est construit via un schéma différentiel. L'idée générale est de considérer plusieurs fois un laminé de rang infini avec une concentration infinitésimale de matrice comme la phase d'inclusion d'un laminé de rang infini avec une concentration infinitésimale de matrice. Une quantité infinitésimale de matrice est à chaque fois ajoutée au composite et, après répétition du processus une infinité de fois, une concentration finie de matrice est obtenue.

Le schéma différentiel conduit à une équation de type Hamilton-Jacobi où la concentration de la phase inclusionnaire et les champs macroscopiques jouent respectivement le rôle des variables temporelle et spatiale. Une fonction de distribution caractérise la distribution de la phase inclusionnaire. Le potentiel effectif en taux de déformation $\tilde{w}(\dot{\mathbf{E}}) = \hat{w}(\dot{\mathbf{E}}, \tau = -\ln f)$, dans le cas d'un laminé de rang infini où la phase inclusionnaire est vide et distribuée de manière isotrope, est gouverné par une équation de Hamilton-Jacobi de la forme (Idiart, 2008) :

$$\partial_\tau \hat{w} + \hat{w} + \sup_{\mathbf{a}} \left\langle \partial_{\dot{\mathbf{E}}} \hat{w} : (\mathbf{a} \otimes_s \boldsymbol{\xi}) - w(\dot{\mathbf{E}} + \mathbf{a} \otimes_s \boldsymbol{\xi}) \right\rangle_S = 0, \quad \hat{w}(\dot{\mathbf{E}}, 0) = 0. \quad (3.73)$$

où $\boldsymbol{\xi} = \mathbf{x}/\|\mathbf{x}\|$ et \mathbf{x} est le vecteur position relatif au centre de la sphère unité. Comme spécifié dans (Joëssel, 2018), pour une matrice incompressible, l'équation de Hamilton-Jacobi (3.73) prend une forme particulière (attention : le potentiel en taux de déformation de la matrice est noté ici w , à ne pas confondre avec le rapport de forme défini en 2.1.1, et non pas ϕ comme en 3.1 et le potentiel effectif en taux de déformation est noté ici \tilde{w} et non pas Φ comme en 3.1). Si la trace de l'argument de w est non nulle, alors $w \rightarrow \infty$, $\tilde{w} \rightarrow \infty$ et la réponse globale de la microstructure est incompressible. L'argument de w doit donc être purement déviatorique pour s'affranchir de toute réponse globale incompressible du matériau. La trace de l'argument de w est imposée nulle : $\text{Tr}(\dot{\mathbf{E}} + \mathbf{a} \otimes_s \boldsymbol{\xi}) = 0$ et donc $\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\xi} = -\text{Tr}\dot{\mathbf{E}}$. Le vecteur \mathbf{a} (attention : à ne pas confondre avec la matrice d'interaction entre dislocations définie en 3.2) est décomposé en une partie portée par $\boldsymbol{\xi}$ et en une autre partie orthogonale à $\boldsymbol{\xi}$ notée \mathbf{a}_\perp avec $\mathbf{a} = (\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\xi})\boldsymbol{\xi} + \mathbf{a}_\perp = -(\text{Tr}\dot{\mathbf{E}})\boldsymbol{\xi} + \mathbf{a}_\perp$. La restriction $\mathbf{a}_\perp \cdot \boldsymbol{\xi} = 0$ et le constat $\boldsymbol{\xi} \otimes \boldsymbol{\xi} = (1/3)\mathbf{i} + \boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi}$ permettent de réécrire l'équation (3.73) comme :

$$\begin{cases} \partial_\tau \hat{w} + \hat{w} + \sup_{\mathbf{a}_\perp} \left\langle \partial_{\dot{\mathbf{E}}} \hat{w} : (-\text{Tr}\dot{\mathbf{E}} \boldsymbol{\xi} \otimes \boldsymbol{\xi} + \mathbf{a}_\perp \otimes_s \boldsymbol{\xi}) - w(-\text{Tr}\dot{\mathbf{E}} \boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi} + \dot{\mathbf{E}}^d + \mathbf{a}_\perp \otimes_s \boldsymbol{\xi}) \right\rangle_S = 0, \\ \hat{w}(\dot{\mathbf{E}}, 0) = 0. \end{cases} \quad (3.74)$$

Une propriété intéressante est que le potentiel effectif \tilde{w} hérite de la symétrie cubique du potentiel local w . Un taux de déformation hydrostatique $\dot{\mathbf{E}} = \dot{E}_m \mathbf{i}$ implique une contrainte hydrostatique $\boldsymbol{\Sigma} = \Sigma_m \mathbf{i}$, (voir Annexe A de (Joëssel, 2018)) et :

$$\Sigma_m \mathbf{i} = \partial_{\dot{\mathbf{E}}} \tilde{w}(\dot{E}_m \mathbf{i}) = \frac{1}{3} \partial_{\dot{E}_m} \tilde{w}(\dot{E}_m \mathbf{i}) \mathbf{i} \quad (3.75)$$

ou :

$$\Sigma_m = \frac{1}{3} \partial_{\dot{E}_m} \tilde{w}_h(\dot{E}_m) \quad (3.76)$$

où la fonction $\tilde{w}_h(\dot{E}_m)$ est équivalente à $\tilde{w}(\dot{E}_m \mathbf{i})$. Pour la loi puissance considérée ici, le potentiel effectif \tilde{w}_h hérite de w les propriétés d'homogénéité de degré $1 + 1/n$ en $\dot{\mathbf{E}}$ et de degré $-1/n$ en $\dot{\gamma}_0$ (voir Annexe A de (Joëssel, 2018)). Ainsi, le potentiel effectif \tilde{w}_h prend la forme suivante :

$$\tilde{w}_h(\dot{E}_m) = \frac{\dot{\gamma}_0 \tilde{\sigma}_h}{1 + 1/n} \left| \frac{3\dot{E}_m}{\dot{\gamma}_0} \right|^{1+1/n}, \quad (3.77)$$

où $\tilde{\sigma}_h$ est la contrainte d'écoulement hydrostatique qui dépend de l'exposant n , de la porosité f , de la cisssion de référence τ_0 et des tenseurs de Schmid $\boldsymbol{\mu}^{(k)}$, mais qui est indépendant du taux de déformation hydrostatique \dot{E}_m et du taux de glissement de référence $\dot{\gamma}_0$. Ainsi, la contrainte d'écoulement hydrostatique $\tilde{\sigma}_h$ caractérise complètement la réponse d'un monocristal poreux sous chargement hydrostatique. L'expression (3.77) peut être interprétée comme :

$$\hat{w}_h(\dot{E}_m, \tau) = \frac{\dot{\gamma}_0 \hat{\sigma}_h(\tau)}{1 + 1/n} \left| \frac{3\dot{E}_m}{\dot{\gamma}_0} \right|^{1+1/n} \quad (3.78)$$

et sa dérivée par rapport à \dot{E}_m s'écrit :

$$\partial_{\dot{E}_m} \hat{w}_h(\dot{E}_m, \tau) = 3\hat{\sigma}_h \left| \frac{3\dot{E}_m}{\dot{\gamma}_0} \right|^{1/n} \text{sign}(\dot{E}_m), \quad (3.79)$$

Par insertion de (3.78) dans (3.74), l'équation de Hamilton-Jacobi réduite (3.74) se résume à une équation différentielle ordinaire en $\hat{\sigma}_h(\tau)$:

$$\partial_\tau \hat{\sigma}_h - \frac{1}{n} \hat{\sigma}_h - \alpha_{LAM}(n) = 0, \quad \hat{\sigma}_h(0) = 0 \quad (3.80)$$

où

$$\alpha_{LAM}(n) = \frac{1+n}{n} \dot{\gamma}_0^{1/n} \inf_{\mathbf{a}_\perp} \langle w(\boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi} + \mathbf{a}_\perp \otimes_s \boldsymbol{\xi}) \rangle_S, \quad (3.81)$$

dont la solution est :

$$\hat{\sigma}_h(\tau) = \alpha_{LAM}(n) n \left(e^{\tau/n} - 1 \right). \quad (3.82)$$

À l'instant final t , pour la porosité désirée, la contrainte d'écoulement hydrostatique $\tilde{\sigma}_h = \tilde{\sigma}_h(-\ln f)$ peut s'écrire sous la forme :

$$\tilde{\sigma}_h = \alpha_{LAM}(n) n \left(f^{-1/n} - 1 \right). \quad (3.83)$$

En utilisant la forme particulière (3.11) du potentiel w , l'expression (3.81) devient :

$$\alpha_{LAM}(n) = \frac{1+n}{n} \inf_{\mathbf{a}_\perp} \sup_{\boldsymbol{\sigma}^d \in \mathcal{T}^d} \left\langle \boldsymbol{\sigma}^d : (\boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi} + \mathbf{a}_\perp \otimes_s \boldsymbol{\xi}) - \sum_{k=1}^{12} \frac{\tau_0}{n+1} \left| \frac{\boldsymbol{\sigma}^d : \boldsymbol{\mu}^{(k)}}{\tau_0} \right|^{n+1} \right\rangle_S. \quad (3.84)$$

où \mathcal{T}^d est l'ensemble des tenseurs d'ordre deux symétriques et déviatoriques. La condition sur l'infimum des \mathbf{a}_\perp oblige $\boldsymbol{\sigma}^d \cdot \boldsymbol{\xi}$ à être parallèle à $\boldsymbol{\xi}$ (voir Annexe C de (Joëssel, 2018)). La condition $\boldsymbol{\sigma}^d \cdot \boldsymbol{\xi} \parallel \boldsymbol{\xi}$ implique :

$$\alpha_{LAM}(n) = \frac{1+n}{n} \sup_{\boldsymbol{\sigma}^d \in \mathcal{T}_\parallel(\boldsymbol{\xi})} \left\langle \boldsymbol{\sigma}^d : (\boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi}) - \sum_{k=1}^{12} \frac{\tau_0}{n+1} \left| \frac{\boldsymbol{\sigma}^d : \boldsymbol{\mu}^{(k)}}{\tau_0} \right|^{n+1} \right\rangle_S, \quad (3.85)$$

où $\mathcal{T}_\parallel(\boldsymbol{\xi}) = \{ \boldsymbol{\sigma}^d \in \mathcal{T}^d : \boldsymbol{\sigma}^d \cdot \boldsymbol{\xi} \parallel \boldsymbol{\xi} \}$ (voir Annexe C de (Joëssel, 2018)). Cette expression peut encore être simplifiée en évaluant la fonction objective en $\Lambda \boldsymbol{\sigma}^d$ et en optimisant par rapport à Λ . Il en résulte

$$\alpha_{LAM}(n) = \sup_{\boldsymbol{\sigma}^d \in \mathcal{T}_\parallel(\boldsymbol{\xi})} \left\langle \left(|\boldsymbol{\xi} \cdot \boldsymbol{\sigma}^d \cdot \boldsymbol{\xi}|^{(n+1)/n} \right) / \left(\sum_{k=1}^{12} \tau_0^{-n} \left| \boldsymbol{\sigma}^d : \boldsymbol{\mu}^{(k)} \right|^{n+1} \right)^{1/n} \right\rangle_S. \quad (3.86)$$

Des valeurs numériques de α_{LAM} sont données dans (Joëssel, 2018) pour plusieurs valeurs de n . Les détails sur les techniques employées pour évaluer numériquement α_{LAM} sont présentés dans l'Annexe D de (Joëssel, 2018) et ne sont pas repris ici par souci de concision.

Des simulations numériques par FFT en champs complets sont ensuite effectuées pour évaluer la pertinence de ce modèle. La méthode "de base" est utilisée pour les simulations numériques par FFT (utilisation du code CraFT, simulations à direction de contrainte macroscopique imposée). Les cellules unitaires périodiques sont composées d'une matrice et de cavités mono-dispersées en taille et non-interpénétrables. Des cellules unitaires sont représentées sur la figure 3.23. Le comportement de la matrice est élasto-viscoplastique (ajout d'une partie élastique, viscoplasticité cristalline régie par le potentiel (3.7) pour les CFC). Une direction de contrainte macroscopique hydrostatique est imposée avec un taux de déformation macroscopique hydrostatique fixé à 9000^{-1} s^{-1} . Le scalaire $\dot{\gamma}_0$ est fixé à 1 s^{-1} . La contrainte macroscopique hydrostatique Σ_m est calculée (loin dans le domaine plastique) et la contrainte d'écoulement hydrostatique est finalement obtenue par la relation :

$$\bar{\sigma}_h = \Sigma_m \left| \frac{\dot{\gamma}_0}{3\dot{E}_m} \right|^{1/n}, \quad (3.87)$$

qui découle de (3.76) et (3.77). Une étude paramétrique conduit à considérer au moins 13 voxels pour le rayon des cavités. Les cellules unitaires sont discrétisées en 256^3 voxels. Une autre étude a montré que la contrainte d'écoulement hydrostatique est peu sensible à l'agencement spatial des cavités (du moins pour des porosités jusqu'à 10%). La figure 3.24 illustre la comparaison entre les résultats du modèle (approche LAM) et des simulations par FFT. Les résultats obtenus avec le modèle de l'approche HSA sont également reportés. Il ressort que les contraintes d'écoulement hydrostatiques estimées par les modèles (avec les deux approches) sont supérieures à celle obtenue par simulation par FFT. L'approche LAM conduit à des résultats plus proches des simulations par FFT que l'approche HSA. C'est pourquoi le modèle basé sur l'approche LAM a été retenu et utilisé pour ajuster le point purement hydrostatique dans le modèle de 3.1 pour les polycristaux poreux.



FIGURE 3.23 – Exemples de cellules unitaires périodiques avec cavités mono-dispersées en taille et non-interpénétrables pour les simulations par FFT : a) $f = 0.01$, b) $f = 0.1$. (Joëssel *et al.*, 2018).

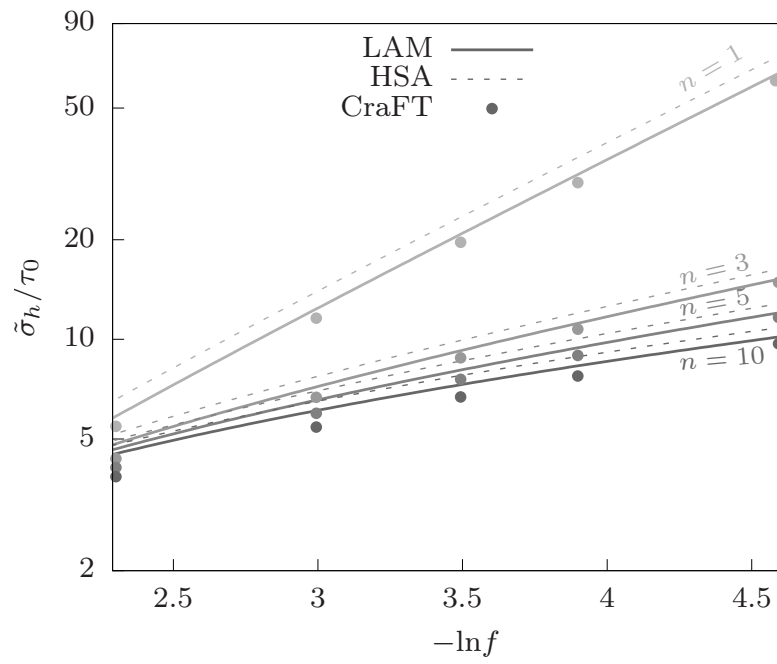


FIGURE 3.24 – Contrainte d'écoulement hydrostatique normalisée par τ_0 en fonction de la porosité f et de l'exposant n : modèles (approches HSA et LAM), simulations par FFT (code CraFT) (Joëssel *et al.*, 2018).

Chapitre 4

Conclusion générale et perspectives

4.1 Bilan du travail réalisé

Ces travaux de recherche portent sur le comportement mécanique des combustibles nucléaires UO_2 et MOX et des équipements internes de cuve des REP. Un point commun entre les deux types de matériaux considérés, céramique pour les combustibles UO_2 et MOX et métallique pour les internes de cuve, est que, durant leur utilisation, ils subissent des températures élevées et de fortes doses d'irradiation, ce qui modifie leur microstructure et leur comportement mécanique. Ce travail de recherche a pour objectif appliqué de fournir des modèles de comportement tridimensionnels capables de prendre en compte le plus explicitement possible les effets de l'irradiation, tout en restant intégrables et utilisables dans des codes de calculs métiers. Notamment, leur utilisation en réacteur peut amener à la formation de cavités dans ces matériaux. La porosité résultante introduit une compressibilité globale à ces matériaux qu'il convient de modéliser : des modèles de comportement tridimensionnels avec prise en compte de la triaxialité des contraintes sont donc recherchés. Ce travail de recherche s'est intéressé aux modèles d'homogénéisation pour matériaux poreux et à la modélisation et la simulation numérique de l'endommagement et de la rupture ductile par nucléation, croissance et coalescence de cavités.

Un nouveau modèle d'homogénéisation est développé pour décrire la surface de charge de plasticité d'un matériau poreux avec deux populations de bulles sous pressions de formes et de tailles différentes (sphériques et ellipsoïdales aplaties). Le modèle de type GTN proposé est basé sur une estimation du taux de dilatation de la matrice. Des simulations numériques en champs complets utilisant une méthode à base de FFT sont effectuées pour calibrer et valider le modèle d'homogénéisation. Le modèle prend en compte la triaxialité des contraintes, les porosités et les pressions internes pour les deux populations de cavité. Cette étude est prolongée par une autre campagne de calculs par FFT pour prendre en compte la disposition particulière des bulles intergranulaires aplaties le long de joints de grains dans le modèle d'homogénéisation. Ce modèle développé pour le combustible UO_2 est intégré dans le code métier SCANAIR, développé à l'IRSN et destiné à la simulation numérique simplifiée des crayons de combustible nucléaire en situation de RIA dans les REP et une première étude le met en application. Un autre modèle d'homogénéisation pour le combustible UO_2 est développé pour prendre en compte les effets de surface entre les bulles et la matrice environnante. Le travail de recherche s'intéresse à l'élasticité des matériaux nanoporeux avec deux populations de bulles sous pressions de formes et de tailles différentes (sphériques et ellipsoïdales aplaties). L'approche par motifs morphologiques représentatifs est utilisée avec un modèle d'interface imparfaite cohérente entre les bulles et la matrice. Des motifs sont définis pour les bulles sphériques et ellipsoïdales. Le modèle prend en compte la tension de surface entre les bulles et la matrice, ainsi que de propriétés élastiques particulières pour l'interface. Une première application numérique

est proposée sur un point matériel pour étudier l'effet de taille des bulles sur les propriétés élastiques effectives. Le travail de recherche porte ensuite sur l'endommagement et la rupture ductile par nucléation, croissance et coalescence de cavités. Un nouveau modèle de zone cohésive est développé à partir du modèle volumique GTN. La méthode développée qui consiste à projeter un modèle d'endommagement volumique en un modèle de zone cohésive surfacique est assez générique et peut être utilisée pour d'autres modèles d'endommagement volumiques. Ce nouveau modèle de zone cohésive est implémenté dans le code XPER, développé à l'IRSN pour traiter de la multifissuration des matériaux. Le modèle est mis en œuvre pour la simulation de la rupture ductile d'éprouvettes pré-entaillées en acier et pour la simulation de la fissuration d'un fragment de pastille de combustible UO_2 en situation de RIA. Le travail de recherche s'intéresse ensuite au comportement viscoplastique du combustible MOX. Un nouveau modèle d'homogénéisation est développé pour décrire le comportement d'un matériau poreux constitué de cavités regroupées en amas et d'une matrice viscoplastique avec deux mécanismes de fluage. Ce modèle est obtenu par utilisation du principe variationnel classique et du modèle LPS. Des simulations numériques en champs complets utilisant une méthode à base de FFT sont effectuées pour calibrer et valider le modèle d'homogénéisation. Cette étude est prolongée par une autre campagne de calculs par FFT pour étudier le cas où les cavités et les grains environnants sont de tailles similaires. Un modèle de plasticité cristalline est alors utilisé pour introduire une anisotropie des grains. Pour les internes de cuve fortement irradiés en aciers inoxydables austénitiques, un nouveau modèle d'homogénéisation est développé pour décrire le comportement viscoplastique d'un polycristal poreux. Un modèle pour monocristal poreux est recherché, suivi d'une simple hypothèse de Voigt pour passer au polycristal. Un modèle de type LPS est ensuite proposé, puis retouché pour retrouver d'autres résultats d'homogénéisation. Un modèle complet simplifié en élasto-viscoplasticité pour matériau poreux est finalement proposé pour un acier inoxydable austénitique fortement irradié. Des simulations numériques en champs complets utilisant une méthode à base de FFT sont effectuées sur des polycristaux denses et poreux afin de générer des résultats de référence. Ces simulations utilisent une loi de plasticité cristalline spécifique à ce type d'acier irradié. Ces résultats sont calibrés avec des données expérimentales disponibles, puis utilisés pour estimer la pertinence du modèle micromécanique proposé. Pour un chargement purement hydrostatique, le modèle micromécanique utilise un résultat obtenu dans le cas d'un monocristal poreux idéalisé comme un laminé de rang infini. Des simulations numériques en champs complets utilisant une méthode à base de FFT sur monocristal poreux montrent que cette approche conduit à des résultats intéressants pour ce type de chargement.

Suite à ce bilan, plusieurs perspectives à ce travail de recherche sont décrites ci-dessous. Pour certaines, des actions de recherche sont déjà lancées et les perspectives correspondantes constituent alors des axes de recherche à moyen terme. Les autres perspectives constituent des axes de recherche à plus long terme.

4.2 Perspective : modélisation de l'endommagement d'un matériau viscoplastique poreux par une approche cohésive-volumique pour application au dioxyde d'uranium irradié

Cette action de recherche fait l'objet de la thèse de Clément Tosi, lancée en octobre 2020. Cette thèse est dirigée par Yann Monerie et co-encadrée par Rodrigue Largenton.

L'objectif appliqué de la thèse est d'améliorer les simulations numériques réalisées avec XPER et présentées en 2.3.3. Ces simulations concernent le comportement mécanique d'un fragment de pastille de combustible UO_2

soumis à un chargement thermique typique relatif à une situation de RIA, avec une modélisation explicite de sa fissuration. L'amélioration visée consiste à considérer un modèle de comportement volumique plus adapté à l' UO_2 que le modèle GTN utilisé par [Nkoumbou Kaptchouang \(2019\)](#) (voir 2.3.1). Le modèle volumique de [Salvo et al. \(2015\)](#) est retenu. C'est un modèle viscoplastique endommageable : les effets de la vitesse de chargement et de la température sur la contrainte sont pris en compte, ainsi que l'effet de la porosité (variable d'endommagement). Le modèle d'endommagement purement plastique GTN est donc remplacé par un modèle d'endommagement viscoplastique. Le modèle de [Salvo et al. \(2015\)](#) a été retenu pour décrire le comportement viscoplastique endommageable du matériau pour deux raisons d'importance vis à vis de l'application visée. Premièrement, ce modèle couvre une vaste gamme de taux de déformation (entre 10^{-9} et 10^{-1} /s), de contraintes (entre 20 et 250 MPa) et de températures (entre 1100 et 1700°C). Les paramètres du modèle ont été calibrés par [Salvo et al. \(2015\)](#) pour l' UO_2 sur la base d'essais de compression simple à différentes vitesses et températures. Deuxièmement, ce modèle introduit de l'endommagement par l'intermédiaire d'une porosité qui peut croître avec le chargement. Comme pour le modèle cohésif de [Nkoumbou Kaptchouang \(2019\)](#) (voir 2.3.3), l'effet d'une pression P_b des gaz de fission sur le comportement viscoplastique du matériau peut alors être aisément pris en compte en translatant la contrainte hydrostatique de la pression P_b . Un autre changement envisagé vis à vis du travail précédent consiste à remplacer le critère de coalescence des cavités utilisé dans le modèle GTN par un autre critère énergétique plus global basé sur la valeur critique du taux de restitution d'énergie.

L'objectif plus théorique de la thèse est de transformer ce modèle d'endommagement viscoplastique volumique en un modèle de zone cohésive surfacique. L'idée générale est de suivre la procédure de [Nkoumbou Kaptchouang \(2019\)](#) (présentée en 2.3.1) pour obtenir un nouveau modèle cohésif dépendant de la vitesse, de la température et de la pression interne dans les cavités.

Après intégration dans les codes LMGC90 et XPER, il est prévu de reprendre la simulation numérique présentée en 2.3.3 du fragment de pastille de combustible UO_2 soumis à un chargement thermique typique d'un RIA pour comparaison avec les résultats précédemment obtenus.

4.3 Perspective : couplage entre thermique, mécanique et diffusion d'espèces pour application au dioxyde d'uranium irradié

Toujours dans le but appliqué d'améliorer les simulations numériques réalisées avec XPER et présentées en 2.3.3 de la fissuration d'un fragment de pastille de combustible en RIA, il conviendrait d'estimer de façon plus précise le champ de température. En effet, la modélisation présentée en 2.3.3 est basée sur un découpage en zones radiales (selon le rayon de la pastille) dans lesquelles les températures sont homogènes. Un calcul SCANAIR permet d'identifier les paramètres de fonctions analytiques permettant de reproduire de façon approchée l'évolution de température dans chaque zone au cours du temps. Cette modélisation entraîne des discontinuités de température entre les zones. Une question qui se pose est de savoir si les fissures orthoradiales obtenues par simulation sont dues à ce découpage arbitraire en zones. Ainsi, une perspective à ce travail serait de modéliser le flux de chaleur dans le combustible afin d'estimer l'évolution de la température de chaque maille. Il conviendrait alors de coupler le calcul de mécanique et le calcul de thermique : d'un côté, la thermique influence les propriétés mécaniques des matériaux (pastille et gaine), les pressions dans les cavités (pastille), la dilatation et d'un autre côté, la mécanique influence la thermique par la fissuration, le jeu entre la pastille et la gaine.

Un point de départ serait le travail de thèse de [Bichet \(2017\)](#) qui a proposé un nouveau modèle thermo-cohésif

dédié à la fissuration thermo-mécanique des milieux hétérogènes. Le modèle proposé par [Bichet \(2017\)](#) repose sur un modèle de zone cohésive frottante au travers de laquelle le flux thermique est modifié. Une épaisseur caractéristique est associée au modèle cohésif et la zone cohésive est décomposée en pointe de fissure en une partie saine et une partie endommagée. Le flux thermique total est supposé être l'addition d'un flux associé à la partie saine et d'un flux associé à la partie endommagée. Les conductivités associées à ces flux sont définies à partir des conductivités des milieux considérés dans une géométrie laminée : deux milieux pour la zone saine et trois milieux pour la zone endommagée. Le couplage entre les problèmes mécanique et thermique est étagé : le problème mécanique est résolu puis le problème thermique (résolution faible du couplage thermo-mécanique). Cette approche pourrait être retenue avec le modèle de zone cohésive viscoplastique présenté en 4.2. La résolution faible du couplage thermo-mécanique pourrait être discutée dans ce cas d'application. Éventuellement, un point fixe global entre mécanique et thermique pourrait être envisagé. Dans ce cas, l'augmentation du temps de calcul associé serait à évaluer afin d'estimer si la résolution faible peut être finalement considérée comme un bon compromis entre précision et temps de calcul.

En terme de validation, certains essais de chauffage ("heating tests") sur pastille à haut taux de combustion pourraient être simulés ([Capps et al., 2021](#)). Des recuits thermiques ont été effectués sur une ou deux pastilles dans un tronçon de gaine pour différents taux de combustion. Dans certains de ces essais, les fragments de pastille après essais sont analysés (estimation des tailles des fragments). Certains de ces essais (réalisés dans le cadre des recherches menées sur le comportement du combustible lors d'un Accident de Perte de Réfrigérant Primaire, APRP) pourraient être simulés afin d'estimer la pertinence du nouveau modèle thermo-cohésif ou du modèle cohésif précédent (décrit en 4.2) dans le cas d'une température homogène dans le combustible.

Une autre amélioration à ces simulations numériques de fissuration d'un fragment de pastille de combustible en RIA serait d'ajouter un couplage avec la diffusion des gaz de fission. Un point de départ serait le module de gaz de fission de SCANAIR ([Moal, 2012](#)). D'une part, cela permettrait d'estimer des quantités locales, comme le gonflement par diffusion de lacunes vers les bulles et la quantité de gaz dans les bulles (utile pour l'estimation de la pression interne dans le modèle cohésif présenté en 4.2). D'autre part, cela permettrait d'estimer la quantité globale de gaz de fission relâchée dans les fissures qui apparaissent lors de la simulation ou vers les volumes libres. Cette information est notamment importante pour estimer le chargement mécanique imposé à la gaine et son risque de fissuration. Il est à noter que la diffusion des atomes de gaz de fission des bulles intragranulaires vers les bulles intergranulaires est calculé dans SCANAIR par l'intermédiaire du gradient de température. Ainsi, le couplage thermo-mécanique présenté ci-dessus pourrait être mis à profit pour introduire un nouveau couplage avec les gaz de fission.

Enfin, une autre amélioration à ces simulations numériques serait d'insérer des zones cohésives dans la gaine pour estimer son risque de fissuration. Un point de départ serait alors le modèle cohésif développé dans la thèse de [Perales \(2005\)](#) pour des gainages irradiés.

4.4 Perspective : modélisation du comportement viscoplastique d'un polycristal pour application au durcissement d'un acier de cuve irradié

Cette action de recherche fait l'objet de la thèse de Loïc Chaix, lancée en novembre 2021. Cette thèse est dirigée par Mihail Garajeu et Martin Idiart.

Le contexte de ce travail n'est plus relatif au vieillissement des aciers des internes de cuve (comme présenté en 3), mais concerne un autre type d'acier, celui des cuves dans les réacteurs à eau sous pression. L'objectif est de proposer un nouveau modèle de comportement plastique à l'échelle du polycristal, capable d'utiliser une loi de comportement plastique cristalline adaptée à un acier de cuve irradié. Le modèle de comportement proposé doit être directement intégrable dans un code de calcul aux éléments finis (tel que XPER) afin d'estimer les champs de contrainte et de déformation lors de la simulation d'un essai sur éprouvette entaillée de type C(T) (pour estimation de sa ténacité).

La cuve contient le cœur du réacteur et constitue ainsi une partie essentielle de la deuxième barrière de sûreté (voir 2). Un acier bainitique au carbone faiblement allié (16MND5) est utilisé en France dans la fabrication de ces cuves (hors revêtements internes) (Boiron et Monnier, 1995). De nombreux changements microstructuraux interviennent dans ces aciers de cuve à cause de l'irradiation. Ces changements constituent la clé pour comprendre la modification de leurs réponses viscoplastiques (dont le durcissement) et de leurs propriétés à rupture avec l'irradiation. Des stratégies de modélisation multi-échelles et multi-physiques ont été développées dans plusieurs projets européens (PERFECT, PERFORM60, SOTERIA) avec pour objectif, pour les aciers de cuve, de mieux comprendre l'évolution de la ténacité à partir de la microstructure initiale, de la température, des conditions d'irradiation... (Massoud *et al.*, 2010; Bugat *et al.*, 2010; Leclercq *et al.*, 2010). Dans ces stratégies multi-échelles, la plasticité cristalline représente une étape importante : elle est souvent utilisée pour dériver une loi de comportement plastique équivalente simple (par exemple isotrope de type J2) en employant diverses méthodes d'homogénéisation pour polycristaux, ainsi que des modèles de comportement cristallin obtenus par dynamique des dislocations ou autres types de simulation aux échelles inférieures. En effet, des progrès importants ont été effectués ces dernières années sur les lois cristallines pour ces aciers irradiés, les rendant en général moins empiriques, mais aussi plus complexes à mettre en œuvre numériquement : de nombreuses variables internes doivent être mises à jour lors de l'intégration de ces lois (par exemple, des densités de dislocations selon les différents systèmes de glissement, des densités de défauts dans différents plans cristallographiques...). Comme énoncé plus haut, l'objectif de ce travail est de proposer un nouveau modèle de comportement plastique à l'échelle du polycristal, capable d'utiliser une loi de comportement plastique cristalline adaptée à un acier de cuve irradié et qui soit intégrable dans un code de calcul aux éléments finis.

De nombreux modèles d'homogénéisation en champs moyens ont été proposés dans la littérature pour la viscoplasticité des polycristaux (voir par exemple l'analyse bibliographique de Lebensohn *et al.* (2011)). Récemment, Ponte Castañeda (2015) a proposé un nouveau modèle d'homogénéisation, appelé "Fully Optimized Second-Order" (FOSO). Ce modèle a été employé avec succès en viscoplasticité sur des polycristaux à structure cristalline faiblement symétrique (Song et Ponte Castañeda, 2018). Pour les aciers de cuve irradiés, au vu des lois cristallines développées récemment, de fortes hétérogénéités sont attendues entre les différents grains du polycristal en termes de déformations et de contraintes lors d'un chargement mécanique. Ces hétérogénéités sont associées à des grains de plus en plus anisotropes lors du chargement (évolutions différentes des cissions critiques dans les grains selon les différents systèmes de glissement). La problématique scientifique consiste à évaluer la pertinence d'un modèle d'homogénéisation récent, à savoir le modèle FOSO, dans le cas de polycristaux en viscoplasticité fortement anisotropes (anisotropie des grains). Pour les grains, une simplification du modèle de comportement cristallin physiquement motivé et récemment développé par Monnet *et al.* (2019) pour les aciers de cuve est retenue. Ce modèle est capable de prendre en compte le régime thermiquement activé, ainsi que le régime athermique de ces aciers. Il est envisagé de comparer les résultats du modèle à des résultats numériques

en champs complets par FFT et des résultats existants d'essais de traction sur aciers irradiés.

4.5 Perspective : simulation numérique de la rupture d'éprouvettes mini-C(T) d'aciers de cuve

Cette action de recherche fait l'objet du post-doctorat d'Audrey Somera, lancé en octobre 2022. Ce post-doctorat est co-encadré par Frédéric Perales.

De façon générale, les opérateurs des centrales nucléaires en Europe ont mis en place des programmes de surveillance pour suivre la fragilisation des cuves des réacteurs. Ces programmes ont généralement mis en œuvre des échantillons Charpy de taille (10x10x55 mm³) constitués de matériaux représentatifs et irradiés dans des capsules de surveillance (Cicero *et al.*, 2020). Le projet européen FRACTESUS ("Fracture mechanics testing of irradiated RPV steels by means of sub-sized specimens", "RPV" pour "reactor pressure vessel") s'intéresse à l'utilisation d'échantillons de petite taille pour déterminer directement la résistance à la rupture. Le petit échantillon de référence est l'éprouvette C(T) miniature (10x10x4 mm³) permettant d'usiner plusieurs échantillons à partir d'un seul échantillon Charpy cassé. Dans ce projet européen, des matériaux sont sélectionnés, usinés et testés et des activités de modélisation et de simulation numérique sont notamment réalisées en support à ces essais. Dans le cadre de ce projet européen, une action de recherche a été lancée afin de simuler numériquement des essais de rupture d'échantillons C(T) miniatures.

Les simulations envisagées reposent sur le code XPER et sur une adaptation de l'approche générale par zone cohésive de Chakraborty et Biner (2014) pour modéliser la transition ductile-fragile des aciers de cuve (procédure générale pour obtenir une dépendance des paramètres du modèle de zone cohésive à la température). Les simulations à réaliser concernent différents aciers vierges ou irradiés et différentes températures d'essais. Il est prévu de simuler explicitement la propagation de fissure, de calculer la courbe macroscopique de la force en fonction de l'ouverture et d'en déduire la ténacité. En fonction du matériau testé et de la température, il conviendra éventuellement de calculer la courbe de l'intégrale de Rice en fonction de l'avancée de fissure afin d'estimer la ténacité. Il est prévu de comparer les évolutions de la ténacité en fonction de la température pour différents aciers (essais sur éprouvettes mini-C(T) irradiées ou non irradiées) obtenues avec les résultats expérimentaux, avec la méthode statistique dite de la courbe maîtresse ("master curve method", voir par exemple (Zhu et Joyce, 2012)) et avec les résultats des simulations numériques.

4.6 Perspective : stratégie meso-macro pour simuler la rupture des gros composants

La simulation numérique sous XPER de la rupture ductile d'une éprouvette pré-entaillée de type C(T) présentée en 2.3.2 d'après (Méité *et al.*, 2022) a été effectuée dans le cadre du projet européen ATLAS+ ("Advanced Structural Integrity Assessment Tools for Safe Long Term Operation"). Ce projet se focalisait sur le développement d'outils avancés pour étudier l'intégrité des tuyauteries des centrales nucléaires sur le long terme. Un de ses objectifs portait sur l'étude de la transférabilité des propriétés ductiles des matériaux, obtenues par des essais sur des éprouvettes de laboratoire à petite échelle, pour réaliser des calculs sur des gros composants à grande échelle (principalement la tuyauterie) et sur l'application des outils avancés pour l'évaluation de leur intégrité (Dahl *et al.*, 2019).

Dans (Méité, 2020), un jeu de paramètres a été obtenu pour simuler les éprouvettes de type C(T) et SEN(T)

("single edge notched tension") et a été validé par comparaison avec des résultats expérimentaux disponibles. Pour la simulation à grande échelle d'une tuyauterie pré-fissurée soumise à une flexion, les mêmes paramètres ont ensuite été employés. Néanmoins, une difficulté majeure de ces calculs réside dans le rapport entre la dimension de la structure (plusieurs mètres) et la taille de maille requise par le modèle de zone cohésive de type GTN utilisé (quelques dizaines ou centaines de microns). Cela induit un nombre important de mailles afin de décrire finement la fissuration de la tuyauterie. De tels calculs sont extrêmement consommateurs en termes de temps de calcul et sont aujourd'hui difficilement accessibles en un temps raisonnable.

De façon générale, il ressort que le temps de calcul important reste un obstacle majeur pour la simulation numérique de la fissuration des gros composants ou de structures complètes. Même si le code XPER a été "parallélisé" en MPI ("Message Passing Interface") et que les serveurs de calculs ont augmenté en puissance de calcul, cela reste encore un obstacle aujourd'hui. Ainsi, une solution envisagée serait de mettre en place une stratégie "meso-macro". Un calcul purement éléments finis (sans zone cohésive) serait effectué à l'échelle macroscopique (par exemple, à l'échelle de la tuyauterie) sans tenir compte d'aucune pré-fissure et avec un maillage assez "grossier". Ce calcul permettrait d'obtenir une estimation de la contrainte, du déplacement, de la déformation, de l'énergie, ou autre grandeur (à déterminer) dans une zone d'intérêt particulière (par exemple, une zone proche de la pré-fissure sur la tuyauterie du projet ATLAS+). Un autre calcul par éléments finis avec zone cohésive serait effectué à l'échelle mésoscopique avec un maillage fin de la zone d'intérêt (par exemple, avec modélisation de la pré-fissure sur la tuyauterie du projet ATLAS+). Ce calcul permettrait de simuler l'éventuelle propagation de fissure. Il convient alors de discuter des conditions limites à imposer dans le calcul à l'échelle mésoscopique. C'est-à-dire qu'il convient de discuter quelle grandeur doit être transférée du calcul macroscopique vers le calcul mésoscopique selon le cas d'étude. Enfin, il convient de discuter si un point fixe global est nécessaire (toujours selon le cas d'étude) entre le calcul macroscopique et le calcul mésoscopique.

Bibliographie

- I.I. BALACHOV, E.N. SHCHERBAKOV, A.V. KOZLOV, I.A. PORTNYKH et F.A. GARNER : Influence of radiation-induced voids and bubbles on physical properties of austenitic structural alloys. *Journal of Nuclear Materials*, 329-333:617–620, 2004. Proceedings of the 11th International Conference on Fusion Reactor Materials (ICFRM-11).
- Y. BAO et T. WIERZBICKI : On fracture locus in the equivalent strain and stress triaxiality space. *International Journal of Mechanical Sciences*, 46(1):81–98, 2004.
- D.D. BARON et L. HALLSTADIUS : Fuel performance of light water reactors (uranium oxide and mox). *Comprehensive Nuclear Materials*, 2:481–514, 2012.
- A.A. BENZERGA, J.-B. LEBLOND, A. NEEDLEMAN et V. TVERGAARD : Ductile failure modeling. *International Journal of Fracture*, 201(1):29–80, 2016.
- E. A. BERNDT et I. SEVOSTIANOV : Micromechanical analysis of the effect of void swelling on elastic and electric properties of irradiated steel. *Journal of Nuclear Materials*, 446(1):148–154, 2014.
- B. BIARD, V. CHEVALIER, C. GAILLARD, V. GEORGENTHUM, Q. GRANDO, J. GUILLOT, L. LEBRETON, C. MANENC, S. MIROTTA et N. MONCHALIN : Reactivity Initiated Accident transient testing on irradiated fuel rods in PWR conditions : The CABRI International Program. *Annals of Nuclear Energy*, 141:107253, 2020.
- L. BICHET : *Mécanismes de transports dans la fissuration des matériaux hétérogènes : application à la durée de vie d'exploitation des centrales nucléaires*. Thèse, Université de Montpellier, 2017.
- N. BILGER, F. AUSLENDER, M. BORNERT et R. MASSON : New bounds and estimates for porous media with rigid perfectly plastic matrix. *Comptes Rendus Mécanique*, 330:127–132, 2002.
- P. BOIRON et B. MONNIER : Construction des centrales REP, Équipements primaires. *Techniques de l'ingénieur*, B3 270, 1995.
- G. BOITTIN, P.-G. VINCENT, H. MOULINEC et M. GĂRĂJEU : Numerical simulations and modeling of the effective plastic flow surface of a biporous material with pressurized intergranular voids. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 323:174–201, 2017.
- M. BORNERT : A generalized pattern-based self-consistent scheme. *Computational Materials Science*, 5(1-3):17–31, 1996a.
- M. BORNERT : *Morphologie microstructurale et comportement mécanique ; caractérisations expérimentales, approches par bornes et estimations autocohérentes généralisées*. Thèse de doctorat, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, 1996b.

- M BORNERT : Homogénéisation des milieux aléatoires : bornes et estimations. In M. BORNERT, T. BRETHERAU et P. GILORMINI, éditeurs : *Homogénéisation en mécanique des matériaux*, volume 1, chapitre 5, pages 133–221. Hermès Science Publications, Paris, 2001.
- M. BORNERT, C. STOLZ et A. ZAOUI : Morphologically representative pattern based bounding in elasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 44(3):307–330, 1996.
- S. BRISARD, L. DORMIEUX et D. KONDO : Hashin-Shtrikman bounds on the bulk modulus of a nanocomposite with spherical inclusions and interface effects. *Computational Materials Science*, 48(3):589–596, 2010a.
- S. BRISARD, L. DORMIEUX et D. KONDO : Hashin-Shtrikman bounds on the shear modulus of a nanocomposite with spherical inclusions and interface effects. *Computational Materials Science*, 50(2):403–410, 2010b.
- S. M. BRUEMMER, E. P. SIMONEN, P. M. SCOTT, P. L. ANDRESEN, G. S. WAS et J. L. NELSON : Radiation-induced material changes and susceptibility to intergranular failure of light-water-reactor core internals. *Journal of Nuclear Materials*, 274:299–314, 1999.
- S. BUGAT, J. EL GHARIB, J.-M. PROIX et A. ZEGHADI : The toughness module of the PERFECT platform : A predictive tool for the fracture toughness of RPV steels. *Journal of Nuclear Materials*, 406(1):187–192, 2010.
- R. F. CANON, J. T. A. ROBERTS et R. J. BEALS : Deformation of UO₂ at High Temperatures. *Journal of the American Ceramic Society*, 54(2):105–112, février 1971.
- F. CAPPIA, D. PIZZOCRI, M. MARCHETTI, A. SCHUBERT, P. VAN UFFELEN, L. LUZZI, D. PAPAIOANNOU, R. MACIAN-JUAN et V. V. RONDINELLA : Microhardness and Young's modulus of high burn-up UO₂ fuel. *Journal of Nuclear Materials*, 479:447–454, 2016.
- N. CAPPS, A. WYSOCKI, A. GODFREY, B. COLLINS, R. SWEET, N. BROWN, S. LEE, N. SZEWCZYK et S. HOXIEKEY : Full core LOCA safety analysis for a PWR containing high burnup fuel. *Nuclear Engineering and Design*, 379:111194, 2021.
- B. CAZALIS, J. DESQUINES, C. POUSSARD, M. PETIT, Y. MONERIE, C. BERNAUDAT, P. YVON et X. AVERTY : The PROMETRA program : Fuel cladding mechanical behavior under high strain rate. *Nuclear technology*, 157:215–229, 2007.
- P. CHAKRABORTY et S. B. BINER : A unified cohesive zone approach to model the ductile to brittle transition of fracture toughness in reactor pressure vessel steels. *Engineering Fracture Mechanics*, 131:194–209, 2014.
- Y. CHEN, A.S. RAO, B. ALEXANDREANU et K. NATESAN : Slow strain rate tensile tests on irradiated austenitic stainless steels in simulated light water reactor environments. *Nuclear Engineering and Design*, 269:38–44, 2014. Special Issue - The International Conference on Structural Mechanics in Reactor Technology (SMiRT21), New Delhi India, Nov 06-11, 2011.
- M. CHERKAOUI, H. SABAR et M. BERVEILLER : Elastic composites with coated reinforcements : A micromechanical approach for nonhomothetic topology. *International Journal of Engineering Science*, 33(6):829–843, 1995.
- O.K. CHOPRA et A.S. RAO : A review of irradiation effects on LWR core internal materials – neutron embrittlement. *Journal of Nuclear Materials*, 412(1):195–208, 2011.

- C. C. CHU et A. NEEDLEMAN : Void Nucleation Effects in Biaxially Stretched Sheets. *Journal of Engineering Materials and Technology*, 102(3):249–256, 1980.
- S. CICERO, M. LAMBRECHT, H. SWAN, P. ARFFMAN, E. ALTSTADT, T. PETIT, F. OBERMEIER, B. ARROYO, J.A. ÁLVAREZ et R. LACALLE : Fracture mechanics testing of irradiated RPV steels by means of sub-sized specimens : FRACTESUS project. *Procedia Structural Integrity*, 28:61–66, 2020.
- M. COLBERT : *Etude du comportement de gaz rares dans une matrice céramique à haute température : modélisation par approches semi-empiriques*. Thèse de doctorat, Université d'Aix-Marseille, 2012.
- J. COUTURIER : *Éléments de sûreté nucléaire - Les réacteurs à eau sous pression*. EDP Sciences, 2021. ISBN 978-2-7598-2455-7.
- A. DAHL, D. MOINEREAU, P. LE DELLIOU et W. VINCENT : European Project ATLAS+ : Small and Large Scale Ductile Tearing Experiments on Ferritic Steel WB36 to Study Transferability of Material Ductile Properties. *In Proceedings of ASME 2019 PV&P Conference*, 2019.
- G. DEBOTTON : Transversely isotropic sequentially laminated composites in finite elasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 53:1334–1361, 2005.
- F. DHERBEY, F. LOUCHET, A. A. MOCELLIN et S. LECLERCQ : Elevated temperature creep of polycrystalline uranium dioxide : from microscopic mechanisms to macroscopic behaviour. *Acta Materialia*, 50:1495–1505, 2002.
- L. DORMIEUX et D. KONDO : An extension of Gurson model incorporating interface stresses effects. *International Journal of Engineering Science*, 48(6):575–581, 2010.
- H.L. DUAN, J. WANG, Z.P. HUANG et B.L. KARIHALOO : Size-dependent effective elastic constants of solids containing nano-inhomogeneities with interface stress. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 53(7):1574–1596, 2005.
- H.L. DUAN, X. YI, Z.P. HUANG et J. WANG : A unified scheme for prediction of effective moduli of multiphase composites with interface effects. part i : Theoretical framework. *Mechanics of Materials*, 39(1):81–93, 2007a.
- H.L. DUAN, X. YI, Z.P. HUANG et J. WANG : A unified scheme for prediction of effective moduli of multiphase composites with interface effects : Part ii-application and scaling laws. *Mechanics of Materials*, 39(1), 2007b.
- F. DUBOIS, M. JEAN, M. RENOUF, R. MOZUL, A. MARTIN et M. BAGNERIS : LMGC90. *In 10ème Colloque National en Calcul des Structures, CSMA 2011*, Giens, France, 2011.
- R. DUBOURG, H. FAURE-GEORS, G. NICAISE et M. BARRACHIN : Fission product release in the first two PHEBUS tests FPT0 and FPT1. *Nuclear Engineering and Design*, 235:2183–2208, 2005.
- D. J. EDWARDS, F. A. GARNER, S. M. BRUEMMER et P. G. EFSING : Nano-cavities observed in a 316SS PWR flux thimble tube irradiated to 33 and 70 dpa. *Journal of Nuclear Materials*, 384:249–255, 2009.
- D. J. EDWARDS, E. P. SIMONEN, F. A. GARNER, L. R. GREENWOOD, B.A. OLIVER et S. M BRUEMMER : Influence of irradiation temperature and dose gradients on the microstructural evolution in neutron-irradiated 316SS. *Journal of Nuclear Materials*, 317:32–45, 2003.

- O. V. ERSHOVA, E. N. SHCHERBAKOV, P. I. YAGOVITIN, M. V. EVSEEV, V. S. SHIKHALEV et A. V. KOZLOV : Relation between the physico-mechanical properties of an austenitic ChS-68 steel and its swelling during high-dose irradiation. *The Physics of Metals and Metallography*, 106(6):624–629, Dec 2008.
- S.B. FISHER, R.J. WHITE, P.M.A. COOK, S. BREMIER, R.C. CORCORAN, R. STRATTON, C.T. WALKER, P.K. IVISON et I.D. PALMER : Measurement and analysis of fission gas release from BNFL's SBR MOX fuel. *Journal of Nuclear Materials*, 306:153–172, 2002.
- D. FRANÇOIS, A. PINEAU et A. ZAOUI : *Mechanical behaviour of materials. Vol 1 : Micro and macroscopic constitutive behaviour*. Solid Mechanics and Its Applications, Vol. 180. Springer, 2012.
- M. GĂRĂJEU et P. SUQUET : Effective properties of porous ideally plastic or viscoplastic materials containing rigid particles. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 45(6):873–902, 1997.
- F. A. GARNER : Radiation damage in austenitic steels. *Comprehensive Nuclear Materials*, 4:33–95, 2012.
- F. A. GARNER, D. J. EDWARDS, S. M. BRUEMMER, S. I. POROLLO, Y. V. KONOBEV, V. S. NEUSTROEV, V. K. SHAMARDIN, A. V. KOZLOV, I. I. BALACHOV et Y. ISOBE : Recent developments concerning void swelling in pwr internals at relatively low irradiation temperatures. *Effect of Radiation on materials, 21st International Symposium ASTM*, 2004.
- F. A. GARNER, S. I. POROLLO, Yu V. KONOBEV, V. S. NEUSTROEV et O. P. MAKSIMKIN : Void swelling of Russian austenitic stainless steels at PWR-relevant displacement rates and temperatures. *In Proceedings of Fontevraud-6 Symposium on Contribution of Materials Investigations to Improve the Safety and Performance of LWRs*, pages 637–648, 2006.
- J. GARRIGUES : Statique des coques élastiques, 1999. Cours, Ecole Centrale Marseille.
- J.-M. GATT, Y. MONERIE, D. LAUX et D. BARON : Elastic behavior of porous ceramics : Application to nuclear fuel materials. *Journal of Nuclear Materials*, 336(2-3):145–155, 2005.
- M. GOLOGANU, J.B. LEBLOND et J. DEVAUX : 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, 1994.
- J.-L. GUILLET, Y. GUERIN et B. BONIN : *Combustibles nucléaires*. E-den, Une monographie de la Direction de l'énergie nucléaire. CEA Saclay ; Groupe Moniteur, 2008. ISBN 978-2-281-11325-9.
- A.L. GURSON : 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, 1977.
- M.E. GURTIN et A.I. MURDOCH : A continuum theory of elastic material surfaces. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 57(4):291–323, 1975.
- X. HALLER : *Modélisation du comportement élastique des matériaux nanoporeux : application au combustible UO₂*. Thèse, Université de Montpellier, 2015.
- X. HALLER, Y. MONERIE, S. PAGANO et P.-G. VINCENT : Elastic behavior of porous media with spherical nanovoids. *International Journal of Solids and Structures*, 84:99–109, 2016.

- X. HAN : *Modélisation de la fragilisation due au gonflement dans les aciers inoxydables austénitiques irradiés*. Thèse de doctorat, École nationale supérieure des mines de Paris, 2012.
- X. HAN, J. BESSON, S. FOREST, B. TANGUY et S. BUGAT : A yield function for single crystals containing voids. *International Journal of Solids and Structures*, 50:2115–2131, 2013.
- Z. HASHIN et S. SHTRIKMAN : A variational approach to the theory of the elastic behaviour of multiphase materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 11(2):127–140, 1963.
- T. HELFER, B. MICHEL, J.-M. PROIX, M. SALVO, J. SERCOMBE et M. CASELLA : Introducing the open-source mfront code generator : Application to mechanical behaviours and material knowledge management within the PLEIADES fuel element modelling platform. *Computers & Mathematics with Applications*, 70(5):994–1023, 2015.
- E. HERVÉ et O. PELLEGRINI : The elastic constants of a material containing spherical coated holes. *Archives of Mechanics*, 47(2):223–246, 1995.
- E.N. HODKIN : The ratio of grain boundary energy to surface energy of nuclear ceramics as determined from pore geometries. *Journal of Nuclear Materials*, 88:7–14, 1980.
- J. HURE, S. EL SHAWISH, L. CIZELJ et B. TANGUY : Intergranular stress distributions in polycrystalline aggregates of irradiated stainless steel. *Journal of Nuclear Materials*, 476:231–242, 2016.
- J.-P. HUTIN : Gestion de la durée de vie des centrales nucléaires. *Techniques de l'ingénieur*, BN3307 V1, 2006.
- IAEA : *Assessment and Management of Ageing of Major Nuclear Power Plant Components Important to Safety : PWR Vessel Internals*. INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY, Vienna, 1999. IAEA-TECDOC-1119.
- M. I. IDIART : Nonlinear sequential laminates reproducing hollow sphere assemblages. *Comptes Rendus Mécanique*, 2007:363–368, 2007.
- M. I. IDIART : Modeling the macroscopic behavior of two-phase nonlinear composites by infinite-rank laminates. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 56:2599–2617, 2008.
- IRSN : Démarche générale de prévention des accidents - Le risque nucléaire et sa gestion. *Site internet de l'IRSN*, 2019. URL https://www.irsn.fr/FR/connaissances/Installations_nucleaires/La_surete_Nucleaire/risque-nucleaire/demarche-prevention/Pages/sommaire.aspx#.YZZPgU6ZOUk.
- IRSN : *GFORGE de l'IRSN*, 2022. URL <https://gforge.irsn.fr/gf/project/pelicans>.
- A. JELEA, M. COLBERT, F. RIBEIRO, G. TRÉGLIA et R.J.-M. PELLENG : An atomistic modelling of the porosity impact on UO_2 matrix macroscopic properties. *Journal of Nuclear Materials*, 415(2):210–216, 2011.
- L. JOËSSEL, P.-G. VINCENT, M. GĂRĂJEU et M. I. IDIART : Viscoplasticity of voided cubic crystals under hydrostatic loading. *International Journal of Solids and Structures*, 147:156–165, 2018.
- L. JOËSSEL : *Modélisation micromécanique du comportement viscoplastique d'un polycristal poreux : application à un acier inoxydable austénitique irradié*. Thèse de doctorat, Université d'Aix-Marseille, 2018.

- S. KASHIBE et K. UNE : Effects of temperature cycling and heating rate on fission gas release of BWR fuels. *Journal of Nuclear Science and Technology*, 28:1090–1099, 1991.
- S. KASHIBE, K. UNE et K. NOGITA : Formation and growth of intragranular fission gas bubbles in UO_2 fuels with burnup of 6 – 83 GWd/t. *Journal of Nuclear Materials*, 206:22–34, 1993.
- J. KOPLIK et A. NEEDLEMAN : Void growth and coalescence in porous plastic solids. *International Journal of Solids and Structures*, 24:835–853, 1988.
- R. LARGENTON : *Modélisation du comportement effectif du combustible MOX : par une analyse micro-mécanique en champs de transformation non uniformes*. Thèse de doctorat, Université d’Aix-Marseille, 2012.
- H. LE QUANG et Q.-C. HE : Variational principles and bounds for elastic inhomogeneous materials with coherent imperfect interfaces. *Mechanics of Materials*, 40(10):865–884, 2008.
- R.A. LEBENSOHN, M.I. IDIART, P. PONTE CASTAÑEDA et P.-G. VINCENT : Dilatational viscoplasticity of polycrystalline solids with intergranular cavities. *Philosophical Magazine*, 91(22):3038–3067, 2011.
- J.B. LEBLOND, G. PERRIN et P. SUQUET : Exact results and approximate models for porous viscoplastic solids. *International Journal of Plasticity*, 10:213–235, 1994.
- S. LECLERCQ, D. LIDBURY, S. Van DYCK, D. MOINEREAU, A. ALAMO et A. AL MAZOUZI : PERFORM 60 – Prediction of the effects of radiation for reactor pressure vessel and in-core materials using multi-scale modelling – 60years foreseen plant lifetime. *Journal of Nuclear Materials*, 406(1):193–203, 2010.
- D. LESPIAUX, J. NOIROT et P. MENUT : Post-Test Examinations of High Burnup PWR Fuels Submitted to RIA Transients in the Cabri Facility. *In Proceedings of The International Topical Meeting on LMR fuel performance*, pages 650–658. American Nuclear Society, 1997.
- C. LING, B. TANGUY, J. BESSON, S. FOREST et F. LATOURTE : Void growth and coalescence in triaxial stress fields in irradiated FCC single crystals. *Journal of Nuclear Materials*, 492:157–170, 2017.
- P. LIPINSKI, E.H. BARHDADI et M. CHERKAOUI : Micromechanical modelling of an arbitrary ellipsoidal multi-coated inclusion. *Philosophical Magazine*, 86(10):1305–1326, 2006.
- Y. LIU et P. PONTE CASTAÑEDA : Homogenization estimates for the average behavior and field fluctuations in cubic and hexagonal viscoplastic polycrystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 52:1175–1211, 2004.
- P. LÖSÖNEN : On the behaviour of intragranular fission gas in UO_2 fuel. *Journal of Nuclear Materials*, 280:56–72, 2000.
- M. MARCADON : *Effets de taille et d’interphase sur le comportement mécanique de nanocomposites particuliers*. Thèse de doctorat, Ecole Polytechnique, 2005.
- D.G. MARTIN : The elastic constants of polycrystalline UO_2 and (U, Pu) mixed oxides : a review and recommendations. *High Temperatures - High Pressures*, 21:13–24, 1989.
- J.-P. MASSOUD, S. BUGAT, B. MARINI, D. LIDBURY et S. Van DYCK : PERFECT – Prediction of Irradiation Damage Effects on Reactor Components : A summary. *Journal of Nuclear Materials*, 406(1):2–6, 2010.

- A. MBIAKOP, A. CONSTANTINESCU et K. DANAS : An analytical model for porous single crystals with ellipsoidal voids. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 84:436–467, 2015.
- R. McDONALD : An Evaluation of the Mechanical Properties and Microstructure in Uranium Dioxide Doped with Oxide Additives, 2014. A Thesis Presented in Partial Fulfillment of the Requirements for the Degree Master of Science, Arizona State University.
- M. MÉITÉ : Modeling and Simulation of ductile tearing – WP 3.2 - ATLAS+ Project’s progress report. Rapport technique 2020-00520, IRSN, 2020.
- M. MÉITÉ, N. B. NKOUMBOU KAPTCHOUANG, Y. MONERIE, F. PERALES et P.-G. VINCENT : Ductile Crack Growth Using Cohesive GTN Model. In G. Z. VOYIADJIS, éditeur : *Handbook of Damage Mechanics : Nano to Macro Scale for Materials and Structures*, pages 333–351. Springer International Publishing, 2022.
- C. MI, D.A. BUTTRY, P. SHARMA et D.A. KOURIS : Atomistic insights into dislocation-based mechanisms of void growth and coalescence. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 59(9):1858–1871, 2011.
- J. C. MICHEL, H. MOULINEC et P. SUQUET : Effective properties of composite materials with periodic microstructure : a computational approach. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 172(1):109–143, 1999. ISSN 0045-7825.
- J.-C. MICHEL, P. SUQUET et F. THÉBAUD : Une modélisation du rôle des interfaces dans le comportement des composites à matrice métallique. *Revue Européenne des Éléments Finis*, 3(4):573–595, 1994.
- J.C. MICHEL, H. MOULINEC et P. SUQUET : A computational method for linear and nonlinear composites with arbitrary phase contrast. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 52:139–160, 2001.
- H.-L. MING, Z.-M. ZHANG, P.-Y. XIU, J.-Q. WANG, E.-H. HAN, W. KE et M.-X. SU : Microstructure, Residual Strain and Stress Corrosion Cracking Behavior in 316L Heat-Affected Zone. *Acta Metallurgica Sinica*, 29:848–858, 2016.
- A. MOAL : SCANAIR reference documentation. Rapport technique PSN-RES/SEMIA-2012-00360, IRSN, 2012.
- A. MOAL, V. GEORGENTHUM et O. MARCHAND : SCANAIR A transient fuel performance code : Part One : General modelling description. *Nuclear Engineering and Design*, 280:150–171, 2014.
- V. MONCHIET et G. BONNET : Interfacial models in viscoplastic composites materials. *International Journal of Engineering Science*, 48(12):1762–1768, 2010.
- G. MONNET et C. MAI : Prediction of irradiation hardening in austenitic stainless steels : Analytical and crystal plasticity studies. *Journal of Nuclear Materials*, 518:316–325, 2019.
- G. MONNET, L. VINCENT et L. GÉLÉBART : Multiscale modeling of crystal plasticity in Reactor Pressure Vessel steels : Prediction of irradiation hardening. *Journal of Nuclear Materials*, 514:128–138, 2019.
- T. MORI et K. TANAKA : Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions. *Acta Metallurgica*, 21(5):571–574, 1973.
- H. MOULINEC et P. SUQUET : A fast numerical method for computing the linear and nonlinear properties of composites. *Comptes Rendus Académie des Sciences Paris II*, 318:1417–1423, 1994.

- H. MOULINEC et P. SUQUET : A numerical method for computing the overall response of nonlinear composites with complex microstructure. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 157:69–94, 1998.
- A. NEEDLEMAN : A Continuum Model for Void Nucleation by Inclusion Debonding. *Journal of Applied Mechanics*, 54(3):525–531, 1987.
- A. NEEDLEMAN : An analysis of tensile decohesion along an interface. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 38(3):289–324, 1990.
- V. S. NEUSTROEV et F. A. GARNER : Very high swelling and embrittlement observed in a Fe-18C-10Ni-Ti hexagonal fuel wrapper irradiated in the BOR-60 fast reactor. *Journal of Nuclear Materials*, 378:327–332, 2008.
- N. NKOUMBOU KAPTCHOUANG : *Modélisation micromécanique de l'endommagement ductile par une approche cohésive-volumique : application à l'UO₂ irradié*. Thèse, Université de Montpellier, 2019.
- N.B. NKOUMBOU KAPTCHOUANG, Y. MONERIE, F. PERALES et P.-G. VINCENT : Cohesive GTN model for ductile fracture simulation. *Engineering Fracture Mechanics*, 242:107437, 2021.
- J. NOIROT, L. DESGRANGES et J. LAMONTAGNE : Detailed characterisations of high burn-up structures in oxide fuels. *Journal of Nuclear Materials*, 372(2):318–339, 2008.
- D.R. OLANDER : *Fundamental Aspects of Nuclear Reactor Fuel Elements*. Technical Information Center, Office of Public Affairs. Energy Research and Development Administration. TID-26711-P1, 1976.
- G. OUDINET, I. MUNOZ-VIALARD, L. AUFORE, M.-J. GOTTA, J.M. BECKER, G. CHIARELLI et R. CASTELLI : Characterization of plutonium distribution in MIMAS MOX by image analysis. *Journal of Nuclear Materials*, 375(1):86–94, 2008.
- B. PALIWAL et M. CHERKAOUI : Estimation of anisotropic elastic properties of nanocomposites using atomistic-continuum interphase model. *International Journal of Solids and Structures*, 49(18):2424–2438, 2012.
- J. PAUX, L. MORIN, R. BRENNER et D. KONDO : An approximate yield criterion for porous single crystals. *European Journal of Mechanics A/Solids*, 51:1–10, 2015.
- V. PENSÉE, Q.-C. HE et H.L. QUANG : Poroelasticity of fluid-saturated nanoporous media. *Materials Science Forum*, 614:35–40, 2009.
- F. PERALES : *Fissuration des matériaux à gradient de propriétés. Application au Zircaloy hydruré*. Thèse, Université de Montpellier, 2005.
- F. PERALES, S. BOURGEOIS, A. CHRYSOCHOOS et Y. MONERIE : Two field multibody method for periodic homogenization in fracture mechanics of nonlinear heterogeneous materials. *Engineering Fracture Mechanics*, 75(11):3378–3398, 2008. Local Approach to Fracture (1986–2006) : Selected papers from the 9th European Mechanics of Materials Conference.
- F. PERALES, F. DUBOIS, Y. MONERIE, B. PIAR et L. STAINIER : A NonSmooth Contact Dynamics-based multi-domain solver. *European Journal of Computational Mechanics*, 19(4):389–417, 2010.

- F. PERALES, A. SOCIE, N.B. NKOUMBOU KAPTCHOUANG, F. DUBOIS, Y. MONERIE, R. MOZUL, P.-G. VINCENT et F. BABIK : XPER : une plateforme pour la simulation numérique distribuée d'interactions multiphysiques entre corps. *In 15ème Colloque National en Calcul des Structures, CSMA 2022*, Giens, France, 2022.
- C. POKOR : *Caractérisation microstructurale et modélisation du durcissement des aciers austénitiques irradiés des structures internes des réacteurs à eau pressurisée*. Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Grenoble, 2002.
- C. POKOR, Y. BRECHET, P. DUBUISSON, J.-P. MASSOUD et X. AVERTY : Irradiation damage in 304 and 316 stainless steels : experimental investigation and modeling Part I : Evolution of the microstructure. *Journal of Nuclear Materials*, 326:19–29, 2004.
- P. PONTE CASTAÑEDA : The effective mechanical properties of nonlinear isotropic composites. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 39:45–71, 1991.
- P. PONTE CASTAÑEDA et P. SUQUET : Nonlinear composites. *Advances in Applied Mechanics*, 34:171–302, 1998.
- P. PONTE CASTAÑEDA et J.R. WILLIS : The effect of spatial distribution on the effective behavior of composite materials and cracked media. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 43(12):1919–1951, 1995.
- P. PONTE CASTAÑEDA : Fully optimized second-order variational estimates for the macroscopic response and field statistics in viscoplastic crystalline composites. *Proceedings of the Royal Society A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 471(2184), 2015.
- S.G. POPOV, J.J. CARBAJO, V.K. IVANOV et G.L. YODER : Thermophysical properties of MOX and UO₂ fuels including the effects of irradiation. Rapport technique ORNL/TM-2000/351, Oak Ridge National Laboratory, novembre 2000.
- L. PORTELETTE, J. AMODEO, R. MADEC, J. SOULACROIX, T. HELFER et B. MICHEL : Crystal viscoplastic modeling of UO₂ single crystal. *Journal of Nuclear Materials*, 510:635–643, 2018.
- L. PORTELETTE, P.-G. VINCENT, H. MOULINEC et M. GĂRĂJEU : Viscoplastic behavior of a porous polycrystal with similar pore and grain sizes : Application to nuclear mox fuel materials. *International Journal of Solids and Structures*, 236-237, 2022.
- A. RENAULT, J. MALAPATE, C. POKOR et P. GAVOILLE : TEM and EFTEM characterization of solution annealed 304L stainless steel irradiated in PHENIX, up to 36 dpa and at 390 °C. *Journal of Nuclear Materials*, 421:124–131, 2012.
- G.L. REYNOLDS, W.B. BEERÉ et P.T. SAWBRIDGE : The effect of fission products on the ratio of grain-boundary energy to surface energy in irradiated uranium dioxide. *Journal of Nuclear Materials*, 41(1):112–114, 1971.
- J. T. A. ROBERTS et J. C. VOGLEWEDE : Application of deformation maps to the study of in-reactor behavior of oxide fuels. *Journal of The American Ceramic Society*, 56(9):472–475, 1973.
- J.L. ROUTBORT, N.A. JAVED et J.C. VOGLEWEDE : Compressive creep of Mixed-Oxide fuel pellets. *Journal of Nuclear Materials*, 44:247–259, 1972.

- J.L. ROUTBORT et J.C. VOGLEWEDE : Creep of Mixed-Oxide fuel pellets at high stress. *Journal of The American Ceramic Society*, 56(6):330–333, 1973.
- M. SALVO : *Etude expérimentale et modélisation du comportement mécanique du combustible UO_2 en compression à haute température et forte vitesse de sollicitation*. Thèse de doctorat, Aix-Marseille Université, 2014.
- M. SALVO, J. SERCOMBE, J.-C. MÉNARD, J. JULIEN, T. HELFER et T. DÉSOYER : Experimental characterization and modelling of UO_2 behavior at high temperatures and high strain rates. *Journal of Nuclear Materials*, 456:54–67, 2015.
- I. SCHEIDER : Derivation of separation laws for cohesive models in the course of ductile fracture. *Engineering Fracture Mechanics*, 76(10):1450–1459, 2009.
- I. SCHEIDER et W. BROCKS : Simulation of cup–cone fracture using the cohesive model. *Engineering Fracture Mechanics*, 70(14):1943–1961, 2003.
- S. EL SHAWISH, P.-G. VINCENT, H. MOULINEC, L. CIZELJ et L. GÉLÉBART : Full-field polycrystal plasticity simulations of neutron-irradiated austenitic stainless steel : A comparison between FE and FFT-based approaches. *Journal of Nuclear Materials*, 529:151927, 2020.
- T. SIEGMUND et W. BROCKS : Prediction of the Work of Separation and Implications to Modeling. *International Journal of Fracture*, 99(1-2):97–116, 1999.
- T. SIEGMUND et W. BROCKS : A numerical study on the correlation between the work of separation and the dissipation rate in ductile fracture. *Engineering Fracture Mechanics*, 67(2):139–154, 2000.
- O.D. SLAGLE, F.E. BARD, B.C. GNEITING et J.R. THIELGES : Fuel transient deformation. *Nuclear Engineering and Design*, 79(3):301–307, 1984.
- D. SONG et P. PONTE CASTAÑEDA : A finite-strain homogenization model for viscoplastic porous single crystals : I – theory. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 107:560–579, 2017.
- D. SONG et P. PONTE CASTAÑEDA : Fully optimized second-order homogenization estimates for the macroscopic response and texture evolution of low-symmetry viscoplastic polycrystals. *International Journal of Plasticity*, 110:272–293, 2018.
- J. SPINO, K. VENNIX et M. COQUERELLE : Detailed characterisation of the rim microstructure in PWR fuels in the burn-up range 40–67 GWd/tM. *Journal of Nuclear Materials*, 231(3):179–190, 1996.
- L. STAINIER, F. DUBOIS et R. PEYROUX : MatLib une bibliothèque portable de modèles constitutifs pour la mécanique non-linéaire des solides : concepts et implémentation. In *6ème Colloque National en Calcul des Structures, CSMA 2003*, Giens, France, 2003.
- C. STOLZ et A. ZAOUI : Analyse morphologique et approches variationnelles du comportement d’un milieu élastique hétérogène. *Comptes Rendus Académie des Sciences*, 312:143–150, 1991.
- P. SUQUET : Overall properties of nonlinear composites : a modified secant moduli theory and its link with Ponte Castañeda’s nonlinear variational procedure. *Comptes Rendus Académie des Sciences Paris*, 320, Série IIb:563–571, 1995.

- P. SUQUET, H. MOULINEC, O. CASTELNAU, M. MONTAGNAT, N. LAHELLEC, F. GRENNERAT, P. DUVAL et R. BRENNER : Multi-scale modeling of the mechanical behavior of polycrystalline ice under transient creep. *Procedia IUTAM*, 3:76–90, 2012. IUTAM Symposium on Linking Scales in Computations : From Microstructure to Macro-scale Properties.
- P.M. SUQUET : Discontinuities and Plasticity. In *Nonsmooth Mechanics and Applications*, International Centre for Mechanical Sciences, pages 279–340. Springer, Vienna, 1988.
- M. SUZUKI, T. SUGIYAMA et T. FUKETA : Thermal stress analysis of high-burnup LWR fuel pellet pulse-irradiated in Reactivity-Initiated Accident conditions. *Journal of Nuclear Science and Technology*, 45(11): 1155–1164, 2008.
- B. TANGUY, X. HAN, J. BESSON, S. FOREST, C. ROBERTSON et N. RUPIN : Dislocations and irradiation defects-based micromechanical modelling for neutron irradiated austenitic stainless steels. In *International Symposium on Plasticity 2013 and Its Current Applications*, 2013.
- C. TOSI : Simulation numérique de la fissuration d’une pastille de combustible nucléaire en situation accidentelle, 2020. Rapport de stage, Ecole Polytech Montpellier.
- C. R. TOTTLE : Mechanical properties of uranium compounds. Rapport technique ANL - 7070, Argonne National Laboratory, 1965.
- V. TVERGAARD : On localization in ductile materials containing spherical voids. *International Journal of Fracture*, 18:237–252, 1982.
- V. TVERGAARD : Material failure by void growth to coalescence. In J.W. HUTCHINSON et T.Y. WU, éditeurs : *Advances in Applied Mechanics*, volume 27, pages 83–151. Academic Press, New-York, 1990.
- V. TVERGAARD : Relations between Crack Growth Resistance and Fracture Process Parameters Under Large Scale Yielding. In *IUTAM Symposium on Nonlinear Analysis of Fracture*, Solid Mechanics and its Applications, pages 93–104. Springer, Dordrecht, 1997.
- V. TVERGAARD et J. W. HUTCHINSON : Effect of strain-dependent cohesive zone model on predictions of crack growth resistance. *International Journal of Solids and Structures*, 33(20):3297–3308, 1996.
- V. TVERGAARD et J.W. HUTCHINSON : The relation between crack growth resistance and fracture process parameters in elastic-plastic solids. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 40(6):1377–1397, 1992.
- K. UNE : Simulated bubble swelling in UO₂ pellet. *Journal of Nuclear Materials*, 158:188–201, 1988.
- P.-G. VINCENT : *Modélisation micromécanique de la croissance et de la percolation de pores sous pression dans une matrice céramique à haute température*. Thèse de doctorat, Université d’Aix-Marseille I, 2007.
- P.-G. VINCENT, Y. MONERIE et P. SUQUET : Ductile damage of porous materials with two populations of voids. *Comptes Rendus Mécanique*, 336:245–259, 2008.
- P.-G. VINCENT, Y. MONERIE et P. SUQUET : Porous materials with two populations of voids under internal pressure : I. Instantaneous constitutive relations. *International Journal of Solids and Structures*, 46:480–506, 2009.

- P.-G. VINCENT, H. MOULINEC, L. JOËSSEL, M. I. IDIART et M. GĂRĂJEU : Porous polycrystal plasticity modeling of neutron-irradiated austenitic stainless steels. *Journal of Nuclear Materials*, 542:152463, 2020.
- P.-G. VINCENT, P. SUQUET, Y. MONERIE et H. MOULINEC : Effective flow surface of porous materials with two populations of voids under internal pressure : I. A GTN model. *International Journal of Plasticity*, 56:45–73, 2014a.
- P.-G. VINCENT, P. SUQUET, Y. MONERIE et H. MOULINEC : Effective flow surface of porous materials with two populations of voids under internal pressure : II. Full-field simulations. *International Journal of Plasticity*, 56:74–98, 2014b.
- J. WANG, H.L. DUAN, Z. ZHANG et Z.P. HUANG : An anti-interpenetration model and connections between interphase and interface models in particle-reinforced composites. *International Journal of Mechanical Sciences*, 47(4-5 SPEC. ISS.):701–718, 2005.
- R.J WHITE : The development of grain-face porosity in irradiated oxide fuel. *Journal of Nuclear Materials*, 325(1):61–77, 2004.
- R.J. WHITE, S.B. FISHER, P.M.A. COOK, R. STRATTON, C.T. WALKER et I.D. PALMER : Measurement and analysis of fission gas release from BNFL's SBR MOX fuel. *Journal of Nuclear Materials*, 288:43–56, 2001.
- K. WOJTACKI, P.-G. VINCENT, P. SUQUET, H. MOULINEC et G. BOITTIN : A micromechanical model for the secondary creep of elasto-viscoplastic porous materials with two rate-sensitivity exponents : Application to a mixed oxide fuel. *International Journal of Solids and Structures*, 184:99–113, 2020. *Physics and Mechanics of Random Structures : From Morphology to Material Properties*.
- I. ZACHARIE, S. LANSIART, P. COMBETTE, M. TROTABAS, M. COSTER et M. GROOS : Microstructural analysis and modelling of intergranular swelling of an irradiated UO₂ fuel treated at high temperature. *Journal of Nuclear Materials*, 255(2–3):92–104, 1998.
- X.-K. ZHU et J. A. JOYCE : Review of fracture toughness (G, K, J, CTOD, CTOA) testing and standardization. *Engineering Fracture Mechanics*, 85:1–46, 2012.
- M. L. ZOUARI : *Modélisation par dynamique d'amas des évolutions microstructurales et du gonflement sous irradiation dans les aciers inoxydables austénitiques*. Thèse de doctorat, Université de Grenoble, 2012.

Deuxième partie

Notice individuelle

Chapitre 5

Curriculum Vitae

Pierre-Guy VINCENT

Chercheur en mécanique

Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire

B.P. 3 – 13115 St-Paul-lez-Durance Cedex

+33 4 42 19 97 61

pierre-guy.vincent@irsn.fr

40 ans – nationalité française – en couple – 3 enfants

En quelques lignes

Pierre-Guy VINCENT, ingénieur-docteur en mécanique des solides et des structures. Doctorat en mécanique obtenu en 2007. Thèse encadrée par l'IRSN et le CNRS sur le comportement mécanique des combustibles nucléaires en dioxyde d'uranium. Actuellement, chercheur en mécanique à l'IRSN sur le centre de Cadarache (Bouches-du-Rhône) pour mener des recherches en micromécanique et mécanique des solides sur les combustibles nucléaires et les aciers irradiés.

Diplômes

2007 : Doctorat, Université d'Aix-Marseille I

Discipline : **Mécanique** et énergétique

École doctorale 353 : Physique, Modélisation et Sciences pour l'Ingénieur

Mention : Très Honorable

2004 : DEA de Mécanique, Université d'Aix-Marseille II

Filière : Solides

Mention : Très Bien

2004 : Ingénieur ESM2 – actuelle École Centrale Marseille

Option : **Mécanique** – Majeure : Structures

Félicitations du jury

Expériences

2012 – présent : Chercheur en Mécanique

à l'Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire – **IRSN**,

Pôle Sûreté Nucléaire – Recherche en Sûreté, Service de Maîtrise des Incidents et Accidents

Activités principales :

- Mener des **recherches** en micromécanique et mécanique des solides sur les combustibles nucléaires et les aciers irradiés
- Encadrer des doctorants, post-doctorants
- Développer et suivre des collaborations et des partenariats scientifiques
- Participer à des projets collaboratifs (européen, groupe de travail)

- Membre de la Direction du **MIST** (2012 – 2019), Laboratoire de Micromécanique et Intégrité des Structures, **Laboratoire Commun IRSN – CNRS – Université de Montpellier**

2008 – 2011 : Chargé d'évaluation de la maîtrise des risques spécialisé en mécanique

à l'Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire – **IRSN**,

Direction de l'Expertise Nucléaire de Défense, Service d'Appui Technique et d'Études

Activités principales :

- Mener des **études** et **recherches finalisées** dans le domaine de la sécurité des transports et installations (dynamique rapide)
- Évaluer des dossiers d'**expertise** en sûreté des transports (contribution en tant que spécialiste en mécanique des structures et en dynamique rapide)
- Participer à des contrôles, analyses de dossier de conception, suivis de fabrication de matériels et inspections

2008 (6 mois) : Ingénieur de recherche

au Centre National de la Recherche Scientifique – **CNRS**,

Laboratoire de Mécanique et d'Acoustique – **LMA**

Thématique :

- Modélisation de la croissance et coalescence de cavités dans un matériau polycristallin poreux (endommagement ductile)
- Simulations numériques par transformées de Fourier rapides (méthode FFT), utilisation et implémentation (loi de comportement)
- Micromécanique et homogénéisation

2004 – 2007 : Doctorat

à l'Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire – **IRSN**,

Direction de la Prévention des Accidents Majeurs, Service d'Étude et de Modélisation du Combustible en situation Accidentelle

Collaboration **CNRS**, Laboratoire de Mécanique et d'Acoustique – **LMA**

Cofinancement IRSN – EDF

Thématique :

- Gonflement et fissuration du combustible nucléaire (UO_2) fortement irradié en situation accidentelle
- Modélisation de la surface de plasticité, de l'élasticité et de l'endommagement ductile pour un matériau poreux à deux populations de cavités saturées
- Simulations numériques (FFT, éléments finis, zones cohésives)
- Micromécanique et homogénéisation

2004 (6 mois) : Stage Ingénieur – DEA

à l'Institut de Radioprotection et de Sûreté nucléaire – **IRSN**,

Direction de la Prévention des Accidents Majeurs, Service d'Étude et de Modélisation du Combustible en situation Accidentelle

Thématique :

- Comportement élastoplastique anisotrope du Zircaloy irradié et hydruré constitutif des gainages de crayons combustibles nucléaires en situation accidentelle
- Micromécanique et homogénéisation

2003 (2 mois) : **Stage Ingénieur** (2ème année)

au Port Autonome de Marseille – **PAM**, Bureau d'études

Thématique :

- Modélisation d'un portique à conteneurs, calculs de structure par éléments finis

2002 (1 mois) : **Stage ouvrier** – aide laboratoire

à Électricité de France – **EDF**

Production scientifique

h-index : 9 (Scopus)

Publications dans des revues internationales à comité de lecture : 18

Chapitre de livre : 1

Article de "review" : 1

Conférences à comité de lecture, colloques, groupe de travail : 29

Compétences scientifiques

Thématiques :

- Mécanique théorique et numérique (solide, structure, matériaux)
- Homogénéisation, méthodes de changement d'échelles
- Endommagement ductile, plasticité, viscoplasticité
- Fissuration en dynamique rapide
- Dynamique rapide, propagation d'onde de choc
- Types de matériaux rencontrés / modélisés : céramiques, métaux, bois, élastomères
- Types de codes de calcul en mécanique utilisés :
 - FFT (Fast Fourier Transform) : CraFT (code LMA)
 - DEM (Discrete Element Method, Cohesive zones) : XPER (code IRSN)
 - FEM (Finite Element Method) : Effel, Abaqus, Cast3M, LS-DYNA, AUTODYN
 - SPH (Smoothed-particle hydrodynamics) : LS-DYNA

Compétences fonctionnelles

Co-encadrement de doctorants :

- X. Haller (2012 – 2015)
- L. Joëssel (2015 – 2018)
- N. B. Nkoumbou Kaptchouang (2016 – 2019)
- C. Tosi (2020 –)
- L. Chaix (2021 –)

Co-encadrement de post-doctorants :

- G. Boittin (2014 – 2015, 2017)
- K. Wojtacki (2017 – 2018)
- L. Portelette (2020 – 2021)
- A. Somera (2022 –)

Co-encadrement de stage ingénieur (niveau M2) :

- C. Tosi (2020)

Participation à la Direction du MIST, Laboratoire de Micromécanique et Intégrité des Structures, Laboratoire Commun IRSN – CNRS – Université de Montpellier :

- Préparation du bilan annuel devant le comité de pilotage (2013 – 2019)
- Mise en place du programme scientifique du quinquennal 2015 – 2019
- Suivi du programme scientifique
- Organisation d'un workshop autour des activités du MIST en 2015

Participation à des projets européens :

- SOTERIA, Safe long-term operation of light water reactors based on improved understanding of radiation effects in nuclear structural materials, avec le CNRS – LMA (2015 – 2019)
- FRACTESUS, Fracture mechanics testing of irradiated RPV steels by means of sub-sized specimens (2020 – 2024)

Participation au développement de moyens numériques : code CraFT (LMA).

Participation à la préparation et à la mise en œuvre de deux campagnes expérimentales :

- Campagnes d'essais de détonation sur plate-forme expérimentale miniature. Étude des multi-réflexions sur obstacles plans. Étude des réflexions sur obstacles cylindriques

Participation à la rédaction d'avis et de fiches d'expertise en mécanique concernant la tenue mécanique d'emballages en condition accidentelle de transport

Études de dossiers de conception, réalisation de suivis de fabrication sur du matériel de transport

Suivi technique de programmes de sous-traitance :

- Modélisation par éléments finis de la tenue mécanique d'un emballage en condition accidentelle de transport
- Développement de moyens numériques :
 - Intégration dans le code SCANAIR (code IRSN, simulation du comportement thermomécanique d'un crayon combustible lors d'un accident de réactivité) d'une nouvelle loi de comportement (critère de plasticité micromécanique) pour le combustible UO₂ irradié
 - Mise en place d'un pré et d'un post-traitement pour XPER (code IRSN, simulation de la fissuration des matériaux) et étude de l'influence du maillage sur la simulation de la fissuration ductile à l'aide d'un modèle de zone cohésive

Diffusion scientifique vers la société :

- Rédaction d'un article pour la revue AKTIS de l'IRSN (trimestriel multimédia d'information scientifique pour la communauté scientifique nationale et internationale)

Divers

Membre de la Direction du MIST, Laboratoire de Micromécanique et Intégrité des Structures, laboratoire

commun IRSN – CNRS – Université de Montpellier (2015 – 2019)

Membre du Conseil d'Administration de l'association MECAMAT (depuis 2015)

Membre extérieur du Conseil de l'Ecole Doctorale I2S, ED 166 (depuis 2016)

Membre du Conseil d'Unité du Laboratoire IRSN/PSN/SEMIA/LPTM (2013 – 2017)

Participation à des groupes de travail internationaux de l'OCDE : "Task Force on the nuclear fuel micromechanical behavior", "Task Group on the RPV Integrity Assessment for In-Vessel Retention".

Collaborations :

- Correspondant scientifique pour l'élaboration et le suivi de collaborations scientifiques :
 - CNRS / AMU / ECM – LMA Laboratoire de Mécanique et d'Acoustique
 - CNRS / UM – LMGC Laboratoire de Mécanique et Génie Civil
 - UNLP Université Nationale de La Plata (Argentine)
- Scientifique invité au Los Alamos National Laboratory LANL, USA (1 mois, 2008)
- Accueil de M. Idiart à Cadarache (professeur à l'UNLP, Argentine) (1 mois, 2015)

Reconnaissance :

- Invitations pour rédiger un article dans un numéro spécial de Comptes Rendus – Mécanique, un article dans un numéro spécial d'IJSS et un chapitre d'un livre sur la mécanique de l'endommagement
- Article de conférence sélectionné pour la gazette MECAMAT 2008
- Invitation pour présentation au groupe de travail MECAMAT "Physique et mécanique de l'endommagement et de la rupture" (2008)

Chapitre 6

Activités de recherche

Mes activités de recherche s'articulent autour de l'étude du comportement mécanique de matériaux poreux du nucléaire par la modélisation, de l'échelle microscopique locale à l'échelle macroscopique de la structure. Les milieux poreux étudiés dans le cadre de mes recherches sont des céramiques de combustibles nucléaires et des aciers utilisés dans les réacteurs nucléaires à eau sous pression.

Pour chaque problème posé, mon objectif est d'obtenir une solution pertinente, présentant un bon compromis entre précision et complexité : précision vis à vis des phénomènes physiques à modéliser, complexité vis à vis des solutions proposées. Ma démarche vise à effectuer les développements théoriques nécessaires pour apporter des réponses aux problèmes physiques posés en essayant de ne conserver que les éléments principaux, i.e., éviter de rajouter des éléments "superflus" vis à vis des problèmes à traiter.

Mes activités de recherche sont pilotées par les besoins de l'IRSN. Cela m'a conduit à aborder des sujets de natures diverses en micromécanique (céramiques à haute température, matériaux métalliques, plasticité, viscoplasticité, élasticité des nanoporeux, endommagement, fissuration...) dans un cadre coopératif. Ce manuscrit a notamment comme objectif de souligner une cohérence d'ensemble à ces travaux de recherche.

6.1 Thématiques de recherche

Mes thématiques de recherche portent globalement sur la mécanique théorique et numérique (solide, structure, matériaux), avec, d'une part, l'homogénéisation et les méthodes de changement d'échelles en mécanique des solides, et d'autre part, les couplages entre l'endommagement et la plasticité ou la viscoplasticité et la simulation de la fissuration des matériaux.

Les deux types de matériaux étudiés, céramique pour les combustibles en dioxyde d'uranium et oxydes mixtes et métallique pour les internes de cuve, subissent, durant leur utilisation, des températures élevées et de fortes doses d'irradiation, ce qui modifie leur microstructure et leur comportement mécanique. Mon travail de recherche a pour objectif appliqué de fournir des modèles de comportement tridimensionnels capables de prendre en compte le plus explicitement possible les effets de l'irradiation, tout en restant intégrables et utilisables dans des codes de calculs métiers. Leur utilisation en réacteur peut notamment amener à la formation de cavités dans ces matériaux, ce qui introduit une compressibilité globale à ces matériaux. Des modèles de comportement tridimensionnels avec prise en compte de la triaxialité des contraintes sont recherchés.

Pour le combustible nucléaire en dioxyde d'uranium, un modèle d'homogénéisation est mis au point pour décrire la surface de charge de plasticité d'un matériaux poreux avec deux populations de bulles sous pressions de formes et de tailles différentes. Ce modèle proposé pour le combustible en dioxyde d'uranium est intégré dans un code métier de l'IRSN destiné à la simulation numérique simplifiée des crayons de combustible nucléaire en situation accidentelle d'insertion de réactivité dans les réacteurs à eau sous pression (SCANAIR). Un autre modèle d'homogénéisation pour le combustible en dioxyde d'uranium est développé pour prendre en compte les effets de surface entre les bulles et la matrice environnante en élasticité des matériaux nanoporeux. Pour l'endommagement et la rupture ductile par nucléation, croissance et coalescence de cavités, un modèle de zone cohésive est construit à partir du modèle micromécanique volumique GTN. Ce modèle de zone cohésive est implémenté dans le code XPER de l'IRSN pour traiter de la fissuration des matériaux. Pour le combustible MOX, un modèle d'homogénéisation est développé pour décrire le comportement d'un matériau poreux constitué de cavités regroupées en amas et d'une matrice viscoplastique avec deux mécanismes de fluage. Pour les internes de cuve fortement irradiés en aciers inoxydables austénitiques, un modèle d'homogénéisation est mis au point pour décrire le comportement viscoplastique d'un polycristal poreux. Un modèle complet simplifié en élasto-viscoplasticité est finalement proposé.

6.2 Collaborations scientifiques

Pour le développement de mon programme de recherche, j'ai pu établir des collaborations externes à l'IRSN avec :

- Laboratoire de Mécanique et Génie Civil (LMGC), unité mixte de recherche de l'Université de Montpellier (UM) et du Centre National de la Recherche Scientifique (CNRS) – **Yann Monerie** (Professeur d'Université, PU), **Stéphane Pagano** (Directeur de Recherche CNRS, DR). Collaboration effectuée dans le cadre du laboratoire commun MIST (Laboratoire de Micromécanique et Intégrité des Structures, laboratoire commun IRSN – CNRS – Université de Montpellier) et dans le cadre d'accords de thèse.
- Laboratoire de Mécanique et d'Acoustique (LMA), unité mixte de recherche d'Aix-Marseille Université (AMU), du CNRS et de Centrale Marseille – **Mihail Garajeu** (Maitre de Conférence, MCF), **Hervé Moulinec** (Ingénieur de Recherche CNRS, IR), **Pierre Suquet** (DR). Collaboration effectuée dans le cadre d'accords spécifiques et d'accords de thèse.
- Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de La Plata (UNLP), Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET) – **Martin Idiart** (PU). Collaboration effectuée dans le cadre d'accords de thèse.
- Département Matériaux et Mécanique des Composants, Électricité de France (EDF) – **Rodrigue Largeton** (Expert senior). Collaboration effectuée dans le cadre d'un accord de thèse.

De façon plus ponctuelle et dans le cadre du projet européen SOTERIA, j'ai pu établir une collaboration avec :

- Jozef Stefan Institute (JSI) – **Samir El Shawish**, **Leon Cizelj**.
- Direction de l'énergie nucléaire, Service de recherches métallurgiques appliquées, Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives (CEA) – **Lionel Gélébart**.

6.3 Responsabilités administratives et collectives

6.3.1 Contrats de recherche scientifique

Les contrats de recherche scientifique dans lesquels j'ai pu travailler sont les suivants (hors contrats de thèse) :

- Références IRSN-SJ LS11198 et IRSN DAFJ/SJ/LS12289, 2011 – 2021, Accords de collaboration du MIST, Laboratoire de Micromécanique et Intégrité des Structures, Laboratoire Commun IRSN – CNRS – Université de Montpellier
- Référence IRSN DAFJ/SJ/MP/LS11621, 2012 (4 mois), "Surface de charge d'un matériau biporeux avec pression interne : simulations numériques à base de transformées de Fourier rapides" avec le LMA
Participants : Yann Monerie, Hervé Moulinec, Pierre Suquet, Pierre-Guy Vincent
Articles : 2 (International Journal of Plasticity)
- Référence IRSN DAFJ/SJ/MP/LS11882, 2013 – 2015 (18 mois), "Comportement viscoplastique des matériaux poreux saturés : développement de méthodes numériques à base de transformées de Fourier rapides" avec le LMA
Participants : Mihail Garajeu, Hervé Moulinec, Pierre-Guy Vincent
Contractuelle : Guylaine Boittin
- Référence IRSN LS 12322, 2015 (9 mois), "Comportement plastique des matériaux poreux : développement de méthodes numériques à base de transformées de Fourier rapides et application au combustible UO₂ irradié" avec le LMA
Participants : Mihail Garajeu, Hervé Moulinec, Pierre-Guy Vincent
Contractuelle : Guylaine Boittin
Article : 1 (Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering)
- Référence IRSN DAFJ/SJ/LS20284, 2016 – 2018 (26 mois), "Comportement viscoplastique des matériaux poreux saturés : développement de méthodes numériques à base de transformées de Fourier rapides et application au combustible MOX irradié" avec le LMA
Participants : Hervé Moulinec, Pierre Suquet, Pierre-Guy Vincent
Contractuels : Guylaine Boittin, Kajetan Wojtacki
Article : 1 (International Journal of Solids and Structures)
- Référence IRSN LS 21153, 2019 – 2021 (33 mois), "Comportement viscoplastique des matériaux polycristallins poreux saturés : développement de méthodes numériques à base de transformées de Fourier rapides et application au combustible MOX irradié" avec le LMA
Participants : Mihail Garajeu, Hervé Moulinec, Pierre-Guy Vincent
Contractuel : Luc Portelette
Article : 1 (Journal of Nuclear Materials)
- Contribution au projet européen SOTERIA, 2015 – 2019 (4 ans), "Safe long-term operation of light water reactors based on improved understanding of radiation effects in nuclear structural materials" avec le LMA
Participants : Hervé Moulinec, Pierre-Guy Vincent
Article : 1 (Journal of Nuclear Materials)
Participants : Samir El Shawish, Leon Cizelj, Hervé Moulinec, Lionel Gélébart, Pierre-Guy Vincent
Article : 1 (Journal of Nuclear Materials)

- Contribution au projet européen FRACTESUS, 2020 – 2024 (4 ans), "Fracture mechanics testing of irradiated RPV steels by means of sub-sized specimens"

Participants : Frédéric Perales, Pierre-Guy Vincent

Contractuelle : Audrey Somera

6.3.2 Laboratoire

- **Membre de la Direction du MIST**, Laboratoire de Micromécanique et Intégrité des Structures, laboratoire commun IRSN – CNRS – Université de Montpellier (2015 – 2019)
- **Membre du Conseil d'Administration de l'association MECAMAT** (depuis 2015)
- **Membre extérieur du Conseil de l'Ecole Doctorale I2S, ED 166** (depuis 2016)
- **Membre du Conseil d'Unité du Laboratoire IRSN/PSN/SEMIA/LPTM** (2013 – 2017)
- **Participation à des groupes de travail internationaux de l'OCDE.**

6.3.3 Expertises

Révisions d'articles pour des revues internationales : International Journal of Solids and Structures, SoftwareX, Journal of Materials Research and Technology, Proceedings of the Royal Society A, Mechanics of Materials.

6.4 Publications scientifiques

Synthèse :

- Publications dans des revues internationales à comité de lecture : 18
- Chapitre de livre : 1
- Article de "review" : 1
- Conférences à comité de lecture, colloques, groupe de travail : 29

Il est à noter que la plupart des articles scientifiques ont été publiés dans des journaux généralistes en mécanique des solides et des matériaux et non dans des journaux spécialisés dans le domaine du nucléaire. L'objectif est de donner, quand cela s'avère pertinent, le plus de portée possible à ces travaux de recherche. Ainsi, toute la communauté de mécanique des solides et des matériaux est visée par la plupart de ces publications.

Quelques éléments de bibliométrie sont donnés ci-dessous :

- le nombre de citations par année a tendance à augmenter (voir figure 6.1). Il est de 52 en 2022. Cela montre une portée croissante des articles publiés.
- le nombre d'articles par année varie entre 0 et 3 (voir figure 6.2). Il est de 2 en 2022. Ces variations sont à relier à la diversité des sujets abordés en micromécanique (céramiques à haute température, matériaux métalliques, plasticité, viscoplasticité, élasticité des nanoporeux, endommagement, fissuration...) et le temps nécessaire avant de pouvoir publier sur un nouveau sujet.

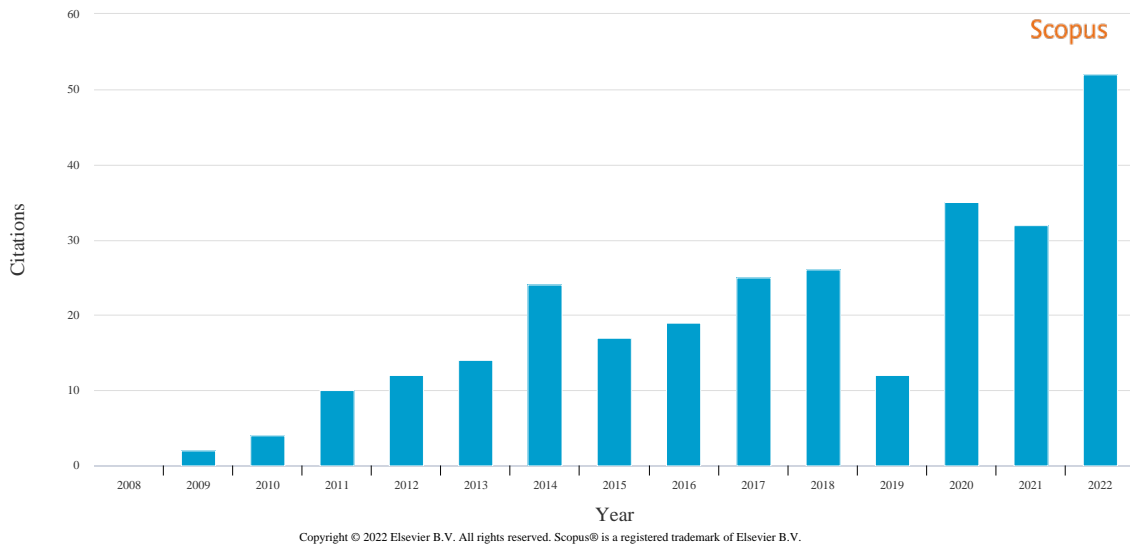


FIGURE 6.1 – Nombre de citations par année (Scopus, novembre 2022).

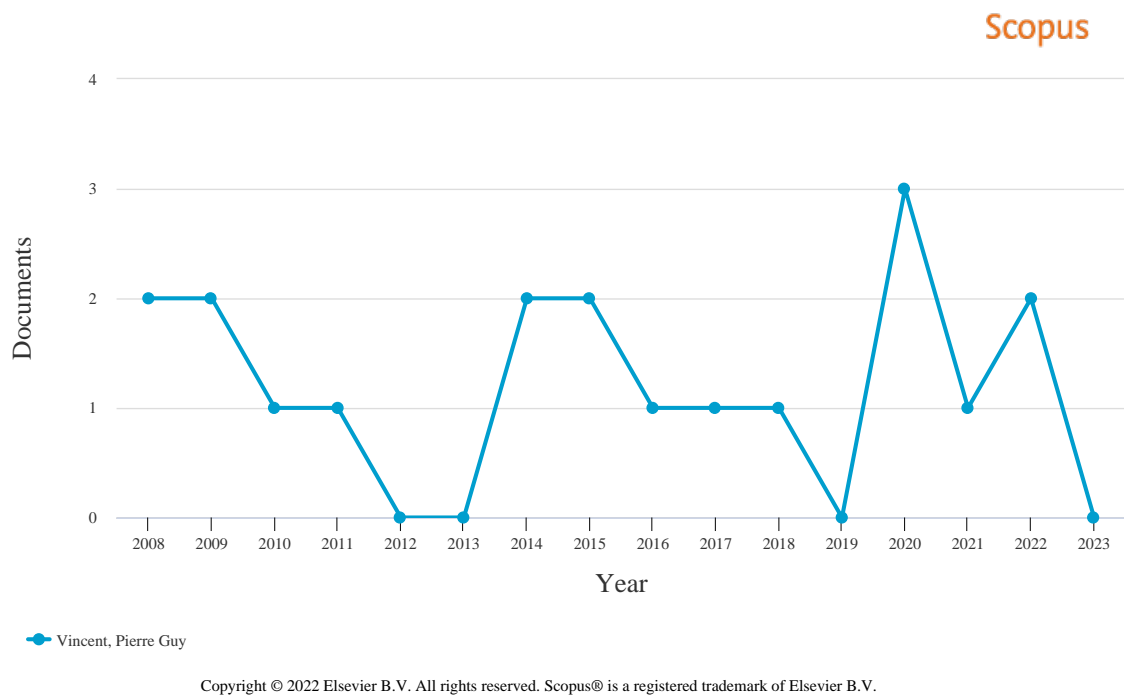


FIGURE 6.2 – Nombre d'articles par année (Scopus, novembre 2022).

6.4.1 Articles dans des revues internationales à comité de lecture

- Portelette, L., Vincent, P.-G., Moulinec, H., Garajeu, M., Viscoplastic behavior of a porous polycrystal with similar pore and grain sizes : Application to nuclear MOX fuel materials (2022) *International Journal of Solids and Structures*, 236-237, art. no. 111316.
- Nkoumbou Kaptchouang, N.B., Monerie, Y., Perales, F., Vincent, P.-G., Cohesive GTN model for ductile fracture simulation (2021) *Engineering Fracture Mechanics*, 242, art. no. 107437.
- Vincent, P.-G., Moulinec, H., Joëssel, L., Idiart, M.I., Garajeu, M., Porous polycrystal plasticity modeling of neutron-irradiated austenitic stainless steels (2020) *Journal of Nuclear Materials*, 542, art. no. 152463.
- El Shawish, S., Vincent, P.-G., Moulinec, H., Cizelj, L., Gélébart, L., Full-field polycrystal plasticity

- simulations of neutron-irradiated austenitic stainless steel : A comparison between FE and FFT-based approaches (2020) *Journal of Nuclear Materials*, 529, art. no. 151927.
- Wojtacki, K., Vincent, P.-G., Suquet, P., Moulinec, H., Boittin, G., A micromechanical model for the secondary creep of elasto-viscoplastic porous materials with two rate-sensitivity exponents : Application to a mixed oxide fuel (2020) *International Journal of Solids and Structures*, 184, pp. 99-113.
 - Joëssel, L., Vincent, P.-G., Garajeu, M., Idiart, M.I., Viscoplasticity of voided cubic crystals under hydrostatic loading (2018) *International Journal of Solids and Structures*, 147, pp. 156-165.
 - Boittin, G., Vincent, P.-G., Moulinec, H., Garajeu, M., Numerical simulations and modeling of the effective plastic flow surface of a biporous material with pressurized intergranular voids (2017) *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 323, pp. 174-201.
 - Haller, X., Monerie, Y., Pagano, S., Vincent, P.-G., Elastic behavior of porous media with spherical nanovoids (2016) *International Journal of Solids and Structures*, 84, pp. 99-109.
 - Idiart, M.I., Vincent, P.-G., A generalized-secant homogenization scheme for viscoplastic polycrystalline solids under imposed deformations (2015) *Comptes Rendus - Mécanique*, 343 (3), pp. 179-186.
 - Haller, X., Monerie, Y., Pagano, S., Vincent, P.-G., Effective elastic properties of nanoporous materials with spherical and spheroidal voids [Propriétés élastiques effectives des matériaux nanoporeux à cavités sphériques et sphéroïdales] (2015) *Matériaux et Techniques*, 103 (3), art. no. 302.
 - Vincent, P.-G., Suquet, P., Monerie, Y., Moulinec, H., Effective flow surface of porous materials with two populations of voids under internal pressure : I. A GTN model (2014) *International Journal of Plasticity*, 56, pp. 45-73.
 - Vincent, P.-G., Suquet, P., Monerie, Y., Moulinec, H., Effective flow surface of porous materials with two populations of voids under internal pressure : II. Full-field simulations (2014) *International Journal of Plasticity*, 56, pp. 74-98.
 - Lebensohn, R.A., Idiart, M.I., Castañeda, P.P., Vincent, P.-G., Dilatational viscoplasticity of polycrystalline solids with intergranular cavities (2011) *Philosophical Magazine*, 91 (22), pp. 3038-3067.
 - Vincent, P.-G., Bourgeois, S., Monerie, Y., Overall elastoplastic behavior of anisotropic metal-matrix composites reinforced by aligned inclusions. Application to hydrided and irradiated Zircaloy-4 cladding tubes (2010) *Mechanics of Materials*, 42 (2), pp. 175-188.
 - Vincent, P.-G., Monerie, Y., Suquet, P., Porous materials with two populations of voids under internal pressure : I. Instantaneous constitutive relations (2009) *International Journal of Solids and Structures*, 46 (3-4), pp. 480-506.
 - Vincent, P.-G., Monerie, Y., Suquet, P., Porous materials with two populations of voids under internal pressure : II. Growth and coalescence of voids (2009) *International Journal of Solids and Structures*, 46 (3-4), pp. 507-526.
 - Vincent, P.-G., Monerie, Y., Yield criterion for a rigid-ideally plastic material with randomly oriented cracks (2008) *Comptes Rendus - Mécanique*, 336 (3), pp. 297-303.
 - Vincent, P.-G., Monerie, Y., Suquet, P., Ductile damage of porous materials with two populations of voids (2008) *Comptes Rendus - Mécanique*, 336 (1-2), pp. 245-259.

6.4.2 Chapitre de livre

- Méité, M., Nkoumbou Kaptchouang, N. B., Monerie, Y., Perales, F., Vincent, P.-G., Ductile Crack Growth Using Cohesive GTN Model (2022) in G. Z. Voyiadjis, éditeur : Handbook of Damage Mechanics : Nano to Macro Scale for Materials and Structures, pp. 333-351. Springer International Publishing.

6.4.3 Article de "review"

- Michel, B., Welland, M., Ofori-Opoku, N., Vanbrutzel, L., Kulacsy, K., Tonks, M.R., Vincent, P.-G., Ribeiro, F., Jelea, A., Pastore, G., Anderson, D.A., Gatt, J.-M., Madec, R., Crocombette, J.-P., State of the art of fuel micro-mechanical modelling : From atomic scale to engineering laws in fuel performance codes (2022) Journal of Nuclear Materials, 572, art. no. 154034.

6.4.4 Conférences à comité de lecture, colloques, groupe de travail

- Chaix, L., Garajeu, M., Idiart, M.I., Monnet, G., Vincent, P.-G., Irradiation hardening of reactor pressure vessel steels : crystal plasticity law and polycrystal full-field simulations (2022) XXXVIII Argentinian congress on computational mechanics MECOM2022, Bahía Blanca, Argentina.
- Tosi, C., Largenton, R., Monerie, Y., Vincent, P.-G., Modèle de zone cohésive viscoplastique dédié à la surfragmentation à haute température des céramiques nucléaires pressurisées (2022) 15ème Colloque National en Calcul des Structures CSMA, Giens, France.
- Perales, F., Socie, A., Nkoumbou Kaptchouang, N.B., Dubois, F., Monerie, Y., Mozul, R., Vincent, P.-G., Babik, F., XPER : une plateforme pour la simulation numérique distribuée d'interactions multiphysiques entre corps (2022) 15ème Colloque National en Calcul des Structures CSMA, Giens, France.
- Portelette, L., Vincent, P.-G., Moulinec, H., Garajeu, M., Porous polycrystal full-field simulations on nuclear MOX fuel materials (2020) 14th World Congress on Computational Mechanics WCCM - ECCOMAS Congress, Paris, France.
- Nkoumbou Kaptchouang, N.B., Monerie, Y., Vincent, P.-G., Micromechanical Modelling of Ductile Damage via a Cohesive-Volumetric Approach (2019) VI International Conference on Computational Modeling of Fracture and Failure of Materials and Structures CFRAC, Braunschweig, Germany.
- Nkoumbou Kaptchouang, N.B., Monerie, Y., Vincent, P.-G., Modélisation micromécanique de la rupture ductile par une approche cohésive-volumique (2018) Matériaux, Strasbourg, France.
- Joëssel, L., Vincent, P.-G., Garajeu, M., Idiart, M.I., Viscoplasticity of voided cubic crystals under hydrostatic loadings (2017) XIV International Conference on Computational Plasticity COMPLAS, Barcelona, Spain.
- Joëssel, L., Vincent, P.-G., Garajeu, M., Idiart, M.I., Modèle viscoplastique pour un monocristal poreux cubique sous chargement purement hydrostatique (2017) Congrès Français de Mécanique CFM, Lille, France.
- Boittin, G., Vincent, P.-G., Moulinec, H., Garajeu, M., Numerical simulations and modeling of the effective plastic flow surface of a biporous material with pressurized intergranular bubbles : application to irradiated uranium dioxide (2016) NuMat2016 : The Nuclear Materials Conference, Montpellier, France.
- Boittin, G., Vincent, P.-G., Moulinec, H., Garajeu, M., Numerical simulation and modeling of the effective plastic flow surface of a biporous material with pressurized intergranular cavities : application to UO2

- fuel (2015) Workshop MIST, Montpellier, France.
- Haller, X., Monerie, Y., Pagano, S., Vincent, P.-G., Modélisation du comportement élastique des matériaux nanoporeux : application au combustible UO₂ (2015) Workshop MIST, Montpellier, France.
 - Haller, X., Monerie, Y., Pagano, S., Vincent, P.-G., Modélisation du comportement élastique effectif des matériaux nanoporeux à cavités sphériques et sphéroïdales (2015) 12e Colloque National en Calcul des Structures CSMA, Giens, France.
 - Haller, X., Monerie, Y., Pagano, S., Vincent, P.-G., Effective elastic properties of bi-nanoporous materials (2015) Bilateral French-Italy Workshop. Going down to the microscale in multiphysics problems. From seismic driven risks to petroleum geomechanics, Arpino, Italy.
 - Boittin, G., Moulinec, H., Garajeu, M., Vincent, P.-G., Étude du comportement mécanique de microstructures à porosité bimodale pressurisée par transformées de Fourier rapides (2015) Deuxièmes Journées Matériaux Numériques, St-Aignan-sur-Cher, France.
 - Idiart, M.I., Vincent, P.-G., A generalized-secant homogenization scheme for viscoplastic polycrystalline solids under imposed deformations (2015) 1st Pan-American Congress on Computational Mechanics, Buenos Aires, Argentina.
 - Haller, X., Monerie, Y., Pagano, S., Vincent, P.-G., Effective elastic properties of nanoporous materials with spherical and ellipsoidal in shape voids (2014) European Mechanics of Materials Conference EMMC, Gothenburg, Suède.
 - Haller, X., Monerie, Y., Pagano, S., Vincent, P.-G., Propriétés élastiques effectives des matériaux nanoporeux à cavités sphériques et ellipsoïdales (2014) Matériaux 2014, Montpellier, France.
 - Vincent, P.-G., Suquet, P., Monerie, Y., Moulinec, H., Effective plastic flow surface of a porous material with two populations of voids subjected to internal pressures : constitutive modeling and 3-dimensional full-field numerical simulations (2014) International Symposium on Plasticity ISP, Freeport, Bahamas.
 - Vincent, P.-G., Monerie, Y., Moulinec, H., Suquet, P., Surface de charge de plasticité effective pour un matériau biporeux saturé : modélisation analytique et simulations numériques (2013) Congrès Français de Mécanique CFM, Bordeaux, France.
 - Suquet, P., Vincent, P.-G., Moulinec, H., Monerie, Y., Effective flow surface of a porous material with two populations of voids : constitutive modeling and 3 dimensional full field numerical simulations (2013) International Conference on Computational Plasticity COMPLAS XII, Barcelona, Spain.
 - Vincent, P.-G., Monerie, Y., Suquet, P., Moulinec, H., Effective flow surface of a bi-porous material : constitutive modeling and numerical simulations (2012) 6th European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering ECCOMAS, Vienna, Austria.
 - Monerie, Y., Vincent, P.-G., Suquet, P., Les céramiques nucléaires : des matériaux accommodants (2009) Sciences et Technologies des Poudres et Matériaux Frittés, Montpellier, France.
 - Vincent, P.-G., Monerie, Y., Suquet, P., Damage evolution in porous materials with two populations of voids under internal pressure (2009) the 3rd US-France Symposium on Damage and Failure in Heterogeneous Materials and Structures, Florida, USA.
 - Vincent, P.-G., Monerie, Y., Suquet, P., Modélisation micromécanique de l'endommagement ductile d'un milieu poreux saturé à deux échelles (2008) MECAMAT Groupe de travail « Physique et mécanique de l'endommagement et de la rupture », Paris, France.
 - Monerie, Y., Perales, F., Vincent, P.-G., Modelling of Ductile Failure of Heterogeneous Materials (2008)

5th European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering ECCOMAS, Venice, Italy.

- Vincent, P.-G., Monerie, Y., Suquet, P., Milieux poreux à deux populations de cavités : bornes non linéaires et estimation (2007) Congrès Français de Mécanique CFM, Grenoble, France.
- Vincent, P.-G., Monerie, Y., Suquet, P., Multi-phases and multi-components materials under dynamic loading (2007) 10th European Mechanics of Materials Conference EMMC, Kazimierz Dolny, Poland. Article sélectionné par la gazette MECAMAT 2008.
- Monerie, Y., Suquet, P., Vincent, P.-G., Céramiques nucléaires (2006) Colloque MECAMAT, Aussois, France.
- Vincent, P.-G., Monerie, Y., Bourgeois, S., Homogénéisation du comportement élastoplastique des gainages de crayons combustibles (2005) Congrès Français de Mécanique CFM, Troyes, France.

6.4.5 Mémoires

- Vincent, P.-G., Modélisation micromécanique de la croissance et de la percolation de pores sous pression dans une matrice céramique à haute température (2007) Thèse de doctorat, Université d'Aix-Marseille I.
- Vincent, P.-G., Homogénéisation du comportement élastoplastique des gainages de crayons combustibles (2004) Rapport de stage, Université d'Aix-Marseille II, DEA de mécanique, filière solides et EGIM (cursus ESM2), option mécanique, majeure structures.

6.5 Encadrements scientifiques

Synthèse :

- Co-encadrement de post-doctorats : 4
- Co-encadrement de thèses de doctorat : 5 (dont 3 soutenues et 2 en cours)
- Encadrement de stage ingénieur (niveau M2) : 1

6.5.1 Post-doctorats

- Guylaine Boittin (2014 – 2015)

Financement : IRSN – LMA

Titre : Simulations numériques et modélisation de la surface de charge de plasticité effective pour un matériau biporeux avec cavités intergranulaires sous pression

Encadrants : Mihail Garajeu, Hervé Moulinec, Pierre-Guy Vincent

Publications : 1 (Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering)

- Guylaine Boittin (2017) et Kajetan Wojtacki (2017 – 2018)

Financement : IRSN – LMA

Titre : Modèle micromécanique pour le fluage secondaire d'un matériau élasto-viscoplastique poreux avec deux exposants de viscoplasticité : application à un combustible MOX

Encadrants : Hervé Moulinec, Pierre Suquet, Pierre-Guy Vincent

Publications : 1 (International Journal of Solids and Structures)

- Luc Portelet (2020 – 2021)

Financement : IRSN – LMA

Titre : Comportement viscoplastique d'un polycristal poreux avec des cavités et des grains de tailles similaires : application à des combustibles MOX

Encadrants : Mihail Garajeu, Hervé Moulinec, Pierre-Guy Vincent

Publications : 1 (Journal of Nuclear Materials)

— Audrey Somera (2022 –)

Financement : IRSN – Commission Européenne

Titre : Étude numérique de la rupture d'éprouvettes mini-C(T) d'aciers de cuve vierges et irradiés dans le domaine de transition ductile-fragile

Encadrants : Frédéric Perales, Pierre-Guy Vincent

Publications : –

6.5.2 Thèses de doctorat

— Xavier Haller (2012 – 2015)

Financement : IRSN – EDF

Sujet : Modélisation du comportement élastique des matériaux nanoporeux : application au combustible UO_2

Co-directeurs de thèse : Yann Monerie, Stéphane Pagano

Encadrant : Pierre-Guy Vincent

Publications : 2 (International Journal of Solids and Structures, Matériaux et Techniques)

— Louis Joëssel (2015 – 2018)

Financement : IRSN

Sujet : Modélisation micromécanique du comportement viscoplastique d'un polycristal poreux : application à un acier inoxydable austénitique irradié

Co-directeurs de thèse : Mihail Garajeu, Martin Idiart, Pierre-Guy Vincent

Publications : 2 (International Journal of Solids and Structures, Journal of Nuclear Materials)

— Noé Brice Nkoumbou Kaptchouang (2016 – 2019)

Financement : IRSN – EDF

Sujet : Modélisation micromécanique de l'endommagement ductile par une approche cohésive-volumique : application à l' UO_2 irradié

Directeur de thèse : Yann Monerie

Encadrant : Pierre-Guy Vincent

Publications : 2 (Engineering Fracture Mechanics, chapitre dans "Handbook of Damage Mechanics : Nano to Macro Scale for Materials and Structures")

— Clément Tosi (2020 –)

Financement : IRSN – EDF

Sujet : Modélisation micromécanique de l'endommagement d'un matériau viscoplastique poreux par une approche cohésive-volumique : application à l' UO_2 irradié

Directeur de thèse : Yann Monerie

Co-encadrants : Rodrigue Largenton, Pierre-Guy Vincent

Publications : –

— Loïc Chaix (2021 –)

Financement : IRSN – ISFIN Institut Sciences de la Fusion et de l’Instrumentation en Environnements Nucléaires (AMU)

Sujet : Modélisation micromécanique du comportement viscoplastique d’un polycristal : application au durcissement d’un acier irradié

Co-directeurs de thèse : Mihail Garajeu, Martin Idiart

Encadrant : Pierre-Guy Vincent

Publications : –

6.5.3 Stage ingénieur

— Clément Tosi (2020) École Polytech Montpellier

Financement : IRSN

Sujet : Simulation numérique de la fissuration d’une pastille de combustible nucléaire en situation accidentelle

Tuteurs : Yann Monerie, Pierre-Guy Vincent

Chapitre 7

Sélection de quatre articles

- 7.1 Article : "Effective flow surface of porous materials with two populations of voids under internal pressure : I. A GTN model"



Effective flow surface of porous materials with two populations of voids under internal pressure: I. A GTN model



Pierre-Guy Vincent^{a,b}, Pierre Suquet^{c,*}, Yann Monerie^{a,b,1}, Hervé Moulinec^c

^a Institut de Radioprotection et de Sécurité Nucléaire, B.P. 3, 13115 Saint-Paul-lez-Durance Cedex, France

^b Laboratoire de Micromécanique et d'Intégrité des Structures, IRSN-CNRS-UMII, B.P. 3, 13115 Saint-Paul-lez-Durance Cedex, France

^c Laboratoire de Mécanique et d'Acoustique, CNRS, UPR 7051, Aix-Marseille Univ, Centrale Marseille, 31, Chemin Joseph Aiguier, 13402 Marseille Cedex 20, France

ARTICLE INFO

Article history:

Received 1 August 2013

Received in final revised form 29 November 2013

Available online 12 February 2014

Keywords:

A. Ductility

B. Constitutive behaviour

B. Ideally plastic material

B. Porous material

C. Variational calculus

ABSTRACT

This study is devoted to the effective plastic flow surface of a bi-porous material saturated by a fluid. The material under consideration exhibits two populations of voids. The smaller voids are spherical voids whereas the larger ones are spheroidal and randomly oriented inside the material. These two populations of voids are subjected to internal pressures due to the presence of gases. Approximate models for the effective plastic flow surface of such a bi-porous saturated material have previously been proposed in Vincent et al. (2009), where a three-scale homogenization procedure has been performed: first, smearing out all the small spherical bubbles using a Gurson-like matrix, and second, smearing out the intergranular ellipsoidal bubbles. Our objective here is to derive a simple analytical expression of the effective flow surface, starting from one of these previous models, obtained by generalizing the approach of Gologanu et al. (1994) to compressible materials. The main contributions of the present paper are: (1) an expression for the average dilatation-rate in the matrix, (2) an approximation of the effective flow surface in the form of a Gurson–Tvergaard–Needleman criterion. The accuracy of this new model is assessed in a companion paper by comparison with full field numerical simulations.

© 2014 Elsevier Ltd. All rights reserved.

1. Motivations and objectives

This study is devoted to the effective plastic flow surface of bi-porous materials characterized by the presence of two populations of voids with well separated sizes: (1) spherical intragranular bubbles at a very small scale, and (2) ellipsoidal (oblate) intergranular bubbles at a larger scale. These two populations of voids are filled with a fluid and therefore are subjected to internal pressures. They are randomly distributed inside the material with random orientation (for the ellipsoidal voids).

Such a microstructure is typical of the highly irradiated uranium dioxide (UO₂), a nuclear fuel commonly used in nuclear reactors. The assessment of the safety of nuclear plants under accident conditions has recently motivated several studies on the mechanical behavior of highly irradiated nuclear fuels at different scales (Vincent et al., 2008, 2009a,b; Julien et al., 2011). UO₂ is a polycrystalline material which exhibits, when highly irradiated, a very specific microstructure with two

* Corresponding author. Tel.: +33 4 91 16 42 08; fax: +33 4 91 16 44 81.

E-mail addresses: pierre-guy.vincent@irsn.fr (P.-G. Vincent), suquet@lma.cnrs-mrs.fr (P. Suquet), yann.monerie@irsn.fr (Y. Monerie), moulinec@lma.cnrs-mrs.fr (H. Moulinec).

¹ Present address: Laboratoire de Mécanique et Génie Civil, Université Montpellier 2, CNRS, CC 048 Place Eugène Bataillon, 34095 Montpellier Cedex, France.

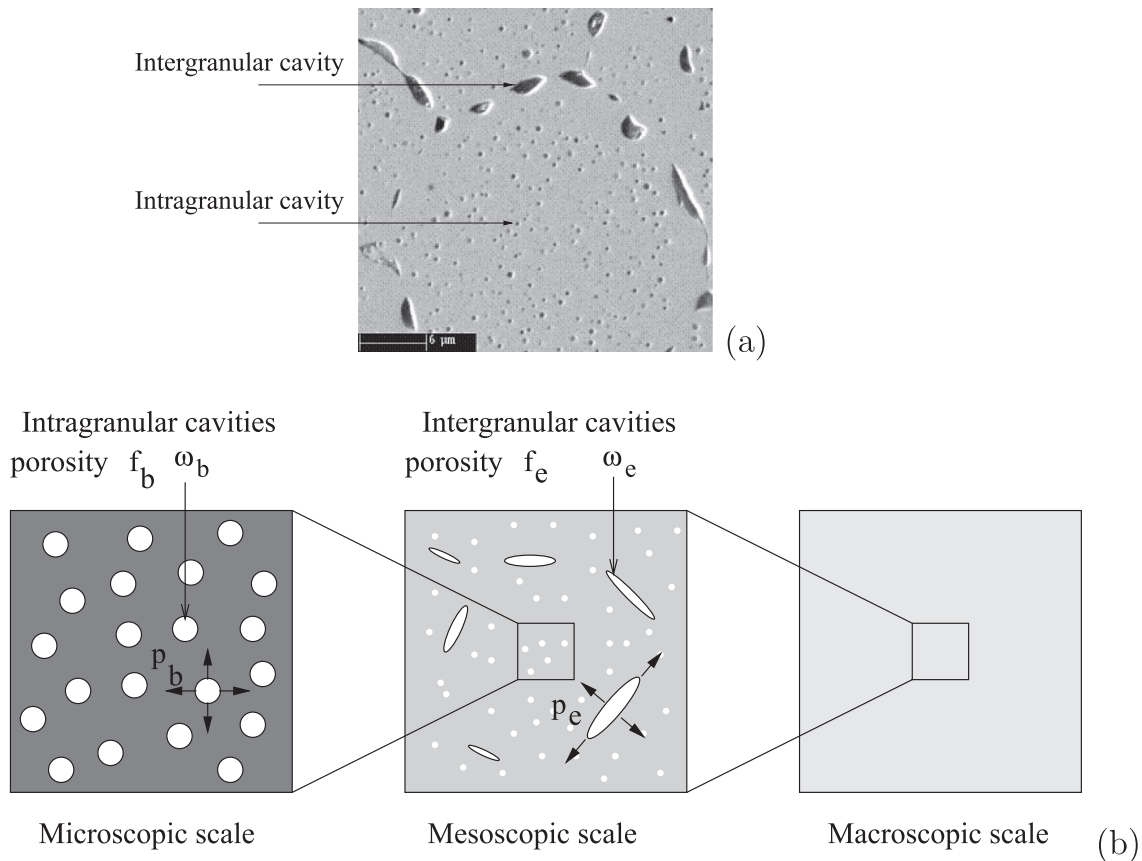


Fig. 1. Micrography of irradiated UO_2 (23 GW d/tU) after heat treatment at 2000 K during 3 h (Dubourg et al., 2005). (b) Three-scale up-scaling (or homogenization) procedure (Vincent et al., 2009a).

populations of voids of rather different sizes and shapes as shown in Fig. 1 (more information about the formation and the size of these voids can be found in Kashibe et al. (1993), Lösönen (2000) and Kashibe and Une (1991)):

- at the smallest scale (microscopic scale), a first population of voids, almost spherical in shape, is observed inside the grains. The diameter of these so-called *intragranular voids* is typically of the order of a few nanometers, much smaller than the typical grain size which is of the order of 10 μm (Olander, 1976; Dherbey et al., 2002; Kashibe and Une, 1991).
- at a larger scale (mesoscopic scale), a second population of voids, roughly spheroidal in shape, is located at the grain boundaries (the diameter of these so-called *intergranular voids* is typically of the order of a few microns).

Both types of voids are filled with fission gases, with possibly different pressures inside the *intergranular* and *intragranular* voids. Under accident condition, the temperature in the material and the gas pressure inside the voids increase suddenly. At such high temperatures, this polycrystalline ceramic is ductile and the two populations of voids start growing until they eventually coalesce to form a macro-crack, a mechanism which is strongly reminiscent of ductile rupture in metals. The problem addressed in the present study is thus not restricted to highly irradiated UO_2 and concerns more generally voided materials with two populations of pressurized voids.

The typical length scale attached to this polycrystalline material at the macroscopic scale is much larger than those of the two populations of voids leading to a clear separation of scales. Therefore the macroscopic properties of such bi-porous materials can be predicted by two successive homogenization procedures, a first one from the microscopic to the mesoscopic scale, and a second one from the mesoscopic to the macroscopic scale, as schematically illustrated in Fig. 1(b).

The first scale transition, from the microscopic to the mesoscopic scale, will not be discussed here in much details. It amounts to finding the effective behavior of a porous material made from a von Mises matrix containing pressurized voids. Since the voids are spherical in shape with a rather low volume fraction Gurson's model (Gurson, 1977), with adequate modifications to account for the internal pressure in the voids, is a convenient and reasonably accurate model for the problem under consideration. More sophisticated homogenization models do exist, at least for viscoplasticity (Danas et al., 2008), but Gurson's model, in addition to its accuracy in the present context, has the definite advantage that it delivers an explicit form for the dissipation potential at the mesoscale which is needed for the second scale transition, from the mesoscopic to the macroscopic scale. This second step, to which most of this study is devoted, amounts to finding the effective properties of a voided material, composed of a Gurson matrix and containing randomly distributed ellipsoidal (spheroidal) voids. The

distribution of the second population of voids assumed here is slightly different from that encountered in polycrystalline UO_2 , where the intergranular voids are located along the grain boundaries. This approximation is motivated by the results of [Lebensohn et al. \(2011\)](#) who showed that when the anisotropy of the single crystals is moderate (typically cubic materials such as UO_2), the precise location of the intergranular voids is not very important. Another point worthy of notice is that a *composite grain model* could be constructed in the line of [Vincent et al. \(2009b\)](#) where the ellipsoidal voids are smeared out in a layer of material along the grain boundary surrounding a core of Gurson material. For the sake of simplicity and in order to obtain analytical results this model has not been pursued here.

The problem of a pressure-sensitive ductile matrix containing voids has been considered by different authors, [Lee and Ung \(1999\)](#), [Guo et al. \(2008\)](#) and [Thoré et al. \(2009\)](#) for a Drucker–Prager matrix containing spherical voids, [Monchiet and Kondo, 2012](#) for a Mises–Schleicher matrix, again with spherical voids. The problem of an incompressible matrix containing ellipsoidal voids in an incompressible matrix has been considered by [Gologanu et al. \(1994\)](#), [Ponte Castañeda and Zaidman \(1996\)](#), [Benzerga et al. \(2004\)](#), [Monchiet et al. \(2011\)](#) and [Madou and Leblond \(2012\)](#) among others. The effect of a secondary population of small voids on the growth of a primary population of larger voids has been considered by several authors ([Leblond and Perrin, 1999](#); [Fabrègue and Pardoën, 2008](#) among others). But to the authors’ knowledge the only work addressing specifically the problem of a Gurson matrix containing spheroidal voids *under internal pressure* is [Vincent et al. \(2009a\)](#) on which the present study is based.

Our objective here is to derive a simple analytical expression of the effective flow surface of such bi-porous materials under internal pressure building upon the previous study of [Vincent et al. \(2009a\)](#) where two rigorous upper bounds and an estimate of the effective flow surface have been derived. The first bound was based on the variational method of [Ponte Castañeda \(1991\)](#), also called *the modified secant method* ([Suquet, 1995](#); [Ponte Castañeda and Suquet, 1998](#)) and was accurate at low stress-triaxiality. The second bound was obtained by generalizing the approach of [Gurson \(1977\)](#) and [Gologanu et al. \(1994\)](#) to compressible materials. The resulting prediction was observed to be accurate at high stress-triaxiality and this procedure is often referred to as the limit analysis procedure (LA). The estimate, called *the N-phase model*, inspired by the work of [Bilger et al. \(2002\)](#), was again based on the variational method of [Ponte Castañeda \(1991\)](#) and matches the best of the two bounds at low and high triaxialities. However, its implementation in a standard FEM code requires to solve, at each Gauss point of the structure, a set of N non-linear equations. This local nonlinear step results in a significant slowing-down of the structural calculation. The objective of the present work is therefore to derive an approximation in closed-form of the effective flow surface. This objective is motivated by the need of a model which can be accurate and at the same time cost effective for structural calculations. Such a model is also particularly useful for parametric studies to study the influence of the volume fraction and aspect ratio of the voids, as well as their internal pressure on the overall response of the material.

This objective is achieved by searching a “Gurson-like”, or Gurson–Tvergaard–Needleman (GTN), approximation of the effective flow surface in the form:

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

where Σ_m is the macroscopic hydrostatic stress and Σ_{eq} is the von Mises stress, $\Sigma_m = \frac{1}{3} \text{Tr}(\Sigma)$, $\Sigma_{eq} = \sqrt{\frac{3}{2} \Sigma^d : \Sigma^d}$, $\Sigma^d = \Sigma - \Sigma_m \mathbf{i}$ is the deviatoric part of Σ , σ_0 denotes the yield stress of the unvoided matrix. $\bar{\Sigma}_m^+$ and $\bar{\Sigma}_m^-$ are the flow stresses of the material under hydrostatic stress (corresponding respectively to a contraction and a dilatation of the material), α and β are the two scalar functions:

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

where $\bar{\Sigma}_{eq}$ is the flow stress of the material under purely deviatoric strain-rate. α , β , $\bar{\Sigma}_m^+$, and $\bar{\Sigma}_m^-$ depend on the shape and volume fractions of the two populations of voids and on the internal pressures p_b (in the intragranular voids) and p_e (in

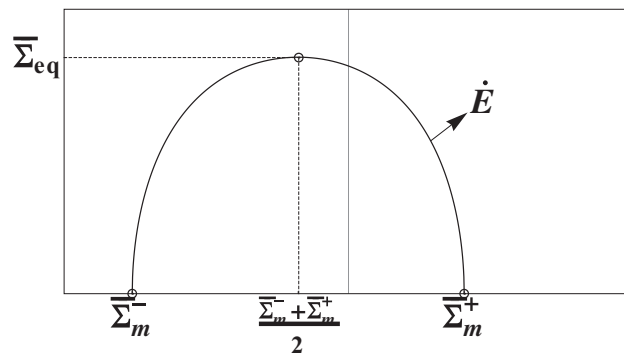


Fig. 2. Generalized GTN criterion in the plane Σ_m, Σ_{eq} passing through the three specific points $(\bar{\Sigma}_m^+, 0)$, $(\bar{\Sigma}_m^-, 0)$, $(\frac{\bar{\Sigma}_m^+ + \bar{\Sigma}_m^-}{2}, \bar{\Sigma}_{eq})$ corresponding respectively to purely hydrostatic (positive or negative) and deviatoric overall strain-rates.

the intergranular voids). Thus, the proposed criterion is a generalized Gurson criterion passing through the three specific points $\bar{\Sigma}_m^+$, $\bar{\Sigma}_m^-$, and $\bar{\Sigma}_{eq}$ as illustrated in Fig. 2.

As will be seen later, accurate approximations for these three specific points can be derived from the compressible velocity field of Vincent et al. (2009a) generalizing to compressible materials the approach of Gologanu et al. (1994). The key point in the determination of $\bar{\Sigma}_m^+$, $\bar{\Sigma}_m^-$, and $\bar{\Sigma}_{eq}$ is the estimation of the average dilatation-rate in the matrix, a new unknown by comparison with the more classical incompressible case. The analysis is performed on a hollow ellipsoid but the result remains valid for an assemblage of randomly oriented ellipsoids such as shown in Fig. 3.

The present study, in two parts, is organized as follows. In the present paper, the different scales involved in the problem, the class of microstructures, the main assumptions of the model, the loading conditions, and classical relations used in upscaling methods are recalled in Section 2 and the main results of Vincent et al. (2008, 2009a) are summarized. Then a simplified analytical model is derived in Section 3 and 4 for spherical voids and in Section 5 for spheroidal voids. The accuracy of this new model is assessed in part 2 of the paper by comparison with full field numerical simulations using the Fast Fourier Transform method of Moulinec and Suquet (1998), Michel et al. (2000, 2001). These simulations are performed on microstructures containing a large number of spheroidal voids as shown in Fig. 3(b).

2. Micromechanical analysis

2.1. Microstructure and loading conditions

As exposed in Section 1, the problem with primary and secondary populations of voids involves three different scales. The smallest (or microscopic) scale corresponds to the intragranular level (Fig. 1(b) left). The intermediate (or mesoscopic) scale corresponds to the scale of a single grain or of a couple of grains with a large number of small intragranular voids (Fig. 1(b) center). The largest (or macroscopic) scale corresponds to a large representative volume element containing a sufficiently large number of grains and intergranular voids together with an even larger number of intragranular voids.

Let V denote a representative volume element at the macroscopic scale, ω_e is the domain occupied by the intergranular voids and ω_b is the domain occupied by the intragranular voids. The partial porosities f_b , f_e and the total porosity f read:

$$f_b = \frac{|\omega_b|}{|V - \omega_e|}, \quad f_e = \frac{|\omega_e|}{|V|}, \quad f = f_e + f_b - f_e f_b. \quad (3)$$

Since our main objective is to derive the instantaneous effective flow surface of the material (instantaneous in the terminology of Ponte Castañeda and Zaidman, 1996; Zaidman and Ponte Castañeda, 1996), the microstructure of the material is assumed to be fixed.

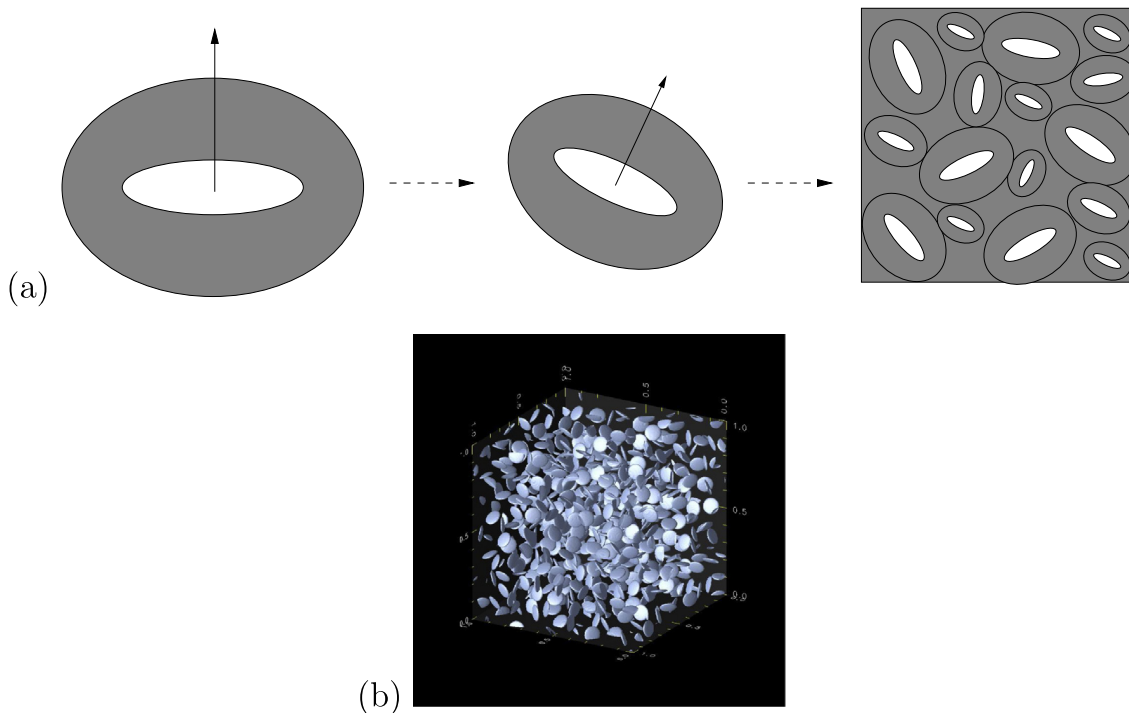


Fig. 3. (a): Assemblage of self-similar randomly oriented hollow ellipsoids (from Vincent et al., 2009a). Unit pattern (left). Rotated and dilated hollow ellipsoid (center). Representative volume element (right). (b): Typical microstructure used in the full-field simulations: randomly oriented ellipsoidal voids (intergranular) in a compressible matrix (due to the presence of intragranular voids).

The spherical intragranular smaller voids are filled with fission gases at pressure p_b . The larger, intergranular, ellipsoidal voids are filled with fission gases at pressure p_e which can be different from p_b . In addition, the whole volume element is subjected to an overall strain-rate $\dot{\mathbf{E}}$.

2.2. Up-scaling

The three scales of the problem being well separated, the up-scaling (or homogenization) procedure can be performed in two successive steps (see Fig. 1(b)), first from the microscopic to the mesoscopic scale, smearing out all the small spherical voids, and second from the mesoscopic to the macroscopic scale, smearing out the details of the grain boundaries and the intergranular ellipsoidal voids. These two successive steps will be called the first scale transition and the second scale transition in the sequel.

2.2.1. Average stress and strain rate in voided materials

The overall stress and strain-rate are the volume averages of the local stress and strain-rate fields over a representative volume element V comprising a matrix domain and a domain occupied by voids denoted by ω (which can be ω_b or ω_e , depending on the scale transition under consideration). The voids are subjected to a uniform pressure p (which could either be p_b or p_e depending on the scale under consideration). The overall stress and strain rate are defined as in (Vincent et al., 2009a):

$$\Sigma = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = \frac{1}{|V|} \int_{V-\omega} \boldsymbol{\sigma} \, d\mathbf{x} - \frac{|\omega|}{|V|} p \mathbf{i}, \quad (4)$$

$$\dot{\mathbf{E}} = \langle \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} \rangle = \frac{1}{|V|} \left(\int_{V-\omega} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} \, d\mathbf{x} - \int_{\partial\omega} \dot{\mathbf{u}} \otimes_s \mathbf{n} \, ds \right), \quad (5)$$

where $\boldsymbol{\sigma}$ and $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}$ are the local stress and strain-rate fields, \mathbf{n} is the unit normal vector on the boundary of the voids pointing from the bulk material towards the interior of the void, \mathbf{i} is the second-order identity tensor, and $\dot{\mathbf{u}}$ is the local velocity field. The symmetric tensor product of $\mathbf{a} \otimes_s \mathbf{b}$ of the two vectors \mathbf{a} and \mathbf{b} is defined as $(\mathbf{a} \otimes_s \mathbf{b})_{ij} = \frac{1}{2} (a_i b_j + a_j b_i)$.

2.2.2. Effective dissipation potential and effective flow surface

The up-scaling procedure for the two scale transitions is based on the minimization of the average plastic dissipation in a representative volume element under an imposed macroscopic strain-rate to which corresponds a variational principle. The scale transition is not specified and the variational principle applies to both changes of scale:

$$\Sigma = \frac{\partial \Phi}{\partial \dot{\mathbf{E}}}(\dot{\mathbf{E}}, p), \quad (6)$$

with

$$\Phi(\dot{\mathbf{E}}, p) = \inf_{\dot{\mathbf{u}} \in \mathcal{K}(\dot{\mathbf{E}})} \frac{1}{|V|} \left[\int_{V-\omega} \varphi(\boldsymbol{\varepsilon}(\dot{\mathbf{u}})) \, d\mathbf{x} + p \int_{\partial\omega} \dot{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{n} \, ds \right], \quad (7)$$

where $\mathcal{K}(\dot{\mathbf{E}})$ denotes the set of velocity fields $\dot{\mathbf{u}}$ satisfying $\dot{\mathbf{u}} = \dot{\mathbf{E}} \cdot \mathbf{x}$ on ∂V . The dissipation potential of the matrix, φ , is a positively homogeneous function of degree 1 with respect to $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}$. Φ inherits this property of homogeneity of degree 1, and therefore is not everywhere differentiable. Relation (6) must be understood in a generalized sense. Φ is the dissipation potential of an effective domain $P^{\text{hom}}(p)$ characterized as:

$$P^{\text{hom}}(p) = \{ \Sigma \text{ such that } \Sigma : \dot{\mathbf{E}} \leq \Phi(\dot{\mathbf{E}}, p) \text{ for all } \dot{\mathbf{E}} \}. \quad (8)$$

The boundary of $P^{\text{hom}}(p)$ is the effective flow surface of the material and consists of all stresses deriving from the potential Φ :

$$\text{when } \dot{\mathbf{E}} \neq \mathbf{0}, \quad \Sigma = \frac{\partial \Phi}{\partial \dot{\mathbf{E}}}(\dot{\mathbf{E}}, p) \text{ belongs to the effective flow surface.} \quad (9)$$

The variational principle (7) and the characterization (9) apply to both scale transitions.

2.2.3. First scale transition: generalized Gurson criterion

For the first scale transition, the plastic dissipation potential φ corresponds to a von Mises, incompressible, material ($\varphi(\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}) = \sigma_0 \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{eq}$). Generalizing Gurson's approach to account for the internal pressure in the voids, Vincent et al. (2009a) have established that the effective (mesoscopic) potential differs from the usual Gurson's potential by only a linear term

$$\Phi^b(\dot{\mathbf{E}}, p_b) = \Phi^{\text{Gur}}(\dot{\mathbf{E}}) - 3p_b \dot{\mathbf{E}}_m \quad (10)$$

where Gurson's potential corresponding to the drained case ($p_b = 0$), reads:

$$\Phi^{\text{Gur}}(\dot{\mathbf{E}}) = \sigma_0 \int_{f_b^*}^1 \left(\frac{4}{y^2} (\dot{E}_m)^2 + \frac{1}{q_3} (\dot{E}_{eq})^2 \right)^{\frac{1}{2}} dy. \quad (11)$$

\dot{E}_m is the hydrostatic strain rate and \dot{E}_{eq} is the von Mises norm for the strain rate, $\dot{E}_m = \frac{1}{3} \text{Tr}(\dot{\mathbf{E}})$, $\dot{E}_{eq} = \sqrt{\frac{2}{3} \dot{\mathbf{E}}^d : \dot{\mathbf{E}}^d}$, $\dot{\mathbf{E}}^d = \dot{\mathbf{E}} - \dot{E}_m \mathbf{i}$ is the deviatoric part of $\dot{\mathbf{E}}$. The initial analysis of Gurson corresponds to $f_b^* = f_b$ and $q_3 = 1$. The enhanced porosity $f_b^* = q_1 f_b$ and the parameter q_3 have been introduced by [Koplik and Needleman \(1988\)](#) to better match their unit-cell calculations. Detailed expressions for these parameters q_1 and q_3 can be found in [Koplik and Needleman \(1988\)](#) and [Leblond et al. \(1994\)](#).

The effective flow surface corresponding to (10) through relation (9) is a generalized Gurson–Tvergaard–Needleman (GTN) criterion ([Gurson, 1977](#); [Koplik and Needleman, 1988](#); [Tvergaard et al., 1990](#)):

$$q_3 \left(\frac{\Sigma_{eq}}{\sigma_0} \right)^2 + 2q_1 f_b \cosh \left(\frac{3}{2} \frac{\Sigma_m + p_b}{\sigma_0} \right) - 1 - (q_1 f_b)^2 = 0, \quad (12)$$

where Σ_m is the hydrostatic stress and Σ_{eq} is the von Mises stress, $\Sigma_m = \frac{1}{3} \text{Tr}(\Sigma)$, $\Sigma_{eq} = \sqrt{\frac{3}{2} \Sigma^d : \Sigma^d}$, Σ^d is the macroscopic stress deviator. Note that when the voids are subjected to a uniform internal pressure p_b , the general form of the Gurson criterion is preserved, Σ being replaced by $\Sigma + p_b \mathbf{i}$.

2.3. Second scale transition: the upper bound of [Vincent et al. \(2009a\)](#)

For the second scale transition, the local dissipation potential φ in (7) is the mesoscopic effective potential (10) corresponding to a compressible material, the voided domain consists of the intergranular voids $\omega = \omega_e$, the internal pressure is the pressure in the intergranular voids $p = p_e$ and the effective potential derived from (7) is the effective macroscopic potential $\Phi(\dot{\mathbf{E}}, p_b, p_e)$.

A more specific microstructure will be assumed at the mesoscopic scale, obtained by assembling confocal hollow ellipsoids in the line of [Gologanu et al. \(1994\)](#) or [Madou and Leblond \(2012\)](#) (who considered a single hollow ellipsoid). All intergranular voids are assumed to be spheroidal in shape with the same aspect-ratio $w = c/a$ between the semi-axis c in the direction of the axis of the spheroid and the semi-axis a in the plane orthogonal to this direction. The intergranular voids are therefore oblate when $w < 1$, spherical when $w = 1$ and prolate when $w > 1$. Each void is surrounded by an ellipsoidal shell of matrix which is confocal to the void and the whole space is filled with such self-similar ellipsoids with arbitrary orientation and size ([Fig. 3\(b\)](#)). [Vincent et al. \(2009a\)](#) have derived rigorous properties and approximations for the effective potential Φ . In particular they showed that

$$\Phi(\dot{\mathbf{E}}, p_b, p_e) = \Phi(\dot{\mathbf{E}}, p_b - p_e, 0) - 3p_e \dot{E}_m = \Phi(\dot{\mathbf{E}}, 0, p_e - p_b) - 3p_b \dot{E}_m. \quad (13)$$

In other words when the two populations of voids are saturated, with pressure p_b in the small voids and p_e in the large voids, and when the matrix is incompressible at the microscopic scale, it is sufficient to perform the second scale transition for a drained porous matrix ($p_b = 0$), provided that the pressure in the larger voids is set equal to $p_e - p_b$. Equivalently, it is sufficient to determine the potential $\Phi(\dot{\mathbf{E}}, p_b - p_e, 0)$ for a saturated porous matrix under pressure $p_b - p_e$, provided that the pressure in the larger voids is set equal to 0.

Moreover [Vincent et al. \(2009a\)](#) have derived a rigorous upper bound for the above described assemblage of hollow ellipsoids by generalizing to compressible materials the approach of [Gologanu et al. \(1994\)](#) by using for a single hollow ellipsoid the velocity field

$$\dot{\mathbf{u}} = \dot{\mathbf{u}}^{\text{Gol}} + A \mathbf{x}, \quad (14)$$

where A is a scalar parameter and $\dot{\mathbf{u}}^{\text{Gol}}$ is derived from the incompressible velocity field of [Gologanu et al. \(1994\)](#). A more detailed construction of the velocity field (14) is given in [Vincent et al. \(2008, 2009a\)](#). A definite advantage of this explicit field over the more general, but less explicit, family of velocity fields of [Gologanu et al. \(1997\)](#) is that it leads to an effective dissipation potential which can be expressed (almost) in closed form (see relation (40)). The matrix being isotropic (Gurson material) the use of enriched velocity fields is not expected to lead to significant improvements, although this point has not been checked in details. This velocity field can classically be extended to the hollow ellipsoid assemblage. The resulting strain-rate field in the matrix reads as

$$\dot{\mathbf{e}} = \dot{\mathbf{e}}^{\text{Gol}} + A \mathbf{i}$$

and since the field $\dot{\mathbf{e}}^{\text{Gol}}$ is incompressible, A can be interpreted as the dilatation rate in the matrix (which is assumed to be uniform by the specific choice (14)):

$$\dot{e}_m = A \quad \text{in the matrix.}$$

According to relation (5), the macroscopic dilatation-rate can be expressed as

$$3\dot{E}_m = 3(1 - f_e)A + f_e \frac{|\dot{\omega}_e|}{|\omega_e|},$$

where $|\omega_e|$ denotes the volume of ω_e . Keeping in mind that $f_e = \frac{|\omega_e|}{|V|}$, the change in volume fraction of the ellipsoidal voids can be expressed as

$$\frac{\dot{f}_e}{f_e} = \frac{|\dot{\omega}_e|}{|\omega_e|} - \frac{|\dot{V}|}{|V|} = 3(\dot{E}_m - A) \frac{1 - f_e}{f_e} \quad \text{where} \quad \frac{|\dot{V}|}{|V|} = 3\dot{E}_m. \quad (15)$$

In other words

- when $A = 0$, there is no dilatation-rate in the matrix ($\dot{f}_b = 3f_b\dot{E}_m = 0$) and the overall dilatation is entirely due to the change of volume of the intergranular voids,
- when $A = \dot{E}_m$, the volume fraction of the intergranular voids does not change ($\dot{f}_e = 0$) and the overall dilatation is entirely due to the change of volume of the intragranular voids.

An accurate determination of the average dilatation rate A in the matrix for arbitrary loading conditions p_b , p_e and $\dot{\mathbf{E}}$ is essential in obtaining accurate predictions for the effective flow surface of the material. A numerical procedure was used in Vincent et al. (2009a). The present study aims at deriving an analytical approximation for this dilatation rate, using asymptotic expansions of A as a function of $p_b - p_e$ and $\dot{\mathbf{E}}$ in the neighborhood of $A = \pm\infty$, $A = 0$ and $A = \dot{E}_m$. Section 3 deals with the simpler case of spherical voids, whereas the general case of spheroidal and randomly oriented voids is addressed in Section 5.

3. Spherical intergranular voids: average strain-rate in the matrix

3.1. The upper bound of Vincent et al. (2009a)

When the intergranular voids are spherical ($w = 1$) (Vincent et al., 2009a) have shown that the effective potential $\Phi(\dot{\mathbf{E}}, p_b, p_e)$ for the composite sphere assemblage can be bounded from above by:

$$\Phi^+(\dot{\mathbf{E}}, p_b, p_e) = \inf_A \phi(A, \dot{\mathbf{E}}, p) - 3p_e\dot{E}_m, \quad (16)$$

where $p = p_b - p_e$ and

$$\phi(A, \dot{\mathbf{E}}, p) = \sigma_0 \int_{f_e}^1 \int_{f_b^*}^1 \sqrt{4\frac{A^2}{y^2} + 4\frac{(\dot{E}_m - A)^2}{q_3 z^2} + \frac{(\dot{E}_{eq})^2}{q_3}} dy dz - 3(1 - f_e)pA. \quad (17)$$

The effective flow surface corresponding to the potential (16) is defined by the parametric equations:

$$\left. \begin{aligned} \Sigma_m &= \frac{1}{3} \frac{\partial \Phi^+}{\partial \dot{E}_m}(\dot{\mathbf{E}}, p_b, p_e) = -p_e + \frac{4}{3} \frac{\sigma_0}{q_3} \int_{f_b^*}^1 \int_{f_e}^1 \frac{\dot{E}_m - A_{sol}}{z^2 \sqrt{4\frac{A_{sol}^2}{y^2} + 4\frac{(\dot{E}_m - A_{sol})^2}{q_3 z^2} + \frac{(\dot{E}_{eq})^2}{q_3}}} dz dy, \\ \Sigma_{eq} &= \frac{\partial \Phi^+}{\partial \dot{E}_{eq}}(\dot{\mathbf{E}}, p_b, p_e) = \frac{\sigma_0}{q_3} \int_{f_b^*}^1 \int_{f_e}^1 \frac{\dot{E}_{eq}}{\sqrt{4\frac{A_{sol}^2}{y^2} + 4\frac{(\dot{E}_m - A_{sol})^2}{q_3 z^2} + \frac{(\dot{E}_{eq})^2}{q_3}}} dz dy, \end{aligned} \right\} \quad (18)$$

where A_{sol} denotes the solution of the minimization problem (16). In a structural calculation the minimization problem (16) and the numerical integration of the double integrals in (18) have to be performed at every Gauss point of the structure. Both operations are time-consuming at a single material point and the cost at the level of a structure is extremely high. The rest of the paper aims first at determining an approximate, but accurate, analytical expression for the average dilatation-rate in the matrix A_{sol} and second, to use this approximation to propose a simple analytical expression for the effective flow surface.

3.2. Specific properties of A_{sol}

The approximation proposed is based on several general properties of A_{sol} as a function of p_b , p_e and $\dot{\mathbf{E}}$. Note that A_{sol} depends in fact on p_b and p_e only through their difference $p = p_b - p_e$. The properties are listed below and proved in Appendix A.

Property 1. $A_{sol}(p, \dot{\mathbf{E}})$ is an odd function of $(p, \dot{\mathbf{E}})$:

$$A_{sol}(-p, -\dot{\mathbf{E}}) = -A_{sol}(p, \dot{\mathbf{E}}). \quad (19)$$

A straightforward consequence of Property 1 is that Φ^+ is itself an even function of $(\dot{\mathbf{E}}, p_b, p_e)$:

$$\Phi^+(-\dot{\mathbf{E}}, -p_b, -p_e) = \Phi^+(\dot{\mathbf{E}}, p_b, p_e). \quad (20)$$

Property 2. $A_{\text{sol}}(p, \dot{\mathbf{E}})$ is a monotone increasing function of p .

This property allows to consider either A_{sol} as a function of p (the determination of this function is our final goal), or conversely p as a function of A_{sol} (it will be useful to compute p for a few, physically relevant, values of A_{sol}).

Property 3.

$$\lim_{p \rightarrow \pm p^\infty} A_{\text{sol}}(p, \dot{\mathbf{E}}) = \pm \infty \quad \text{where} \quad p^\infty = \frac{2}{3} \frac{\sigma_0}{1 - f_e} I_0, \quad (21)$$

where I_0 is a scalar function of f_e and f_b^* given by (A.7), and more specifically

$$A_{\text{sol}}(p, \dot{\mathbf{E}}) \sim \pm \sqrt{\frac{\sigma_0}{12q_3(1-f_e)}} \sqrt{4\dot{E}_m^2 I_1 + \dot{E}_{eq}^2 I_2} \frac{1}{\sqrt{p^\infty \mp p}} \quad \text{when} \quad p \rightarrow \pm p^\infty, \quad (22)$$

where I_1 and I_2 are two scalar functions of f_e and f_b^* given by (A.10).

In other words the range of pressure p for which the problem (16) has a solution is limited to the interval $] - p^\infty, + p^\infty[$. Explicit expressions of I_0 , I_1 , and I_2 are given in Appendix C.

Two other specific values of p , are worth investigating. The first one, p^0 , corresponds to the pressure which compensates exactly the effect of the overall strain-rate $\dot{\mathbf{E}}$ and gives no average dilatation-rate in the matrix: $A_{\text{sol}} = 0$ when $p = p^0$.

Property 4. $A_{\text{sol}}(p, \dot{\mathbf{E}}) = 0$ when $p = p^0(\dot{\mathbf{E}})$ with

$$p^0(\dot{\mathbf{E}}) = \frac{-4\sigma_0(1-f_b^*)}{3\sqrt{q_3}(1-f_e)} \dot{E}_m \int_{f_e}^1 \frac{1}{z^2} \left(4 \frac{\dot{E}_m^2}{z^2} + \dot{E}_{eq}^2 \right)^{-1/2} dz. \quad (23)$$

In addition

$$\frac{\partial A_{\text{sol}}}{\partial p}(p^0, \dot{\mathbf{E}}) = \frac{3(1-f_e)}{4\sigma_0\sqrt{q_3}(1-f_b^*)} \frac{1}{\left[\frac{1}{f_b^*} \left(4\dot{E}_m^2 J_1 + \dot{E}_{eq}^2 J_2 \right) + \frac{\dot{E}_{eq}^2}{q_3} J_1 \right]}, \quad (24)$$

where J_1 and J_2 are functions of f_b^* , f_e and $\dot{\mathbf{E}}$ defined in (A.13).

The second pressure of interest, p^1 corresponds to the internal pressure in the voids for which $A = \dot{E}_m$, which, following (15), corresponds to the specific loading conditions where the void volume fraction of the intergranular voids is kept constant in time.

Property 5. $A_{\text{sol}}(p, \dot{\mathbf{E}}) = \dot{E}_m$ when $p = p^1(\dot{\mathbf{E}})$ with

$$p^1(\dot{\mathbf{E}}) = \frac{4\sigma_0}{3} \dot{E}_m \int_{f_b^*}^1 \frac{1}{y^2} \left(4 \frac{\dot{E}_m^2}{y^2} + \frac{\dot{E}_{eq}^2}{q_3} \right)^{-1/2} dy. \quad (25)$$

In addition

$$\frac{\partial A_{\text{sol}}}{\partial p}(p^1, \dot{\mathbf{E}}) = \frac{3q_3}{4\sigma_0} \frac{1}{\left(\frac{1}{f_e} J_3 + \dot{E}_{eq}^2 J_4 \right)}, \quad (26)$$

where J_3 and J_4 are functions of f_b^* , f_e and $\dot{\mathbf{E}}$ defined in (A.17).

3.3. Explicit approximation for A_{sol}

An interpolation, matching the above exact asymptotic results when $p \sim -p^\infty$, $p \sim p^0$, $p \sim p^1$, and $p \sim p^\infty$ is proposed.

Attention is restricted to $\dot{E}_m > 0$, since according to (A.1), the expression of A_{sol} for $\dot{E}_m < 0$ can be deduced from that for $\dot{E}_m > 0$ by changing the sign of p and the sign of A_{sol} .

The interval $] - p^\infty, + p^\infty[$ is split into 3 subintervals and the proposed interpolation takes different forms in each of these intervals:

$$\bar{A}(\dot{\mathbf{E}}, p) = \begin{cases} A_-(\dot{\mathbf{E}}, p) & \text{when } -p^\infty < p \leq p^0, \\ A_0(\dot{\mathbf{E}}, p) & \text{when } p^0 \leq p \leq p^1, \\ A_+(\dot{\mathbf{E}}, p) & \text{when } p^1 \leq p < p^\infty. \end{cases} \quad (27)$$

The branches are chosen in such a way that the singularity of $A_{\text{sol}}(p, \dot{\mathbf{E}})$ at $p = \pm p^\infty$ is reproduced and the exact values of $A_{\text{sol}}(p, \dot{\mathbf{E}})$ and $\frac{\partial A_{\text{sol}}}{\partial p}(p, \dot{\mathbf{E}})$ are met at $p = p^0$ and $p = p^1$ (the dependence on $\dot{\mathbf{E}}$ is omitted for simplicity):

$$A_-(p^0) = A_0(p^0) = 0, \quad \frac{\partial A_-}{\partial p}(p^0) = \frac{\partial A_0}{\partial p}(p^0) = \frac{\partial A_{\text{sol}}}{\partial p}(p^0),$$

$$A_0(p^1) = A_+(p^1) = \dot{E}_m, \quad \frac{\partial A_0}{\partial p}(p^1) = \frac{\partial A_+}{\partial p}(p^1) = \frac{\partial A_{\text{sol}}}{\partial p}(p^1).$$

In the first interval $] -p^\infty, p^0[$ the proposed approximation reads as:

$$A_-(p) = -C_- \left(\frac{\sqrt{p^\infty + p^0}}{\sqrt{p^\infty + p}} - 1 \right) + D_-(p - p^0) \tag{28}$$

with

$$\left. \begin{aligned} C_- &= \frac{1}{\sqrt{p^\infty + p^0}} \sqrt{\frac{\sigma_0}{12q_3(1-f_e)}} \sqrt{4\dot{E}_m^2 I_1 + E_{eq}^2 I_2}, \\ D_- &= \frac{\partial A_{\text{sol}}}{\partial p}(p^0) - \frac{C_-}{2(p^\infty + p^0)}. \end{aligned} \right\} \tag{29}$$

Similarly, the interpolation proposed for the interval $]p^1, +p^\infty[$ reads as:

$$A_+(p) = C_+ \left(\frac{\sqrt{p^\infty - p^1}}{\sqrt{p^\infty - p}} - 1 \right) + D_+(p - p^1) + \dot{E}_m \tag{30}$$

with

$$\left. \begin{aligned} C_+ &= \frac{1}{\sqrt{p^\infty - p^1}} \sqrt{\frac{\sigma_0}{12q_3(1-f_e)}} \sqrt{4\dot{E}_m^2 I_1 + E_{eq}^2 I_2}, \\ D_+ &= \frac{\partial A_{\text{sol}}}{\partial p}(p^1) - \frac{C_+}{2(p^\infty - p^1)}. \end{aligned} \right\} \tag{31}$$

As for the middle interval $]p^0, p^1[$, the function $A_{\text{sol}}(p)$ is approximated by a polynomial of degree 3 in p matching the exact values of $A_{\text{sol}}(p)$ and its first derivative at $p = p^0$ and $p = p^1$:

$$A_0(p) = (p - p^0) \left(\frac{E}{2} (p - p^1)^2 + F(p - p^1) + \frac{\dot{E}_m}{p^1 - p^0} \right) \tag{32}$$

with

$$\left. \begin{aligned} E &= \frac{2}{(p^1 - p^0)^2} \left(\frac{\partial A_{\text{sol}}}{\partial p}(p^0) + \frac{\partial A_{\text{sol}}}{\partial p}(p^1) - \frac{2\dot{E}_m}{p^1 - p^0} \right), \\ F &= \frac{1}{p^1 - p^0} \left(\frac{\partial A_{\text{sol}}}{\partial p}(p^1) - \frac{\dot{E}_m}{p^1 - p^0} \right) \end{aligned} \right\} \tag{33}$$

3.4. Comparison between the exact minimizer A_{sol} and the approximation \bar{A} (27)

The approximate form (27) is compared in this section with the exact minimizer A_{sol} of (16). This is done for three different values of the triaxiality ratio of the overall strain-rate: $\dot{E}_m/\dot{E}_{eq} = 0$, $\dot{E}_m/\dot{E}_{eq} = +\infty$ and $\dot{E}_m/\dot{E}_{eq} = 1$.

3.4.1. Purely deviatoric macroscopic strain-rate: $\dot{E}_m = 0$

When the overall strain-rate is purely deviatoric, the two intermediate pressures p^0 and p^1 are both equal to 0 and the intermediate regime (between p^0 and p^1) no more exists. The approximation (27) takes a simplified form thanks to the expressions given in Appendix A.1. The exact minimizer of (16) (crosses) and the approximation (27) (solid line) are compared in Fig. 4 for four different values of the volume fraction of both populations of voids. As can be seen, the agreement is excellent over the whole range of admissible pressures p , and for the four values of the porosities.

3.4.2. Purely hydrostatic macroscopic strain-rate: $\dot{E}_{eq} = 0$

When the overall strain-rate is purely hydrostatic, the two intermediate pressures p^0 and p^1 can be computed explicitly (see Appendix A.2). Other simplifications occur in the different terms of the approximation (27) which takes a simplified form thanks to the expressions given in Appendix A.2. Again, the agreement between the exact minimizer of (16) (crosses) and the approximation (27) (solid line) is excellent over the whole range of admissible pressures p , and for the four values of the porosities (Fig. 5).

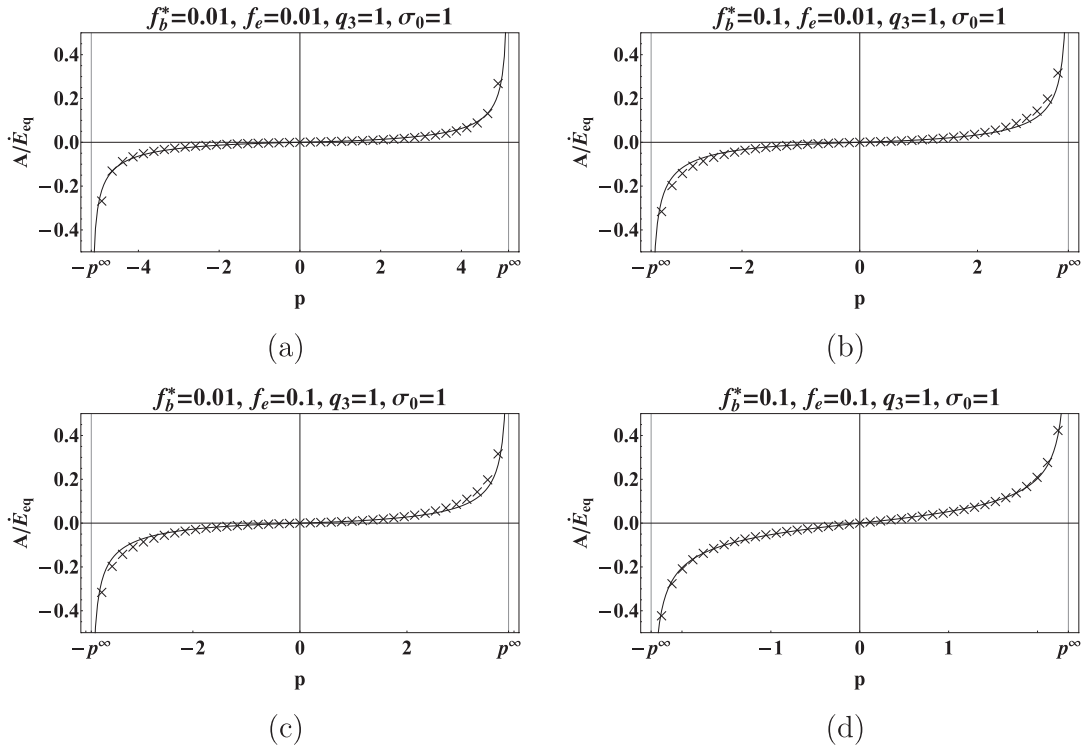


Fig. 4. Spherical intergranular voids. Purely deviatoric overall strain-rate $\dot{\epsilon}_m = 0$. Comparison between the exact dilatation-rate A_{sol} (crosses) and the approximation \bar{A} (27) (solid line).

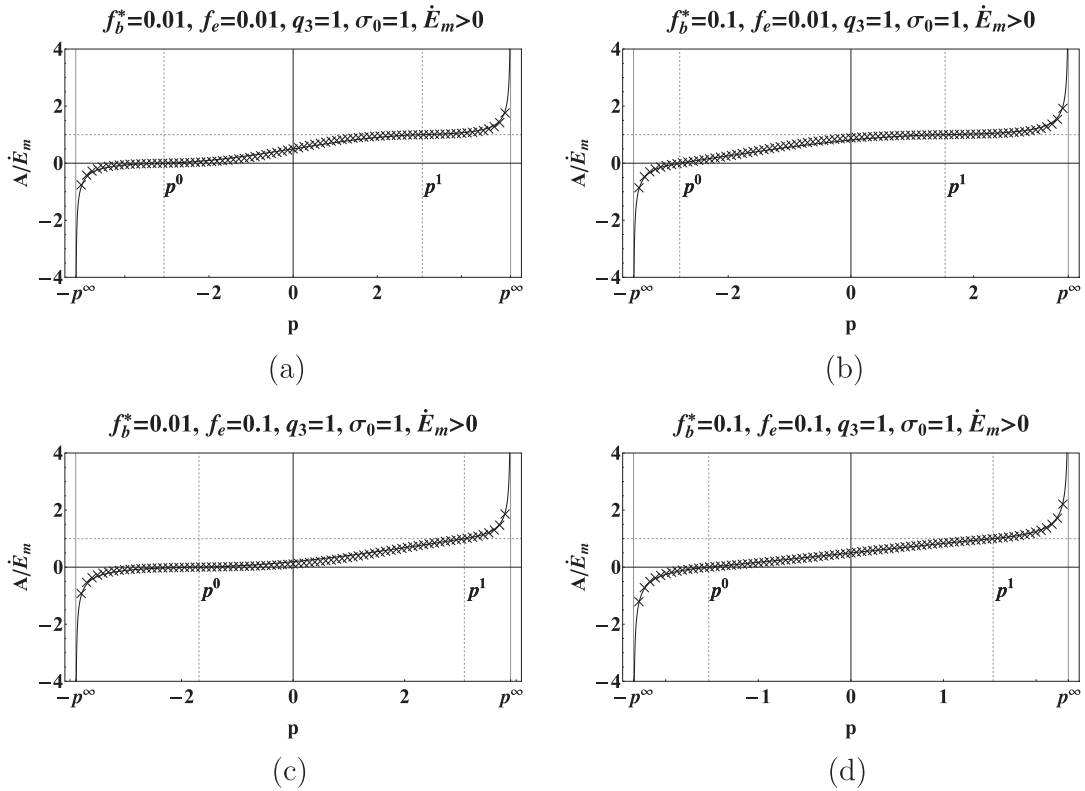


Fig. 5. Spherical intergranular voids. Purely hydrostatic overall strain-rate $\dot{\epsilon}_{eq} = 0$. Comparison between the exact dilatation-rate A_{sol} (crosses) and the approximation \bar{A} (27) (solid line).

3.4.3. Intermediate strain-rate: $\dot{E}_m/\dot{E}_{eq} = 1$

For all intermediate values of the triaxiality ratio of the overall strain-rate, the integrals have to be computed numerically. A specific triaxiality ratio $\dot{E}_m/\dot{E}_{eq} = 1$ has been considered for the comparison performed in Fig. 6. Again the agreement between the exact minimizer and its approximation is seen to be excellent.

All these comparisons show that A_{sol} , the average dilatation-rate in the matrix, solution of the variational problem (16) can be accurately approximated by the expression (27). Consequently, the resolution of the minimization problem (16) can be avoided.

4. A GTN criterion for pressurized voided materials with spherical intergranular voids

It remains to find an accurate approximation for the effective flow surface defined by the parametric equation (18). A first approach is to use the approximation \bar{A} in (16) to get an upper bound, denoted by $\bar{\Phi}$, for the overall dissipation potential:

$$\bar{\Phi}(\dot{\mathbf{E}}, p_b, p_e) = \phi(\bar{A}(p, \dot{\mathbf{E}}), \dot{\mathbf{E}}, p) - 3p_e \dot{E}_m. \tag{34}$$

Then the approximate flow surface is defined by the parametric equations:

$$\Sigma_m = \frac{1}{3} \frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial \dot{E}_m}(\dot{\mathbf{E}}, p_b, p_e), \quad \Sigma_{eq} = \frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial \dot{E}_{eq}}(\dot{\mathbf{E}}, p_b, p_e). \tag{35}$$

It should be noted that the parametric equations (35) do not reduce to (18) upon substitution of A_{sol} with \bar{A} . In addition to the double integrals in (18), other terms involving the derivatives of \bar{A} with respect to \dot{E}_m and \dot{E}_{eq} have to be taken into account. The resulting flow surface is a rigorous outer bound to the flow surface defined by the potential Φ^+ . A comparison between the two flow surfaces is shown in Fig. 7 where they are respectively plotted with crosses and squares. The agreement between crosses and squares is seen to be excellent which proves that the expression (27) is an accurate approximation of the actual solution A_{sol} .

The cost for determining the flow surface (35) is certainly less than that for (18), as there is no minimization problem to be solved for A_{sol} . However the double integrals are still time-consuming (keeping in mind that this operation has to be repeated at every Gauss point of a piece of material, at every time step along its loading history) and a simpler analytical expression for this flow surface is searched for.

To this end, a useful observation can be made from Fig. 7: the shape of the two flow surfaces (18) and (35) is reminiscent of a GTN flow surface whose equation is (1). As schematically depicted in Fig. 2, such a GTN surface is completely determined

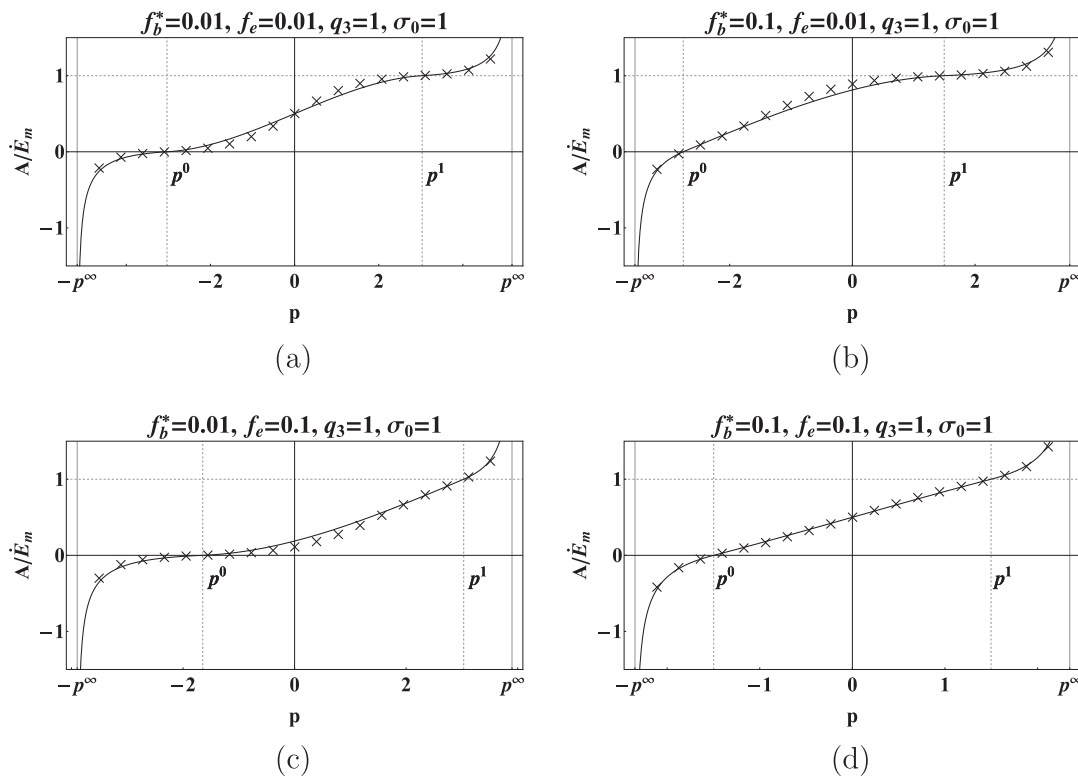


Fig. 6. Spherical intergranular voids. Triaxial overall strain-rate: $\dot{E}_m/\dot{E}_{eq} = 1$. Comparison between the exact dilatation-rate A_{sol} (crosses) and the approximation \bar{A} (27) (solid line).

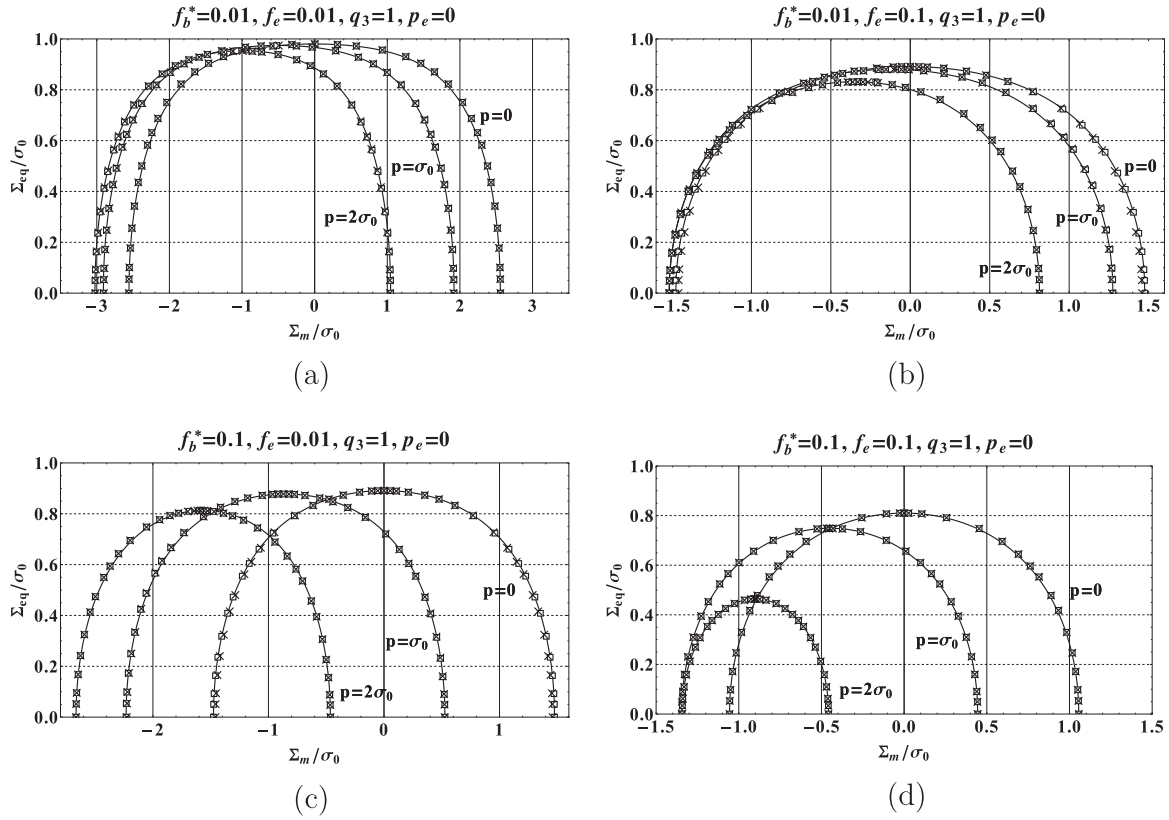


Fig. 7. Spherical intergranular voids. Comparison between the flow surface (18) (crosses), the flow surface (35) (squares) and the GTN approximation (1) (solid line). p denotes the difference $p_b - p_e$.

by the data of three particular stress points: the two points $(\bar{\Sigma}_m^-, 0)$ and $(\bar{\Sigma}_m^+, 0)$ on the hydrostatic axis and the point $(\frac{1}{2}(\bar{\Sigma}_m^- + \bar{\Sigma}_m^+), \bar{\Sigma}_{eq})$ corresponding to the maximum deviatoric stress on the surface. Obviously, looking for an approximation in the form (1) for the flow surface, leads to enforcing certain symmetries which are not necessarily present in the actual surface. This is discussed in Appendix D.

The two hydrostatic points $(\bar{\Sigma}_m^\pm, 0)$ correspond to the two purely hydrostatic strain rates $\dot{\mathbf{E}} = \pm \mathbf{i}$ where \mathbf{i} is the identity among second-order tensors. Indeed \bar{A} and consequently Φ depend on the two first invariants of $\dot{\mathbf{E}}$. Therefore, the constitutive relations obtained by derivation of the potential are isotropic and the principal axes of the overall stress and of the overall strain-rate coincide. Every direction is a principal direction for $\dot{\mathbf{E}}$ and consequently for Σ which proves that Σ is hydrostatic as well. The points $(\bar{\Sigma}_m^\pm, 0)$ could be computed using the relations (35) with $\dot{\mathbf{E}} = \pm \mathbf{i}$. But it is simpler to use a specific property of positively homogeneous functions of degree 1. Both Φ^+ and $\bar{\Phi}$ are such that

$$\bar{\Phi}(\lambda \dot{\mathbf{E}}) = \lambda \bar{\Phi}(\dot{\mathbf{E}}) \quad \text{for all positive } \lambda.$$

By derivation with respect to λ (and setting $\lambda = 1$), one gets (Euler's equation):

$$\frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial \dot{\mathbf{E}}}(\dot{\mathbf{E}}) : \dot{\mathbf{E}} = \bar{\Phi}(\dot{\mathbf{E}}). \quad (36)$$

It follows from this relation applied with $\dot{\mathbf{E}} = \pm \mathbf{i}$ that

$$3\bar{\Sigma}_m^\pm = \pm \phi(\bar{A}^\pm, \pm \mathbf{i}, p) - 3p_e, \quad (37)$$

where ϕ is defined in (17) and $\bar{A}^\pm = \bar{A}(\pm \mathbf{i}, p)$ where the function \bar{A} is defined in (27). Similarly, choosing a purely deviatoric strain-rate $\dot{\mathbf{E}}^d$ with $\dot{E}_{eq}^d = 1$ in (36) yields

$$\bar{\Sigma}_{eq} = \phi(\bar{A}_{eq}, \dot{\mathbf{E}}^d, p), \quad (38)$$

where $\bar{A}_{eq} = \bar{A}(\dot{\mathbf{E}}^d, p)$ with the function \bar{A} defined in (27). The quantities \bar{A}^\pm and \bar{A}_{eq} take simplified forms thanks to the expressions given in Appendices A.1 and A.2. Then the flow surface corresponding to Φ is bounded all the hydrostatic and the deviatoric axes by:

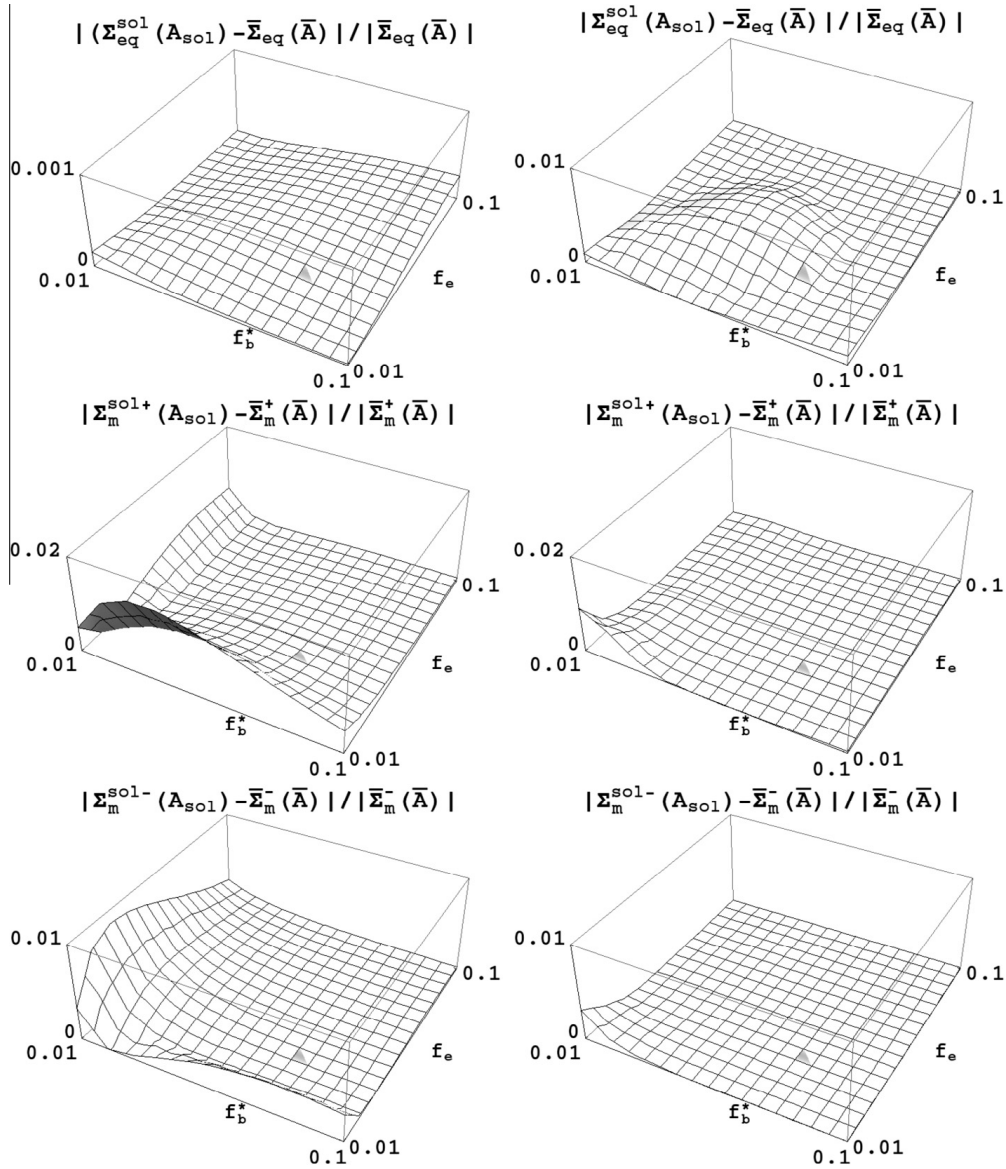


Fig. 8. Spherical intergranular voids. $p_e = 0$ and $q_3 = 1$. Left: $p_b = \sigma_0$, right: $p_b = 2\sigma_0$. Comparison between $\Sigma_m^{\text{sol}\pm}$, Σ_{eq}^{sol} obtained with A_{sol} and $\bar{\Sigma}_m^\pm$, $\bar{\Sigma}_{eq}$ obtained with \bar{A} .

$$\left. \begin{aligned} \bar{\Sigma}_m^\pm &= \pm \frac{\sigma_0}{3} \int_{f_e}^1 \int_{f_b^*}^1 \sqrt{4 \frac{(\bar{A}^\pm)^2}{y^2} + 4 \frac{(\pm 1 - \bar{A}^\pm)^2}{q_3 z^2}} dy dz - (1 - f_e) p \bar{A}^\pm - p_e, \\ \bar{\Sigma}_{eq} &= \sigma_0 \int_{f_e}^1 \int_{f_b^*}^1 \sqrt{4 \frac{\bar{A}_{eq}^2}{y^2} + 4 \frac{\bar{A}_{eq}^2}{q_3 z^2} + \frac{1}{q_3}} dy dz - 3(1 - f_e) p \bar{A}_{eq}. \end{aligned} \right\} \quad (39)$$

The integrals entering (39) can be expressed in closed form (see Appendix C).

4.1. Comparison between the GTN approximation and the flow surfaces associated with the upper bounds Φ^+ and $\bar{\Phi}$

The three flow surfaces corresponding to the potential Φ^+ (16) of Vincent et al. (2009a), the present potential $\bar{\Phi}$ and the approximation (1) are compared in Fig. 7. As can be seen, the agreement is very satisfactory at all stress triaxiality. A more accurate comparison, focusing on the three specific overall stresses corresponding respectively to the three overall strain-rate states $\dot{\mathbf{E}} = \pm \dot{\mathbf{i}}$ and $\dot{\mathbf{E}} = \dot{\mathbf{E}}^d$, has been performed over a broad range of porosities. These stress states provide rigorous bounds for the effective flow surface on the hydrostatic axis and on the deviatoric axis respectively. These three stress states are successively evaluated with the actual solution A_{sol} of the minimization problem (16) (the corresponding stresses are denoted by $\Sigma_m^{\text{sol}\pm}$, Σ_{eq}^{sol}) and with the approximation \bar{A} (the corresponding stresses are denoted by $\bar{\Sigma}_m^\pm$, $\bar{\Sigma}_{eq}$). As can be seen

in Fig. 8, the discrepancy between the two sets of results is less than 1.5% over the whole range of porosities f_b^* and f_e of interest in the present context of nuclear fuel.

5. Ellipsoidal intergranular voids

5.1. Upper bound and approximation of Vincent et al. (2009a)

The present section is devoted to ellipsoidal voids, and more specifically to spheroidal voids characterized by two equal axes. In view of Fig. 1(a), attention is restricted to *oblate* spheroids where the third axis is smaller than the two equal axes (see Appendix E for more details). The voids are randomly distributed and randomly oriented in the volume element V and the matrix surrounding them is a Gurson material. The additional porosity due to these intergranular voids is denoted by f_e (see (3)). All voids are assumed to have the same aspect ratio w ($w < 1$ for oblate spheroids).

Using the trial field (14), Vincent et al. (2009a) have derived an upper bound for the plastic potential of a single hollow ellipsoid in a Gurson matrix. Then, averaging over all possible orientations of the hollow ellipsoids (as schematically depicted in Fig. 3), the effective dissipation potential of an assemblage of hollow ellipsoids has been bounded from above by:

$$\Phi^+(\dot{\mathbf{E}}, p_b, p_e) = \inf_A \left[\sigma_0 \int_{f_b^*}^1 \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} H(\lambda, A, y, \dot{E}_m, \dot{E}_{eq}) d\lambda dy - 3(1 - f_e)pA \right] - 3p_e \dot{E}_m, \quad (40)$$

where

$$H(\lambda, A, y, \dot{E}_m, \dot{E}_{eq}) = \sqrt{J^2(\lambda) \frac{4A^2}{y^2} + \frac{J(\lambda)}{q_3} \left(3Q_J(\lambda) (\dot{E}_m - A)^2 + J(\lambda) \dot{E}_{eq}^2 \right)}, \quad (41)$$

λ is related to the systems of ellipsoidal coordinates (see Appendix E). This expression is hardly amenable to analytical calculations. However, following the notations and the analysis of Gologanu et al. (1994), Vincent et al. (2008) have noticed that, the potential $\Phi^+(\dot{\mathbf{E}}, p_b, p_e)$ can be approximated with a very good accuracy by a simpler expression

$$\Phi^+(\dot{\mathbf{E}}, p_b, p_e) \approx \tilde{\Phi}(\dot{\mathbf{E}}, p_b, p_e) = \inf_A \left[\tilde{\phi}(\dot{\mathbf{E}}, p_b, p_e, A) \right] - 3p_e \dot{E}_m, \quad (42)$$

where:

$$\tilde{\phi}(\dot{\mathbf{E}}, p_b, p_e, A) = \sigma_0(g+1) \int_{\tilde{f}}^1 \int_{\tilde{f}}^1 \sqrt{\frac{4A^2}{y^2} + \frac{(\dot{E}_m - A)^2}{z^2} \frac{\tilde{a}^2}{q_3} + (\dot{E}_m - A)^2 \frac{\tilde{b}^2}{q_3} + \frac{(\dot{E}_{eq})^2}{q_3}} dz dy - 3(1 - f_e)pA. \quad (43)$$

The scalar coefficients g , \tilde{a} , \tilde{b} , given by relations (E.8) and (E.11) in Appendix E, depend on the geometry of the ellipsoidal voids only. \tilde{f} is a function of the geometry of the voids and of the actual porosity f_e (see (E.8)). The form (43) is very close to the form (17) of the potential for spherical voids where the actual porosity f_e of the ellipsoidal voids is replaced by an artificial porosity \tilde{f} , except for the presence of the additional term $(\dot{E}_m - A)^2 \frac{\tilde{b}^2}{q_3}$. The very same procedure of approximation as for spherical voids can be followed. First an explicit (and accurate) approximation \bar{A} of the average dilatational rate A_{sol} is proposed, based on specific properties of A_{sol} . Second, this approximation is used to identify the coefficients of a GTN criterion.

5.2. General properties of A_{sol}

Let $A_{sol}(p, \dot{\mathbf{E}})$ denote the solution of the variational problem (42). Then the five properties of A_{sol} that were found for spherical voids have counterparts for ellipsoidal voids, with only slight modifications. Properties 1 and 2 are unchanged: A_{sol} is an odd function of $(p, \dot{\mathbf{E}})$ and a nondecreasing function of p

$$A_{sol}(-p, -\dot{\mathbf{E}}) = -A_{sol}(p, \dot{\mathbf{E}}), \quad \frac{\partial A_{sol}}{\partial p}(p, \dot{\mathbf{E}}) \geq 0.$$

Properties 3–5 have to be slightly amended (see Appendix B for a proof):

Property 3'.

$$\left. \begin{aligned} A_{sol}(p, \dot{\mathbf{E}}) &\sim \pm \sqrt{\frac{\sigma_0(g+1)}{12q_3(1-f_e)}} \sqrt{4\dot{E}_m^2 \tilde{I}_1 + \dot{E}_{eq}^2 \tilde{I}_2} \frac{1}{\sqrt{\tilde{p}^\infty \mp p}} \quad \text{when } p \rightarrow \pm \tilde{p}^\infty, \\ \tilde{p}^\infty &= \frac{2}{3} \frac{\sigma_0(g+1)}{1-f_e} \tilde{I}_0, \end{aligned} \right\} \quad (44)$$

where \tilde{I}_0 , \tilde{I}_1 and \tilde{I}_2 are scalar functions of f_b^* , f_e , w given by (B.4) and (B.7). Explicit expressions of \tilde{I}_0 , \tilde{I}_1 , and \tilde{I}_2 are given in Appendix C.

Property 4. $A_{sol}(p, \dot{\mathbf{E}}) = 0$ when $p = \tilde{p}^0(\dot{\mathbf{E}})$ with

$$\left. \begin{aligned} \tilde{p}^0(\dot{\mathbf{E}}) &= \frac{-4\sigma_0(g+1)(1-f_b^*)}{3\sqrt{q_3}(1-f_e)} \dot{E}_m \int_{f_b^*}^1 \frac{\tilde{c}^2(z)}{z^2} \left(4 \frac{\dot{E}_m^2 \tilde{c}^2(z)}{z^2} + \dot{E}_{eq}^2 \right)^{-1/2} dz, \\ \frac{\partial A_{sol}}{\partial p}(\tilde{p}^0, \dot{\mathbf{E}}) &= \frac{3(1-f_e)}{4\sigma_0(g+1)\sqrt{q_3}(1-f_b^*)} \frac{1}{\left[\frac{1}{f_b^*} \left(4\dot{E}_m^2 \tilde{J}_1 + \dot{E}_{eq}^2 \tilde{J}_2 \right) + \frac{\dot{E}_{eq}^2}{q_3} \tilde{J}_1 \right]}, \end{aligned} \right\} \quad (45)$$

where \tilde{J}_1 and \tilde{J}_2 are functions of f_b^*, f_e, w and $\dot{\mathbf{E}}$ defined in (B.9).

Property 5. $A_{sol}(p, \dot{\mathbf{E}}) = \dot{E}_m$ when $p = \tilde{p}^1(\dot{\mathbf{E}})$ with

$$\left. \begin{aligned} \tilde{p}^1(\dot{\mathbf{E}}) &= \frac{4\sigma_0(g+1)}{3} \frac{1-\tilde{f}}{1-f_e} \dot{E}_m \int_{f_b^*}^1 \frac{1}{y^2} \left(4 \frac{\dot{E}_m^2}{y^2} + \frac{\dot{E}_{eq}^2}{q_3} \right)^{-1/2} dy, \\ \frac{\partial A_{sol}}{\partial p}(\tilde{p}^1, \dot{\mathbf{E}}) &= \frac{3q_3}{4\sigma_0(g+1)} \frac{1-f_e}{1-\tilde{f}} \frac{1}{\left[\frac{1}{4} \left(\frac{\tilde{a}^2}{\tilde{f}} + \tilde{b}^2 \right) J_3 + \dot{E}_{eq}^2 J_4 \right]}. \end{aligned} \right\} \quad (46)$$

where J_3 and J_4 given by (A.17) are the same as for spherical voids.

5.3. Explicit approximation for A_{sol}

An interpolation, matching the above exact asymptotic results, can be proposed in the same vein as in Section 3.3. Restricting attention to $\dot{E}_m > 0$ (the expression of A_{sol} for $\dot{E}_m < 0$ being deduced from that for $\dot{E}_m > 0$ by changing the sign of p and the sign of A_{sol}) the interpolation consists of three branches and has the same form as in (27):

$$\tilde{A}(\dot{\mathbf{E}}, p) = \begin{cases} -\tilde{C}_- \left(\frac{\sqrt{\tilde{p}^\infty + \tilde{p}^0}}{\sqrt{\tilde{p}^\infty + p}} - 1 \right) + \tilde{D}_-(p - \tilde{p}^0) & \text{when } -\tilde{p}^\infty < p \leq \tilde{p}^0, \\ (p - \tilde{p}^0) \left(\frac{\tilde{E}}{2} (p - \tilde{p}^1)^2 + \tilde{F}(p - \tilde{p}^1) + \frac{\dot{E}_m}{\tilde{p}^1 - \tilde{p}^0} \right) & \text{when } \tilde{p}^0 \leq p \leq \tilde{p}^1, \\ \tilde{C}_+ \left(\frac{\sqrt{\tilde{p}^\infty - \tilde{p}^1}}{\sqrt{\tilde{p}^\infty - p}} - 1 \right) + \tilde{D}_+(p - \tilde{p}^1) + \dot{E}_m & \text{when } \tilde{p}^1 \leq p < \tilde{p}^\infty, \end{cases} \quad (47)$$

with

$$\left. \begin{aligned} \tilde{C}_- &= \frac{1}{\sqrt{\tilde{p}^\infty + \tilde{p}^0}} \sqrt{\frac{\sigma_0(g+1)}{12q_3(1-f_e)}} \sqrt{4\dot{E}_m^2 \tilde{I}_1 + \dot{E}_{eq}^2 \tilde{I}_2}, \\ \tilde{C}_+ &= \frac{1}{\sqrt{\tilde{p}^\infty - \tilde{p}^1}} \sqrt{\frac{\sigma_0(g+1)}{12q_3(1-f_e)}} \sqrt{4\dot{E}_m^2 \tilde{I}_1 + \dot{E}_{eq}^2 \tilde{I}_2}, \end{aligned} \right\} \quad (48)$$

The corresponding coefficients $\tilde{D}_-, \tilde{D}_+, \tilde{E}$ and \tilde{F} are given by (29), (31) and (33) where $p^0, p^1, p^\infty, C_-, C_+$ should be replaced by $\tilde{p}^0, \tilde{p}^1, \tilde{p}^\infty, \tilde{C}_-, \tilde{C}_+$ and where the derivatives $\partial A_{sol}/\partial p$ at \tilde{p}^0 and \tilde{p}^1 are obtained by means of (45) and (46).

5.4. Accuracy of the approximation of Φ^+ by $\tilde{\Phi}$

In the case of drained voids (no internal pressure) the accuracy of the approximation of Φ^+ by $\tilde{\Phi}$ has been discussed in Vincent et al. (2008) to which the reader is referred for more details. When the voids are pressurized, we illustrate here the accuracy of this approximation by comparing the limit pressure (beyond which no macroscopic stress can be sustained by the porous material) as predicted by Φ^+ and by $\tilde{\Phi}$.

It is readily seen that the limit pressure for Φ^+ is given by:

$$p_+^\infty = \frac{1}{3(1-f_e)} \sigma_0 \int_{f_b^*}^1 \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} \sqrt{J^2(\lambda) \frac{4}{y^2} + \frac{J(\lambda)}{q_3}} 3Q_J(\lambda) d\lambda dy, \quad (49)$$

whereas the limit pressure for $\tilde{\Phi}$ is found to be:

$$\tilde{p}^\infty = \frac{1}{3(1-f_e)} \sigma_0(g+1) \int_{f_b^*}^1 \int_{f_f}^1 \sqrt{\frac{4}{y^2} + \frac{1}{z^2} \frac{\tilde{a}^2}{q_3} + \frac{\tilde{b}^2}{q_3}} dz dy. \quad (50)$$

p_+^∞ and \tilde{p}^∞ are compared in Fig. 9. As can be seen the agreement is very good over a large range of (f_b^*, f_e) and even for small w and the error is less than 1.5%.

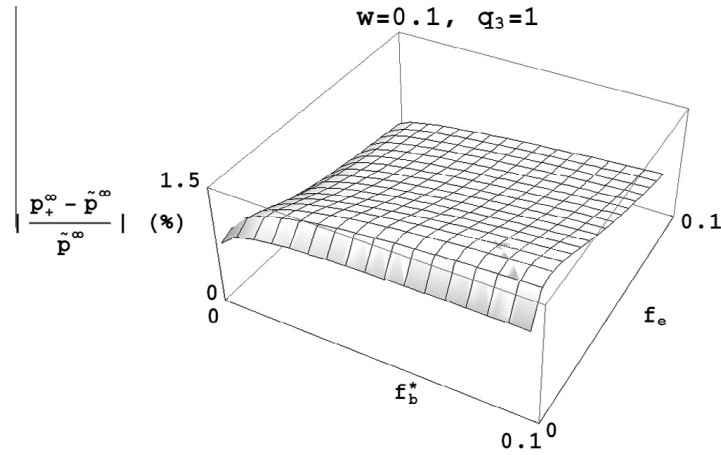


Fig. 9. Accuracy of the approximation of the limit pressure between p_+^* (49) by \tilde{p}^∞ (9).

5.5. Comparison between the exact minimizer A_{sol} and the approximation \tilde{A} (47)

The exact minimizer A_{sol} and the approximation \tilde{A} (47) are compared over the whole range of admissible pressures for three specific values of the triaxiality ratio of the overall strain-rate: $\dot{E}_m/\dot{E}_{eq} = 0$, $\dot{E}_m/\dot{E}_{eq} = +\infty$ and $\dot{E}_m/\dot{E}_{eq} = 1$.

5.5.1. Purely deviatoric macroscopic strain-rate: $\dot{E}_m = 0$

When the overall strain-rate is purely deviatoric, the approximation (47) takes a simple form with the help of the detailed expressions in Appendix B.1. Four different values of the volume fraction of both populations of voids are considered in Fig. 10. As can be seen, the agreement between the exact minimizer of (40) (crosses) and the approximation (47) (solid line) is excellent over the whole range of admissible pressures p , and for the four values of the porosities.

5.5.2. Purely hydrostatic macroscopic strain-rate: $\dot{E}_{eq} = 0$

When the overall strain-rate is purely hydrostatic, the two intermediate pressures \tilde{p}^0 and \tilde{p}^1 can be computed explicitly (see Appendix B.2). Other simplifications occur in the different terms of the approximation (47) which takes a simplified

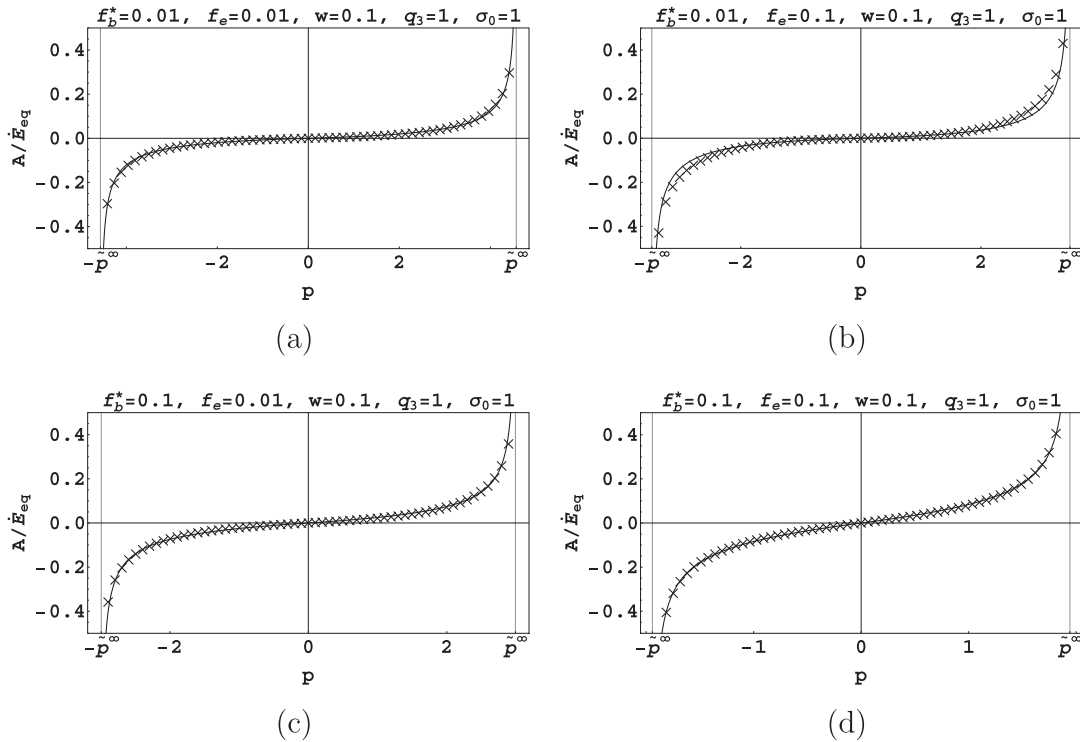


Fig. 10. Ellipsoidal intergranular voids. Purely deviatoric overall strain-rate $\dot{E}_m = 0$. Comparison between the exact minimizer A_{sol} for Φ^+ (crosses) and the approximation \tilde{A} (47) (solid line).

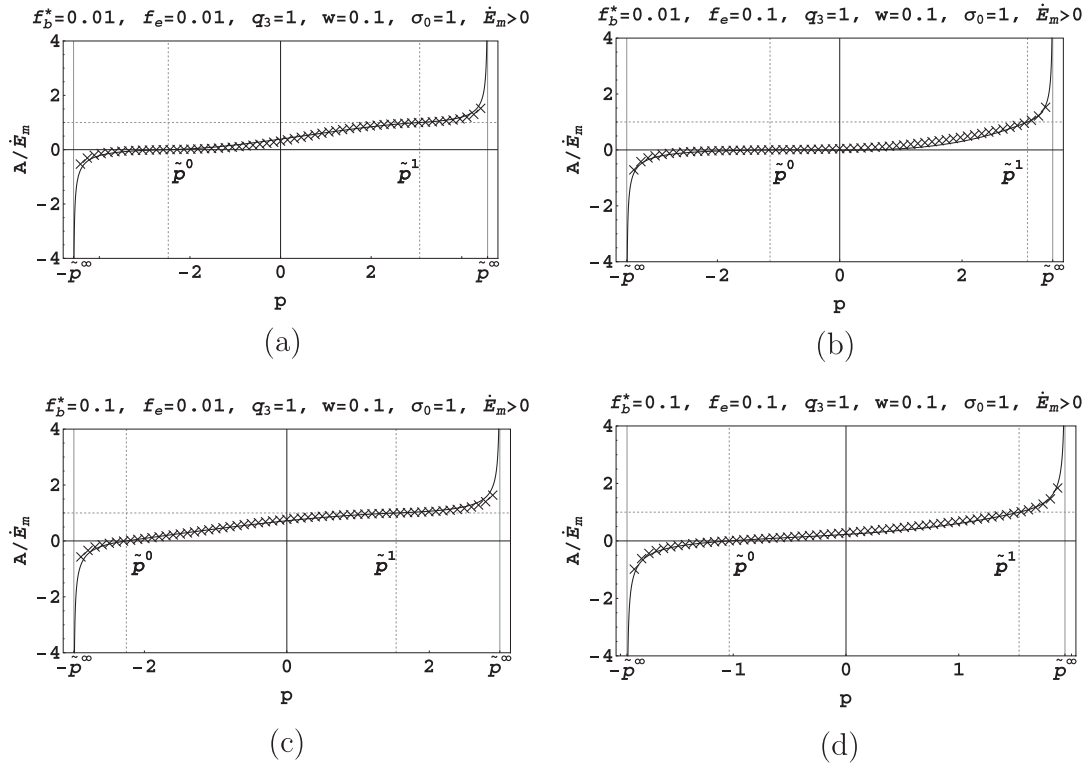


Fig. 11. Ellipsoidal intergranular voids. Purely hydrostatic overall strain-rate $\dot{\epsilon}_{eq} = 0, \dot{\epsilon}_m > 0$. Comparison between the exact minimizer A_{sol} for Φ^+ (crosses) and the approximation \tilde{A} (47) (solid line).

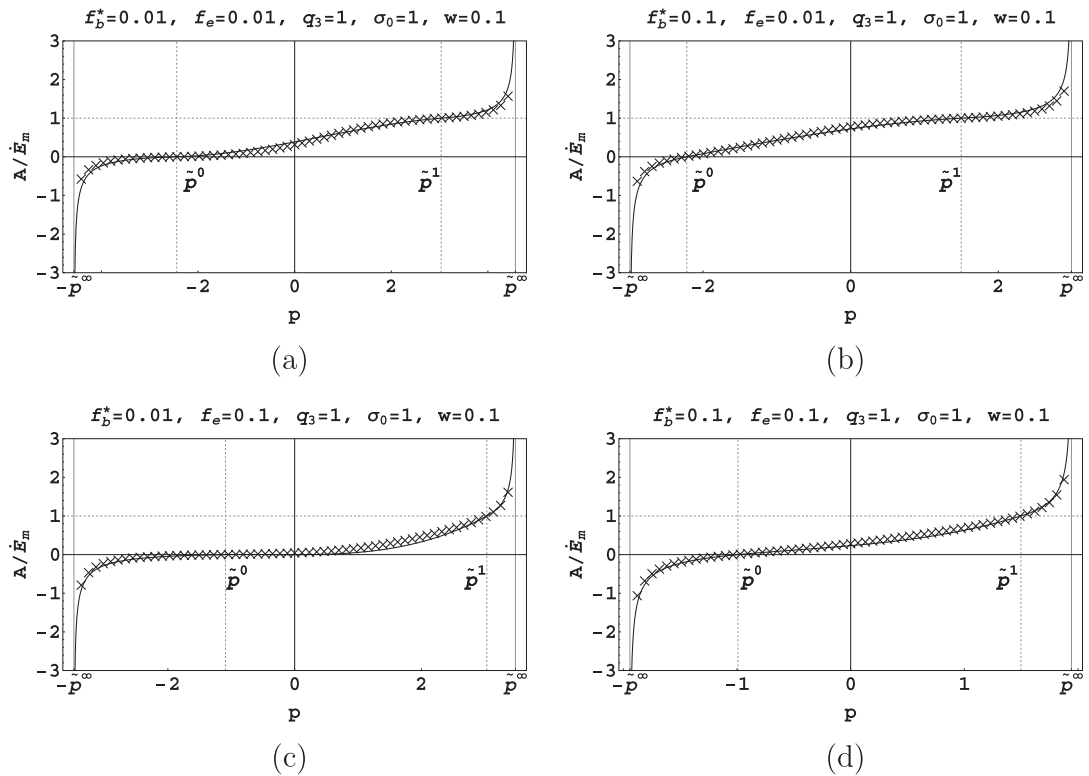


Fig. 12. Ellipsoidal intergranular voids. Triaxial overall strain-rate $\dot{\epsilon}_m/\dot{\epsilon}_{eq} = 1$. Comparison between the exact minimizer A_{sol} for Φ^+ (crosses) and the approximation \tilde{A} (47) (solid line).

form thanks to the expressions given in Appendix B.2. Again, the agreement between the exact minimizer of (40) (crosses) and the approximation (47) (solid line) is excellent over the whole range of admissible pressures p , and for the four values of the porosities (Fig. 11).

5.5.3. Intermediate strain-rate: $\dot{E}_m/\dot{E}_{eq} = 1$

For all intermediate values of the triaxiality ratio of the overall strain-rate, the integrals have to be computed numerically. A specific triaxiality ratio $\dot{E}_m/\dot{E}_{eq} = 1$ has been considered for the comparison performed in Fig. 12. Again the agreement between the exact minimizer and its approximation is seen to be excellent.

5.6. A GTN criterion for pressurized voided materials with ellipsoidal intergranular voids

It remains to find, as in the spherical case, an accurate approximation for the effective flow surface. First of all, the exact minimizer of (40) leads to an upper bound defined by the parametric equations:

$$\Sigma_m = \frac{1}{3} \frac{\partial \Phi^+}{\partial \dot{E}_m}(\dot{\mathbf{E}}, p_b, p_e), \quad \Sigma_{eq} = \frac{\partial \Phi^+}{\partial \dot{E}_{eq}}(\dot{\mathbf{E}}, p_b, p_e), \tag{51}$$

$$\left. \begin{aligned} \Sigma_m &= -p_e + \frac{\sigma_0}{q_3} \int_{f_b^*}^1 \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} \frac{J(\lambda) Q_J(\lambda)}{H(\lambda, A_{sol}, y, \dot{E}_m, \dot{E}_{eq})} d\lambda dy (\dot{E}_m - A_{sol}), \\ \Sigma_{eq} &= \frac{\sigma_0}{q_3} \int_{f_b^*}^1 \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} \frac{J^2(\lambda)}{H(\lambda, A_{sol}, y, \dot{E}_m, \dot{E}_{eq})} d\lambda dy \dot{E}_{eq}. \end{aligned} \right\} \tag{52}$$

To simplify these relations a first approach consists in using the approximation \tilde{A} in (47) to get an upper bound, denoted by $\tilde{\Phi}$ for the overall dissipation potential Φ^+ :

$$\tilde{\Phi}(\dot{\mathbf{E}}, p_b, p_e) = \sigma_0 \int_{f_b^*}^1 \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} H(\lambda, \tilde{A}(\dot{E}_m, \dot{E}_{eq}), y, \dot{E}_m, \dot{E}_{eq}) d\lambda dy - 3(1 - f_e) p \tilde{A}(\dot{E}_m, \dot{E}_{eq}) - 3p_e \dot{E}_m. \tag{53}$$

The associated flow surface is then an upper bound defined by the parametric equation (35). It is recalled here that the terms proportional to the derivatives of \tilde{A} with respect to \dot{E}_m and \dot{E}_{eq} have to be properly taken into account in the expressions (35).

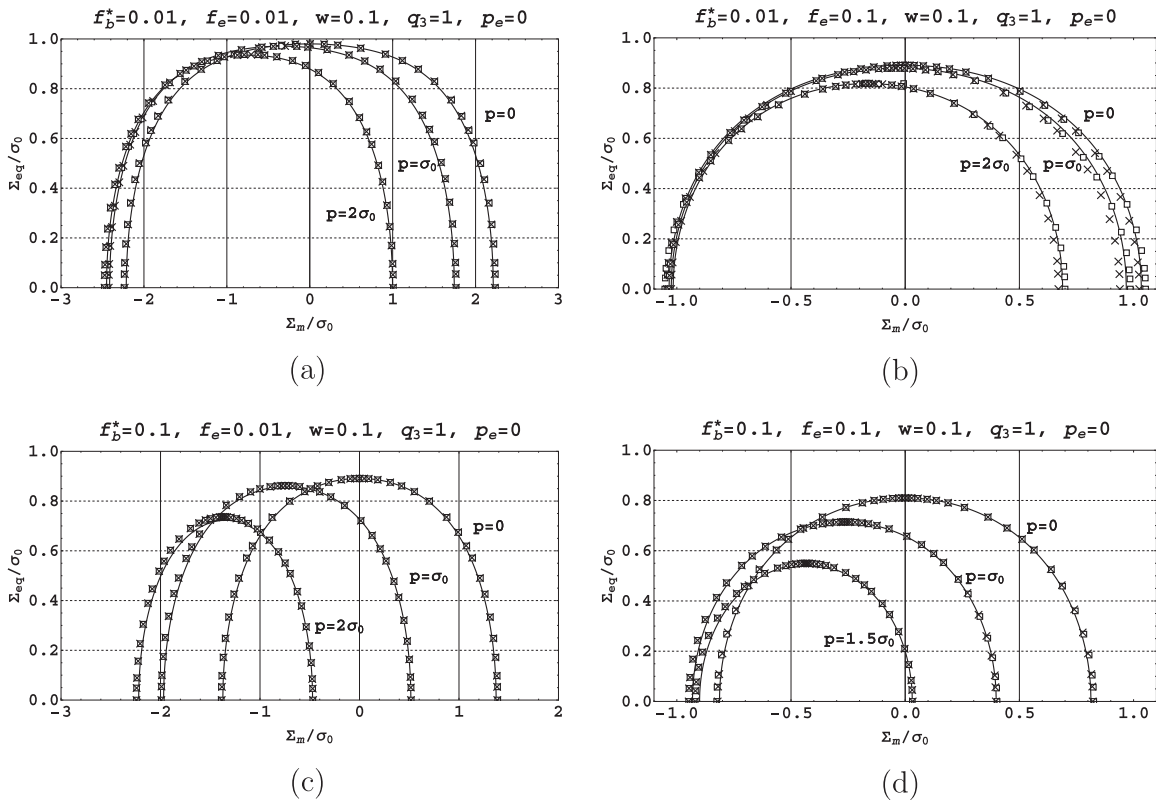


Fig. 13. Ellipsoidal intergranular voids. Comparison between the flow surface (52) associated with Φ^+ (40) (crosses), the flow surface (35) associated with $\tilde{\Phi}$ (53) (squares) and the GTN approximation (1) (solid line). p denotes the difference $p_b - p_e$.

The two flow surfaces, which remain two upper bounds, are compared in Fig. 13. The agreement between crosses (Φ^+) and squares (Φ) is seen to be excellent. This proves that the expression (47) is an accurate approximation for the exact minimizer of (40). However, even if the approximation of Φ^+ by Φ avoids the resolution of an optimization problem to determine A_{sol} , the evaluation of the double integrals in the analog of (51) (with Φ instead of Φ^+) is still time-consuming when repeated at each Gauss point of a structure. This motivates the search of an explicit equation for the effective flow surface.

Following Section 4, a GTN flow surface in the form (1) is proposed, based on \tilde{A} (47) and $\tilde{\phi}$ (43). The three specific stresses $\tilde{\Sigma}_m^-$, $\tilde{\Sigma}_m^+$, $\tilde{\Sigma}_{eq}$ which specify completely the form (1) and correspond respectively to the minimum and maximum hydrostatic stresses and to the maximum deviatoric stress on the flow surface are then given by:

$$\tilde{\Sigma}_m^\pm = \pm \frac{1}{3} \tilde{\phi}(\tilde{A}^\pm, \pm \mathbf{i}, p) - p_e, \quad \tilde{A}^\pm = \tilde{A}(\pm \mathbf{i}, p), \quad \tilde{\Sigma}_{eq} = \tilde{\phi}(\tilde{A}_{eq}, \dot{\mathbf{E}}^d, p), \quad \tilde{A}_{eq} = \tilde{A}(\dot{\mathbf{E}}^d, p), \quad (54)$$

where \tilde{A}^\pm and \tilde{A}_{eq} can be expressed in closed form by means of Appendices B.1 and B.2. The relations (54), together with the definition (43) of $\tilde{\phi}$ lead to:

$$\left. \begin{aligned} \tilde{\Sigma}_m^\pm &= \pm \frac{1}{3} \sigma_0 (g+1) \int_{f_b}^1 \int_{f_f}^1 \sqrt{\frac{4(\tilde{A}^\pm)^2}{y^2} + \frac{(\pm 1 - \tilde{A}^\pm)^2}{z^2} \frac{\tilde{a}^2}{q_3} + (\pm 1 - \tilde{A}^\pm)^2 \frac{\tilde{b}^2}{q_3}} dz dy - (1 - f_e) p \tilde{A}^\pm - p_e, \\ \tilde{\Sigma}_{eq} &= \sigma_0 (g+1) \int_{f_b}^1 \int_{f_f}^1 \sqrt{\frac{4(\tilde{A}_{eq})^2}{y^2} + \frac{(\tilde{A}_{eq})^2}{z^2} \frac{\tilde{a}^2}{q_3} + (\tilde{A}_{eq})^2 \frac{\tilde{b}^2}{q_3} + \frac{1}{q_3}} dz dy - 3(1 - f_e) p \tilde{A}_{eq}. \end{aligned} \right\} \quad (55)$$

The integrals entering (55) can be expressed in closed form (see Appendix C). The three flow surfaces corresponding to the two upper bounds (35) and (52), and the approximation (1) are compared in Fig. 13. As can be seen the agreement is very satisfactory at all stress triaxiality.

6. Conclusion

This study is devoted to porous materials with two populations of randomly distributed voids with different sizes. The smallest voids are spherical whereas the largest voids are spheroidal. Both population of voids are subjected to an internal homogeneous pressure. In this study, attention has been focused on analytical approximations for the dilatation-rate in the matrix at the mesoscopic scale and for the effective flow surface at the macroscopic scale. An analytical estimate for the effective flow surface, obtained by extending the result of Vincent et al. (2008) to saturated voids has been proposed. This new criterion has the same form as the classical GTN criterion, which facilitates its integration in any standard FEM code in which the GTN criterion is already implemented. In the second part of this study (next paper) the accuracy of the new model is assessed by comparison with full field numerical simulations.

7. Acknowledgments

H. Moulinec and P. Suquet acknowledge the financial support of Labex MEC and of A*Midex through Grants ANR-11-LABX-0092 and ANR-11-IDEX-0001-02.

Appendix A. Properties of $A_{sol}(\dot{\mathbf{E}}, p)$ for spherical cavities

Proof of Property 1. From the definition (17) of ϕ it is readily seen that:

$$\phi(-A, -\dot{\mathbf{E}}, -p) = \phi(A, \dot{\mathbf{E}}, p), \quad (A.1)$$

and that the function which is to be minimized in the right-hand side of (16) is also an even function of $(A, \dot{\mathbf{E}}, p_b, p_e)$. Since it is a strictly convex function of A (whenever $\dot{\mathbf{E}} \neq 0$ which is the case throughout the paper), the minimizer A_{sol} in (16) is unique. Now consider the minimization problem for $(-\dot{\mathbf{E}}, -p_b, -p_e)$. Its unique minimizer $A_{sol}(-\dot{\mathbf{E}}, -p)$ satisfies

$$\phi(A_{sol}(-\dot{\mathbf{E}}, -p), -\dot{\mathbf{E}}, -p) \leq \phi(B, -\dot{\mathbf{E}}, -p) \quad \text{for all } B. \quad (A.2)$$

Choosing $B = -A$ and the parity property (A.1) in the two sides of (A.2) shows that

$$\phi(-A_{sol}(-\dot{\mathbf{E}}, -p), \dot{\mathbf{E}}, p) \leq \phi(A, \dot{\mathbf{E}}, p) \quad \text{for all } A,$$

which proves, by virtue of the uniqueness of the minimizer, that

$$-A_{sol}(-\dot{\mathbf{E}}, -p) = A_{sol}(\dot{\mathbf{E}}, p).$$

Proof of Property 2. Note that ϕ is a convex function of all its arguments p , A , $\dot{\mathbf{E}}$ separately. The stationarity of ϕ with respect to A implies

$$\frac{\partial \phi}{\partial A}(A_{\text{sol}}, \dot{\mathbf{E}}, p) = 0$$

and by derivation with respect to p , one gets

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial A^2}(A_{\text{sol}}, \dot{\mathbf{E}}, p) \frac{\partial A_{\text{sol}}}{\partial p} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial A \partial p}(A_{\text{sol}}, \dot{\mathbf{E}}, p) = 0. \quad (\text{A.3})$$

ϕ is a convex function of A and $\partial^2 \phi / \partial A^2$ is positive. In addition, it follows from (17) that $-\partial^2 \phi / \partial A \partial p = 3(1 - f_e) > 0$. Therefore A_{sol} is a monotone increasing function of p .

Proof of Property 3. The function $A_{\text{sol}}(\dot{\mathbf{E}}, p)$ can be inverted to get a function $p(A_{\text{sol}}, \dot{\mathbf{E}})$ which is obtained by writing the optimality condition of ϕ with respect to A

$$\frac{\partial \phi}{\partial A}(A_{\text{sol}}, \dot{\mathbf{E}}, p) = 0.$$

A straightforward calculation gives:

$$\frac{\partial \phi}{\partial A}(A, \dot{\mathbf{E}}, p) = \sigma_0 \int_{f_e}^1 \int_{f_b^*}^1 \frac{4 \frac{A}{y^2} + 4 \frac{(A - \dot{E}_m)}{q_3 z^2}}{\sqrt{4 \frac{A^2}{y^2} + 4 \frac{(\dot{E}_m - A)^2}{q_3 z^2} + \frac{(\dot{E}_{eq})^2}{q_3}}} dy dz - 3(1 - f_e)p \quad (\text{A.4})$$

and therefore the function $p(A_{\text{sol}}, \dot{\mathbf{E}})$ reads as:

$$p(A_{\text{sol}}, \dot{\mathbf{E}}) = \frac{\sigma_0}{3(1 - f_e)} \int_{f_e}^1 \int_{f_b^*}^1 \frac{4 \frac{A_{\text{sol}}}{y^2} + 4 \frac{(A_{\text{sol}} - \dot{E}_m)}{q_3 z^2}}{\sqrt{4 \frac{A_{\text{sol}}^2}{y^2} + 4 \frac{(\dot{E}_m - A_{\text{sol}})^2}{q_3 z^2} + \frac{(\dot{E}_{eq})^2}{q_3}}} dy dz. \quad (\text{A.5})$$

Taking the limit of (A.5) as $A_{\text{sol}} \rightarrow \pm\infty$ yields

$$\lim_{A \rightarrow \pm\infty} p(A_{\text{sol}}, \dot{\mathbf{E}}) = \pm p^\infty, \quad p^\infty = \frac{2}{3} \frac{\sigma_0}{1 - f_e} I_0, \quad (\text{A.6})$$

where

$$I_0 = \int_{f_e}^1 \int_{f_b^*}^1 \sqrt{\frac{1}{y^2} + \frac{1}{q_3 z^2}} dy dz \quad (\text{A.7})$$

To prove the more specific result (22), use is made of (A.3). A straightforward calculation gives:

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial A \partial p}(A, \dot{\mathbf{E}}, p) = -3(1 - f_e), \quad (\text{A.8})$$

and

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial A^2}(A, \dot{\mathbf{E}}, p) = \sigma_0 \int_{f_e}^1 \int_{f_b^*}^1 \frac{\frac{16 \dot{E}_m^2}{q_3 y^2 z^2} + \frac{4 \dot{E}_{eq}^2}{q_3} \left(\frac{1}{y^2} + \frac{1}{q_3 z^2} \right)}{\left(4 \frac{A^2}{y^2} + 4 \frac{(\dot{E}_m - A)^2}{q_3 z^2} + \frac{(\dot{E}_{eq})^2}{q_3} \right)^{3/2}} dy dz. \quad (\text{A.9})$$

It follows from (A.9) that as p approaches $\pm p^\infty$, i.e. when A_{sol} approaches $\pm\infty$

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial A^2}(A_{\text{sol}}, \dot{\mathbf{E}}, p) \sim |A_{\text{sol}}|^{-3} \frac{\sigma_0}{2q_3} (4 \dot{E}_m^2 I_1 + \dot{E}_{eq}^2 I_2),$$

where

$$I_1 = \int_{f_e}^1 \int_{f_b^*}^1 \frac{1}{y^2 z^2} \left(\frac{1}{y^2} + \frac{1}{q_3 z^2} \right)^{-3/2} dy dz, \quad I_2 = \int_{f_e}^1 \int_{f_b^*}^1 \left(\frac{1}{y^2} + \frac{1}{q_3 z^2} \right)^{-1/2} dy dz. \quad (\text{A.10})$$

Therefore, according to (A.3):

$$|A_{\text{sol}}|^{-3} \frac{\partial A_{\text{sol}}}{\partial p}(\dot{\mathbf{E}}, p) \sim \frac{6q_3(1-f_e)}{\sigma_0} \frac{1}{(4\dot{E}_m^2 I_1 + \dot{E}_{eq}^2 I_2)},$$

which gives by integration between p and p^∞

$$A_{\text{sol}}(p, \dot{\mathbf{E}}) \sim \sqrt{\frac{\sigma_0}{12q_3(1-f_e)}} \sqrt{4\dot{E}_m^2 I_1 + \dot{E}_{eq}^2 I_2} \frac{1}{\sqrt{p^\infty - p}} \quad \text{when } p \sim p^\infty.$$

A similar integration can be performed between $-p^\infty$ and p to get a similar asymptotic result when $p \sim -p^\infty$.

Proof of Property 4. The derivative of $A_{\text{sol}}(p, \dot{\mathbf{E}})$ at $p = p^0(\dot{\mathbf{E}})$ (where $A_{\text{sol}} = 0$) can be obtained from

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial A^2}(0, \dot{\mathbf{E}}, p^0) \frac{\partial A_{\text{sol}}}{\partial p}(p^0, \dot{\mathbf{E}}) = -\frac{\partial^2 \phi}{\partial A \partial p}(0, \dot{\mathbf{E}}, p^0) = 3(1-f_e).$$

It follows from the general expression (A.9) that

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial A^2}(0, \dot{\mathbf{E}}, p^0) = 4\sigma_0 \sqrt{q_3} \int_{f_e}^1 \int_{f_b^*}^1 \frac{4\dot{E}_m^2 + \dot{E}_{eq}^2 \left(\frac{1}{y^2} + \frac{1}{q_3 z^2} \right)}{\left(\frac{4\dot{E}_m^2}{z^2} + \dot{E}_{eq}^2 \right)^{3/2}} dy dz. \tag{A.11}$$

$$= 4\sigma_0 \sqrt{q_3} (1-f_b^*) \left[\frac{1}{f_b^*} \left(4\dot{E}_m^2 J_1 + \dot{E}_{eq}^2 J_2 \right) + \frac{\dot{E}_{eq}^2}{q_3} J_1 \right], \tag{A.12}$$

where

$$J_1 = \int_{f_e}^1 \frac{1}{z^2} \left(\frac{4\dot{E}_m^2}{z^2} + \dot{E}_{eq}^2 \right)^{-3/2} dz, \quad J_2 = \int_{f_e}^1 \left(\frac{4\dot{E}_m^2}{z^2} + \dot{E}_{eq}^2 \right)^{-3/2} dz \tag{A.13}$$

Therefore

$$\frac{\partial A_{\text{sol}}}{\partial p}(p^0, \dot{\mathbf{E}}) = \frac{3(1-f_e)}{4\sigma_0 \sqrt{q_3} (1-f_b^*)} \frac{1}{\left[\frac{1}{f_b^*} \left(4\dot{E}_m^2 J_1 + \dot{E}_{eq}^2 J_2 \right) + \frac{\dot{E}_{eq}^2}{q_3} J_1 \right]}. \tag{A.14}$$

Proof of Property 5. The derivative of $A_{\text{sol}}(p, \dot{\mathbf{E}})$ at $p = p^1(\dot{\mathbf{E}})$ (where $A_{\text{sol}} = \dot{E}_m$) can be obtained from

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial A^2}(\dot{E}_m, \dot{\mathbf{E}}, p^1) \frac{\partial A_{\text{sol}}}{\partial p}(p^1, \dot{\mathbf{E}}) = -\frac{\partial^2 \phi}{\partial A \partial p}(\dot{E}_m, \dot{\mathbf{E}}, p^1) = 3(1-f_e).$$

It follows from the general expression (A.9) that

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial A^2}(\dot{E}_m, \dot{\mathbf{E}}, p^1) = 4 \frac{\sigma_0}{q_3} \int_{f_e}^1 \int_{f_b^*}^1 \frac{4\dot{E}_m^2 + \dot{E}_{eq}^2 \left(\frac{1}{y^2} + \frac{1}{q_3 z^2} \right)}{\left(\frac{4\dot{E}_m^2}{y^2} + \frac{\dot{E}_{eq}^2}{q_3} \right)^{3/2}} dy dz. \tag{A.15}$$

$$= 4 \frac{\sigma_0}{q_3} (1-f_e) \left(\frac{1}{f_e} J_3 + \dot{E}_{eq}^2 J_4 \right), \tag{A.16}$$

where

$$J_3 = \int_{f_b^*}^1 \left(\frac{4\dot{E}_m^2}{y^2} + \frac{\dot{E}_{eq}^2}{q_3} \right)^{-1/2} dy, \quad J_4 = \int_{f_b^*}^1 \frac{1}{y^2} \left(\frac{4\dot{E}_m^2}{y^2} + \frac{\dot{E}_{eq}^2}{q_3} \right)^{-3/2} dy. \tag{A.17}$$

Therefore

$$\frac{\partial A_{\text{sol}}}{\partial p}(p^1, \dot{\mathbf{E}}) = \frac{3q_3}{4\sigma_0} \frac{1}{\left(\frac{1}{f_e} J_3 + \dot{E}_{eq}^2 J_4 \right)}. \tag{A.18}$$

A.1. Purely deviatoric macroscopic strain-rate: $\dot{E}_m = 0$

When the overall strain-rate $\dot{\mathbf{E}}$ is purely deviatoric ($\dot{E}_m = 0$), the above quantities of interest read as:

$$\left. \begin{aligned} p^0 &= p^1 = 0, \\ J_1 &= \frac{1-f_e}{f_e} \dot{E}_{eq}^{-3}, \quad J_2 = (1-f_e) \dot{E}_{eq}^{-3}, \\ J_3 &= (1-f_b^*) \sqrt{q_3} \dot{E}_{eq}^{-1}, \quad J_4 = \frac{1-f_b^*}{f_b^*} \dot{E}_{eq}^{-3} (q_3)^{3/2}, \\ \frac{\partial A_{sol}}{\partial p}(p^0, \dot{\mathbf{E}}) &= \frac{\partial A_{sol}}{\partial p}(p^1, \dot{\mathbf{E}}) = \frac{3\sqrt{q_3}}{4\sigma_0} \frac{1}{1-f_b^*} \frac{f_b^* f_e}{q_3 f_e + f_b^*} \dot{E}_{eq}. \end{aligned} \right\} \quad (\text{A.19})$$

A.2. Purely hydrostatic macroscopic strain-rate: $\dot{E}_{eq} = 0$

When the overall strain-rate $\dot{\mathbf{E}}$ is purely hydrostatic ($\dot{E}_{eq} = 0$), the above quantities of interest read as:

$$\left. \begin{aligned} p^0 &= \frac{2\sigma_0}{3\sqrt{q_3}} \frac{1-f_b^*}{1-f_e} \ln f_e \frac{\dot{E}_m}{|\dot{E}_m|}, \quad p^1 = -\frac{2\sigma_0}{3} \ln f_b^* \frac{\dot{E}_m}{|\dot{E}_m|}, \\ J_1 &= \frac{1}{16} (1-f_e^2) |\dot{E}_m|^{-3}, \quad J_2 = \frac{1}{32} (1-f_e^4) |\dot{E}_m|^{-3}, \\ J_3 &= \frac{1}{4} (1-(f_b^*)^2) |\dot{E}_m|^{-1}, \quad J_4 = \frac{1}{16} (1-(f_b^*)^2) |\dot{E}_m|^{-3}, \\ \frac{\partial A_{sol}}{\partial p}(p^0, \dot{\mathbf{E}}) &= \frac{3}{\sqrt{q_3} \sigma_0} \frac{f_b^*}{1-f_b^*} \frac{1}{1+f_e} |\dot{E}_m|, \\ \frac{\partial A_{sol}}{\partial p}(p^1, \dot{\mathbf{E}}) &= \frac{3q_3}{\sigma_0} \frac{f_e}{1-(f_b^*)^2} |\dot{E}_m|. \end{aligned} \right\} \quad (\text{A.20})$$

Appendix B. Properties of $A_{sol}(\dot{\mathbf{E}}, p)$ for ellipsoidal cavities

Recall that

$$\tilde{\phi}(\dot{\mathbf{E}}, p_b, p_e, A) = \sigma_0(g+1) \int_{f_b^*}^1 \int_f^1 \sqrt{\frac{4A^2}{y^2} + \frac{(\dot{E}_m - A)^2}{z^2} \frac{\tilde{a}^2}{q_3} + (\dot{E}_m - A)^2 \frac{\tilde{b}^2}{q_3} + \frac{\dot{E}_{eq}^2}{q_3}} dz dy - 3(1-f_e)pA.$$

Proof of Property 3'. The optimality conditions of $\tilde{\phi}$ with respect to A

$$\frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial A}(A_{sol}, \dot{\mathbf{E}}, p) = 0.$$

Setting:

$$\tilde{c}^2(z) = \frac{1}{4} (\tilde{a}^2 + \tilde{b}^2 z^2),$$

it is readily seen that:

$$\frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial A}(A, \dot{\mathbf{E}}, p) = \sigma_0(g+1) \int_f^1 \int_{f_b^*}^1 \frac{4 \frac{A}{y^2} + 4 \frac{(A - \dot{E}_m)}{q_3 z^2} \tilde{c}^2(z)}{\sqrt{4 \frac{A^2}{y^2} + 4 \frac{(\dot{E}_m - A)^2}{q_3 z^2} \tilde{c}^2(z) + \frac{\dot{E}_{eq}^2}{q_3}}} dy dz - 3(1-f_e)p \quad (\text{B.1})$$

and therefore the function $p(A_{sol}, \dot{\mathbf{E}})$ reads

$$p(A_{sol}, \dot{\mathbf{E}}) = \frac{\sigma_0(g+1)}{3(1-f_e)} \int_f^1 \int_{f_b^*}^1 \frac{4 \frac{A_{sol}}{y^2} + 4 \frac{(A_{sol} - \dot{E}_m)}{q_3 z^2} \tilde{c}^2(z)}{\sqrt{4 \frac{A_{sol}^2}{y^2} + 4 \frac{(\dot{E}_m - A_{sol})^2}{q_3 z^2} \tilde{c}^2(z) + \frac{\dot{E}_{eq}^2}{q_3}}} dy dz. \quad (\text{B.2})$$

Taking the limit of (B.2) as $A_{sol} \rightarrow \pm\infty$ yields

$$\lim_{A \rightarrow \pm\infty} p(A_{sol}, \dot{\mathbf{E}}) = \pm \tilde{p}^\infty, \quad \tilde{p}^\infty = \frac{2}{3} \frac{\sigma_0(g+1)}{1-f_e} \tilde{I}_0, \quad (\text{B.3})$$

where

$$\tilde{I}_0 = \int_f^1 \int_{f_b^*}^1 \sqrt{\frac{1}{y^2} + \frac{\tilde{c}^2(z)}{q_3 z^2}} dy dz = \int_f^1 \int_{f_b^*}^1 \sqrt{\frac{1}{y^2} + \frac{\tilde{a}^2 + \tilde{b}^2 z^2}{4q_3 z^2}} dy dz. \tag{B.4}$$

To prove the more specific result (44), use is made of the optimality condition:

$$\frac{\partial^2 \tilde{\phi}}{\partial A^2}(A_{\text{sol}}, \dot{\mathbf{E}}, p) \frac{\partial A_{\text{sol}}}{\partial p} = - \frac{\partial^2 \tilde{\phi}}{\partial A \partial p}(A_{\text{sol}}, \dot{\mathbf{E}}, p) = 3(1 - f_e) \tag{B.5}$$

A straightforward calculation gives:

$$\frac{\partial^2 \tilde{\phi}}{\partial A^2}(A, \dot{\mathbf{E}}, p) = \sigma_0(g + 1) \int_f^1 \int_{f_b^*}^1 \frac{\frac{16\dot{E}_m^2 \tilde{c}^2(z)}{q_3 y^2 z^2} + \frac{4\dot{E}_{eq}^2}{q_3} \left(\frac{1}{y^2} + \frac{\tilde{c}^2(z)}{q_3 z^2}\right)}{\left[4\frac{A^2}{y^2} + 4\frac{(\dot{E}_m - A)^2 \tilde{c}^2(z)}{q_3 z^2} + \frac{\dot{E}_{eq}^2}{q_3}\right]^{3/2}} dy dz. \tag{B.6}$$

It follows from (B.6) that as p approaches $\pm \tilde{p}^\infty$, i.e. when A_{sol} approaches $\pm \infty$

$$\frac{\partial^2 \tilde{\phi}}{\partial A^2}(A_{\text{sol}}, \dot{\mathbf{E}}, p) \sim |A_{\text{sol}}|^{-3} \frac{\sigma_0(g + 1)}{2q_3} (4\dot{E}_m^2 \tilde{I}_1 + \dot{E}_{eq}^2 \tilde{I}_2),$$

where

$$\tilde{I}_1 = \int_f^1 \int_{f_b^*}^1 \frac{\tilde{c}^2(z)}{y^2 z^2} \left(\frac{1}{y^2} + \frac{\tilde{c}^2(z)}{q_3 z^2}\right)^{-3/2} dy dz, \quad \tilde{I}_2 = \int_f^1 \int_{f_b^*}^1 \left(\frac{1}{y^2} + \frac{\tilde{c}^2(z)}{q_3 z^2}\right)^{-1/2} dy dz. \tag{B.7}$$

Therefore, according to (B.5):

$$|A_{\text{sol}}|^{-3} \frac{\partial A_{\text{sol}}}{\partial p}(\dot{\mathbf{E}}, p) \sim \frac{6q_3(1 - f_e)}{\sigma_0(g + 1)} \frac{1}{(4\dot{E}_m^2 \tilde{I}_1 + \dot{E}_{eq}^2 \tilde{I}_2)},$$

which gives by integration between p and \tilde{p}^∞

$$A_{\text{sol}}(p, \dot{\mathbf{E}}) \sim \sqrt{\frac{\sigma_0(g + 1)}{12q_3(1 - f_e)}} \sqrt{4\dot{E}_m^2 \tilde{I}_1 + \dot{E}_{eq}^2 \tilde{I}_2} \frac{1}{\sqrt{\tilde{p}^\infty - p}} \quad \text{when } p \sim \tilde{p}^\infty.$$

A similar integration can be performed between $-\tilde{p}^\infty$ and p to get a similar asymptotic result when $p \sim -\tilde{p}^\infty$.

Proof of Property 4. The derivative of $A_{\text{sol}}(p, \dot{\mathbf{E}})$ at $p = \tilde{p}^0(\dot{\mathbf{E}})$ (where $A_{\text{sol}} = 0$) can be obtained from

$$\frac{\partial^2 \tilde{\phi}}{\partial A^2}(0, \dot{\mathbf{E}}, \tilde{p}^0) \frac{\partial A_{\text{sol}}}{\partial p}(\tilde{p}^0, \dot{\mathbf{E}}) = - \frac{\partial^2 \tilde{\phi}}{\partial A \partial p}(0, \dot{\mathbf{E}}, \tilde{p}^0) = 3(1 - f_e).$$

It follows from the general expression (B.6) that

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \tilde{\phi}}{\partial A^2}(0, \dot{\mathbf{E}}, \tilde{p}^0) &= 4\sigma_0(g + 1)\sqrt{q_3} \int_f^1 \int_{f_b^*}^1 \frac{\frac{4\dot{E}_m^2 \tilde{c}^2(z)}{y^2 z^2} + \dot{E}_{eq}^2 \left(\frac{1}{y^2} + \frac{\tilde{c}^2(z)}{q_3 z^2}\right)}{\left[\frac{4\dot{E}_m^2 \tilde{c}^2(z)}{z^2} + \dot{E}_{eq}^2\right]^{3/2}} dy dz \\ &= 4\sigma_0(g + 1)\sqrt{q_3}(1 - f_b^*) \left[\frac{1}{f_b^*} \left(4\dot{E}_m^2 \tilde{J}_1 + \dot{E}_{eq}^2 \tilde{J}_2\right) + \frac{\dot{E}_{eq}^2}{q_3} \tilde{J}_1 \right], \end{aligned} \tag{B.8}$$

where

$$\tilde{J}_1 = \int_f^1 \frac{\tilde{c}^2(z)}{z^2} \left(\frac{4\dot{E}_m^2 \tilde{c}^2(z)}{z^2} + \dot{E}_{eq}^2\right)^{-3/2} dz, \quad \tilde{J}_2 = \int_f^1 \left(\frac{4\dot{E}_m^2 \tilde{c}^2(z)}{z^2} + \dot{E}_{eq}^2\right)^{-3/2} dz \tag{B.9}$$

Therefore

$$\frac{\partial A_{\text{sol}}}{\partial p}(\tilde{p}^0, \dot{\mathbf{E}}) = \frac{3(1 - f_e)}{4\sigma_0(g + 1)\sqrt{q_3}(1 - f_b^*)} \frac{1}{\left[\frac{1}{f_b^*} \left(4\dot{E}_m^2 \tilde{J}_1 + \dot{E}_{eq}^2 \tilde{J}_2\right) + \frac{\dot{E}_{eq}^2}{q_3} \tilde{J}_1 \right]}. \tag{B.10}$$

Proof of Property 5'. The expression of \tilde{p}^1 is a direct consequence of (B.2) with $A = \dot{E}_m$. The derivative of $A_{\text{sol}}(p, \dot{E})$ at $p = \tilde{p}^1(\dot{E})$ (where $A_{\text{sol}} = \dot{E}_m$) can be obtained from

$$\frac{\partial^2 \tilde{\phi}}{\partial A^2}(\dot{E}_m, \dot{E}, \tilde{p}^1) \frac{\partial A_{\text{sol}}}{\partial p}(\tilde{p}^1, \dot{E}) = -\frac{\partial^2 \tilde{\phi}}{\partial A \partial p}(\dot{E}_m, \dot{E}, \tilde{p}^1) = 3(1 - f_e).$$

It follows from the general expression (B.6) that

$$\frac{\partial^2 \tilde{\phi}}{\partial A^2}(\dot{E}_m, \dot{E}, \tilde{p}^1) = 4 \frac{\sigma_0(g+1)}{q_3} \int_{\tilde{f}}^1 \int_{f_b^*}^1 \frac{4\dot{E}_m^2 \tilde{c}^2(z) + \dot{E}_{eq}^2 \left(\frac{1}{y^2} + \frac{\tilde{c}^2(z)}{q_3 z^2} \right)}{\left(\frac{4\dot{E}_m^2}{y^2} + \frac{\dot{E}_{eq}^2}{q_3} \right)^{3/2}} dy dz \quad (\text{B.11})$$

$$= 4 \frac{\sigma_0(g+1)}{q_3} (1 - \tilde{f}) \left[\frac{1}{4} \left(\frac{\tilde{a}^2}{\tilde{f}} + \tilde{b}^2 \right) J_3 + \dot{E}_{eq}^2 J_4 \right], \quad (\text{B.12})$$

where

$$J_3 = \int_{f_b^*}^1 \left(\frac{4\dot{E}_m^2}{y^2} + \frac{\dot{E}_{eq}^2}{q_3} \right)^{-1/2} dy, \quad J_4 = \int_{f_b^*}^1 \frac{1}{y^2} \left(\frac{4\dot{E}_m^2}{y^2} + \frac{\dot{E}_{eq}^2}{q_3} \right)^{-3/2} dy. \quad (\text{B.13})$$

Therefore

$$\frac{\partial A_{\text{sol}}}{\partial p}(\tilde{p}^1, \dot{E}) = \frac{3q_3}{4\sigma_0(g+1)} \frac{1 - f_e}{1 - \tilde{f}} \frac{1}{\left[\frac{1}{4} \left(\frac{\tilde{a}^2}{\tilde{f}} + \tilde{b}^2 \right) J_3 + \dot{E}_{eq}^2 J_4 \right]}. \quad (\text{B.14})$$

B.1. Purely deviatoric macroscopic strain-rate: $\dot{E}_m = 0$

When the overall strain-rate \dot{E} is purely deviatoric ($\dot{E}_m = 0$), the above quantities of interest read as:

$$\left. \begin{aligned} \tilde{p}^0 &= \tilde{p}^1 = 0, \\ \tilde{J}_1 &= \frac{1 - \tilde{f}}{4} \left(\frac{\tilde{a}^2}{\tilde{f}} + \tilde{b}^2 \right) \dot{E}_{eq}^{-3}, \quad \tilde{J}_2 = (1 - \tilde{f}) \dot{E}_{eq}^{-3}, \\ J_3 &= (1 - f_b^*) \sqrt{q_3} \dot{E}_{eq}^{-1}, \quad J_4 = \frac{1 - f_b^*}{f_b^*} \dot{E}_{eq}^{-3} (q_3)^{3/2}, \\ \frac{\partial A_{\text{sol}}}{\partial p}(\tilde{p}^0, \dot{E}) &= \frac{\partial A_{\text{sol}}}{\partial p}(\tilde{p}^1, \dot{E}) = \frac{3\sqrt{q_3}}{4\sigma_0(g+1)} \frac{1 - f_e}{1 - \tilde{f}} \frac{1}{1 - f_b^*} \frac{f_b^* \tilde{f}}{q_3 \tilde{f} + \frac{f_b^*}{4} (\tilde{a}^2 + \tilde{b}^2 \tilde{f})} \dot{E}_{eq}. \end{aligned} \right\} \quad (\text{B.15})$$

B.2. Purely hydrostatic macroscopic strain-rate: $\dot{E}_{eq} = 0$

When the overall strain-rate \dot{E} is purely hydrostatic ($\dot{E}_{eq} = 0$), the above quantities of interest read as:

$$\left. \begin{aligned} \tilde{p}^0 &= -\frac{\sigma_0(g+1)}{3\sqrt{q_3}} \frac{1 - f_b^*}{1 - f_e} \frac{\dot{E}_m}{|\dot{E}_m|} \tilde{J}_3, \\ \tilde{J}_3 &= \sqrt{\tilde{a}^2 + \tilde{b}^2} - \sqrt{\tilde{a}^2 + \tilde{b}^2 \tilde{f}^2} + |\tilde{a}| \ln \left(\frac{|\tilde{a}| + \sqrt{\tilde{a}^2 + \tilde{b}^2 \tilde{f}^2}}{|\tilde{a}| \tilde{f} + \sqrt{\tilde{a}^2 + \tilde{b}^2 \tilde{f}^2}} \right), \\ \tilde{p}^1 &= -\frac{2\sigma_0(g+1)}{3} \frac{1 - \tilde{f}}{1 - f_e} \ln f_b^* \frac{\dot{E}_m}{|\dot{E}_m|}, \\ \tilde{J}_1 &= \frac{1}{4} \frac{1 - \tilde{f}^2}{\sqrt{\tilde{a}^2 + \tilde{b}^2} + \sqrt{\tilde{a}^2 + \tilde{b}^2 \tilde{f}^2}} |\dot{E}_m|^{-3}, \\ J_3 &= \frac{1}{4} (1 - (f_b^*)^2) |\dot{E}_m|^{-1}, \quad J_4 = \frac{1}{16} (1 - (f_b^*)^2) |\dot{E}_m|^{-3}, \\ \frac{\partial A_{\text{sol}}}{\partial p}(\tilde{p}^0, \dot{E}) &= \frac{3(1 - f_e)}{4\sqrt{q_3} \sigma_0(g+1)} \frac{f_b^*}{1 - f_b^*} \frac{\sqrt{\tilde{a}^2 + \tilde{b}^2} + \sqrt{\tilde{a}^2 + \tilde{b}^2 \tilde{f}^2}}{1 - \tilde{f}^2} |\dot{E}_m|, \\ \frac{\partial A_{\text{sol}}}{\partial p}(\tilde{p}^1, \dot{E}) &= \frac{3q_3}{\sigma_0(g+1)} \frac{1 - f_e}{1 - \tilde{f}} \frac{1}{1 - (f_b^*)^2} \frac{4\tilde{f}}{\tilde{a}^2 + \tilde{b}^2 \tilde{f}} |\dot{E}_m|. \end{aligned} \right\} \quad (\text{B.16})$$

Remark. For consistency, it can be checked that all results for spherical voids are recovered from the ellipsoidal case by setting $\tilde{f} = f_e$, $\tilde{g} = 0$, $\tilde{a} = 2$, $\tilde{b} = 0$.

Appendix C. Integrals

Throughout the paper, use has been made of several integrals which can actually be expressed in closed form.

C.1. I_1 and I_2

The integrals I_1 and I_2 can alternatively be expressed as:

$$I_1 = \sqrt{q_3}(i_1 + i_2 - i_3 - i_4), \tag{C.1}$$

$$I_2 = \frac{1}{3\sqrt{q_3}} \left[(f_b^*)^2(i_3 - i_1) + q_3(f_e^2(i_3 - i_2) + i_4 - i_1) + i_4 - i_2 \right], \tag{C.2}$$

where

$$i_1 = \sqrt{(f_b^*)^2 + q_3}, \quad i_2 = \sqrt{f_e^2 q_3 + 1}, \quad i_3 = \sqrt{(f_b^*)^2 + f_e^2 q_3}, \quad i_4 = \sqrt{q_3 + 1}. \tag{C.3}$$

C.2. Integrals I_0 , \tilde{I}_0 , (39) and (55)

The double integrals I_0 , \tilde{I}_0 , (39) and (55) are special cases of the more general integral

$$I = \int_{f_t}^1 \int_{f_b^*}^1 \sqrt{\frac{P^2}{y^2} + \frac{Q^2}{z^2} + R^2} dy dz. \tag{C.4}$$

Then:

- when $R \neq 0$:

$$I = B_1 - B_2 - B_3 + B_4 + \frac{PQ}{2R} \arcsin \left(\frac{LM - NK}{M^2 + N^2} \right) + \ln \left[\left(\frac{Q + B_3}{f_t(Q + B_1)} \right)^Q \left(\frac{f_b^*(f_t P + B_3)}{f_t P + B_4} \right)^{(Pf_t)} \right] + \ln \left[\left(\frac{P + B_2}{f_b^*(P + B_1)} \right)^P \left(\frac{f_t(f_b^* Q + B_2)}{f_b^* Q + B_4} \right)^{(Qf_b^*)} \right]. \tag{C.5}$$

where

$$B_1 = \sqrt{P^2 + Q^2 + R^2}, \quad B_2 = \sqrt{P^2 + f_b^{*2}(Q^2 + R^2)}, \quad B_3 = \sqrt{Q^2 + f_t^2(P^2 + R^2)}, \tag{C.6}$$

$$B_4 = \sqrt{f_b^{*2}Q^2 + f_t^2(P^2 + f_b^{*2}R^2)}, \quad B_5 = PQR, \tag{C.6}$$

$$A_i = (P^2 Q^2 - R^2 B_i^2), \quad C_i = 2B_5 B_i, \quad i = 1, 4, \tag{C.7}$$

$$K = A_1 A_4 - C_1 C_4, \quad L = A_1 C_4 + C_1 A_4, \quad M = A_2 A_3 - C_2 C_3, \quad N = A_2 C_3 + A_3 C_2. \tag{C.8}$$

- When $R = 0$ and $P \neq 0, Q \neq 0$, then

$$I = 2(B_1 - B_2 - B_3 + B_4) + \ln \left[\left(\frac{Q + B_3}{f_t(Q + B_1)} \right)^Q \left(\frac{f_b^*(f_t P + B_3)}{f_t P + B_4} \right)^{Pf_t} \right] + \ln \left[\left(\frac{P + B_2}{f_b^*(P + B_1)} \right)^P \left(\frac{f_t(f_b^* Q + B_2)}{f_b^* Q + B_4} \right)^{Qf_b^*} \right], \tag{C.9}$$

with

$$B_1 = \sqrt{P^2 + Q^2}, \quad B_2 = \sqrt{P^2 + f_b^{*2}Q^2}, \quad B_3 = \sqrt{Q^2 + f_t^2P^2}, \quad B_4 = \sqrt{f_b^{*2}Q^2 + f_t^2P^2}. \tag{C.10}$$

- When $R = P = 0, Q \neq 0$, then

$$I = -(1 - f_b^*) | Q | \ln(f_t).$$

- When $R = Q = 0, P \neq 0$, then

$$I = -(1 - f_t) | P | \ln(f_b^*).$$

The double integrals I_0 , \tilde{I}_0 , (39) and (55) can be expressed in closed form:

- The first double integral in (39) ($\bar{\Sigma}_m^\pm$) with $P = 2\bar{A}^\pm$, $Q = \frac{2(\pm 1 - \bar{A}^\pm)}{\sqrt{q_3}}$, $R = 0$, and $f_t = f_e$
- The second double integral in (39) ($\bar{\Sigma}_{eq}$) with $P = 2\bar{A}_{eq}$, $Q = \frac{2\bar{A}_{eq}}{\sqrt{q_3}}$, $R = \frac{1}{\sqrt{q_3}}$, and $f_t = f_e$
- I_0 with $P = 1$, $Q = \sqrt{\frac{1}{q_3}}$, $R = 0$, and $f_t = f_e$.
- \tilde{I}_0 with $P = 1$, $Q = \frac{\tilde{a}}{2\sqrt{q_3}}$, $R = \frac{\tilde{b}}{2\sqrt{q_3}}$, and $f_t = \tilde{f}$
- The first double integral in (55) ($\tilde{\Sigma}_m^\pm$) with $P = 2\tilde{A}^\pm$, $Q = \frac{\tilde{a}}{\sqrt{q_3}}(\pm 1 - \tilde{A}^\pm)$, $R = \frac{\tilde{b}}{\sqrt{q_3}}(\pm 1 - \tilde{A}^\pm)$, and $f_t = \tilde{f}$.
- The second double integral in (55) ($\tilde{\Sigma}_{eq}$) with $P = 2\tilde{A}_{eq}$, $Q = \frac{\tilde{a}}{\sqrt{q_3}}\tilde{A}_{eq}$, $R = \sqrt{\frac{1}{q_3} + \frac{\tilde{b}^2}{q_3}\tilde{A}_{eq}^2}$, and $f_t = \tilde{f}$.

C.3. \tilde{I}_1 and \tilde{I}_2

$$\tilde{I}_1 = 4q_3^{3/2} \left(\frac{\tilde{i}_1 - \tilde{i}_3}{\tilde{b}^2(f_b^*)^2 + 4q_3} + \frac{\tilde{i}_2 - \tilde{i}_4}{\tilde{b}^2 + 4q_3} \right), \quad (C.11)$$

$$\tilde{I}_2 = \frac{4\sqrt{q_3}}{\tilde{b}^2} \left[\frac{1}{\tilde{i}_5} \left[\arctan(\tilde{i}_1\tilde{i}_5) + \arctan(\tilde{i}_2\tilde{i}_5) - \arctan(\tilde{i}_3\tilde{i}_5) - \arctan(\tilde{i}_4\tilde{i}_5) \right] - \tilde{i}_1 - \tilde{i}_2 + \tilde{i}_3 + \tilde{i}_4 \right], \quad (C.12)$$

$$\begin{aligned} \tilde{i}_1 &= \frac{1}{2} \sqrt{(f_b^*)^2(\tilde{a}^2 + \tilde{b}^2) + 4q_3}, & \tilde{i}_2 &= \frac{1}{2} \sqrt{\tilde{a}^2 + \tilde{f}^2(\tilde{b}^2 + 4q_3)}, & \tilde{i}_3 &= \frac{1}{2} \sqrt{(f_b^*)^2(\tilde{a}^2 + \tilde{b}^2\tilde{f}^2) + 4\tilde{f}^2q_3}, \\ \tilde{i}_4 &= \frac{1}{2} \sqrt{\tilde{a}^2 + \tilde{b}^2 + 4q_3}, & \tilde{i}_5 &= \frac{|\tilde{b}|}{|\tilde{a}|\sqrt{q_3}}. \end{aligned} \quad (C.13)$$

Appendix D. Symmetry of the flow surface

The GTN yield function ((1)) corresponds to a flow surface which is symmetric with respect to the vertical axis passing through the point $(\frac{\Sigma_m^- + \Sigma_m^+}{2}, \bar{\Sigma}_{eq})$ in the plane (Σ_m, Σ_{eq}) . The question addressed here is whether this symmetry property is present in the actual macroscopic flow surface (corresponding to the exact minimization in (7) with $\varphi = \varphi^{Gur}$ over all possible velocity fields), in the flow surface deduced from the upper bound Φ^+ and in the flow surface deduced from Φ .

The exact flow surface cannot even be plotted in the plane (Σ_m, Σ_{eq}) because of the effect of the third invariant of the stress which complicates the representation of the flow surface even for an isotropic material. In full rigor, the flow surface should be represented in the space of the three invariants of Σ (Danas et al., 2008). Therefore the symmetry of the actual flow surface in the plane of the two first invariants is a ill-posed question and will not be discussed here. It will just be noted in part II of this study that this effect of the third invariant on the overall flow surface is small in the range of porosities of interest to us (less than a few percents).

We discuss here the symmetry of the upper bound corresponding to Φ^+ . It can be proved in two specific cases, first when $p_b = p_e = 0$ (drained materials see D.1 for a proof), and second when $f_b^* = f_e$ and $q_3 = 1$ (see D.2 for a proof). It remains an

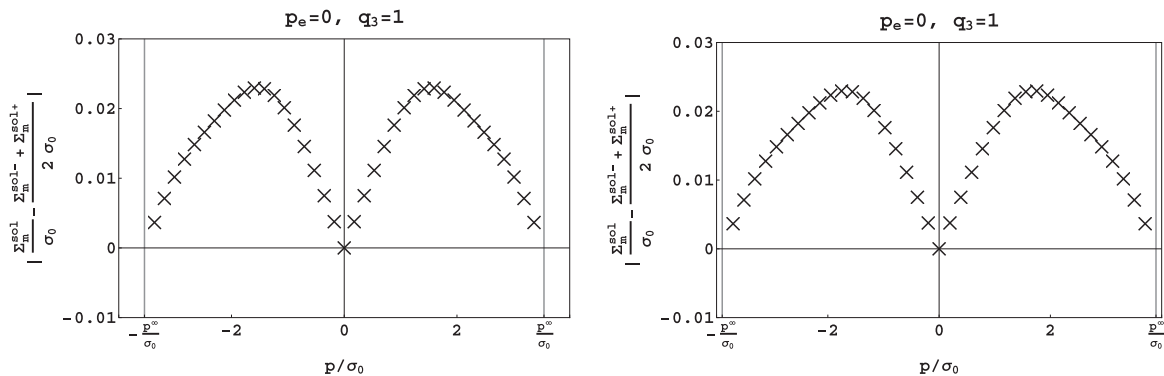


Fig. D.14. Spherical voids. Asymmetry of the flow surface obtained with A_{sol} : (left) $(f_b, f_e) = (10\%, 1\%)$, (right) $(f_b, f_e) = (1\%, 10\%)$.

approximation in general. However, it can be checked that the hydrostatic component (denoted by Σ_m^{sol}) of the stress state on the flow surface where the equivalent stress is maximum is, for all values of the internal pressure p , close to the mid point $\frac{\Sigma_m^{\text{sol}} + \Sigma_m^{\text{sol}_1}}{2}$ between the two hydrostatic points bounding the domain on the hydrostatic axis. As can be seen in Fig. D.14, the discrepancy is less than 3% of the yield stress σ_0 .

D.1. Drained materials $p_b = p_e = 0$

It follows from the relation (20) that, when $p_b = p_e = 0$, Φ^+ (16) is an even function of \dot{E}_m and therefore that its derivative with respect to \dot{E}_m is an odd function of \dot{E}_m whereas its derivative with respect to \dot{E}_{eq} is an even function of \dot{E}_m :

$$\Sigma_m(\dot{E}_m, E_{eq}) = -\Sigma_m(-\dot{E}_m, E_{eq}) \quad \Sigma_{eq}(\dot{E}_m, E_{eq}) = \Sigma_{eq}(-\dot{E}_m, E_{eq}), \quad \text{when } p_b = p_e = 0. \quad (D.1)$$

This proves the desired symmetry.

D.2. $f_b^* = f_e$ and $q_3 = 1$

When $f_b^* = f_e$ and $q_3 = 1$, A and $\dot{E}_m - A$ play a symmetric role in the first integral in (17). Therefore it is readily seen that:

$$\phi(A, -\dot{\mathbf{E}}, p) = \phi(A + \dot{E}_m, \dot{\mathbf{E}}, p) + 3(1 - f_e)p\dot{E}_m. \quad (D.2)$$

Since the minimizer of ϕ is unique it follows from relation (D.2) that

$$A_{\text{sol}}(-\dot{\mathbf{E}}, p) = A(\dot{\mathbf{E}}, p) + \dot{E}_m \quad (D.3)$$

and, upon the change of variables $B = A + \dot{E}_m$, that the minima are related by

$$\inf_A \phi(A, -\dot{\mathbf{E}}, p) = \inf_B \phi(B, \dot{\mathbf{E}}, p) + 3(1 - f_e)p\dot{E}_m, \quad (D.4)$$

which implies that the values of the potential Φ^+ for two opposite strain-rates are related by

$$\Phi^+(-\dot{\mathbf{E}}, p_b, p_e) = \Phi^+(\dot{\mathbf{E}}, p_b, p_e) + 3(1 - f_e)p\dot{E}_m + 6p_e\dot{E}_m. \quad (D.5)$$

Derivating (D.5) with respect to $\dot{\mathbf{E}}$ yields

$$-\frac{\partial \Phi^+}{\partial \dot{\mathbf{E}}}(-\dot{\mathbf{E}}, p_b, p_e) = \frac{\partial \Phi^+}{\partial \dot{\mathbf{E}}}(\dot{\mathbf{E}}, p_b, p_e) + ((1 - f_e)p + 2p_e)\mathbf{i}. \quad (D.6)$$

In other words

$$\frac{1}{2} \left(\Sigma(-\dot{\mathbf{E}}, p_b, p_e) + \Sigma(\dot{\mathbf{E}}, p_b, p_e) \right) = - \left(\frac{(1 - f_e)}{2} p + p_e \right) \mathbf{i},$$

which shows that the two stresses on the flow surface corresponding to opposite strain-rates are symmetric with respect to the axis $\Sigma_m = -\frac{(1 - f_e)}{2} p - p_e$.

Appendix E. Hollow ellipsoids

The inner and the outer boundary of the reference volume are two confocal spheroids (ellipsoids which are rotation invariant around the z axis). Denoting by a_1 and b_1 the horizontal and the vertical semi-axes of the inner spheroid (similar notation for the outer spheroid with index 2, see Fig. E.15), the void volume-fraction and the void aspect-ratio can be expressed as:

$$f_e = \frac{a_1 b_1^2}{a_2 b_2^2} \text{ (volume fraction),} \quad w = \frac{a_1}{b_1} \text{ (aspect ratio).} \quad (E.1)$$

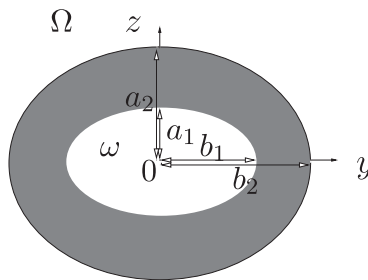


Fig. E.15. Notations for the hollow spheroid of reference Vincent et al. (2009a).

Since the inner and the outer ellipsoids are confocal, the distance $2c$ between their foci is the same and given by:

$$c = \sqrt{b_1^2 - a_1^2} = \sqrt{b_2^2 - a_2^2}. \quad (\text{E.2})$$

A family of confocal ellipsoids with horizontal axis a and vertical axis b , parametrized by a scalar λ , is introduced through the following relations:

$$a = c \sinh \lambda, \quad b = c \cosh \lambda, \quad (\text{E.3})$$

where λ varies between λ_1 and λ_2 :

$$a_1 = c \sinh \lambda_1, \quad b_1 = c \cosh \lambda_1, \quad a_2 = c \sinh \lambda_2, \quad b_2 = c \cosh \lambda_2. \quad (\text{E.4})$$

Then, with the following notations:

$$R(\lambda) = -\frac{ac}{b^2} + \text{Arcsin}\left(\frac{c}{b}\right), \quad Z(\lambda) = \frac{2c}{a} - 2\text{Arcsin}\left(\frac{c}{b}\right), \quad R_2 = R(\lambda_2), \quad Z_2 = Z(\lambda_2), \quad |\Omega| = \frac{4}{3}\pi a_2 b_2^2, \quad \tilde{\alpha} = \frac{a_2 b_2^2}{2c^3} \quad (\text{E.5})$$

one defines:

$$J(\lambda) = \frac{4}{3} \frac{\pi b (2a^2 + b^2)}{|\Omega|} \quad (\text{E.6})$$

and:

$$Q_J(\lambda) = \frac{4}{9} \frac{b\pi}{|\Omega|} \left\{ b^2 [-1 + 6R(\lambda)\tilde{\alpha} + 3Z_2\tilde{\alpha}]^2 + 2a^2 [1 - 6Z_2\tilde{\alpha} + 12R^2(\lambda)\tilde{\alpha}^2 + 12Z^2(\lambda)\tilde{\alpha}^2 + 9Z_2^2\tilde{\alpha}^2 \dots + 6Z(\lambda)\tilde{\alpha}(1 + 2R(\lambda)\tilde{\alpha} - 3Z_2\tilde{\alpha})] \right\}. \quad (\text{E.7})$$

The following notations are used for the definition of $\tilde{\phi}$ in the expression (43):

$$\tilde{f} = \frac{g+f_e}{g+1}, \quad g = \frac{4e_2^3}{3\chi\sqrt{1-e_2^2}}, \quad \chi = \sqrt{\pi^2 + \frac{32}{3}}, \quad (\text{E.8})$$

$$e_1 = \frac{c}{b_1}, \quad e_2 = \frac{c}{b_2}, \quad Z_2 = \frac{2e_2}{\sqrt{1-e_2^2}} - 2 \arcsin(e_2), \quad (\text{E.9})$$

$$\alpha_G(e) = -\frac{1-e^2}{2e^2} + \frac{\sqrt{1-e^2}}{2e^3} \arcsin(e), \quad \alpha_1 = \alpha_G(e_1), \quad \alpha_2 = \alpha_G(e_2), \quad (\text{E.10})$$

$$\tilde{a}^2 = \frac{3}{\kappa^2(g+1)^2} \left(3 - 2\eta + \frac{4\eta Z_2}{\chi g} \right), \quad \tilde{b}^2 = \left(1 - \frac{2}{\chi g} Z_2 \right)^2, \quad (\text{E.11})$$

$$\kappa = \left(\frac{2}{3} + \frac{g(1-f_e)(g+2f_e+gf_e)}{3(g+1)^2(g+f_e)^2 \ln \frac{g+1}{g+f_e}} \right)^{-1}, \quad (\text{E.12})$$

$$\eta = \frac{\kappa(1-f_e)(g+1)(g+f_e) \sinh(2\kappa(\alpha_2 - \alpha_1))}{(g+1)^2 + (g+f_e)^2 + 2(g+1)(g+f_e)\tilde{\eta}}, \quad (\text{E.13})$$

$$\tilde{\eta} = \kappa(\alpha_2 - \alpha_1) \sinh(2\kappa(\alpha_2 - \alpha_1)) - \cosh(2\kappa(\alpha_2 - \alpha_1)). \quad (\text{E.14})$$

References

- Benzerga, A., Besson, J., Pineau, A., 2004. Anisotropic ductile fracture. Part II: Theory. *Acta Mater.* 152, 4639–4650.
- Bilger, N., Auslender, F., Bornert, M., Masson, R., 2002. New bounds and estimates for porous media with rigid perfectly plastic matrix. *C.R. Méc.* 330, 127–132.
- Danas, K., Idiart, M., Ponte Castañeda, P., 2008. A homogenization-based constitutive model for isotropic viscoplastic porous media. *Int. J. Solids Struct.* 45, 3392–3409.
- Dherbey, F., Louchet, F., Mocellin, A., Leclercq, S., 2002. Elevated temperature creep of polycrystalline uranium dioxide: from microscopic mechanisms to macroscopic behaviour. *Acta Mater.* 50, 1495–1505.
- Dubourg, R., Faure-Geors, H., Nicaise, G., Barrachin, M., 2005. Fission product release in the first two PHEBUS tests FPT0 and FPT1. *Nucl. Eng. Des.* 235, 2183–2208.
- Fabrègue, D., Pardoën, T., 2008. A constitutive model for elastoplastic solids containing primary and secondary voids. *J. Mech. Phys. Solids* 56, 719–741.

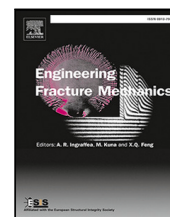
- Gologanu, M., Leblond, J., Devaux, J., 1994. Approximate models for ductile metals containing non-spherical voids-case of axisymmetric oblate ellipsoidal cavities. *ASME J. Eng. Mater. Technol.* 116, 290–297.
- Gologanu, M., Leblond, J., Perrin, G., Devaux, J., 1997. Recent extensions of Gurson's model for porous ductile metals. In: Suquet, P. (Ed.), *Continuum Micromechanics*. Springer-Verlag, New-York, pp. 61–130.
- Guo, T., Faleskog, J., Shih, C., 2008. Continuum modeling of a porous solid with pressure sensitive dilatant matrix. *J. Mech. Phys. Solids* 56, 2188–2212.
- Gurson, A., 1977. Continuum theory of ductile rupture by void nucleation and growth. Part I: Yield criteria and flow rules for porous ductile media. *J. Eng. Mater. Technol.* 99, 1–15.
- Julien, J., Gărăjeu, M., Michel, J.-C., 2011. A semi-analytical model for the behavior of saturated viscoplastic materials containing two populations of voids of different sizes. *Int. J. Solids Struct.* 48, 1485–1498.
- Kashibe, S., Une, K., 1991. Effects of temperature cycling and heating rate on fission gas release of BWR fuels. *J. Nucl. Sci. Technol.* 28, 1090–1099.
- Kashibe, S., Une, K., Nogita, K., 1993. Formation and growth of intragranular fission gas bubbles in UO_2 fuels with burnup of 6–83 GWd/t. *J. Nucl. Mater.* 206, 22–34.
- Koplik, J., Needleman, A., 1988. Void growth and coalescence in porous plastic solids. *Int. J. Solids Struct.* 24, 835–853.
- Lebensohn, R.A., Idiart, M.I., Ponte Castañeda, P., Vincent, P.G., 2011. Dilatational viscoplasticity of polycrystalline solids with intergranular cavities. *Philos. Mag.* 91, 3038–3067.
- Leblond, J., Perrin, G., 1999. A self-consistent approach to coalescence of cavities in inhomogeneously voided ductile solids. *J. Mech. Phys. Solids* 47, 1823–1841.
- Leblond, J., Perrin, G., Suquet, P., 1994. Exact results and approximate models for porous viscoplastic solids. *Int. J. Plast.* 10, 213–235.
- Lee, J., Oung, J., 1999. Yield functions and flow rules for porous pressure-dependent strain-hardening polymeric materials. *J. Appl. Mech.* 67, 288–297.
- Lösönen, P., 2000. On the behaviour of intragranular fission gas in UO_2 fuel. *J. Nucl. Mater.* 280, 56–72.
- Madou, K., Leblond, J., 2012. A Gurson-type criterion for porous ductile solids containing arbitrary ellipsoidal voids. I: Limit-analysis of some representative cell. *J. Mech. Phys. Solids* 60, 1020–1036.
- Michel, J., Moulinec, H., Suquet, P., 2000. A computational method based on augmented Lagrangians and fast Fourier transforms for composites with high contrast. *Comput. Model. Eng. Sci.* 1 (2), 79–88.
- Michel, J., Moulinec, H., Suquet, P., 2001. A computational method for linear and nonlinear composites with arbitrary phase contrast. *Int. J. Numer. Methods Eng.* 52, 139–160.
- Monchiet, V., Charkaluk, E., Kondo, D., 2011. A micromechanics-based modification of the Gurson criterion by using Eshelby-like velocity fields. *Eur. J. Mech. A/Solids* 30, 940–949.
- Monchiet, V., Kondo, D., 2012. Exact solution of a plastic hollow sphere with a Mises–Schleicher matrix. *Int. J. Eng. Sci.* 51, 168–178.
- Moulinec, H., Suquet, P., 1998. A numerical method for computing the overall response of nonlinear composites with complex microstructure. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* 157, 69–94.
- Olander, D., 1976. *Fundamental Aspects of Nuclear Reactor Fuel Elements*. Technical Information Center, Office of Public Affairs. Energy Research and Development Administration, TID-26711-P1.
- Ponte Castañeda, P., 1991. The effective mechanical properties of nonlinear isotropic composites. *J. Mech. Phys. Solids* 39, 45–71.
- Ponte Castañeda, P., Suquet, P., 1998. Nonlinear composites. *Adv. Appl. Mech.* 34, 171–302.
- Ponte Castañeda, P., Zaidman, M., 1996. The finite deformation of nonlinear composite materials. I: Instantaneous constitutive relations. *Int. J. Solids Struct.* 33, 1271–1286.
- 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 Sér. IIB* 320, 563–571.
- Thoré, P., Pastor, F., Pastor, J., Kondo, D., 2009. Closed-form solutions for the hollow sphere model with Coulomb and Drucker–Prager materials under isotropic loadings. *C.R. Méc.* 337 (5), 260–267.
- Tvergaard, V., 1990. Material failure by void growth to coalescence. In: Hutchinson, J., Wu, T. (Eds.), *Advances in Applied Mechanics*, vol. 27. Academic Press, New-York, pp. 83–151.
- Vincent, P.-G., Monerie, Y., Suquet, P., 2008. Ductile damage of porous materials with two populations of voids. *C.R. Méc.* 336, 245–259.
- Vincent, P.-G., Monerie, Y., Suquet, P., 2009a. Porous materials with two populations of voids under internal pressure. I: Instantaneous constitutive relations. *Int. J. Solids Struct.* 46, 480–506.
- Vincent, P.-G., Monerie, Y., Suquet, P., 2009b. Porous materials with two populations of voids under internal pressure. II: Growth and coalescence of voids. *Int. J. Solids Struct.* 46, 507–526.
- Zaidman, M., Ponte Castañeda, P., 1996. The finite deformation of nonlinear composite materials. II: Evolution of the microstructure. *Int. J. Solids Struct.* 33, 1287–1303.

7.2 Article : "Cohesive GTN model for ductile fracture simulation"



Contents lists available at ScienceDirect

Engineering Fracture Mechanics

journal homepage: www.elsevier.com/locate/engfracmech

Cohesive GTN model for ductile fracture simulation

Noé Brice Nkoumbou Kaptchouang^{a,b}, Yann Monerie^{b,c,*}, Frédéric Perales^{a,b},
Pierre-Guy Vincent^{a,b}

^a Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire, B.P. 3, 13115 Saint-Paul-lez-Durance Cedex, France

^b MIST Laboratory, IRSN-CNRS-UM, France

^c LMGC, Univ Montpellier, CNRS, Montpellier, France

ARTICLE INFO

Keywords:

Ductile fracture

Cohesive zone model

GTN model

Crack growth simulation

Triaxiality effects

ABSTRACT

The present work addresses the micromechanical modeling and the simulation of crack initiation and propagation in ductile materials failing by void nucleation, growth and coalescence. A cohesive–volumetric approach is used and the overall material behavior is characterized both by a hardening bulk constitutive law and a softening surface traction–separation law embedded between each mesh of a finite element discretization. The traction–separation law sums up across a surface all the ductile damage processes occurring in a narrow strain localization band, while the bulk behavior concerns the other elasto-plastic effects. The proposed cohesive zone model is based on a micromechanical approach where the Gurson–Tvergaard–Needleman ductile damage model is adapted to the reduced kinematics of a surface while ensuring the complete effect of the strain rate or stress triaxiality both on the local plasticity and on the void growth. The corresponding cohesive model is implemented in the XPER computer code using the Non-Smooth Contact Dynamics method where cohesive models are introduced as mixed boundary conditions between each volumetric finite element. The present approach is applied to the simulation of crack growth in a standard ferritic steel. Results are compared with available experimental data. The efficiency of the proposed cohesive-GTN model is underlined since the shape of the cohesive law and its mechanical parameters arise directly from the micromechanical approach without any *ad hoc* fitting parameter.

1. Introduction

Many materials used in nuclear plants are polycrystalline materials that exhibit a ductile behavior at high temperature, e.g. ceramic materials such as uranium dioxide [1] or mixed oxide fuels, metallic alloys used for the reactor pressure vessels [2], structural components within the vessels, etc. Simulation of the fracture of these materials under accident conditions is of great interest when assessing the safety of nuclear plants. One of the process of ductile fracture is the nucleation and growth of microscopic voids under accumulation of plastic strain in some regions [3,4]. As a consequence, these regions are softened and the deformations can localize into some narrow band, referred as *fracture process zone*, where coalescence of voids occurs and leads to main cracks [5]. On one hand, a widely used framework to describe such a damage process in ductile materials is the continuum micromechanics, based on a physical modeling of the kinematics of voids nucleation, growth and coalescence inside a matrix material. Within this approach, the Gurson–Tvergaard–Needleman (GTN) model [6–9] is surely the most widespread model to characterize the ductile fracture.

* Corresponding author at: LMGC, Univ Montpellier, CNRS, Montpellier, France.

E-mail address: yann.monerie@umontpellier.fr (Y. Monerie).

<https://doi.org/10.1016/j.engfracmech.2020.107437>

Received 29 May 2020; Received in revised form 17 September 2020; Accepted 25 November 2020

Available online 4 December 2020

0013-7944/© 2020 Published by Elsevier Ltd.

Nomenclature

$\Omega, \partial\Omega$	domain and its boundary
\dot{E}	strain rate
\dot{E}_m, \dot{E}_{eq}	hydrostatic and equivalent parts of the strain rate
η_E	strain rate triaxiality, Eq. (4)
\dot{p}	in-plane strain rate
f	porosity
f^*	effective porosity related to the void coalescence, Eq. (8)
f_c	porosity at onset of void coalescence
f_f	porosity at final failure
σ_0	yield stress of the matrix material surrounding the voids
σ_y	flow strength of the matrix material
$\bar{\epsilon}$	average plastic strain of the matrix material
$\mathbf{R}, [\mathbf{u}]$	stress vector and displacement jump across the cohesive zone
$\mathbf{n}, \mathbf{t}, \mathbf{s}$	vectors defining the normal–tangent basis
h	thickness of the localization band summarized by the cohesive zone
H, D	functions of Gurson model, Eq. (2)
χ	couple of variables $\{\eta_E, q_1 f^*(f)\}$

On the other hand, Cohesive Zone Models (CZM) are widely used as numerical models leading to creation of surface as a limit case of strain localization, [10,11] among others. This phenomenological approach of fracture is based on the pioneering works of [12] and [13] who proposed to introduce a process zone at the crack tip in order to avoid the unrealistic unbounded stresses predicted by Linear Elastic Fracture Mechanics. In such an approach, the stress remains finite and tends to vanish while the crack tip is opening. In the standard cohesive surface theory of fracture, the crack growth is modeled as a decohesion of two surfaces within a continuum material. Therefore, the cohesive stress corresponds to the amount of stress which is needed to initiate the separation of the two surfaces. In this framework, the overall material behavior is characterized by two constitutive relations, the volumetric (bulk) stress–strain constitutive law and the traction–separation law across the cohesive surface embedded in a three-dimensional continuum. The traction–separation law is expressed as a relationship $\mathbf{R} = \mathcal{R}([\mathbf{u}])$ between the stress vector \mathbf{R} and the displacement jump $[\mathbf{u}]$ across the two surfaces. For a given material, the shape of the curve $\mathcal{R}([\mathbf{u}])$ is generally unknown and many *a priori* shape functions are proposed in the literature, see [14–17] to cite few. The CZM is thus fully determined by the data of some mechanical surface parameters as cohesive energy and toughness [16,18,19].

It is worth noting that the particular case of the simulation of tearing of ductile metal plates with the help of cohesive zone models has recently given rise to several papers [20–23]. As pointed out by [23], cohesive zone modeling is often combined in practical situations with shell modeling. Cohesive zone models have been elaborated and calibrated in these works, using numerical simulations and sometimes experimental results. In [21], a plate tearing problem is simulated and the measured overall force–displacement response is used to calibrate the cohesive zone. In [20], the complex sequence of events that occurs during failure is studied in details with a GTN model. During a mode I loading crack growth, the fracture process is simulated by a 2D plane strain finite element model. Then, the traction–separation relationship of the cohesive zone is determined. This work was extended in [23] by expanding the model to 3D.

The parameters of any CZM corresponding to a bulk ductile damage model do not have to be considered as pure material parameters since the ductile failure based on void initiation, growth and coalescence is strongly dependent on the local stress and strain states [9,24,25]. Previous works have introduced *ad hoc* dependence of cohesive parameters on surrounding plastic state. For example, [26,27] propose to add a dependence on the accumulated plastic strain of the material adjacent to the cohesive zone. In [28,29], a stress triaxiality dependent cohesive model is formulated by the use of elastic–plastic constitutive relations combined with a softening law under plane strain and plane stress conditions. The behavior of the traction–separation law up to the peak stress is established to replicate the linear elastic and strain hardening behavior of an undamaged material in plane strain [30] and plane stress [29]. The resulting behavior is therefore a function of the path in the stress space (thus the stress triaxiality) and elastic–plastic constants. The softening after the peak stress is characterized by an exponential smoothing function. Another approach to determine the ductile cohesive parameters from a micromechanical basis consists in considering a Representative Volume Element (RVE) composed of a Gurson-like material and identifying the cohesive parameters of an *a priori* given CZM to fit the overall response of the RVE. This idea has been introduced by [16] who studied the behavior of a GTN unit cell under uniaxial strain conditions. Since the void growth and coalescence at high stress triaxiality is the main microscopic mechanism of ductile fracture, this approach has been extended by [30–32] to take into account the local stress triaxiality as an internal variable of a cohesive model. They have determined the cohesive parameters dependence on the stress triaxiality by the numerical study of a plane strain or axisymmetric unit cell under different biaxial stress loadings. This approach has been further developed by [33,34] for the case of rate-dependent GTN-type model.

Following the idea that the traction–separation law should represent the failure behavior of a unit material cell, the present work proposes to derive a CZM for ductile materials from a micromechanical approach. The objective is to obtain a CZM whose the shape as well as the parameters directly derive from a bulk ductile damage model, namely here the GTN model. The present paper is organized as follows. The second section details the modeling and the derivation of the CZM. The third section is devoted to its numerical implementation in the XPER computer code. In a fourth section, the simulation of crack growth in a standard ferritic steel shows the relevance of the approach by comparison to available experimental data.

2. Cohesive zone model for ductile failure

2.1. GTN model

Let us recall that Gurson yield surface [6] is based on the analysis of a hollow sphere (domain Ω , porosity f) made of a homogeneous and incompressible plastic matrix obeying to a von Mises yield criterion (J2 plasticity, yield stress σ_0) and subjected to a homogeneous macroscopic strain rate $\dot{\mathbf{E}}$ on its outer boundary $\partial\Omega$, $\mathbf{v} = \dot{\mathbf{E}} \cdot \mathbf{x}$ on $\partial\Omega$, where \mathbf{v} is the velocity field and \mathbf{x} is the position vector. The effective dissipation potential corresponding to Gurson yield surface reads [6,35]:

$$\Phi^G(\dot{\mathbf{E}}) = \sigma_0 \int_f^1 \sqrt{\frac{4(\dot{E}_m)^2}{y^2} + (\dot{E}_{eq})^2} dy \quad (1)$$

where \dot{E}_m and \dot{E}_{eq} are respectively the hydrostatic and equivalent strain rates, $\dot{E}_m = (1/3) \text{tr } \dot{\mathbf{E}}$, $\dot{E}_{eq} = \sqrt{(2/3) \dot{\mathbf{E}}^d : \dot{\mathbf{E}}^d}$, $\dot{\mathbf{E}}^d = \dot{\mathbf{E}} - \dot{E}_m \mathbf{i}$ denotes the deviatoric part of the effective strain rate, and \mathbf{i} is the second-order identity tensor. A general expression of the integral (1) can be found in [35]:

$$\Phi^G(\dot{\mathbf{E}}) = \sigma_0 \dot{E}_{eq} [3\eta_{\dot{\mathbf{E}}} H(\eta_{\dot{\mathbf{E}}}, f) + D(\eta_{\dot{\mathbf{E}}}, f)] \quad (2)$$

with

$$H(\eta_{\dot{\mathbf{E}}}, f) = \frac{2}{3} \left(\text{arcsinh} \left(\frac{2\eta_{\dot{\mathbf{E}}}}{f} \right) - \text{arcsinh} (2\eta_{\dot{\mathbf{E}}}) \right) \quad \text{and} \quad D(\eta_{\dot{\mathbf{E}}}, f) = \sqrt{(2\eta_{\dot{\mathbf{E}}})^2 + 1} - \sqrt{(2\eta_{\dot{\mathbf{E}}})^2 + f^2} \quad (3)$$

where the effective strain rate triaxiality reads

$$\eta_{\dot{\mathbf{E}}} = \frac{\dot{E}_m}{\dot{E}_{eq}} \quad (4)$$

The macroscopic stress $\Sigma = \partial\Phi^G/\partial\dot{\mathbf{E}}$ is derived from the effective potential (2)

$$\Sigma_m = \sigma_0 H(\eta_{\dot{\mathbf{E}}}, f) \quad \text{and} \quad \Sigma_{eq} = \sigma_0 D(\eta_{\dot{\mathbf{E}}}, f) \quad (5)$$

where $\Sigma_m = (1/3) \text{tr } \Sigma$ is the hydrostatic stress, $\Sigma_{eq} = \sqrt{(3/2) \Sigma^d : \Sigma^d}$ the equivalent stress and $\Sigma^d = \Sigma - \Sigma_m \mathbf{i}$ the deviatoric part of Σ . Gurson yield criterion is thus obtained by eliminating the kinematic parameter $\eta_{\dot{\mathbf{E}}}$ between the hydrostatic and equivalent stresses in (5):

$$\phi^G(\Sigma, f) = \frac{\Sigma_{eq}^2}{\sigma_0^2} + 2f \cosh \left(\frac{3}{2} \frac{\Sigma_m}{\sigma_0} \right) - 1 - f^2 = 0 \quad (6)$$

Various modifications of the Gurson criterion have been progressively introduced in the literature to better fit unit-cell simulations or to take into account cavities interaction and coalescence, etc and can be summarized by the so-called Gurson–Tvergaard–Needleman (GTN) model [8]:

$$\phi^{\text{GTN}}(\Sigma, f) = \frac{\Sigma_{eq}^2}{\sigma_0^2} + 2q_1 f^* \cosh \left(\frac{3}{2} q_2 \frac{\Sigma_m}{\sigma_0} \right) - 1 - q_3 f^{*2} = 0 \quad (7)$$

where $q_1, q_2, q_3 = q_1^2$ are constants and f^* is an effective porosity related to the void coalescence:

$$f^* = \begin{cases} f & \text{for } 0 \leq f \leq f_c \\ f_c + \frac{f_u^* - f_c}{f_f - f_c} (f - f_c) & \text{for } f_c \leq f \end{cases} \quad (8)$$

where f_c is the porosity at onset of void coalescence, f_f is the fracture porosity, $f^*(f_f) = f_u^* = 1/q_1$. The following notation is introduced $k = (f_u^* - f_c)/(f_f - f_c)$. Isotropic hardening can be introduced by replacing σ_0 with $\sigma_y(\bar{\epsilon})$ in Eq. (7), where σ_y is the flow strength of the material surrounding the void. The scalar variable $\bar{\epsilon}$ is interpreted as an ‘average’ plastic strain of the matrix material surrounding the void. Its evolution is governed by an equivalent plastic work expression:

$$\Sigma : \dot{\mathbf{E}} = (1 - f) \sigma_y \dot{\bar{\epsilon}} \quad (9)$$

The evolution of the void volume fraction is given by

$$\dot{f} = \dot{f}_g + \dot{f}_n \quad (10)$$

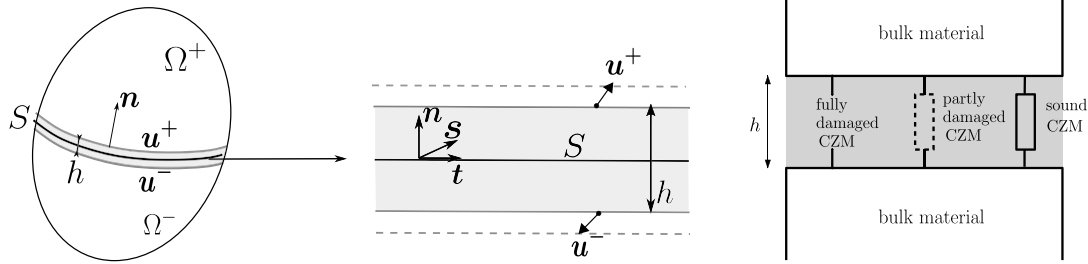


Fig. 1. Displacement jump across a localization band of thickness h . The ductile damage process is summarized inside this band with the help of a surface cohesive zone model having the same behavior as a bulk GTN model. The damage intensity corresponds to the effective porosity given in (8).

where \dot{f}_g is the void growth rate, derived from the conservation of mass

$$\dot{f}_g = (1 - f) \text{tr } \dot{E} \tag{11}$$

and where \dot{f}_n is the rate of void nucleation. In case of strain controlled nucleation, [36] suggest to approximate the nucleation of new cavities by a normal distribution

$$\dot{f}_n = A \dot{\epsilon} \quad \text{where} \quad A(\bar{\epsilon}) = \frac{f_N}{s_N \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2} \left(\frac{\bar{\epsilon} - \epsilon_N}{s_N}\right)^2\right) \tag{12}$$

where f_N is the volume fraction of void nucleating particles, ϵ_N is an average nucleation strain parameter and s_N is a standard deviation. By doing so, the rate of void nucleation depends on the ‘average’ plastic strain $\bar{\epsilon}$ and its time derivative.

2.2. Cohesive interface model

Let us consider that the material domain Ω is made of an elastic–plastic material composed of two regions, Ω^- and Ω^+ , separated by a strain localization band (unit normal vector \mathbf{n}), Fig. 1. Outside the localization band, the material follows a J2 plasticity model without damage. Ductile damage occurs only inside the strain localization band and its behavior is described by the GTN model (7). The thickness h of the localization band is small compared to a characteristic length of Ω . This narrow band is then modeled as a cohesive surface S between Ω^- and Ω^+ as usually done in problems of adhesive solids [37,38]. Designating by \mathbf{u}^+ and \mathbf{u}^- the respective values of the displacement fields at the boundaries of Ω^+ and Ω^- shared with S , the displacement jump across S is defined as:

$$[\mathbf{u}] = \mathbf{u}^+ - \mathbf{u}^- = [u_n]\mathbf{n} + [u_t]\mathbf{t} + [u_s]\mathbf{s} \tag{13}$$

in the local basis $(\mathbf{n}, \mathbf{t}, \mathbf{s})$ where \mathbf{t} and \mathbf{s} are two unit vectors defining the tangent plane. Following [37,39,40], the strain rate on the cohesive surface can be approximated with the help of a scaling rule:

$$\dot{E} \approx \frac{[\dot{\mathbf{u}}] \otimes \mathbf{n}}{h} = \frac{[\dot{u}_i]n_j + [\dot{u}_j]n_i}{2h} = \begin{bmatrix} \frac{[\dot{u}_n]}{h} & \frac{[\dot{u}_t]}{2h} & \frac{[\dot{u}_s]}{2h} \\ \frac{[\dot{u}_t]}{2h} & 0 & 0 \\ \frac{[\dot{u}_s]}{2h} & 0 & 0 \end{bmatrix} \tag{14}$$

All these softening effects occurring into the localization band are here summarized into a zero thickness cohesive surface. In the present work, the parameter h is thus more related to the thickness of the localization band than to the void spacing length as previously proposed in [28,31,32,41,42].

In such an approximation, the in-plane components of the strain rate are neglected. The hydrostatic part and the equivalent part of the strain rate read respectively

$$\dot{E}_m = \frac{1}{3} \frac{[\dot{u}_n]}{h}, \quad \dot{E}_{eq} = \frac{2}{3} \sqrt{\left(\frac{[\dot{u}_n]}{h}\right)^2 + \frac{3}{4} \frac{[\dot{u}_t]^2}{h^2} + \frac{3}{4} \frac{[\dot{u}_s]^2}{h^2}}$$

The strain rate triaxiality is thus obtained as

$$\eta_E = \frac{[\dot{u}_n]}{2\sqrt{[\dot{u}_n]^2 + \frac{3}{4}[\dot{u}_t]^2 + \frac{3}{4}[\dot{u}_s]^2}}$$

The strain rate triaxiality η_E is bounded by above by 1/2, limiting the void growth rate in Eq. (11). This is a strong limitation to develop surface cohesive model for ductile damage. This limitation is directly linked to the reduced kinematics of a surface. To overcome this limitation, two strategies can be considered.

First, information about the current loading state can be transferred from the volumetric domains Ω^+ and Ω^- to the cohesive zone S . The underlying hypothesis is that the loading state inside the cohesive band remains close to the nearest continuum elements adjacent to the cohesive band. This idea was introduced by [27], who proposed a cohesive law depending on the average of the accumulated plastic strain over a bulk finite element adjacent to the cohesive zone. This idea was further extended by [31] who introduced the cohesive parameters dependence on the stress triaxiality of a continuum element adjacent to the cohesive zone. In the latter, the evolution of cohesive parameters with respect to the stress triaxiality was identified by simulating the behavior of a plane strain element obeying to a GTN model under different biaxial loadings.

Second, the dependence of cohesive models on the stress–strain state can be improved by incorporating additional in-plane terms in the cohesive strain rate (14). [43] propose to determine these in-plane terms through the values at each side of the cohesive zone (so from the nearest volumetric elements) to enforce a continuity of the strain. In the present work, in order to enhance the range of stress and strain states affordable by the cohesive model, it is proposed to extend the cohesive kinematics by introducing an additional in-plane strain rate \dot{p} :

$$\dot{E} \approx \frac{[\dot{u}] \otimes_s n}{h} + \dot{p} (t \otimes_s t + s \otimes_s s) = \begin{bmatrix} \frac{[\dot{u}_n]}{h} & \frac{[\dot{u}_t]}{2h} & \frac{[\dot{u}_s]}{2h} \\ \frac{[\dot{u}_t]}{2h} & \dot{p} & 0 \\ \frac{[\dot{u}_s]}{2h} & 0 & \dot{p} \end{bmatrix} \quad (15)$$

This simple choice allows the strain-rate triaxiality η_E to range within $]-\infty, +\infty[$. The rate \dot{p} depends on the loading state provided by the volumetric finite element adjacent to the cohesive zone as presented in Section 3.

2.3. Traction–separation law

Since the local behavior on S is described by the GTN plasticity model, the surface stress vector is related to the strain rate

$$R = \Sigma \cdot n = \left(\Sigma_m t + \frac{2}{3} \frac{\Sigma_{eq}}{\dot{E}_{eq}} \dot{E}^d \right) \cdot n \quad (16)$$

with Σ_m and Σ_{eq} given by (5). A normalized stress tensor $\bar{\Sigma}$ is then defined and the stress vector R , or cohesive stress, reads

$$\bar{\Sigma} = \frac{1}{\sigma_y} \Sigma \quad \text{thus} \quad R = \sigma_y \bar{\Sigma} \cdot n \quad \text{where} \quad \bar{\Sigma} \cdot n = \begin{cases} \bar{\Sigma}_{nn} = \frac{1}{q_2} H(\chi) + \frac{4}{9} D(\chi) \frac{1}{\dot{E}_{eq}} \left(\frac{[\dot{u}_n]}{h} - \dot{p} \right) \\ \bar{\Sigma}_{nt} = \frac{1}{3} D(\chi) \frac{1}{\dot{E}_{eq}} \frac{[\dot{u}_t]}{h} \\ \bar{\Sigma}_{ns} = \frac{1}{3} D(\chi) \frac{1}{\dot{E}_{eq}} \frac{[\dot{u}_s]}{h} \end{cases} \quad (17)$$

and

$$\dot{E}_{eq} = \frac{2}{3} \sqrt{\left(\frac{[\dot{u}_n]}{h} - \dot{p} \right)^2 + \frac{3}{4} \frac{[\dot{u}_t]^2}{h^2} + \frac{3}{4} \frac{[\dot{u}_s]^2}{h^2}}, \quad \eta_E = \frac{\frac{[\dot{u}_n]}{h} + 2\dot{p}}{2 \sqrt{\left(\frac{[\dot{u}_n]}{h} - \dot{p} \right)^2 + \frac{3}{4} \frac{[\dot{u}_t]^2}{h^2} + \frac{3}{4} \frac{[\dot{u}_s]^2}{h^2}}} \quad (18)$$

where χ stands for the couple of variables $\chi = \{\eta_E, q_1 f^*(f)\}$. Eq. (17) shows that this cohesive formulation can be used in 3D since the stress vector is fully described and under mixed mode conditions since all components of the displacement jump have an independent role. The effect of the strain-rate triaxiality is taken into account through the variable χ in functions H and D .

The effective porosity f^* is expressed in terms of porosity f with (8). The evolution law of porosity (10) (including nucleation) reads

$$\dot{f} = (1 - f) \left(\frac{[\dot{u}_n]}{h} + 2\dot{p} \right) + A \dot{\epsilon} \quad (19)$$

and hardening is estimated through the average plastic strain $\bar{\epsilon}$ using (9)

$$\dot{\epsilon} = \frac{1}{1 - f} \left(\bar{\Sigma}_{nn} \frac{[\dot{u}_n]}{h} + \bar{\Sigma}_{nt} \frac{[\dot{u}_t]}{h} + \bar{\Sigma}_{ns} \frac{[\dot{u}_s]}{h} + (\bar{\Sigma}_{tt} + \bar{\Sigma}_{ss}) \dot{p} \right) \quad (20)$$

$$\bar{\Sigma}_{tt} = \bar{\Sigma}_{ss} = \frac{1}{q_2} H(\chi) - \frac{2}{9} D(\chi) \frac{1}{\dot{E}_{eq}} \left(\frac{[\dot{u}_n]}{h} - \dot{p} \right) \quad (21)$$

It is worth noting that the evolution law of $\bar{\epsilon}$ is independent of the hardening law $\sigma_y(\bar{\epsilon})$. Moreover we underline that this GTN traction–separation law can simulate ductile fracture as soon as the porosity rate \dot{f} is not vanishing. In other words, there is no need for macroscopic crack like defect to initiate and propagate a ductile crack with this model. We chose in the sequel to illustrate the ability of the model a compact tension specimen but other situations can be treated as for example notched tensile bars.

Table 1
Material parameters for a ferritic steel StE460 (German designation) from [32].

Elasticity	Y	ν						
	210 GPa	0.3						
Hardening	σ_0	K	n					
	470 MPa	35.0	4.5					
GTN	q_1	q_2	f_0	k	f_c	f_N	ϵ_N	s_N
	1.5	1.0	0.0025	3.4	0.021	0.02	0.3	0.1

2.4. Time integration of the constitutive equations

For sake of simplicity, the dependence in time is omitted for the current time t , and thus E , f and $\bar{\epsilon}$ denote respectively the strain, the porosity and the average plastic strain at time t . Their values at the previous time step $t - \delta t$ are denoted by a superscript $(t - \delta t)$, $E^{(t-\delta t)}$, $f^{(t-\delta t)}$ and $\bar{\epsilon}^{(t-\delta t)}$. The strain increment $\delta E = E - E^{(t-\delta t)}$ is introduced. Using an explicit scheme, the time discretized equations thus read

$$f = f^{(t-\delta t)} + (1 - f^{(t-\delta t)}) (\delta E_{nn} + 2 \delta p) + A(\bar{\epsilon}^{(t-\delta t)}) \delta \bar{\epsilon} \tag{22}$$

$$\bar{\epsilon} = \bar{\epsilon}^{(t-\delta t)} + \delta \bar{\epsilon} \quad \text{with} \quad \delta \bar{\epsilon} = \frac{\bar{\Sigma}_{nn} \delta E_{nn} + 2 \bar{\Sigma}_{nt} \delta E_{nt} + 2 \bar{\Sigma}_{ns} \delta E_{ns} + \bar{\Sigma}_{tt} \delta p + \bar{\Sigma}_{ss} \delta p}{1 - f^{(t-\delta t)}} \tag{23}$$

and

$$\left\{ \begin{array}{l} \bar{\Sigma}_{nn} = \frac{1}{q_2} H(\chi^{(t-\delta t)}) + \frac{4}{9} D(\chi^{(t-\delta t)}) \frac{\delta E_{nn} - \delta p}{(\delta E)_{eq}} \\ \bar{\Sigma}_{nt} = \frac{2}{3} D(\chi^{(t-\delta t)}) \frac{\delta E_{nt}}{(\delta E)_{eq}} \\ \bar{\Sigma}_{ns} = \frac{2}{3} D(\chi^{(t-\delta t)}) \frac{\delta E_{ns}}{(\delta E)_{eq}} \\ \bar{\Sigma}_{tt} = \bar{\Sigma}_{ss} = \frac{1}{q_2} H(\chi^{(t-\delta t)}) - \frac{2}{9} D(\chi^{(t-\delta t)}) \frac{\delta E_{nn} - \delta p}{(\delta E)_{eq}} \\ \eta_{\dot{E}} = \frac{(\delta E)_m}{(\delta E)_{eq}} \end{array} \right. \tag{24}$$

where $\chi^{(t-\delta t)}$ stands now for $\{\eta_{\dot{E}}, q_1 f^*(f^{(t-\delta t)})\}$. Thus, knowing the strain tensor at time t , together with the strain, porosity and average strain at time $t - \delta t$, the porosity and the average strain are updated using Eqs. (22)–(24). Then components of the cohesive stress are evaluated straightforwardly at time t

$$\left\{ \begin{array}{l} R_n = \sigma_y(\bar{\epsilon}) \left(\frac{1}{q_2} H(\chi) + \frac{4}{9} D(\chi) \frac{\delta E_{nn} - \delta p}{(\delta E)_{eq}} \right) \\ R_t = \sigma_y(\bar{\epsilon}) \frac{2}{3} D(\chi) \frac{\delta E_{nt}}{(\delta E)_{eq}} \\ R_s = \sigma_y(\bar{\epsilon}) \frac{2}{3} D(\chi) \frac{\delta E_{ns}}{(\delta E)_{eq}} \end{array} \right. \tag{25}$$

2.5. Traction–separation behavior under various loadings

In order to illustrate the potentialities of the corresponding GTN traction–separation law, we use a Swift-like model to describe the hardening of the material

$$\sigma_y(\bar{\epsilon}) = \sigma_0 (1 + K \bar{\epsilon})^{1/n} \tag{26}$$

where the yield stress σ_0 and the constants K and n are set to fit the experimental plastic flow data given by [32]. The material parameters of the study are specified in Table 1, where Y denotes the Young modulus and ν the Poisson ratio.

First, let us consider a constant axisymmetric strain rate with the following strain

$$E = \begin{bmatrix} \dot{E}_{nn} & 0 & 0 \\ 0 & r \dot{E}_{nn} & 0 \\ 0 & 0 & r \dot{E}_{nn} \end{bmatrix} \times t \quad \text{and} \quad \frac{1}{2} \leq r < 1, \dot{E}_{nn} > 0 \text{ kept constant} \tag{27}$$

The strain-rate triaxiality reads

$$\eta_{\dot{E}} = \frac{1 + 2r}{2(1 - r)}$$

Note that since the loading is proportional, the strain-rate triaxiality corresponds exactly to the strain triaxiality $\eta_E = E_m/E_{eq}$. Prescribing the value of $r = -1/2, -1/3, 0, 1/2, 2/3$ corresponds to an imposed strain triaxiality $\eta_E = 0, 0.125, 0.5, 2, 3.5$. The evolution of the normal cohesive stress R_n/σ_0 (or Σ_{nn}/σ_0) with respect to the normal opening $[u_n]/h$ (or equivalently with respect to the strain component E_{nn}) is plotted in Fig. 2 (left) for the cohesive model and for a GTN material point under various strain triaxialities. The response of the GTN material point has been evaluated using the implicit algorithm of [44] dedicated to a class of pressure-dependent plasticity models.

These curves represent the cohesive traction–separation response corresponding to a unit cell made of a GTN material with a Swift hardening model. Since no elasticity is incorporated in the cohesive model at this stage, the corresponding traction–separation law is *extrinsic*, by opposition to *intrinsic* models where the cohesive response has an initial slope. Contrarily, the GTN material point response presents an initial slope because elasticity has been taken into account in the resolution of the GTN model. This explains the slight difference between the cohesive model and the GTN material point responses particularly highlighted for $\eta_E = 0.125$ in Fig. 2. Here, in the cohesive model, no crack tip opening is observed as long as the cohesive stress does not reach a given threshold. When the strain triaxiality is vanishing, this threshold is lower than the yield stress of the underlying matrix σ_0 . This threshold is about 3–4 times the yield stress when the strain triaxiality is larger than 0.1. Roughly speaking, for non vanishing strain triaxiality, if a ductile cohesive zone has a toughness R_0 , the surface damage occurs when the remote loading reaches about $R_0/3$ or $R_0/4$. This simple result is compatible with other numerical observations [45].

Moreover, when the damage occurs, the cohesive stress decreases rapidly with respect to the crack opening and the ductile CZM is rather brittle for such non vanishing strain triaxiality. The cohesive ductility decreases when the strain triaxiality increases.

Second, let us consider a prescribed direction of axisymmetric stress:

$$\Sigma(t) = k(t) \Sigma^o = k(t) \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & r^* & 0 \\ 0 & 0 & r^* \end{bmatrix} \quad \text{and } \frac{1}{2} \leq r^* < 1 \text{ kept constant} \quad (28)$$

where Σ^o is a known tensor prescribing the direction of the stress, $k(t)$ is an unknown scalar defining the amplitude of the stress. The procedure of [46] is applied. It consists in finding $E(t)$ and $k(t)$ from the following set of equations:

$$\begin{cases} \Sigma(t) = k(t) \Sigma^o & \text{constitutive equations} \\ \Sigma^o : E(t) = x \end{cases} \quad (29)$$

where x is a prescribed loading parameter. Here, a constant and positive value is prescribed for \dot{x} and the evolution for the loading parameter is $x = \dot{x}t$. The stress triaxiality reads

$$\eta_\Sigma = \frac{\Sigma_m}{\Sigma_{eq}} = \frac{1 + 2r^*}{3(1 - r^*)}$$

Since the stress is imposed to be axisymmetric, the strain is also axisymmetric. Moreover, the stress triaxiality η_Σ is prescribed. At the beginning of each time step, the value of E_{nn} is increased and the increment δE_{nn} reads $E_{nn} - E_{nn}^{(t-\delta t)}$. The increment of p (or E_{tt}), denoted by δp , is searched such that:

$$\eta_\Sigma = \frac{1}{q_2} \frac{H(\eta_{\delta E}, q_1 f^*(f^{(t-\delta t)}))}{D(\eta_{\delta E}, q_1 f^*(f^{(t-\delta t)}))} \quad \text{with } \eta_{\delta E} = \frac{(\delta E)_m}{(\delta E)_{eq}} \quad (30)$$

Eq. (30) is solved by using a Newton–Raphson algorithm, leading to an updated value for $\eta_{\delta E}$. The value of δp can thus be calculated by relationships presented in Appendix A, leading to an updated value for p . This is performed at the beginning of each time step of the explicit integration scheme presented in Section 2.4. The evolution of R_n/σ_0 as a function of E_{nn} (or $[u_n]/h$) from the cohesive model is plotted in Fig. 2 (right) for various stress triaxialities. Again, the corresponding cohesive response is *extrinsic* and the cohesive ductility decreases when the strain triaxiality increases, but the cohesive model appears more ductile for this type of loadings. The peak stress is higher than the initial cohesive threshold and corresponds to the critical porosity f_c .

For both type of loadings, Fig. 2 illustrates the high impact of the stress and strain triaxialities on the evolution of the normal cohesive stress. The cohesive strength and the cohesive energy (area under the curve) are strongly dependent on the strain and stress triaxialities, Fig. 3. The greater the strain triaxiality, the brittle the cohesive zone: the strength increases with respect to the strain triaxiality while the cohesive energy decreases. Same type of results were already pointed out by [31] and as expected, damage is hard to develop at very low triaxiality. The maximal normal stress that the cohesive zone can tolerate is reached for a strain triaxiality about 1/2. This lack of damage for low triaxiality loadings is a limitation of the original Gurson model. Nevertheless, note that the model can predict damage for intermediate triaxiality loadings with shear. To illustrate this point, let us consider the following loading combining a normal separation $[u_n]$ and a tangential separation $[u_t]$ (with $E_{nn} = [u_n]/h$ and $E_{nt} = [u_t]/(2h)$):

$$E = \begin{bmatrix} \dot{E} & \dot{E} & 0 \\ \dot{E} & r\dot{E} & 0 \\ 0 & 0 & r\dot{E} \end{bmatrix} \times t \quad \text{with } \dot{E} > 0 \text{ kept constant} \quad (31)$$

Prescribing the value of $r = -0.5, -0.23, 0.4, 1.8$ corresponds to an imposed strain triaxiality $\eta_E \approx 0, 0.125, 0.5, 1.2$. The evolution of R_n/σ_0 (or R_t/σ_0) as a function of $[u_n]/h$ (or $[u_t]/(2h)$) from the cohesive model is plotted in Fig. 4. Imposing a tangential separation leads to a non-zero tangential stress vector which exhibits damage for intermediate triaxialities.

Again, note that there is no fitting parameter in the obtained cohesive model. Once the GTN parameters are known, the cohesive model is fully defined. This is a major feature of the proposed cohesive model.

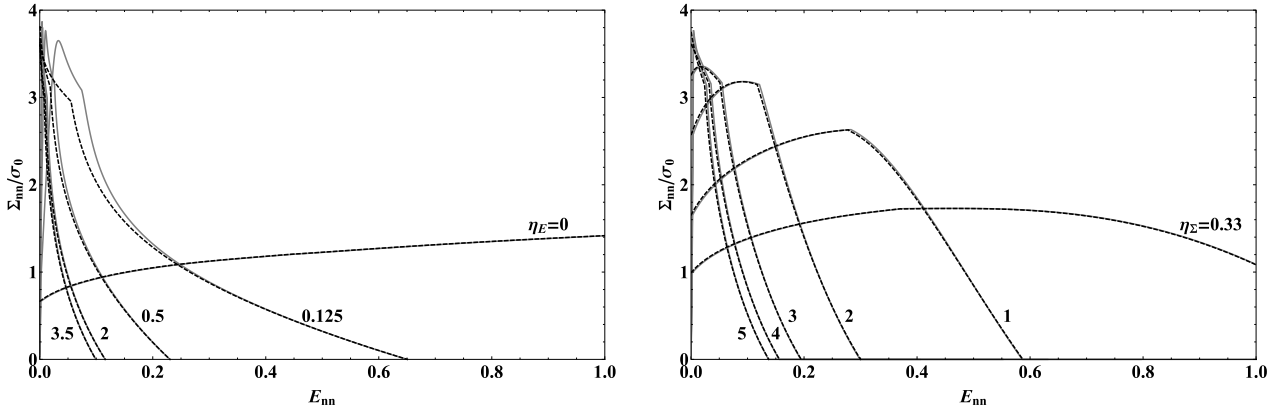


Fig. 2. Response of the cohesive model (dashed line) and a GTN material point (solid line) for (left) various strain triaxalities (axisymmetric strain) and (right) various stress triaxalities (axisymmetric stress).

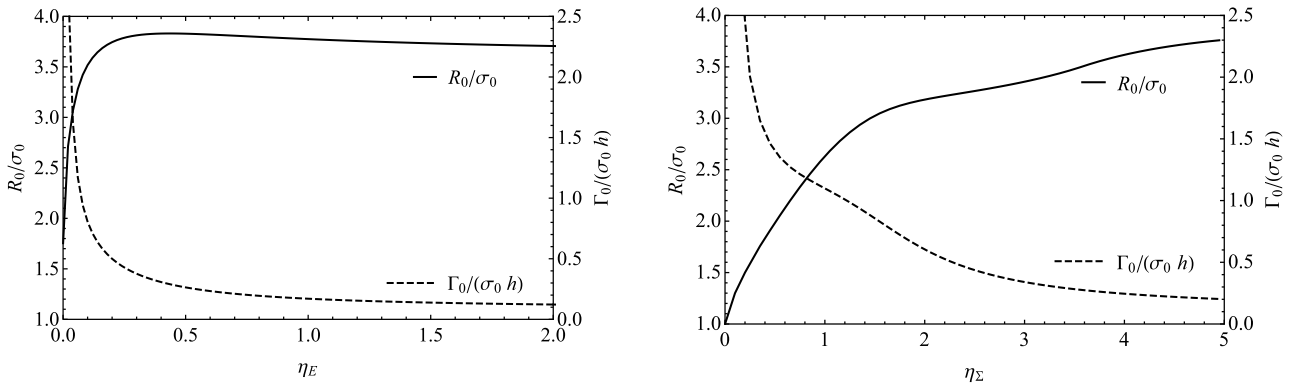


Fig. 3. Dependence of the cohesive strength (left axis, black line) and of the cohesive energy (right axis, dashed line) on the strain triaxiality η_E (Left) or on the stress triaxiality η_Σ (Right).

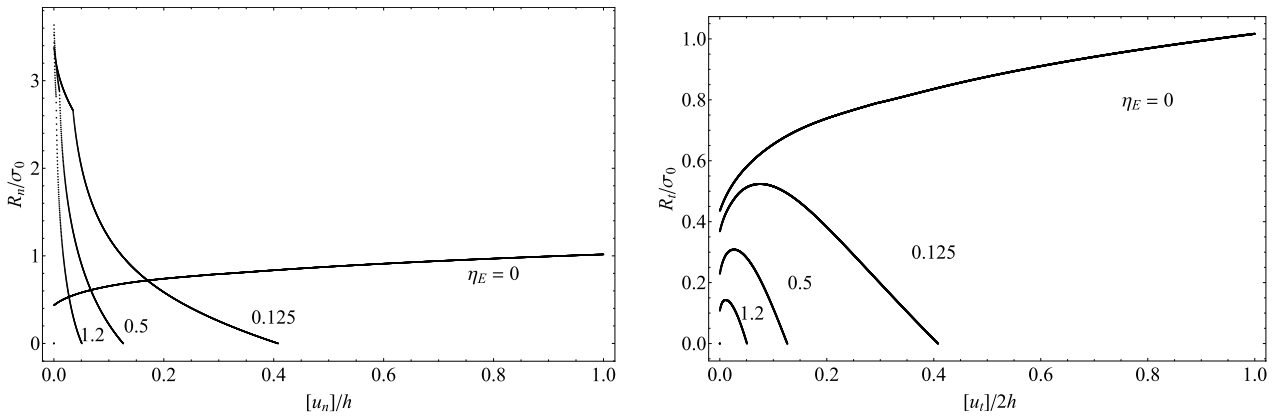


Fig. 4. Response of the cohesive model under a mixed mode loading (31) for various strain triaxalities.

3. Numerical implementation into a cohesive–volumetric finite element formulation

The numerical simulations are performed using the XPER software dedicated to the simulation of fracture dynamics of heterogeneous materials [47,48]. This computer code proposes a periodic homogenization framework under small or finite strain theories, but it can also be used for more general structure computations. XPER implementation involves a multi-contact modeling strategy based on the Non-Smooth Contact Dynamics (NSCD) method where cohesive models are introduced as mixed boundary conditions between each volumetric finite element. Each element or either a group of elements of the mesh can be considered as an independent body and the interface between bodies follows a frictional CZM with no regularization nor penalization. CZM are introduced by a slight modification of Signorini–Coulomb conditions [45,49]. The bulk behavior inside each element corresponds to

Table 2

Expressions of in-plane strain rate components $\dot{\rho}$ depending on crack tip opening rate $[\dot{u}]$ and surrounding volumetric strain rate triaxiality η_E^{vol} .

η_E^{vol}	$\dot{\rho}([\dot{u}], \eta_E^{\text{vol}})$
$\eta_E^{\text{vol}} < 0$	$\dot{\rho} = -\frac{[\dot{u}_n]}{2h}$
$0 \leq \eta_E^{\text{vol}} < 1$ and $\eta_E^{\text{vol}} > 1$	$\dot{\rho} = \frac{2\left(\eta_E^{\text{vol}}\right)^2 + 1}{2\left(\left(\eta_E^{\text{vol}}\right)^2 - 1\right)} \frac{[\dot{u}_n]}{h} - \frac{ \eta_E^{\text{vol}} \sqrt{9\frac{[\dot{u}_n]^2}{h^2} + 3(1 - \left(\eta_E^{\text{vol}}\right)^2)\left(\frac{[\dot{u}_t]^2}{h^2} + \frac{[\dot{u}_s]^2}{h^2}\right)}}{2\left(\left(\eta_E^{\text{vol}}\right)^2 - 1\right)}$
$\eta_E^{\text{vol}} = 1$	$\dot{\rho} = \frac{1}{4} \frac{[\dot{u}_n]^2 + [\dot{u}_t]^2 + [\dot{u}_s]^2}{[\dot{u}_n]h}$

a hardening behavior without any damage. The damage is modeled at the interface between bodies by the cohesive law. Moreover, the NSCD method avoids instabilities arising with softening models, see [45,50] for details.

For the numerical implementation, one has first to specify how the variable $\dot{\rho}$ is updated during the computation. Then, some changes have been performed regarding the cohesive zone model. Indeed, as XPER typically uses *intrinsic* cohesive zone models, a modification of the cohesive model is proposed hereafter to change it from extrinsic to intrinsic. Furthermore, as in a fully general structure computation the loading may be followed by an unloading situation, it has to be introduced in the cohesive model. Thus, the cohesive model is enriched to ensure that the unloading case is properly handled. Finally, the model has been implemented under the assumption of proportional loading and the cohesive stress given by (25) is estimated using the total cohesive strain E instead of the strain increment tensor δE . As in the deformation theory, this approach is valid under the restrictive case of a monotonous and proportional loading, but from numerical standpoint allows a simpler numerical integration of the cohesive model.

3.1. Estimate of the in-plane strain rate $\dot{\rho}$

The strain rate $\dot{\rho}$ is estimated by considering information coming from the volumetric elements adjacent to the cohesive zone. Among several possibilities, it is chosen here to compute $\dot{\rho}$ by maintaining the equality between the strain-rate triaxiality η_E in the cohesive zone and the strain-rate triaxiality η_E^{vol} computed from the stress state in a volumetric element adjacent to the cohesive zone. From the normality rule, GTN model leads to:

$$\dot{E} = \lambda \left(\frac{q_1 q_2 f^*}{\sigma_y} \sinh \left(\frac{3}{2} q_2 \frac{\Sigma_m}{\sigma_y} \right) \mathbf{i} + \frac{3}{\sigma_y^2} \Sigma^d \right) \quad \text{with } \lambda > 0 \quad (32)$$

Substituting in this expression the average stress tensor over the volumetric slave element (denoted by Σ^{vol}) adjacent to the cohesive zone, the corresponding strain rate triaxiality reads

$$\eta_E^{\text{vol}} = \frac{q_1 q_2 f^* \sinh \left(\frac{3}{2} q_2 \frac{\Sigma_m^{\text{vol}}}{\sigma_y} \right)}{2 \frac{\Sigma_{\text{eq}}^{\text{vol}}}{\sigma_y}} \quad (33)$$

From (15), the strain-rate triaxiality in the cohesive zone reads:

$$\eta_E = \frac{\frac{[\dot{u}_n]}{h} + 2\dot{\rho}}{2\sqrt{\left(\frac{[\dot{u}_n]}{h} - \dot{\rho}\right)^2 + \frac{3}{4} \frac{[\dot{u}_t]^2}{h^2} + \frac{3}{4} \frac{[\dot{u}_s]^2}{h^2}}} \quad (34)$$

By equating (33) and (34) the strain rate $\dot{\rho}$ is determined. It appears that $\dot{\rho}$ evolves as a function of the cohesive kinematics and the stress state of the adjacent volumetric slave element. Only the case $[\dot{u}_n] > 0$, corresponding to a positive loading, is considered here (the unloading case $[\dot{u}_n] < 0$ will be separately treated in Section 3.3) and different expressions for $\dot{\rho}$ are determined (see Appendix A for a detailed description). The selected expressions are reported in Table 2.

From the C(T) test simulations presented in Section 4, it was observed that the resulting triaxiality η_E^{vol} decreases when increasing the damage in the cohesive zone. Since the model does not predict any damage for low triaxiality, the rupture is artificially delayed. To address this issue, the volumetric stress Σ^{vol} is transferred to the cohesive zone up to the onset of coalescence (when f reaches f_c). Over the void coalescence, the value of Σ^{vol} is kept constant during the post-coalescence stage and the stress triaxiality does not evolve anymore, see Fig. 9 in the sequel.

3.2. Intrinsic cohesive zone model

We propose here a simple manner to convert an extrinsic CZM to an intrinsic one. The stress vector \mathbf{R} is multiplied by a positive increasing function that rapidly tends to 1 with respect to the crack opening. The resulting stress vector is denoted by $\mathbf{R}^{(int)}$:

$$\mathbf{R}^{(int)} = \begin{cases} R_n^{(int)} = \left(1 - \exp\left(-\alpha_n \frac{[u_n]}{h}\right)\right) \times R_n \\ R_t^{(int)} = \left(1 - \exp\left(-\alpha_t \frac{|[u_t]|}{h}\right)\right) \times R_t \\ R_s^{(int)} = \left(1 - \exp\left(-\alpha_s \frac{|[u_s]|}{h}\right)\right) \times R_s \end{cases} \quad (35)$$

The initial stiffness is calibrated through the parameters α_n , α_t , and α_s that have been calculated with the help of Eqs. (B.4), (B.8) and (B.9) given in Appendix B.

3.3. Unloading case

Since local unloading can occur during a crack growth in a fully general structure computation, one need to specify the behavior of the cohesive zone model during unloading taking into account the irreversibility of the damage process. A criterion has to be defined to distinguish loading state and unloading state. It is chosen to handle the unloading in each direction separately. It means that an unloading can occur in one direction while the other directions are still loaded. In the normal direction, unloading occurs if:

$$[u_n]^{(t)} - [u_n]^{(t-\delta t)} < 0 \quad (36)$$

For the tangential directions, unloading occurs respectively in t or s directions if:

$$|[u_t]^{(t)}| - |[u_t]^{(t-\delta t)}| < 0 \quad \text{or} \quad |[u_s]^{(t)}| - |[u_s]^{(t-\delta t)}| < 0 \quad (37)$$

One has also to define the behavior of the cohesive zone during unloading. The maximum values of separation in each direction that have occurred during the loading process are introduced to take into account the loading history in the cohesive zone and the irreversibility of the damage process

$$[u_i]_{\max} = \max_{0 \leq \tau \leq t} |[u_i](\tau)| \quad \text{with } i = n, t, s \quad (38)$$

Following [51], the unloading behavior is assumed to be an elastic unloading up to the origin and a further elastic reloading also:

$$\bar{\mathbf{R}} = (R_n^{(int)})_{\max} \frac{[u_n]}{[u_n]_{\max}} \mathbf{n} + (R_t^{(int)})_{\max} \frac{[u_t]}{[u_t]_{\max}} \mathbf{t} + (R_s^{(int)})_{\max} \frac{[u_s]}{[u_s]_{\max}} \mathbf{s} \quad (39)$$

where the $(R_i^{(int)})_{\max}$ are the components of the cohesive stress $\mathbf{R}^{(int)}$ evaluated at the maximal opening $[u_i]_{\max}$, $i = n, t, s$. The unloading rule described in (39) is illustrated in Fig. 5. For sake of simplicity, the stress vector $\bar{\mathbf{R}}$ is simply denoted by \mathbf{R} in Fig. 5 and in the next section. The unloading behavior is then completed by assuming the irreversibility of the damage and the hardening during the loading process:

$$\forall \tau \in [0, t], \quad \dot{f}(\tau) \geq 0 \quad \text{and} \quad \dot{\bar{\epsilon}}(\tau) \geq 0 \quad (40)$$

From a practical point of view, two additional tests are performed in the integration scheme to meet the conditions (40):

$$\text{if } f < f^{(t-\delta t)} \quad \text{then } f = f^{(t-\delta t)} \quad \text{and} \quad \text{if } \bar{\epsilon} < \bar{\epsilon}^{(t-\delta t)} \quad \text{then } \bar{\epsilon} = \bar{\epsilon}^{(t-\delta t)} \quad (41)$$

The general equations of the cohesive zone model are summarized in Appendix C. It is worth noting that this elastic unloading is not really realistic. During an unloading voids closure can occur involving some compressive plastic effects. This effect is not taken into account here but a simple elastic unloading allows to avoid spurious effects when unloading of CZM arises.

4. Application: simulation of compact tensile tests

The cohesive zone model is applied to simulate crack growth in a compact tension C(T) specimen under the plane strain conditions. The objective here is to illustrate the ability of the new cohesive zone model to simulate crack growth. Full 3D simulations are left for future work. The material under consideration is a ferritic steel StE460 (German designation) for which experimental data of crack growth tests and parameters for the GTN model have already been reported in many works [30,32,52,53]. The material parameters are reported in Table 1. The material surrounding the cohesive zones is an elastic-plastic solid with hardening law (26), identical to the matrix surrounding the voids in the GTN analysis.

A material length scale of $\Lambda = 200 \mu\text{m}$ has been used with these material properties in [32,53], as a typical value for the ductile fracture in ferritic steels. In these papers, the numerical simulations are performed on one half of the specimen making use of the symmetry boundary conditions. The cohesive properties (energy Γ_0 and strength R_0) used to model the half of the process zone were calibrated on a single element of size $\Lambda \times \Lambda$ with the GTN model representing a unit cell of material. Thus, the total cohesive

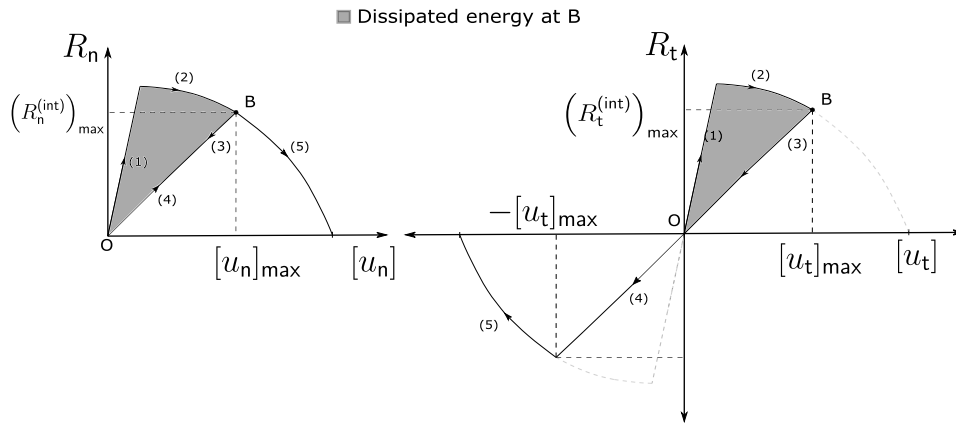


Fig. 5. Illustration of the unloading rule. (1) initial loading, (2) loading (softening), (3) unloading, (4) reloading, (5) loading (softening). (a) normal direction, (b) tangential direction.

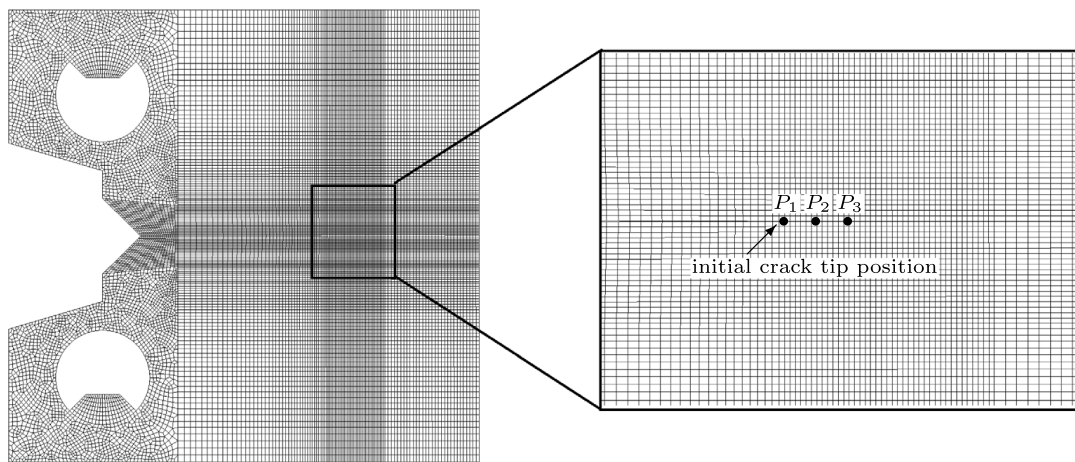


Fig. 6. C(T) specimen mesh with mesh size at the crack tip $l_{\text{mesh}} = 200 \mu\text{m}$. Three positions ahead of the crack tip: P_1 at initial crack tip, P_2 one millimeter ahead, P_3 two millimeter ahead.

energy per crack increment is $2\Gamma_0$. Here, the numerical simulations are performed on a full specimen and since the dissipated energy in a single element is proportional to the size of the element, the parameter h is chosen as the size of a square cell of area $2A^2$, with $h = \sqrt{2} \times 200 \mu\text{m}$, here overestimated by $h \approx 300 \mu\text{m}$. The C_n and C_t parameters are set to 10^{18} Pa/m in order to respect the criterion $C_n = C_t > 21Y/l_{\text{mesh}}$ theoretically derived by [54] even for the smallest mesh size used in this paper $l_{\text{mesh}} \approx 50 \mu\text{m}$.

The dimensions of the standard C(T) side-grooved specimen used for the tests are: $W = 50 \text{ mm}$ (width), $a_0/W = 0.59$ (initial relative crack length), $B = 25 \text{ mm}$ (thickness), $B_n = 19 \text{ mm}$ (net thickness between side grooves). The experimental so-called R -Curve in terms of $J - \Delta a$ from these tests are reported in [30,32,52,53].

The simulations are performed with two-dimensional 4 nodes linear plane strain $Q1$ elements and two contact nodes per cohesive zones are introduced (no significant interpenetration even in case of local rotation). The specimen is located in the x - y plane. The finite element mesh is depicted on Fig. 6. Since the crack path is known, cohesive zones are only put along the line in front of the crack tip, assuming pure mode I crack propagation. The model thus contains a series of cohesive elements located along a line in front of the crack tip which is taken to be initially sharp. The mesh is refined in front of the crack tip, over an initial surface $8 \text{ mm} \times 8 \text{ mm}$, and the bulk elements in this central zone have the initial dimension $l_{\text{mesh}} \times l_{\text{mesh}}$. A coarser mesh is used out of this zone. Information concerning the mesh are specified in Table 3. The two circular holes are partially filled with a purely elastic material (same Young modulus and Poisson ratio as specified in Table 1) in order to apply the loading without any bias on the local shear stress. The loading consists in imposing the vertical component along the y axis of the velocity to \dot{U}_y for the upper part of the specimen and to $-\dot{U}_y$ for the lower part of the specimen. The calculation are made using an explicit finite element solver with an implicit contact resolution, see [48] for details. Since softening behaviors induce instabilities, a dynamical formulation is here employed, again see [48]. This formulation however requires very small time steps (δt about 10^{-9} s to 10^{-8} s). Since instantaneous behavior laws are invoked, a high velocity is prescribed ($\dot{U}_y = 0.1 \text{ m.s}^{-1}$) in order to counterbalance the small time step and run the simulations in a reasonable time. The mass density of the material is set to $7.8 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$.

Table 3
Mesh size and number of elements.

l_{mesh}	Number of elements in the central zone	Total number of elements
200 μm	1600	20220
150 μm	2809	26198
100 μm	6400	38020
50 μm	25000	112638

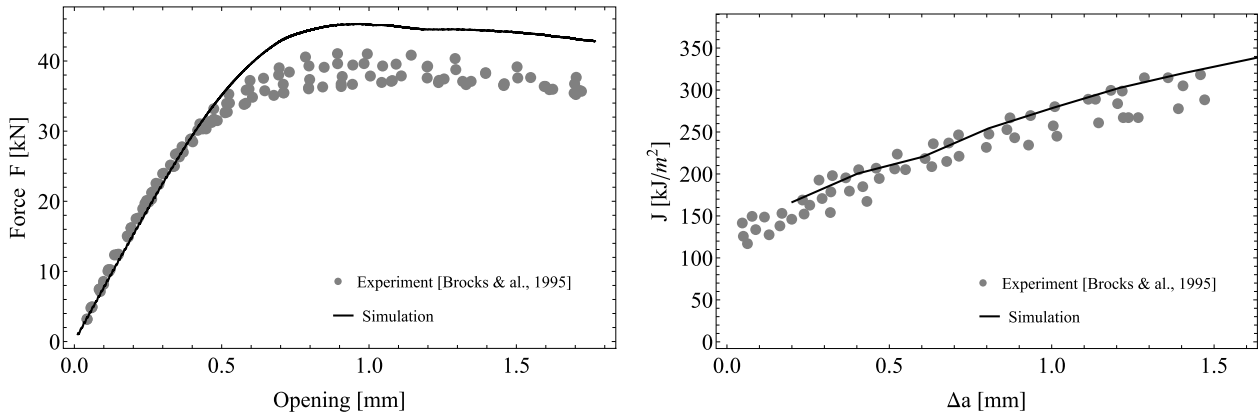


Fig. 7. Cohesive–volumetric finite element simulation (thick lines) vs experiments (gray points). (Left) Overall response: Load F vs opening displacement v , experiments of [55]. (Right) Crack growth resistance curve: J -integral vs crack extension Δa , experiments of [55].

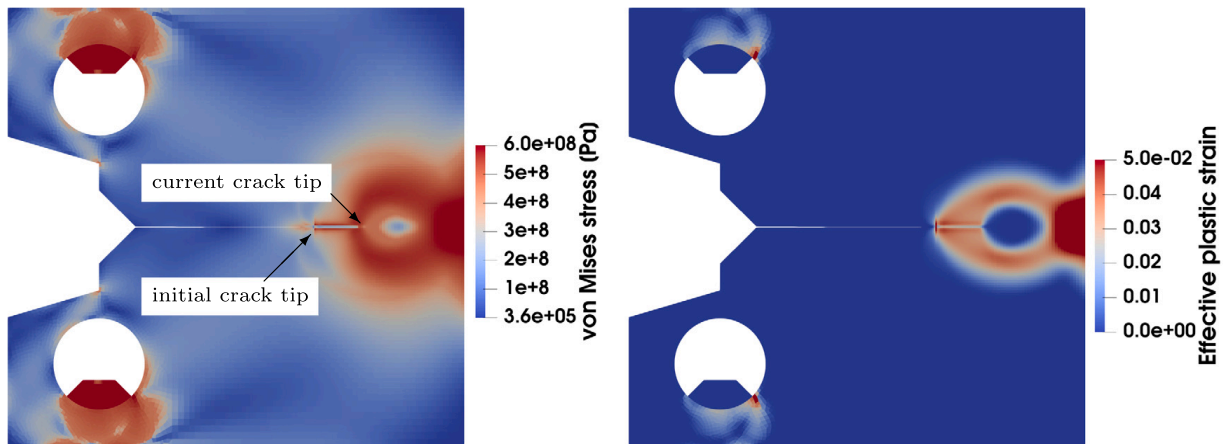


Fig. 8. Equivalent von Mises stress field (left) and cumulated plastic strain field (right) at crack length $\Delta a = 6$ mm.

4.1. Results

The numerical overall response of the C(T) is compared in Fig. 7 (left) to experimental data of [55]. Since the simulations are computed in 2D under plane strain assumption and the specimen is side grooved, the effective thickness $B_{\text{eff}} = \sqrt{B \times B_n}$ is considered for the calculation of the resulting forces, see [55]. The overall agreement is good since there is no parameter to adjust. The crack growth resistance curve is also well predicted. The J -integral versus crack extension Δa is evaluated using ASTM E1820 formula [56] and compared to experimental data of [30] in Fig. 7 (right). The numerical model is found to be in reasonable accordance with the experiments.

During the crack propagation, plasticity develops in the vicinity of the crack tip where tension occurs and at the free boundary ahead of the crack tip where intense compressible loadings are supported, see Fig. 8. The von Mises stress field and the cumulated plastic strain field thus exhibit non trivial spatial structures in the vicinity of the crack tip. The resulting stress and strain triaxiality fields also exhibit complex spatial structure.

As expected, the local CZM that drives the crack propagation depends on this spatial distribution of the triaxiality fields and thus on the position ahead of the crack tip, Fig. 9. Since the evolution of local stress triaxiality with respect to the overall loading is not the same at point P_1 where the crack propagation initiates than at point P_2 where the crack propagation reaches a steady state, the associated local cohesive response is also not the same. Point P_3 is in the same steady state as point P_2 , its local response is the same as P_2 and thus not plotted on the figure. It is readily to see that more cohesive energy is needed to initiate the crack propagation

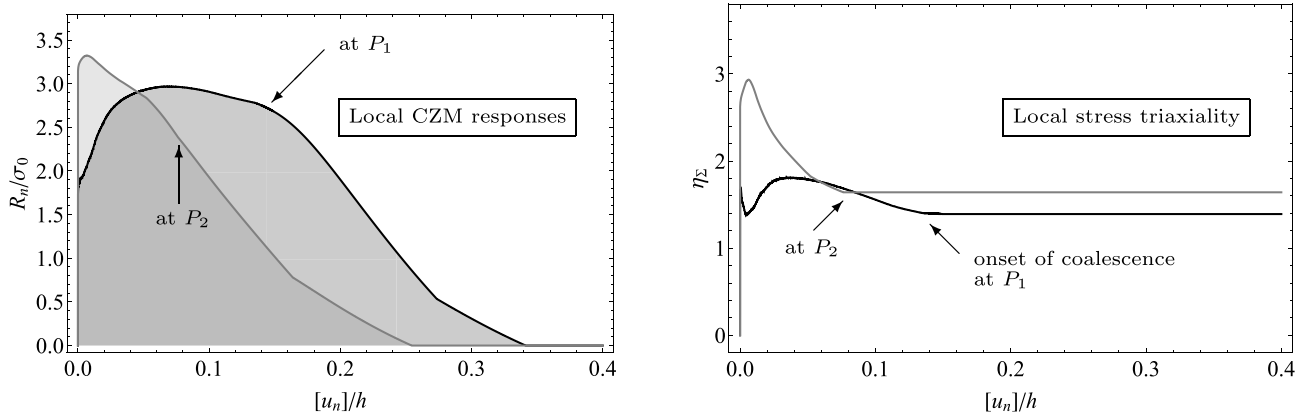


Fig. 9. The local cohesive responses at point P_1 (initial crack tip) and P_2 (1 mm ahead of the crack tip) are different (left) since the local stress triaxiality η_Σ does not evolve as the same manner at these points during the macroscopic loading (right). The stress triaxiality is fixed to a constant value at the onset of coalescence.

than to propagate it in a steady state. Note that the simulations of [21] for analyzing the mode I crack advance initiating from a pre-crack in a large scale plate structure led to the opposite trend. The plate was modeled with shell elements and nodal spring-type cohesive elements were used along the crack path. They obtained a relatively small cohesive energy for elements immediately ahead of the pre-crack tip. Thus the result obtained in the present paper must be dependent of the plane strain conditions. A full study with a comparison between 2D plane strain, 2D plane stress and 3D simulations would be required to discuss this point in depth. It is also worth noting that the shape of the local cohesive response is not *a priori* given and arises from the loading and the micromechanical model. It is again a significant feature of the model. At the crack onset, the CZM is rather a door-like model, while it looks like a triangular one during crack propagation. The peak stress stays about 3 times of the yield stress.

Coherence of the results can be reinforced with the help of a simple estimate. Focusing on Fig. 9(b), the stress triaxiality η_Σ at the crack tip and at the onset of coalescence is about $\eta_\Sigma \simeq 1.4$. For this stress triaxiality value, results obtained in Fig. 3(b) give $\Gamma_0/(\sigma_0 h) \simeq 0.9$. Identifying the mode I cohesive energy Γ_0 to the critical value J_{Ic} of the J -integral and estimating $J_{Ic} \simeq 145 \text{ kJ/m}^2$ in Fig. 7(b) for a crack extension $\Delta a \simeq 0.2 \text{ mm}$ (see [57]), one obtains $h \simeq 340 \text{ }\mu\text{m}$ which is fully consistent with the value used in these calculations ($h = 300 \text{ }\mu\text{m}$).

4.2. Length scale parameter and mesh size sensitivity

Fig. 10 (left) exhibits the macroscopic response for different values of the length scale parameter h . As expected, the overall response is strengthened when increasing h while keeping mesh size l_{mesh} constant. The parameter h scales the local energy dissipated by the cohesive zones. When h increases it can be considered that the cohesive energy is smeared out over a larger length and the effect of localization decreases.

Contrarily, the overall response is strengthened when decreasing l_{mesh} while keeping length scale parameter h constant, Fig. 10 (right). This effect is more unusual since, in the local approach of continuum damage mechanics, the dissipated energy vanishes when the element size tends to zero as a consequence of the damage localization within a single band of elements [58]. Here, the cohesive energy is dissipated along the cohesive zones and not in the bulk elements. A scale effect arises: when the mesh size l_{mesh} decreases, the h -length acts over a larger part of the surrounding finite elements and again, it can be considered that the cohesive energy is smeared out over a larger length.

An artificial hardening is thus obtained when decreasing l_{mesh} while keeping mesh size h constant. This hardening can be counterbalanced by adjusting the value of length scale parameter h with respect to the mesh size l_{mesh} . Fig. 11 shows that it is possible to get an overall load-opening response independent on the mesh size if the length scale parameter is set conveniently. The linear fit $h \simeq 220 + 0.4l_{\text{mesh}}$ (in μm) seems accurate for the current simulations.

5. Conclusion

In this paper the problem of simulating the crack initiation and growth in ductile materials failing by void nucleation, growth and coalescence is investigated. A crack surface is considered to be a limit case of strain localization band leading to a discontinuity of displacement field. The cohesive–volumetric approach appears to be a suitable framework for the description of discontinuity inside a material. In this framework, the hardening behavior of the material is described by the bulk behavior and the damage is described as a cohesive surface with a corresponding traction–separation law. Since in ductile fracture the material separation depends on the local stress and strain states which are strongly dependent on the geometry, a triaxiality-dependent cohesive model is derived. The cohesive surface is approximated as a band of small thickness whose behavior follows a volumetric GTN model. The obtained traction–separation law is a GTN-like model with reduced kinematics. This approach introduces a regularizing length parameter h whose the link with the physical size of the localization band remains to be investigated. The GTN traction–separation

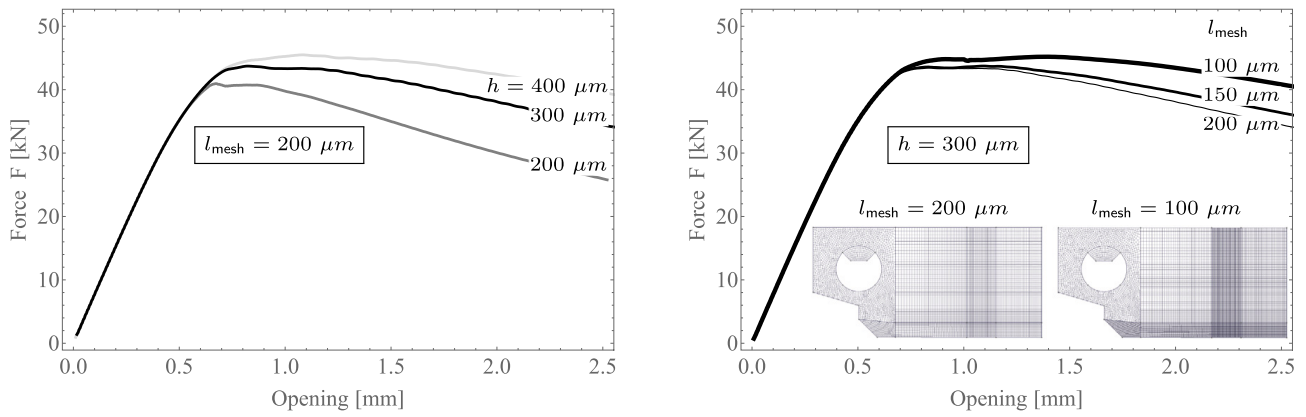


Fig. 10. Cohesive–volumetric finite element simulations, overall load-opening response. Dependence on the thickness parameter for mesh size $l_{\text{mesh}} = 200 \mu\text{m}$ (Left) and dependence on the mesh size for thickness parameter $h = 300 \mu\text{m}$ (Right). Inset: upper part of the corresponding meshes, with mesh refinement in the process zone.

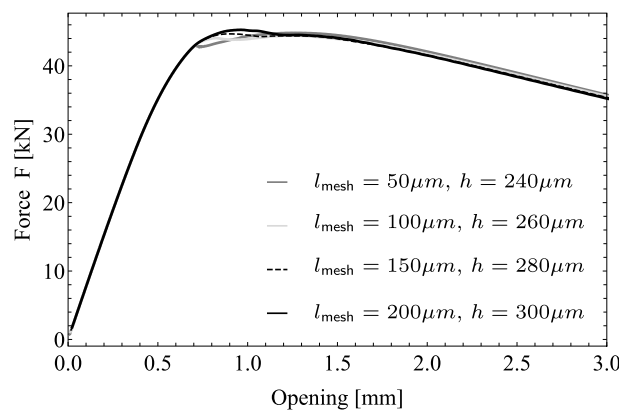


Fig. 11. Adapting the length scale parameter h with respect to the mesh size l_{mesh} in order to obtain converged overall load-opening response.

law reproduces the behavior of a single volumetric element made of a GTN material. It accurately captures the stress or strain rate triaxiality dependence but suffers from the same limitation as the GTN model and does not predict any damage at low triaxiality. However the procedure developed is general and could be extended to more sophisticated micro-mechanical model which takes into account damage at low triaxiality or even viscoplastic effects. The application of this approach to simulate crack propagation in a standard compact tension specimen of ferritic steel shows the ability of the cohesive–volumetric approach to simulate crack growth in ductile material. The results are consistent with previous results obtained by other authors. The application also exhibits the dependence of the regularization parameter h on a material length characterizing the microstructure and the mesh size. The main result of this work is the ability to derive CZM from any softening bulk behavior without any *a priori* assumptions on the shape of the cohesive model. Many previous numerical constatations are here re-obtained with no fitting parameters.

Declaration of competing interest

The authors declare that they have no known competing financial interests or personal relationships that could have appeared to influence the work reported in this paper.

Appendix A. Expressions of \dot{p}

First, let us consider the case $\eta_E^{\text{vol}} \geq 0$ corresponding to tension. Condition $\eta_E^2 = (\eta_E^{\text{vol}})^2$ leads to the following solutions for \dot{p} . If $\eta_E^{\text{vol}} = 1$, the solution is straightforward

$$\dot{p} = \frac{1}{4} \frac{[\dot{u}_n]^2 + [\dot{u}_t]^2 + [\dot{u}_s]^2}{[\dot{u}_n]h} \tag{A.1}$$

If $\eta_E^{vol} \neq 1$,

$$\dot{\rho}_{\pm} = \frac{2(\eta_E^{vol})^2 + 1}{2((\eta_E^{vol})^2 - 1)} \frac{[\dot{u}_n]}{h} \pm \frac{|\eta_E^{vol}| \sqrt{9 \frac{[\dot{u}_n]^2}{h^2} + 3(1 - (\eta_E^{vol})^2) \left(\frac{[\dot{u}_t]^2}{h^2} + \frac{[\dot{u}_s]^2}{h^2} \right)}}{2((\eta_E^{vol})^2 - 1)} \quad (A.2)$$

For $0 \leq \eta_E^{vol} < 1$, it appears that the negative branch should be selected, using the inequalities:

$$\dot{\rho} \geq -[\dot{u}_n]/(2h), \quad \frac{2(\eta_E^{vol})^2 + 1}{2((\eta_E^{vol})^2 - 1)} \leq -1/2, \quad (\eta_E^{vol})^2 - 1 < 0$$

For $\eta_E^{vol} > 1$, considering that the normal strain rate in the cohesive zone $[\dot{u}_n]/h$ should be greater than the transverse strain rate $\dot{\rho}$, it appears from (A.2) that the negative branch should also be selected (using the inequalities: $[2(\eta_E^{vol})^2 + 1]/[2((\eta_E^{vol})^2 - 1)] > 1$ and $(\eta_E^{vol})^2 - 1 > 0$).

Secondly, let us consider the case $\eta_E^{vol} < 0$ corresponding to a compression state. The evolution law of the porosity (19) indicates that the porosity is decreasing. Keeping in mind that the damage variable can only be a growing function, it is chosen here to determine $\dot{\rho}$ from the zero triaxiality $\eta_E^{vol} = 0$. It leads to:

$$\dot{\rho} = -\frac{[\dot{u}_n]}{2h} \quad (A.3)$$

Appendix B. Expressions of α_n , α_t , and α_s

The initial slope of the function $R^{(int)}$ is typically denoted by C_n in the normal direction and $C_t = C_s$ in the tangential directions. It is known that the insertion of intrinsic cohesive models into finite element meshes leads to an additional compliance in the overall force–displacement response. Therefore, the cohesive stiffness has to be set high enough to avoid additional compliance in the material, but not too large in order to avoid numerical instabilities. Various criteria are available to calibrate the cohesive stiffness for given material properties and a given mesh [59–61]. Here, parameters α_n , α_t and α_s are expressed in terms of C_n and C_t . By doing so, existing criteria derived for C_n and C_t can be directly used to adjust α_n , α_t and α_s .

Let us consider a simple case of uniaxial tensile loading with no hardening ($\sigma_y = \sigma_0$):

$$E = \begin{bmatrix} \dot{E}_{nn} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \times t, \quad \text{and } \dot{E}_{nn} > 0 \text{ kept constant} \quad (B.1)$$

In this case, the normal stress vector reads:

$$R_n^{(int)} = \sigma_0 \left(\frac{1}{q_2} H\left(\frac{1}{2}, q_1 f^*\right) + \frac{2}{3} D\left(\frac{1}{2}, q_1 f^*\right) \right) \left(1 - \exp\left(-\alpha_n \frac{[u_n]}{h}\right) \right) \quad (B.2)$$

By imposing:

$$\frac{\partial R_n^{(int)}}{\partial [u_n]} ([u_n] = 0) = C_n \quad (B.3)$$

the parameter α_n reads:

$$\alpha_n = \frac{C_n h}{\sigma_0 \left(\frac{1}{q_2} H\left(\frac{1}{2}, q_1 f^*(f_0)\right) + \frac{2}{3} D\left(\frac{1}{2}, q_1 f^*(f_0)\right) \right)} \quad (B.4)$$

This expression is used in the numerical simulations (Section 4) to estimate α_n . A similar approach can be followed to estimate α_t . Let us consider a simple case of pure shear loading with no hardening ($\sigma_y = \sigma_0$):

$$E = \begin{bmatrix} 0 & \dot{E}_{nt} & 0 \\ \dot{E}_{nt} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \times t \quad \text{and } \dot{E}_{nt} > 0 \text{ kept constant} \quad (B.5)$$

In this case, the tangential stress vector reads:

$$R_t^{(int)} = \sigma_0 \frac{1}{\sqrt{3}} (1 - q_1 f^*) \left(1 - \exp\left(-\alpha_t \frac{[|u_t|]}{h}\right) \right) \quad (B.6)$$

By imposing:

$$\frac{\partial R_t^{(int)}}{\partial [u_t]} ([u_t] = 0) = C_t \quad (B.7)$$

the parameter α_t reads:

$$\alpha_t = \frac{\sqrt{3} C_t h}{\sigma_0(1 - q_1 f^*(f_0))} \quad (\text{B.8})$$

This expression is used in the numerical simulations (Section 4) to estimate α_t . A similar expression can be obtained for α_s from a C_s parameter:

$$\alpha_s = \frac{\sqrt{3} C_s h}{\sigma_0(1 - q_1 f^*(f_0))} \quad (\text{B.9})$$

Appendix C. General equations of the cohesive zone model

The general equations used for the numerical implementation of the cohesive model are summarized below. For each time t , the opening vector ($[u_n]$, $[u_t]$, $[u_s]$) is known and the maximal values are updated:

$$[u_i]_{\max} = \max_{0 \leq \tau \leq t} |[u_i](\tau)| \quad \text{with } i = n, t, s \quad (\text{C.1})$$

The following quantities are computed from the maximal openings:

$$\epsilon_{nn} = \frac{[u_n]_{\max}}{h}, \quad \epsilon_{nt} = \frac{[u_t]_{\max}}{2h}, \quad \epsilon_{ns} = \frac{[u_s]_{\max}}{2h}$$

The previous values $\epsilon_{nn}^{(t-\delta t)}$, $\epsilon_{nt}^{(t-\delta t)}$, $\epsilon_{ns}^{(t-\delta t)}$, the porosity $f^{(t-\delta t)}$ and the average strain $\bar{\epsilon}^{(t-\delta t)}$ are known. The differences between two time steps are denoted by a δ (e.g. $\delta\epsilon_{nn} = \epsilon_{nn} - \epsilon_{nn}^{(t-\delta t)}$). If $f^{(t-\delta t)} < f_c$, then the volumetric stress Σ^{vol} is updated. Otherwise it is maintained to the previous value.

The first step consists in updating the values of the porosity and the average strain from the following equations.

$$\eta_{\dot{E}}^{\text{vol}} = \frac{q_1 q_2 f^*(f^{(t-\delta t)}) \sinh\left(\frac{3}{2} q_2 \frac{\Sigma_m^{\text{vol}}}{\sigma_y(\bar{\epsilon}^{(t-\delta t)})}\right)}{2 \frac{\Sigma_{\text{eq}}^{\text{vol}}}{\sigma_y(\bar{\epsilon}^{(t-\delta t)})}} \quad (\text{C.2})$$

The rate δp is evaluated with the help of Table 2 where ($[u_n]$, $[u_t]$, $[u_s]$) are replaced by ($h \delta\epsilon_{nn}$, $2h \delta\epsilon_{nt}$, $2h \delta\epsilon_{ns}$). Then:

$$(\delta\epsilon)_{\text{eq}} = \frac{2}{3} \sqrt{(\delta\epsilon_{nn} - \delta p)^2 + 3(\delta\epsilon_{nt})^2 + 3(\delta\epsilon_{ns})^2} \quad \text{and} \quad \eta_{\delta\epsilon} = \frac{\delta\epsilon_{nn} + 2\delta p}{3(\delta\epsilon)_{\text{eq}}} \quad (\text{C.3})$$

$$\bar{\Sigma}_{nn} = \frac{1}{q_2} H(\eta_{\delta\epsilon}, q_1 f^*(f^{(t-\delta t)})) + \frac{4}{9} D(\eta_{\delta\epsilon}, q_1 f^*(f^{(t-\delta t)})) \frac{\delta\epsilon_{nn} - \delta p}{(\delta\epsilon)_{\text{eq}}} \quad (\text{C.4})$$

$$\bar{\Sigma}_{tt} = \bar{\Sigma}_{ss} = \frac{1}{q_2} H(\eta_{\delta\epsilon}, q_1 f^*(f^{(t-\delta t)})) - \frac{2}{9} D(\eta_{\delta\epsilon}, q_1 f^*(f^{(t-\delta t)})) \frac{\delta\epsilon_{nn} - \delta p}{(\delta\epsilon)_{\text{eq}}} \quad (\text{C.5})$$

$$\bar{\Sigma}_{nt} = \frac{2}{3} D(\eta_{\delta\epsilon}, q_1 f^*(f^{(t-\delta t)})) \frac{\delta\epsilon_{nt}}{(\delta\epsilon)_{\text{eq}}} \quad (\text{C.6})$$

$$\bar{\Sigma}_{ns} = \frac{2}{3} D(\eta_{\delta\epsilon}, q_1 f^*(f^{(t-\delta t)})) \frac{\delta\epsilon_{ns}}{(\delta\epsilon)_{\text{eq}}} \quad (\text{C.7})$$

Then the increment of average plastic strain is computed:

$$\delta\bar{\epsilon} = \frac{\bar{\Sigma}_{nn} \delta\epsilon_{nn} + 2 \bar{\Sigma}_{nt} \delta\epsilon_{nt} + 2 \bar{\Sigma}_{ns} \delta\epsilon_{ns} + \bar{\Sigma}_{tt} \delta p + \bar{\Sigma}_{ss} \delta p}{1 - f^{(t-\delta t)}} \quad (\text{C.8})$$

and the porosity and plastic strain are up-dated:

$$f = f^{(t-\delta t)} + (1 - f^{(t-\delta t)}) (\delta\epsilon_{nn} + 2 \delta p) + A(\bar{\epsilon}^{(t-\delta t)}) \delta\bar{\epsilon} \quad \text{and} \quad \bar{\epsilon} = \bar{\epsilon}^{(t-\delta t)} + \delta\bar{\epsilon} \quad (\text{C.9})$$

Then, the following conditions are imposed:

$$\text{if } f^{(t)} < f^{(t-\delta t)} \quad \text{then } f^{(t)} = f^{(t-\delta t)}, \quad \text{and if } \bar{\epsilon} < \bar{\epsilon}^{(t-\delta t)} \quad \text{then } \bar{\epsilon}^{(t)} = \bar{\epsilon}^{(t-\delta t)} \quad (\text{C.10})$$

The second step consists in updating the value of the cohesive stress from the following equations. The strain p is evaluated from expressions reported in Table 2 where ($[u_n]$, $[u_t]$, $[u_s]$) are replaced by ($h \epsilon_{nn}$, $2h \epsilon_{nt}$, $2h \epsilon_{ns}$). Then:

$$\epsilon_{\text{eq}} = \frac{2}{3} \sqrt{(\epsilon_{nn} - p)^2 + 3(\epsilon_{nt})^2 + 3(\epsilon_{ns})^2} \quad \text{and} \quad \eta_{\epsilon} = \frac{\epsilon_{nn} + 2p}{3 \epsilon_{\text{eq}}} \quad (\text{C.11})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} R_n = \sigma_y(\bar{\epsilon}) \left(\frac{1}{q_2} H(\eta_\epsilon, q_1 f^*(f)) + \frac{4}{9} D(\eta_\epsilon, q_1 f^*(f)) \frac{\epsilon_{nn} - p}{\epsilon_{eq}} \right) \\ R_t = \sigma_y(\bar{\epsilon}) \frac{2}{3} D(\eta_\epsilon, q_1 f^*(f)) \frac{\epsilon_{nt}}{\epsilon_{eq}} \\ R_s = \sigma_y(\bar{\epsilon}) \frac{2}{3} D(\eta_\epsilon, q_1 f^*(f)) \frac{\epsilon_{ns}}{\epsilon_{eq}} \end{array} \right. \quad (C.12)$$

To the end, the cohesive stress is computed:

$$\bar{\mathbf{R}} = \left\{ \begin{array}{l} R_n \frac{[u_n]}{[u_n]_{\max}} \left(1 - \exp \left(-\alpha_n \frac{[u_n]_{\max}}{h} \right) \right) \\ R_t \frac{[u_t]}{[u_t]_{\max}} \left(1 - \exp \left(-\alpha_t \frac{[u_t]_{\max}}{h} \right) \right) \\ R_s \frac{[u_s]}{[u_s]_{\max}} \left(1 - \exp \left(-\alpha_s \frac{[u_s]_{\max}}{h} \right) \right) \end{array} \right. \quad (C.13)$$

References

- [1] Tottle CR. Mechanical properties of uranium compounds. ANL-7070, 1965.
- [2] Chakraborty P, Biner SB. A unified cohesive zone approach to model the ductile to brittle transition of fracture toughness in reactor pressure vessel steels. *Eng Fract Mech* 2014;131:194–209.
- [3] Vincent P-G, Monerie Y, Suquet P. Porous materials with two populations of voids under internal pressure: I. Instantaneous constitutive relations. *Int J Solids Struct* 2009;46:480–506.
- [4] Vincent P-G, Suquet P, Monerie Y, Moulinec H. Effective flow surface of porous materials with two populations of voids under internal pressure: I. a GTN model. *Int J Plast* 2014;56:45–73.
- [5] Benzerga AA, Leblond J-B. Ductile fracture by void growth to coalescence. *Adv Appl Mech* 2010;44:169–305.
- [6] Gurson AL. Continuum theory of ductile rupture by void nucleation and growth: Part I—Yield criteria and flow rules for porous ductile media. *Trans ASME, J Eng Mater Technol* 1977;99(1):2–15.
- [7] Tvergaard V. Influence of voids on shear band instabilities under plane strain conditions. *Int J Fract* 1981;17(4):389–407.
- [8] Tvergaard V, Needleman A. Analysis of the cup-cone fracture in a round tensile bar. *Acta Metall* 1984;32(1):157–69.
- [9] Koplik J, Needleman A. Void growth and coalescence in porous plastic solids. *Int J Solids Struct* 1988;24(8):835–53.
- [10] Schwalbe K-H, Scheider I, Cornec A. Guidelines for applying cohesive models to the damage behaviour of engineering materials and structures. Springer Science & Business Media; 2012.
- [11] Needleman A. Some issues in cohesive surface modeling. *Procedia IUTAM* 2014;10:221–46.
- [12] Dugdale D. Yielding of steel sheets containing slits. *J Mech Phys Solids* 1960;8(2):100–4.
- [13] Barenblatt GI. The formation of equilibrium cracks during brittle fracture. General ideas and hypotheses. Axially-symmetric cracks. *J Appl Math Mech* 1959;23(3):622–36.
- [14] Needleman A. A continuum model for void nucleation by inclusion debonding. *J Appl Mech* 1987;54(3):525–31.
- [15] Needleman A. An analysis of tensile decohesion along an interface. *J Mech Phys Solids* 1990;38(3):289–324.
- [16] Tvergaard V, Hutchinson JW. The relation between crack growth resistance and fracture process parameters in elastic–plastic solids. *J Mech Phys Solids* 1992;40(6):1377–97.
- [17] Scheider I, Brocks W. Simulation of cup–cone fracture using the cohesive model. *Eng Fract Mech* 2003;70(14):1943–61.
- [18] Chaboche J-L, Feyel F, Monerie Y. Interface debonding model: A viscous regularization with a limited rate dependency. *Int J Solids Struct* 2001;38(18):3127–60.
- [19] Siegmund T, Needleman A. A numerical study of dynamic crack growth in elastic-viscoplastic solids. *Int J Solids Struct* 1997;34(7):769–87.
- [20] Nielsen KL, Hutchinson JW. Cohesive traction-separation laws for tearing of ductile metal plates. *Int J Impact Eng* 2012;48:15–23.
- [21] Woelke PB, Shields MD, Hutchinson JW. Cohesive zone modeling and calibration for mode I tearing of large ductile plates. *Eng Fract Mech* 2015;147:293–305.
- [22] Andersen RG, Woelke PB, Nielsen KL. Cohesive traction-separation relations for plate tearing under mixed mode loading. *Eur J Mech A Solids* 2018;71:199–209.
- [23] Andersen RG, Felter CL, Nielsen KL. Micro-mechanics based cohesive zone modeling of full scale ductile plate tearing: From initiation to steady-state. *Int J Solids Struct* 2019;160:265–75.
- [24] Bao Y, Wierzbicki T. On fracture locus in the equivalent strain and stress triaxiality space. *Int J Mech Sci* 2004;46(1):81–98.
- [25] Benzerga AA, Leblond J-B, Needleman A, Tvergaard V. Ductile failure modeling. *Int J Fract* 2016;201(1):29–80.
- [26] Tvergaard V, Hutchinson JW. Effect of strain-dependent cohesive zone model on predictions of crack growth resistance. *Int J Solids Struct* 1996;33(20):3297–308.
- [27] Tvergaard V. Relations between crack growth resistance and fracture process parameters under large scale yielding. In: *IUTAM symposium on nonlinear analysis of fracture, solid mechanics and its applications*. Dordrecht: Springer; 1997, p. 93–104.
- [28] Banerjee A, Manivasagam R. Triaxiality dependent cohesive zone model. *Eng Fract Mech* 2009;76(12):1761–70.
- [29] Rajendran M, Scheider I, Banerjee A. Stress state dependent cohesive zone model for thin walled structures. *Key Eng Mater* 2010;417–418:353–6.
- [30] Scheider I. Derivation of separation laws for cohesive models in the course of ductile fracture. *Eng Fract Mech* 2009;76(10):1450–9.
- [31] Siegmund T, Brocks W. Prediction of the work of separation and implications to modeling. *Int J Fract* 1999;99(1–2):97–116.
- [32] Siegmund T, Brocks W. A numerical study on the correlation between the work of separation and the dissipation rate in ductile fracture. *Eng Fract Mech* 2000;67(2):139–54.
- [33] Anvari M, Scheider I, Thaulow C. Simulation of dynamic ductile crack growth using strain-rate and triaxiality-dependent cohesive elements. *Eng Fract Mech* 2006;73(15):2210–28.
- [34] Anvari M, Liu J, Thaulow C. Dynamic ductile fracture in aluminum round bars: Experiments and simulations. *Int J Fract* 2007;143(4):317–32.
- [35] Gărăjeu M, Suquet P. Effective properties of porous ideally plastic or viscoplastic materials containing rigid particles. *J Mech Phys Solids* 1997;45(6):873–902.
- [36] Chu CC, Needleman A. Void nucleation effects in biaxially stretched sheets. *Trans ASME, J Eng Mater Technol* 1980;102(3):249–56.

- [37] Michel J-C, Suquet P, Thébaud F. Une modélisation du rôle des interfaces dans le comportement des composites à matrice métallique. *Rev Eur Éléments Finis* 1994;3(4):573–95.
- [38] Monerie Y, Acary V. Formulation dynamique d'un modèle de zone cohésive tridimensionnel couplant endommagement et frottement. *Rev Eur Éléments Finis* 2001;10(02-03-04):489–503.
- [39] Suquet PM. Discontinuities and plasticity. In: *Nonsmooth mechanics and applications*. Vienna: International Centre for Mechanical Sciences, Springer; 1988, p. 279–340.
- [40] Oliver J, Cervera M, Manzoli O. Strong discontinuities and continuum plasticity models: The strong discontinuity approach. *Int J Plast* 1999;15(3):319–51.
- [41] Rashid FM, Banerjee A. Implementation and validation of a triaxiality dependent cohesive model: Experiments and simulations. *Int J Fract* 2013;181(2):227–39.
- [42] Rashid FM, Banerjee A. Simulation of fracture in a low ductility aluminum alloy using a triaxiality dependent cohesive model. *Eng Fract Mech* 2017;179(C):1–12.
- [43] Remmers JJC, de Borst R, Verhoosel CV, Needleman A. The cohesive band model: A cohesive surface formulation with stress triaxiality. *Int J Fract* 2013;181(2):177–88.
- [44] Aravas N. On the numerical integration of a class of pressure-dependent plasticity models. *Internat J Numer Methods Engrg* 1987;24:1395–416.
- [45] Jean M, Acary V, Monerie Y. Non-smooth contact dynamics approach of cohesive materials. *Phil Trans R Soc A* 2001;359(1789):2497–518.
- [46] Michel JC, Moulinec H, Suquet P. Effective properties of composite materials with periodic microstructure: A computational approach. *Comput Methods Appl Mech Engrg* 1999;172(1):109–43.
- [47] Perales F, Bourgeois S, Chrysochoos A, Monerie Y. Two field multibody method for periodic homogenization in fracture mechanics of nonlinear heterogeneous materials. *Eng Fract Mech* 2008;75(11):3378–98.
- [48] Perales F, Dubois F, Monerie Y, Piar B, Stainier L. A nonsmooth contact dynamics-based multi-domain solver. *Eur J Comput Mech* 2010;19(4):389–417.
- [49] Acary V, Monerie Y. Nonsmooth fracture dynamics using a cohesive zone approach. Research report, INRIA; 2006.
- [50] Jean M. The non-smooth contact dynamics method. *Comput Methods Appl Mech Engrg* 1999;177(3):235–57.
- [51] Ortiz M, Pandolfi A. Finite-deformation irreversible cohesive elements for three-dimensional crack-propagation analysis. *Internat J Numer Methods Engrg* 1999;44(9):1267–82.
- [52] Brocks W, Eberle A, Fricke S, Veith H. Large stable crack growth in fracture mechanics specimens. *Nucl Eng Des* 1994;151(2):387–400.
- [53] Siegmund T, Brocks W. The role of cohesive strength and separation energy for modeling of ductile fracture. In: Jerina K, Paris P, editors. *Fatigue and fracture mechanics: 30th Volume*, West Conshohocken, PA: ASTM International; 2000, p. 139–51.
- [54] Perales F. *Fissuration des matériaux à gradient de propriétés: Application au Zircaloy hydruré* [Ph.D. thesis] Montpellier: 2005. 2.
- [55] Brocks W, Klingbeil D, Künecke G, Sun D-Z. Application of the Gurson model to ductile tearing resistance. In: Kirk M, Bakker A, editors. *Constraint effects in fracture theory and applications: Second Volume*, West Conshohocken, PA: ASTM International; 1995, p. 232–52.
- [56] ASTM. ASTM E1820-18, standard test method for measurement of fracture toughness, standard. West Conshohocken, PA: ASTM International; 2018.
- [57] Zhu X-K, A.Joyce J. Review of fracture toughness (G, K, J, CTOD, CTOA) testing and standardization. *Eng Fract Mech* 2012;85:1–46.
- [58] Besson J. Continuum models of ductile fracture: A review. *Int J Damage Mech* 2010;19:3–52.
- [59] Blal N, Daridon L, Monerie Y, Pagano S. Artificial compliance inherent to the intrinsic cohesive zone models: Criteria and application to planar meshes. *Int J Fract* 2012;178(1–2):71–83.
- [60] Tomar V, Zhai J, Zhou M. Bounds for element size in a variable stiffness cohesive finite element model. *Internat J Numer Methods Engrg* 2004;61(11):1894–920.
- [61] Espinosa HD, Zavattieri PD. A grain level model for the study of failure initiation and evolution in polycrystalline brittle materials. Part I: Theory and numerical implementation. *Mech Mater* 2003;35(3):333–64.

- 7.3 Article : "A micromechanical model for the secondary creep of elasto-viscoplastic porous materials with two rate-sensitivity exponents : Application to a mixed oxide fuel"**



A micromechanical model for the secondary creep of elasto-viscoplastic porous materials with two rate-sensitivity exponents: Application to a mixed oxide fuel

Kajetan Wojtacki^a, Pierre-Guy Vincent^{b,c}, Pierre Suquet^{a,*}, Hervé Moulinec^a, Guylaine Boittin^a

^a Aix Marseille Université, CNRS, Centrale Marseille, LMA, 13453 Marseille Cedex 13, France

^b Institut de Radioprotection et de Sécurité Nucléaire, B.P. 3, 13115, Saint-Paul-lez-Durance Cedex, France

^c Laboratoire de Micromécanique et Intégrité des Structures, IRSN-CNRS-UM, B.P. 3, 13115, Saint-Paul-lez-Durance Cedex, France

ARTICLE INFO

Article history:

Revised 21 December 2018

Available online 24 December 2018

MSC:

00-01

99-00

Keywords:

Porous media

Viscoplasticity

FFT method

Homogenization

Mathematical morphology

Microstructures

ABSTRACT

This study deals with the secondary creep of a porous nuclear fuel. This material is composed of an isotropic matrix, weakened by randomly distributed clusters of pores. The viscous strain in the matrix is described by two power-law viscosities corresponding to two different creep mechanisms. The material microstructure is analyzed and appropriate descriptors of its morphology are identified. Representative Volume Elements (RVE's) are generated according to these descriptors. The local fields and overall response of these realizations RVE's are simulated within the framework of periodic homogenization using a full-field computational method based on Fast Fourier Transforms. An analytical model based on appropriate approximations of the effective potential governing the overall response of porous materials under creep is proposed. The accuracy of the model is assessed by comparing its predictions with full-field simulations and the agreement is found to be quite satisfactory.

© 2018 Elsevier Ltd. All rights reserved.

1. Introduction

Mixed oxide (MOX) fuel is a nuclear fuel that consists of plutonium oxide mixed with natural, depleted or reprocessed uranium oxide. MOX fuel has been used in French Pressurised Water Reactors since 1987 (Oudinet et al., 2008). This material exhibits a very specific microstructure which evolves significantly during irradiation (Noirot et al., 2008). As an example, the accumulation of rare gases like Krypton or Xenon generated by the fission process, triggers the onset of irradiation bubbles within the material. This voiding in the bulk of the material has a direct influence on its physical properties and consequently on the loading applied by the fuel on the cladding. Therefore, in order to assess the safety of nuclear power plants, especially under accident conditions such as a Reactivity Initiated Accident (RIA), the impact of those microstructural differences on the overall thermo-mechanical behavior of the fuel has to be carefully studied (Koo et al., 1997; Schmitz and Papin, 1999; Sasajima et al., 2000; Fuketa, 2012).

Our main interest here is in the creep properties of this fuel. A special attention is paid to creep tests in which the material is subjected to a constant stress, for fuel pellets mostly in compression and at high temperature. The response of the material is first an instantaneous elastic deformation, followed by an increase of the strain in a progressive and nonlinear way (primary creep) until the strain rate stabilizes (secondary or steady-state creep) (Routbort et al., 1972). Only the regime of secondary creep is addressed here.

The purpose of this work is to estimate both numerically and analytically the effect of clusters of voids on the strain rate of an irradiated MOX fuel at high temperature, $1573\text{ K} \leq T \leq 2473\text{ K}$, and high stress level, $10\text{ MPa} \leq \Sigma \leq 100\text{ MPa}$, in the range of conditions which could be encountered in a fuel during a postulated RIA (Suzuki et al., 2008).

The overall creep behavior of the material is simulated by means of computational periodic homogenization. Three-dimensional full-field simulations are performed by a method based on Fast Fourier Transforms (FFT) using a home code (CraFT) freely available on the web.¹ This mesh-free approach, first pro-

* Corresponding author.

E-mail address: suquet@lma.cnrs-mrs.fr (P. Suquet).

¹ <http://craft.lma.cnrs-mrs.fr/>

posed by [Moulinec and Suquet \(1994\)](#), is especially attractive for complex heterogeneous microstructures with non-linear phases. Full-field simulations require the reconstruction of artificial microstructures, since 3D images of irradiated nuclear fuels are not available. In comparison to the real microstructure, the artificial realizations have to match appropriate morphological descriptors ([Jeulin, 2000](#)), which have been recognized in a preliminary analysis as containing the most relevant information from the point of view of the considered physical phenomena. The geometry of these microstructures is simplified by considering only spherical pores located within randomly distributed spherical clusters. The matrix surrounding the pores is considered as isotropic and its viscoplastic behavior is described by a strain-rate potential including two creep mechanisms, diffusion creep and dislocation creep. The constitutive relations for the matrix are derived from the phenomenological strain rate identified for MOX fuel in a creep test by [Slagle et al. \(1984\)](#). This potential is described by two power-law functions with two different rate-sensitivity exponents.

The analytical model makes use of a variational approach and provides a lower bound on the effective strain-rate potential ([Michel and Suquet, 1992](#); [Ponte Castañeda, 1991](#); [Suquet, 1992](#); [Ponte Castañeda and Suquet, 1997](#)).

The paper is organized as follows. The microstructure of the material under study is analyzed in [Section 2](#). A few simplifications relative to its morphology and the constitutive relations of the matrix material are introduced in [Section 3](#) together with the procedure followed to generate the microstructures used in the full-field simulations. [Section 4](#) gives a brief introduction to the FFT method and discusses the spatial resolution adopted in the full-field simulations. The analytical model is derived in [Section 5](#). Finally, the accuracy of the model is assessed in [Section 6](#) by comparing its prediction with full-field simulations.

2. Microstructure of MIMAS MOX fuel

As a result of their production process, MOX fuels are multi-phase materials composed of a matrix of uranium dioxide containing plutonium-rich agglomerates. During irradiation, the microstructure of this heterogeneous material evolves and these agglomerates become porous due to the accumulation of rare gases and to the apparition of irradiation bubbles.

In order to relate the overall viscoplastic behavior of this porous material to its microstructure, several morphological informations about the constituents of the material are extracted from data and micrographs from the literature. Since our interest is in the generation of numerical realizations mimicking the actual material, the morphological descriptors used in the present study to analyze the phases are (following [Jeulin, 2000](#)) their volume/surface fraction, their size (cluster or pore diameter, characteristic length) and their spatial distribution. The geometrical description of the MOX microstructure is performed below in two steps. First the agglomerates (or clusters) are analyzed and second the pores (or irradiation bubbles) are studied.

2.1. Pu-rich clusters

The fabrication process has a direct impact on the morphology of the fuel. The present study concerns MIMAS MOX fuels. The MIMAS process (MIcronized MASTer blend) is widely used for MOX fuel fabrication ([Oudinet et al., 2008](#)). It consists in a micronisation of a mixture with 25–30% plutonium dioxide (master-blend mixture), followed by dilution with natural or depleted uranium dioxide to reach the desired plutonium content (more details on the fabrication routes are given in [White et al., 2001](#) and [Fisher et al., 2002](#)). The microstructure of the MOX fuel obtained by the MIMAS process depends also on the characteristics of the uranium dioxide

Table 1

Summary of morphological information concerning the Pu-rich clusters (agglomerates) in MIMAS MOX fuel.

Descriptor	Value
Surface fraction	0.11–0.25
Maximal size	150 μm

powders, which can be produced by AUC (Ammonium Uranate Carbonyl) or ADU (Ammonium DiUranate) routes. The manufacturing process returns a material with plutonium-rich agglomerates. The MIMAS-AUC has a classical duplex structure with about 25 vol% Pu agglomerates in a UO_2/PuO_2 lattice, whilst the MIMAS-ADU has three different phases, the UO_2 rich matrix, the Pu-rich agglomerates, and a coating phase with intermediate Pu content around the particles of UO_2 powder ([White et al., 2001](#)).

The maximal size of Pu-rich spots reported in [Fisher et al. \(2002\)](#), is about 150 μm for MIMAS MOX fuel. From [White et al. \(2001\)](#) and [Fisher et al. \(2002\)](#), the surface fraction of the Pu-rich spots is about 0.11 for MIMAS-ADU and 0.25 for MIMAS-AUC. A summary of these morphological information is presented in [Table 1](#).

2.2. Covariance function analysis for the spatial distribution of Pu-rich clusters

The covariance function is a tool that provides a clear and essential quantification of the spatial distribution of phases in a heterogeneous material (more details and other applications may be found in [Jeulin \(2000\)](#), [Lantuejoul \(2002\)](#), [Matheron \(1975\)](#), [Matheron \(1967\)](#), [Serra \(1982\)](#), [Torquato \(1982\)](#) and [Wojtacki et al. \(2017\)](#)). Any binary image of the heterogeneous medium is one of the possible realizations generated by a specific stochastic process ([Lantuejoul, 2002](#); [Torquato, 1982](#)), assumed to be stationary and ergodic. Each binary image, occupying the volume V , can be defined by the characteristic functions $k_X(\mathbf{x})$ of all the constitutive phases X

$$k_X(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1 & \text{if } \mathbf{x} \in X, \\ 0 & \text{otherwise,} \end{cases} \quad (1)$$

With this definition, the volume fraction of phase X is the average of the characteristic function over the whole volume $\varphi = \langle k_X(\mathbf{x}) \rangle$. The covariance function can be defined as the expectation of the autocorrelation of the characteristic function:

$$C(X, \mathbf{h}) = E \left\{ \int_V k_X(\mathbf{x}) k_X(\mathbf{x} + \mathbf{h}) d\mathbf{x} \right\} = P\{\mathbf{x} \in X, \mathbf{x} + \mathbf{h} \in X\}. \quad (2)$$

In other words, the function $C(X, \mathbf{h})$ gives the probability that both an arbitrary point of the phase X and its translation by the vector \mathbf{h} belong to X . Thus, the covariance has the following properties: $C(X, \mathbf{h} = 0) = |X|/|V| = \varphi$ and $C(X, \mathbf{h} \rightarrow +\infty) = (|X|/|V|)^2 = \varphi^2$, where $\mathbf{h} = \|\mathbf{h}\|$, $|\cdot|$ denotes the volume of a set. Since the covariance function depends on the orientation of vector \mathbf{h} , it is a convenient tool to investigate the anisotropy of a given microstructure.

Six different 2D micrographs of MIMAS-ADU MOX microstructures have been extracted from the work of [Largenton \(2012\)](#). These images have been binarized to extract the Pu-rich clusters and to generate the covariance maps of these inclusions. [Fig. 1](#) shows the averages over the six images of the covariances along three different directions (x , y and diagonal). Since the covariance is similar for all investigated directions, we assume in the sequel of the paper that the plutonium-rich clusters are isotropically distributed in the fuel.

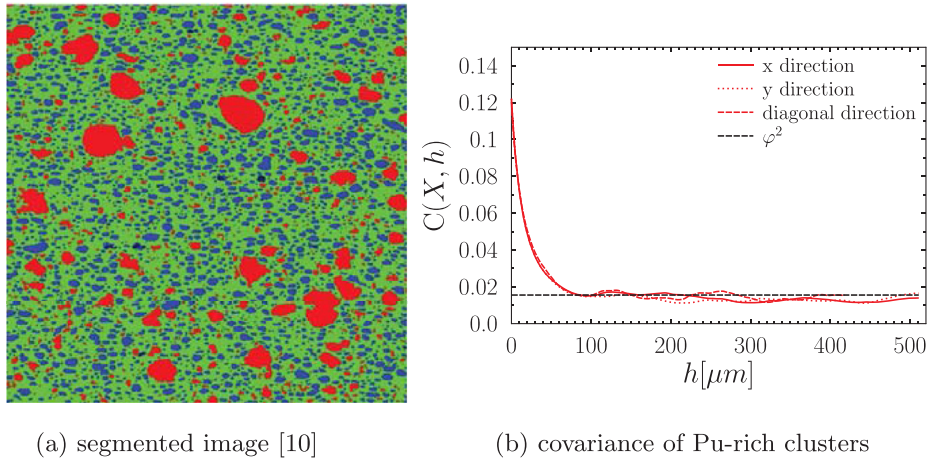


Fig. 1. Distribution of Pu-rich clusters in MIMAS-ADU MOX: image and covariance function. The Pu-rich clusters are in red. (For interpretation of the references to color in this figure legend, the reader is referred to the web version of this article.)

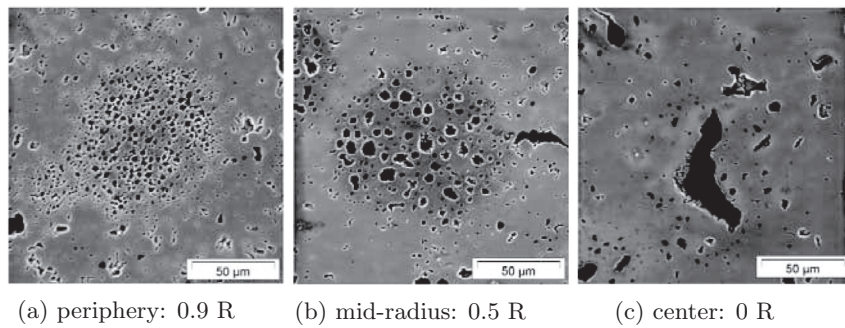


Fig. 2. Apparition of irradiation bubbles in the Pu-rich clusters. The bubble size changes with distance from the pellet center (MIMAS MOX (Noirot et al., 2008)).

Table 2
Summary of morphological information concerning the irradiation bubbles.

Descriptor	Value
Porosity in the clusters p_c	0–0.34
Characteristic size	2 μm –80 μm

Moreover, the average information extracted from the covariance function $C(X, \mathbf{h})$, where X is the Pu-rich phase, is in very good agreement with the literature:

- Pu-rich clusters surface fraction (y-intercept of the covariance = $C(X, \mathbf{0})$): $\bar{\varphi}_c \approx 0.12$
- mean characteristic size of clusters (first minimum of their covariance function): $\bar{d}_c \approx 100 \mu\text{m}$,

where an overbar $\bar{\cdot}$ denotes the average over the 6 different images.

2.3. Irradiation bubbles

Irradiation triggers the accumulation of rare gases such as Krypton or Xenon in Pu-rich clusters, which results in the apparition of irradiation bubbles (or pores). The size of these pores varies with their radial position in the pellet, increasing from the periphery towards the central region (Fig. 2).

The bubble size also depends on the local burn-up of the fuel: Noirot et al. (2008) give histograms of bubble sizes in the center of the MIMAS MOX peripheral agglomerates for four distinct burn-ups. They show that the size of these bubbles increases with the burn-up (the peak of histograms increases from 2 μm to 13 μm

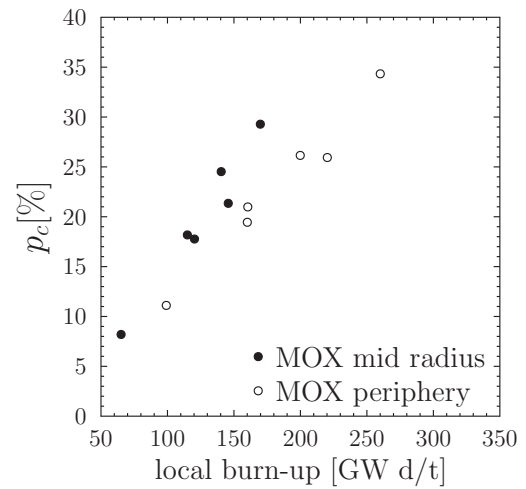
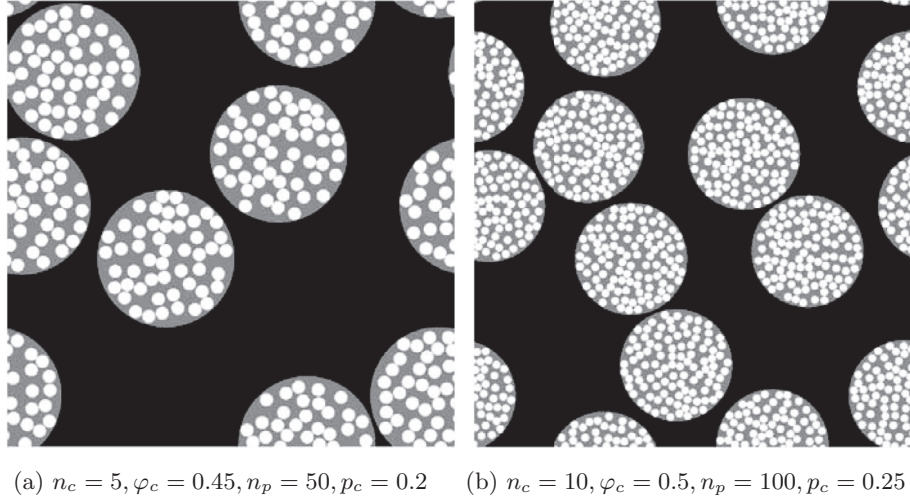


Fig. 3. Dependence of porosity in the Pu-rich agglomerates on the local burn-up for MOX fuel (Noirot et al., 2008).

with the burn-up). Moreover the largest bubbles are located in the central zone of the pellet, with a maximal size ranging from about 50 μm to 80 μm (Noirot et al., 2008; Fisher et al., 2002). The pore volume fraction per cluster depends on their location and on the local burn-up rate as well (Fig. 3): the porosity increases along the radius towards the central zone as well as with an increasing burn-up rate. As can be seen in Fig. 3, the maximal porosity found in clusters is 34%. A brief summary of this morphological information is given in Table 2.



(a) $n_c = 5, \varphi_c = 0.45, n_p = 50, p_c = 0.2$ (b) $n_c = 10, \varphi_c = 0.5, n_p = 100, p_c = 0.25$

Fig. 4. Example of periodic unit-cells: pores (white), clusters (grey) and matrix (black).

3. Reconstruction of computational microstructures

The microstructure of MIMAS MOX is quite specific, strongly heterogeneous and evolutive with irradiation. Simplifying assumptions concerning the geometry and the behavior of the constituent phases of this material are introduced hereafter in view of the computational modelling of representative volume elements.

3.1. Geometry

The geometry of irradiated MIMAS MOX has been idealized as a two-phase microstructure, with clusters of pores embedded in a surrounding matrix. The clusters, supposed to be spherical in shape and with a single size, were randomly distributed in the material. Spherical and single-sized pores were randomly distributed inside the clusters.

Taking into account the morphological information given in Section 2, the numerical samples used in the full-field simulations were reconstructed with the following set of parameters:

- porosity in the clusters: $p_c \in \{0.1, 0.3\}$
- pore diameter: $d_p \in \{4 \mu\text{m}, 8 \mu\text{m}, 16 \mu\text{m}, 32 \mu\text{m}\}$
- volume fraction of clusters in the total volume: $\varphi_c = 0.15$
- cluster diameter: $d_c = 100 \mu\text{m}$
- number of clusters in the numerical samples²: $n_c = 13$.

3.2. Constitutive relations of the phases

For simplicity, by lack of experimental data for the individual phases, a single material behavior is attributed to the UO_2 -rich matrix (shown in black in Fig. 4), to the coating phase in the case of MIMAS-ADU and to the Pu-rich spots (in grey in Fig. 4). Following the aforementioned simplifications, a simple two-phase medium consisting of a homogeneous MOX matrix containing clusters of irradiation bubbles was investigated. It is generally admitted that the stationary creep of MOX fuel results from two creep mechanisms, namely diffusion creep and dislocation creep. The identification of material parameters for stationary creep of MOX fuel was done by Routbort et al. (1972), Routbort and Voglewede (1973), and Roberts and Voglewede (1973). The dependence of the creep rate on stress is described by the superposition of a linearly viscous flow and of a power-law creep relation. In the proposed models the maximal temperature in the range of validity is about

$T_{max} \approx 2000 \text{ K}$. A high temperature enhancement of the model was then proposed by Slagle et al. (1984) who added a third term to increase the accuracy of the model up to $T_{max} = 2900 \text{ K}$. The final unidimensional constitutive relation of Slagle et al. (1984) reads as follows:

$$\dot{\varepsilon}^{vp} = \frac{A_1}{d^2} e^{-Q_1/(RT)} \sigma^{n_1} + (B_2 e^{-Q_2/(RT)} + B_3 e^{-Q_3/(RT)}) \sigma^{n_2}, \quad (3)$$

where: $\dot{\varepsilon}^{vp}$ [1/s] is the strain rate, σ [MPa] is the stress, R [J/(mol·K)] denotes the gas constant (8.3144598 J/(mol·K)), d [μm] is the grain size, the Q_i [J/mol] denote activation energies, and A_1, B_2, B_3 depend on the density and oxygen-to-metal ratio. The parameters used in the present study are specified in Table 3. They correspond to a 0.97 density, a 1.97 oxygen-to-metal ratio and a 20 μm grain size (according to the first batch used in the initial study of Routbort et al., 1972). According to Routbort et al. (1972), the first term in equation (3) with a linear dependence on the stress and an inverse-square-grain-size dependence is associated with a Nabarro–Herring stress-enhanced diffusion process which is likely to control the deformation in the linearly viscous flow region. In this regime, deformation is controlled by the diffusion of vacancies. In the power law region, according again to Routbort et al. (1972), the deformation is due to the motion of dislocations (hence the nonlinear dependence on stress of the second term in equation (3)). A three-dimensional version of Slagle's law has been implemented in CraFT (see Section 4). This law is used in the following to describe the viscoplastic behavior of the MOX matrix phase.

The fission process also induces an athermal creep (whose mechanisms are not well known). Following Massih (2006), this additional creep mechanism may be described by an additional term in equation (3) in the form $C\dot{F}\sigma$, where C is a constant and \dot{F} is the fission rate. Accounting for this term may be important to investigate fuel deformation under base irradiation conditions. This additional contribution to the strain rate can be incorporated into the first term of equation (3) (the linearly viscous term). The analytical model proposed in Section 5 and based on the sum of two strain-rate potentials remains unchanged. In the present study focused on the behavior of the fuel during a postulated RIA, which lasts few seconds, this fission term is neglected.

The pores (or bubbles) in the irradiated material are subjected to an internal pressure P_b , due to fission gases accumulated in these cavities. A porous material with no internal pressure in the pores ($P_b = 0$) is said to be drained, and, in the other case ($P_b \neq 0$), the porous material is said to be saturated. The present

² The number of clusters is limited by the available RAM memory.

Table 3
Parameters of Slagle's law (3) used in the present study.

A_1	B_2	B_3	Q_1	Q_2	Q_3	d	n_1	n_2
$\mu\text{m}^2 \cdot \text{MPa}^{-n_1} \cdot \text{s}^{-1}$	$\text{MPa}^{-n_2} \cdot \text{s}^{-1}$	$\text{MPa}^{-n_2} \cdot \text{s}^{-1}$	J/mol	J/mol	J/mol	μm	–	–
8.97×10^5	900	2.87×10^{17}	387300	572700	1256108	20	1	4.4

study focuses on the overall viscoplastic behavior of a saturated porous material with an incompressible matrix. As demonstrated in Vincent et al. (2009), in the particular case of an incompressible matrix, the macroscopic behavior of the saturated material can be obtained from the macroscopic behavior of the drained material by a shift along the axis of hydrostatic stresses, Σ_m (the macroscopic hydrostatic stress) being replaced by $\Sigma_m + P_b$. In other words when the voids are saturated, with pressure P_b in the voids, and when the matrix is incompressible at the microscopic scale, it is sufficient to perform the scale transition for a drained porous material ($P_b=0$) and then replace the overall hydrostatic stress Σ_m by $\Sigma_m + P_b$. With this result in mind, only the drained case ($P_b = 0$) is considered in the remainder of this study without loss of generality.

As shown by fractographies (see Guérin et al., 2000), subdivision of grains occurs in the Pu-rich spots located at the pellet periphery and at mid-radius inside the fuel pellet. This subdivision of grains in very small grains is reminiscent of high-burnup structures observed in highly irradiated uranium dioxide fuels. By contrast, in the central area of the pellet, there is no significant change in grain size. As pointed out by Guérin et al. (2000), the temperature is higher in the central area and the thermal diffusion is efficient enough to induce recovery of the accumulation of point defects, thus preventing subdivision of grains. In the present study, the material surrounding the cavities (without distinguishing between the UO_2 rich matrix, the Pu-rich spots and, for MIMAS-ADU, the coating phase) is considered as isotropic. The isotropy assumption is legitimate when the cavities are larger than the surrounding grains. This is the case in the periphery of the pellet, after subdivision of the grains and when the cavities are larger than the grains in the Pu-rich spots. In other situations, for example in the central zone of the pellet, the cavities and the grains may have comparable sizes. Then the isotropy assumption is only motivated by the fact that the anisotropy of the crystals is moderate due to the cubic fluorite structure of PuO_2 and UO_2 .

3.3. Microstructure generation

Periodic numerical samples have been generated following the morphological properties defined in Section 3.1. The proposed algorithm proceeds in two steps (both steps generate monodisperse sets of objects):

- the Metropolis algorithm (Metropolis et al., 1953) is used to arrange randomly n_c non-overlapping spherical clusters that occupy a φ_c fraction of the entire volume,
- then the same algorithm is used to distribute randomly inside each cluster n_p non-overlapping spherical pores, that occupy a p_c fraction of the cluster volume.

Finally, having a table with the positions and the radii of the clusters and of the pores, an image of the microstructure is generated at a desired spatial resolution. Fig. 4 shows 2D examples of generated microstructures.

The periodic unit-cells used in the full-field simulations were generated using the above described methodology. A single initial spatial distribution of clusters has been used in all the generated microstructures, with the following parameters: $n_c = 13$, $\varphi_c = 0.15$, $d_c = 100 \mu\text{m}$ and $L_{RVE} \approx 360 \mu\text{m}$. This distribution of clusters has been selected out of 2000 realizations: a covariogram study has been performed for each of them and the microstructure with the smallest observed anisotropy (minimal dispersion between the

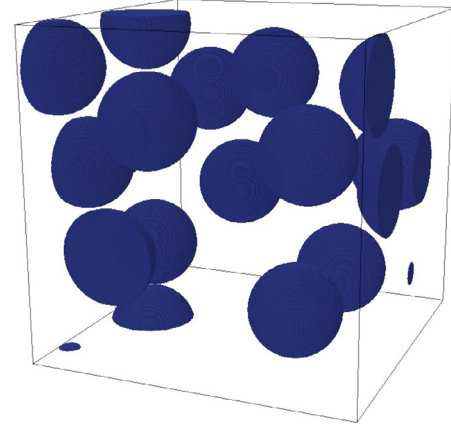


Fig. 5. Pu-rich clusters distribution used to generate the periodic cells for the full-field simulations.

Table 4
Summary of geometrical information of the microstructures used in the full-field simulations.

Micro.	d_c [μm]	d_p [μm]	p_c	n_p	f
1.0	–	–	–	1	0.015
1.1	100	32	0.1	3	0.015
1.2	100	16	0.1	24	0.015
1.3	100	8	0.1	195	0.015
1.4	100	4	0.1	1563	0.015
2.0	–	–	–	1	0.045
2.1	100	32	0.3	9	0.045
2.2	100	16	0.3	73	0.045
2.3	100	8	0.3	586	0.045

covariances estimated for different directions) has finally been selected. The obtained distribution of clusters is shown in Fig. 5.

The different parameters corresponding to the different microstructures are summarized in Table 4. The total volume fraction of the pores is $f = p_c \varphi_c$. Additionally, two simple microstructures were investigated in further simulations. These microstructures (labelled 1.0 and 2.0) are cubic unit-cells containing a single void with porosity f equal to 0.015 and 0.045 respectively.

Fig. 6 shows one cluster of each microstructure. All seven generated samples are used in the further full-field simulations. The numerical method is briefly introduced in the next section, as well as the influence of the discretization (spatial resolution).

4. Numerical method and influence of discretization

4.1. Integration of the constitutive equations

The constitutive equations of Slagle's model used in this study can be formulated for triaxial stress as

$$\begin{cases} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} = \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^e + \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{vp} \\ \dot{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbf{C} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^e \\ \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{vp} = \frac{3}{2} \left(\frac{A_1}{d^2} e^{-\frac{Q_1}{RT}} \sigma_{eq}^{n_1-1} \boldsymbol{\sigma}_d + (B_2 e^{-\frac{Q_2}{RT}} + B_3 e^{-\frac{Q_3}{RT}}) \sigma_{eq}^{n_2-1} \boldsymbol{\sigma}_d \right). \end{cases} \quad (4)$$

The strain $\boldsymbol{\varepsilon}$ has been decomposed into its elastic and visco-plastic parts $\boldsymbol{\varepsilon}^e$ and $\boldsymbol{\varepsilon}^{vp}$, a dot over a variable denotes its time derivative, $\boldsymbol{\sigma}_d$ is the deviatoric part of the stress $\boldsymbol{\sigma}$, $\sigma_{eq} = \sqrt{\frac{3}{2} \boldsymbol{\sigma}_d : \boldsymbol{\sigma}_d}$ is the equivalent von Mises stress and \mathbf{C} denotes the elastic stiffness tensor.

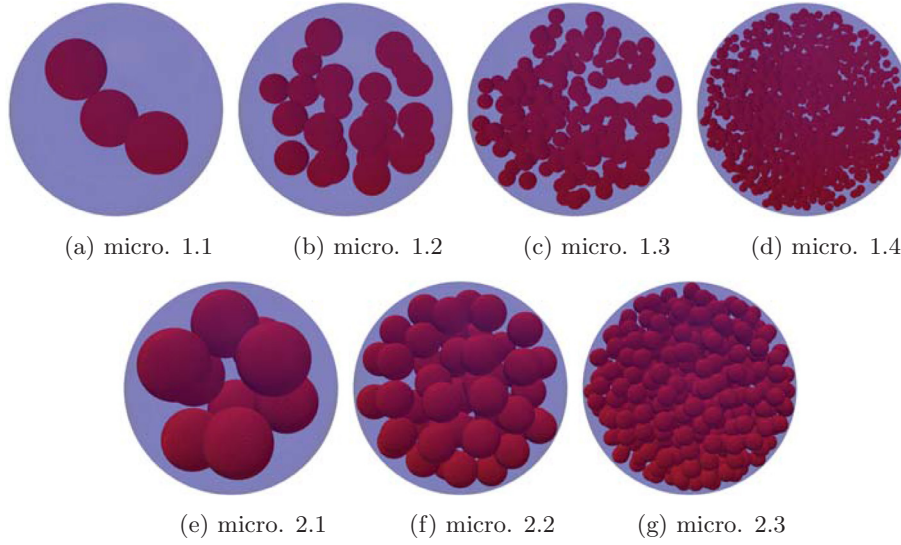


Fig. 6. Illustration of the porous clusters for each microstructure used in the full-field simulations.

The elastic moduli of the material are supposed to be isotropic, and thus fully described by the shear modulus μ and the bulk modulus k

$$\mathbf{C} = 2\mu\mathbf{K} + 3k\mathbf{J}$$

where \mathbf{J} and \mathbf{K} are the usual fourth-order projectors on hydrostatic and deviatoric symmetric tensors of order 2. As a consequence the constitutive relations (4) can be further simplified as

$$\begin{cases} \dot{\boldsymbol{\sigma}}_d = 2\mu \left(\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_d - \frac{3}{2} \frac{A_1}{d^2} e^{-\frac{Q_1}{RT}} \sigma_{eq}^{n_1} \frac{\boldsymbol{\sigma}_d}{\sigma_{eq}} - \frac{3}{2} (B_2 e^{-\frac{Q_2}{RT}} + B_3 e^{-\frac{Q_3}{RT}}) \sigma_{eq}^{n_2} \frac{\boldsymbol{\sigma}_d}{\sigma_{eq}} \right) \\ \dot{\sigma}_m = 3k \dot{\varepsilon}_m \end{cases} \quad (5)$$

where $\sigma_m = \frac{1}{3} \text{Tr} \boldsymbol{\sigma}$ denotes the hydrostatic component of the stress.

Replacing the time derivatives $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}$ and $\dot{\boldsymbol{\sigma}}$ by the finite difference approximations

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}(t) \simeq \frac{\boldsymbol{\varepsilon}(t) - \boldsymbol{\varepsilon}(t - \delta t)}{\delta t} \quad \text{and} \quad \dot{\boldsymbol{\sigma}}(t) \simeq \frac{\boldsymbol{\sigma}(t) - \boldsymbol{\sigma}(t - \delta t)}{\delta t} \quad (6)$$

and using a purely implicit scheme (backward Euler), the time-discretized constitutive relations (5) read as

$$\begin{cases} \boldsymbol{\sigma}_d - \boldsymbol{\sigma}_d^{(-\delta t)} = 2\mu (\boldsymbol{\varepsilon}_d - \boldsymbol{\varepsilon}_d^{(-\delta t)} \\ - \delta t \frac{3}{2} \frac{A_1}{d^2} e^{-\frac{Q_1}{RT}} \sigma_{eq}^{n_1-1} \boldsymbol{\sigma}_d - \delta t \frac{3}{2} (B_2 e^{-\frac{Q_2}{RT}} + B_3 e^{-\frac{Q_3}{RT}}) \sigma_{eq}^{n_2-1} \boldsymbol{\sigma}_d) \\ \sigma_m - \sigma_m^{(-\delta t)} = 3k (\varepsilon_m - \varepsilon_m^{(-\delta t)}) \end{cases} \quad (7)$$

where $\boldsymbol{\varepsilon}_d$ is the strain deviator (recall that the elastic part of the strain is compressible, while the viscous part is incompressible). For simplicity, the dependence in time is omitted for the current time, and thus $\boldsymbol{\varepsilon}$ and $\boldsymbol{\sigma}$ denote respectively the strain $\boldsymbol{\varepsilon}(t)$ and the stress $\boldsymbol{\sigma}(t)$ at time t , their values at time $t - \delta t$ being denoted by a superscript $(-\delta t)$, $\boldsymbol{\varepsilon}^{(-\delta t)} = \boldsymbol{\varepsilon}(t - \delta t)$ and $\boldsymbol{\sigma}^{(-\delta t)} = \boldsymbol{\sigma}(t - \delta t)$.

Introducing a so-called “elastic trial” stress $\boldsymbol{\sigma}^T$ defined by

$$\boldsymbol{\sigma}^T = \boldsymbol{\sigma}^{(-\delta t)} + \mathbf{C} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} \delta t$$

(this is the value that stress would have if no visco-plastic contribution occurred during $t - \delta t$ and t), one has

$$\begin{cases} \boldsymbol{\sigma}_d = \boldsymbol{\sigma}_d^T - 3\mu \delta t \left(\frac{A_1}{d^2} e^{-\frac{Q_1}{RT}} \sigma_{eq}^{n_1-1} + (B_2 e^{-\frac{Q_2}{RT}} + B_3 e^{-\frac{Q_3}{RT}}) \sigma_{eq}^{n_2-1} \right) \boldsymbol{\sigma}_d \\ \sigma_m = \sigma_m^T. \end{cases} \quad (8)$$

It follows from the first equation in (8) that $\boldsymbol{\sigma}_d$ and $\boldsymbol{\sigma}_d^T$ are co-linear. Thus, knowing the state of the stress and strain tensors at time $t - \delta t$ and knowing the strain at time t , $\boldsymbol{\sigma}_d^T$ can be evaluated straightforwardly and thus finding the stress at time t is reduced to a non linear equation whose unknown is σ_{eq}

$$\sigma_{eq} + 3\mu \delta t \left(\frac{A_1}{d^2} e^{-\frac{Q_1}{RT}} \right) \sigma_{eq}^{n_1} + 3\mu \delta t \left(B_2 e^{-\frac{Q_2}{RT}} + B_3 e^{-\frac{Q_3}{RT}} \right) \sigma_{eq}^{n_2} - \sigma_{eq}^T = 0. \quad (9)$$

In the present study, this scalar zero-finding equation has been solved using Muller’s method (Muller, 1956). Once σ_{eq} has been assessed, the whole tensor $\boldsymbol{\sigma}$ is obtained simply by:

$$\begin{cases} \boldsymbol{\sigma}_d = \frac{\sigma_{eq}}{\sigma_{eq}^T} \boldsymbol{\sigma}_d^T \\ \sigma_m = \sigma_m^T. \end{cases} \quad (10)$$

With this time-integration scheme, the constitutive equations (7) can be re-written symbolically with a function \mathcal{G}

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \mathcal{G}(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}), \boldsymbol{\sigma}^{(-\delta t)}(\mathbf{x}), \boldsymbol{\varepsilon}^{(-\delta t)}(\mathbf{x})) \quad (11)$$

which makes the problem well suited to the use of the FFT-based homogenization method.

4.2. FFT-based homogenization method

The numerical approach that has to be chosen to carry out this study must take into account the very high complexity of the microstructures involved. Indeed, the dispersion of the clusters in the volume and the random distribution of porosities within the clusters, with the great disparity that exists between the size of the clusters and that of the pores, requires numerical simulations based on complex and large microstructural data. The computational method used here is the FFT-based homogenization method, introduced in Moulinec and Suquet (1994), which has long proven its capability to deal with this type of problem. The method, compared to the finite element method, offers the advantages of a lower computational cost and of being a meshless method - all the operations being performed on a regular grid. Its principles will be briefly recalled below, the interested reader is referred to the literature (among others Moulinec and Suquet, 1994; Moulinec and Suquet, 1998; Müller, 1996; Eyre and Milton, 1999; Zeman et al., 2010; Kabel et al., 2014; Willot

et al., 2014; Schneider et al., 2016; Moulinec et al., 2018) for more information.

4.2.1. Lippmann–Schwinger equation

Let us consider a periodic unit-cell occupying a volume V of heterogeneous material submitted to an overall prescribed strain \mathbf{E} . Periodicity conditions are imposed on the boundary ∂V of the unit cell. The properties of the phases are described by constitutive equations in the form $\boldsymbol{\sigma} = \mathcal{G}(\boldsymbol{\varepsilon}, \dots)$. Therefore, the local problem reads

$$\begin{cases} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \mathcal{G}(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}), \dots), \\ \text{div}(\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x})) = 0, \\ \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}(\mathbf{x})) = \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}^*(\mathbf{x})) + \mathbf{E}, \\ \mathbf{u}^* \# , \quad \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} - \# , \end{cases} \quad (12)$$

where \mathbf{u}^* denotes the fluctuating part of the displacement. It satisfies periodicity conditions on the boundary of V (notation $\#$), while the traction $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}$ is antiperiodic (notation $-\#$) for equilibrium purposes. By introducing a reference material with homogeneous stiffness \mathbf{c}^0 , and the associated Green operator Γ^0 , the problem can be reduced to the Lippmann–Schwinger equation, which can be written in real space

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) = -\Gamma^0 * \boldsymbol{\tau}(\mathbf{x}) + \mathbf{E}, \quad (13)$$

where a polarization field $\boldsymbol{\tau}$ has been introduced and defined as

$$\boldsymbol{\tau}(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) - \mathbf{c}^0 : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) = \mathcal{G}(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}), \dots) - \mathbf{c}^0 : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}), \quad (14)$$

and where $*$ denotes a convolution operation. Relation (13) can be conveniently written in Fourier space as

$$\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}(\boldsymbol{\xi}) = -\hat{\Gamma}^0(\boldsymbol{\xi}) : \hat{\boldsymbol{\tau}}(\boldsymbol{\xi}) \quad \forall \boldsymbol{\xi} \neq \mathbf{0}, \quad \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{0}) = \mathbf{E}, \quad (15)$$

where $\boldsymbol{\xi}$ denotes the angular frequency belonging to the reciprocal lattice associated with the unit-cell V . Recall that a convolution in real space is replaced by a simple product in Fourier space.

4.2.2. Fixed-point algorithm

The fixed-point iteration method, proposed in Moulinec and Suquet (1998) to solve the Lippmann–Schwinger equation (13), was adopted in the present study. The algorithm can be summarized by the following recursive relation:

$$\begin{cases} \boldsymbol{\varepsilon}^{k+1}(\mathbf{x}) = -\Gamma^0 * (\boldsymbol{\sigma}^k(\mathbf{x}) - \mathbf{c}^0 : \boldsymbol{\varepsilon}^k(\mathbf{x})) + \mathbf{E} \\ \boldsymbol{\sigma}^k(\mathbf{x}) = \mathcal{G}(\boldsymbol{\varepsilon}^k(\mathbf{x}), \dots) \end{cases} \quad (16)$$

where k and $k + 1$ refer to two successive iterates.

When the overall stress $\boldsymbol{\Sigma}$ is prescribed, the algorithm must be slightly modified into

$$\begin{cases} \boldsymbol{\varepsilon}^{k+1} = -\Gamma^0 * (\boldsymbol{\sigma}^k(\mathbf{x}) - \mathbf{c}^0 : \boldsymbol{\varepsilon}^k(\mathbf{x})) + \mathbf{E}^{k+1}, \quad \boldsymbol{\sigma}^k(\mathbf{x}) = \mathcal{G}(\boldsymbol{\varepsilon}^k(\mathbf{x}), \dots), \\ \mathbf{E}^{k+1} = \langle \boldsymbol{\varepsilon}^k \rangle - \mathbf{c}^0 : (\langle \boldsymbol{\sigma}^k \rangle - \boldsymbol{\Sigma}) \end{cases} \quad (17)$$

4.2.3. Convergence tests

The algorithm requires a convergence test to decide when the iterating process must be stopped. The criterion proposed in Moulinec and Suquet (1994) is based on an equilibrium test which consists in evaluating

$$\text{err}_1(k) = \frac{\left(\|\text{div} \boldsymbol{\sigma}^k\|^2 \right)^{1/2}}{\|\langle \boldsymbol{\sigma}^k \rangle\|} \quad (18)$$

and in comparing it, at each iteration, with the prescribed accuracy ζ_1 : the equilibrium test is satisfied when $\text{err}_1(k) < \zeta_1$. In (18), the

generic notation $\|\cdot\|$ has been used to denote the Frobenius norms of a vector \mathbf{v} or a second-order tensor $\boldsymbol{\tau}$

$$\|\mathbf{v}\|^2 = \sum_{i=1,2,3} v_i^2, \quad \|\boldsymbol{\tau}\|^2 = \tau_{ij}\tau_{ij} = \sum_{i=1,2,3} \sum_{j=1,2,3} \tau_{ij}^2.$$

But as discussed in Moulinec et al. (2018), this criterion imposes difficult conditions which is why the more relaxed criterion introduced by Monchiet and Bonnet (2012) was used in this study. This criterion takes a simple form in Fourier space

$$\text{err}'_1(k) = \left(\frac{\sum_{\boldsymbol{\xi}} \frac{2 \|\boldsymbol{\xi} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}^k(\boldsymbol{\xi})\|^2 - \|\boldsymbol{\xi} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}^k(\boldsymbol{\xi}) \cdot \boldsymbol{\xi}\|^2}{\|\boldsymbol{\xi}\|^2 \|\boldsymbol{\xi}\|^4}}{\sum_{\boldsymbol{\xi}} \|\hat{\boldsymbol{\sigma}}^k(\boldsymbol{\xi})\|^2} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (19)$$

In addition, since the mechanical tests performed are creep tests or, more generally, tests where the macroscopic stress is imposed, a second convergence test must be performed at each iteration to determine if the macroscopic conditions prescribed are satisfied

$$\text{err}_2(k) = \frac{\|\langle \boldsymbol{\sigma}^k \rangle - \boldsymbol{\Sigma}\|}{\|\boldsymbol{\Sigma}\|} < \zeta_2 \quad (20)$$

where $\boldsymbol{\Sigma}$ is the prescribed overall stress and where ζ_2 is the requested accuracy for macroscopic conditions.

In all the computations presented below, the convergence thresholds are $\zeta_1 = 10^{-3}$ and $\zeta_2 = 10^{-5}$. In other words, iterations are stopped as soon as both conditions $\text{err}'_1(k) < 10^{-3}$ and $\text{err}_2(k) < 10^{-5}$ are satisfied.

4.2.4. Stabilization of the overall strain rate

The mechanical conditions of a creep test are simulated. The macroscopic stress is prescribed and the response of the material is described by the evolution of the overall deformation with time. After a transient regime whose duration varies with temperature and mechanical loading and, to a lesser extent, with the sample considered, the overall strain rate stabilizes and remains constant.

In the present study, the overall strain rate is estimated by a five point stencil

$$\dot{\mathbf{E}}(t) \simeq \frac{-\mathbf{E}(t + 2\delta t) + 8\mathbf{E}(t + \delta t) - 8\mathbf{E}(t - \delta t) + \mathbf{E}(t - 2\delta t)}{12 \delta t}. \quad (21)$$

The stabilized regime is reached - and the loading process is then stopped - when the relative evolution of the strain rate is small. The stopping criterion used is

$$\|\dot{\mathbf{E}}(t) - \dot{\mathbf{E}}(t - K\delta t)\| < \eta_L \|\dot{\mathbf{E}}(t)\|. \quad (22)$$

In the present work, the typical value for K is 10 (which means that two strain rates are compared with 10 loading steps of difference), and the required accuracy is $\eta_L = 10^{-5}$.

4.3. Spatial discretization

The question of spatial discretization is of crucial importance in determining the ability of numerical simulations to capture local variations in the mechanical fields involved and hence to accurately describe the effective properties.

The FFT-based method imposes a spatial discretization along a regular grid, the basic element of which is a voxel. The discretization study should proceed by performing several simulations of the same structure at different resolutions (i.e. by varying the numbers of voxels in the volume considered). Its cost would be beyond our currently available computational means. The approach adopted here was to study a simplified microstructure that is nevertheless

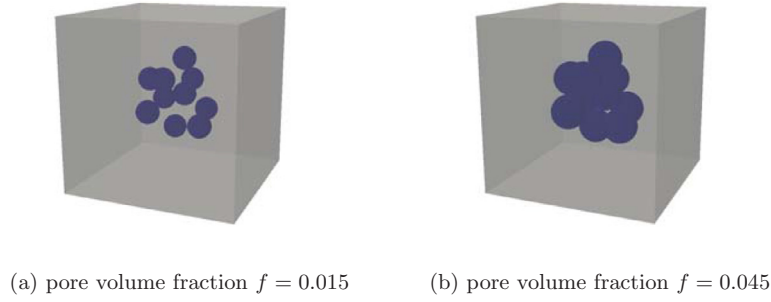


Fig. 7. Pores distribution in the unit-cell used in the study of discretization.

Table 5

Centered cluster with 10 pores. Overall strain rates and relative differences (with respect to the finest discretization) as a function of the discretization along the pore diameter.

RVE discretizations (voxels)		32 ³	64 ³	128 ³	256 ³	512 ³
$f = 1.5\%$	$\dot{\epsilon}_{11}$ (10 ⁻⁶ 1/s)	6.16	6.14	6.13	6.11	6.11
	err_{rel} [%]	0.9	0.6	0.3	0.05	–
$f = 4.5\%$	$\dot{\epsilon}_{11}$ (10 ⁻⁶ 1/s)	7.41	7.30	7.23	7.18	7.16
	err_{rel} [%]	3.54	2.01	0.94	0.3	–

Table 6

Summary of chosen geometrical and computational information related to all microstructures used in full-field simulations: overall porosity, number of pores per cluster, RVE edge length, number of performed simulations for uniaxial, hydrostatic and deviatoric loadings respectively. The second sub-column of N_{lim}^c is the number of investigated temperatures and stress levels.

Micro.	f [%]	n_p	L [vox]	N_{lim}^c		N_{hyd}^c	N_{dev}^c
1.0	1.5	1	96	100	10 T × 10 Σ	1	1
1.1	1.5	3	324	100	10 T × 10 Σ	1	1
1.2	1.5	24	648	30	3 T × 10 Σ	1	1
1.3	1.5	195	1296	12	3 T × 4 Σ	1	1
1.4	1.5	1563	2592	1	1 T × 1 Σ	1	1
2.0	4.5	1	96	100	10 T × 10 Σ	1	1
2.1	4.5	9	512	100	10 T × 10 Σ	1	1
2.2	4.5	73	1024	30	3 T × 10 Σ	1	1
2.3	4.5	586	2048	12	3 T × 4 Σ	1	1

representative of the actual geometry. This simplified microstructure, shown in Fig. 7, consists of a single cluster located at the center of the image, with a volume fraction of 15%, in which 10 pores have been placed randomly. The two porosities of interest, 10% and 30% of pores per cluster, are investigated. The mechanical loading is a uniaxial creep test in compression ($\Sigma = -\Sigma \mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1$), with the following values of the thermomechanical parameters $T = 2473$ K and $\Sigma = 100$ MPa.

Several discretizations of the unit-cell were examined, 32³, 64³, 128³, 256³ and 512³ voxels, corresponding to an increasingly refined resolution along the diameter of a single pore. Table 5 summarizes the results obtained. The pore volume fraction of 4.5% (30% of pores in a cluster) is more sensitive to discretization than the porosity 1.5%. A compromise between accuracy and computational cost was achieved by selecting a resolution of 29 and 42 voxels per diameter of pore for 1.5% and 4.5% porosity respectively. The precision on the overall strain rate is then less than 0.1% and 0.5% respectively.

4.4. Full-field simulations

In order to model the effect of pores on the overall behaviour of the irradiated MOX fuel, 10 different temperatures and 10 stress levels were investigated in the simulations:

$$\begin{aligned} \text{Temperature: } T[\text{K}] &\in \{1573, 1673, \dots, 2473\}, \\ \text{Stress: } \Sigma[\text{MPa}] &\in \{10, 20, \dots, 100\}. \end{aligned}$$

The simulations were mostly focused on the uniaxial compressive creep test, given by:

$$\text{Uniaxial: } \Sigma = \Sigma(-\mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1). \quad (23)$$

Due to the chosen discretization and related computational cost, the simulations performed on the most refined microstructures were limited (see Table 6).

Additional creep tests, under hydrostatic and axisymmetric deviatoric loadings, were carried out in order to adjust the semi-analytical model presented in Section 5. These additional simulations were performed at temperature $T = 1973$ K and at only one stress level for all generated microstructures. The hydrostatic and deviatoric loadings are given respectively as:

$$\begin{aligned} \text{Hydrostatic: } \Sigma &= \Sigma(-\mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_2 - \mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_3), \\ \text{Deviatoric: } \Sigma &= \Sigma\left(-\frac{2}{3}\mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1 + \frac{1}{3}\mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_2 + \frac{1}{3}\mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_3\right). \end{aligned} \quad (24)$$

Detailed information about the microstructures and the different loading conditions are summarized in Table 6.

It is worth mentioning that the computations on the largest microstructure (micro. 1.4) were run with approximately 4TB of RAM memory and 1296 cores.

5. Analytical model

5.1. Strain-rate potentials

An estimate of the effective viscoplastic behavior of the porous MIMAS MOX fuel can be proposed using a micromechanical approach. It is noted that the matrix material is governed by a strain-rate potential exhibiting two temperature-activated creep mechanisms

$$\dot{\epsilon} = \frac{\partial \psi}{\partial \sigma}(\sigma), \quad \psi(\sigma) = \psi_1(\sigma) + \psi_n(\sigma), \quad (25)$$

with

$$\psi_1(\sigma) = \frac{1}{2}A\sigma_{eq}^2, \quad \psi_n(\sigma) = \frac{1}{n+1}B\sigma_{eq}^{n+1}, \quad (26)$$

where

$$A = \frac{A_1}{d^2} e^{-Q_1/(RT)}, \quad B = B_2 e^{-Q_2/(RT)} + B_3 e^{-Q_3/(RT)}.$$

Similarly the overall strain rate of the porous material also derives from an effective strain-rate potential (Ponte Castañeda and Suquet, 1997)

$$\dot{\Sigma} = \frac{\partial \Psi}{\partial \Sigma}(\Sigma) \quad \text{with} \quad \Psi(\Sigma) = \text{Inf}_{\sigma \in \mathcal{S}(\Sigma)} \langle \psi(\sigma) \rangle, \quad (27)$$

$$\mathcal{S}(\Sigma) = \{\sigma \in \mathcal{H}, \operatorname{div} \sigma(\mathbf{x}) = 0 \text{ in } V, \sigma \cdot \mathbf{n} = \#, \langle \sigma \rangle = \Sigma\}. \quad (28)$$

Define two partial effective potentials as

$$\Psi_1(\Sigma) = \operatorname{Inf}_{\sigma \in \mathcal{S}(\Sigma)} \langle \psi_1(\sigma) \rangle \quad \text{and} \quad \Psi_n(\Sigma) = \operatorname{Inf}_{\sigma \in \mathcal{S}(\Sigma)} \langle \psi_n(\sigma) \rangle, \quad (29)$$

and let $\sigma, \sigma_1, \sigma_n$ be the local stress fields solution of the variational problems (27) and (29). Then, by the variational properties (29)

$$\langle \psi_1(\sigma) \rangle \geq \langle \psi_1(\sigma_1) \rangle, \quad \langle \psi_n(\sigma) \rangle \geq \langle \psi_n(\sigma_n) \rangle,$$

and therefore

$$\begin{aligned} \Psi(\Sigma) &= \langle \psi_1(\sigma) \rangle + \langle \psi_n(\sigma) \rangle \geq \langle \psi_1(\sigma_1) \rangle + \langle \psi_n(\sigma_n) \rangle \\ &= \Psi_1(\Sigma) + \Psi_n(\Sigma) \end{aligned}$$

In other words $\Psi_1 + \Psi_n$ is a lower bound for the effective potential Ψ

$$\Psi(\Sigma) \geq (\Psi_1 + \Psi_n)(\Sigma). \quad (30)$$

Remark: Homogenization is a non-additive procedure, in the sense that the effective potential corresponding to the sum of two potentials (here ψ_1 and ψ_n) is not the sum of the individual effective potentials (here Ψ_1 and Ψ_n). This is a well-known fact in viscoelastic composites which gives rise to long memory effects, even when the individual constituents exhibit only short-term memory effects. These complex interactions between the two potentials will be neglected in the sequel, but the inequality (30) gives a rigorous status to this approximation. Note that Monerie and Gatt (2006) approached the problem differently (and heuristically) by interpolating Ψ between Ψ_1 and Ψ_n with a weight factor depending on the overall stress Σ .

5.2. Bounding the overall strain rate

Although a lower bound on the potential does not always result in a lower bound for its derivatives, in the present case the lower bound (30) implies a lower bound for one of the components of the overall strain rate

$$\dot{\mathbf{E}} = \frac{\partial \Psi}{\partial \Sigma}(\Sigma). \quad (31)$$

Recall that $\sigma, \sigma_1, \sigma_n$ be the local stress fields solution of the variational problems (27) and (29). Euler's theorem for positively homogeneous functions, applied to ψ_1 and ψ_n respectively, yields

$$\begin{cases} \frac{\partial \Psi_1}{\partial \Sigma}(\Sigma) : \Sigma = 2\Psi_1(\Sigma) = 2\langle \psi_1(\sigma_n) \rangle \\ \leq 2\langle \psi_1(\sigma) \rangle = \left\langle \frac{\partial \psi_1}{\partial \sigma}(\sigma) : \sigma \right\rangle, \\ \frac{\partial \Psi_n}{\partial \Sigma}(\Sigma) : \Sigma = (n+1)\Psi_n(\Sigma) = (n+1)\langle \psi_n(\sigma_n) \rangle \\ \leq (n+1)\langle \psi_n(\sigma) \rangle = \left\langle \frac{\partial \psi_n}{\partial \sigma}(\sigma) : \sigma \right\rangle. \end{cases} \quad (32)$$

Adding up the two inequalities in (32), one gets that

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi_1}{\partial \Sigma}(\Sigma) : \Sigma + \frac{\partial \Psi_n}{\partial \Sigma}(\Sigma) : \Sigma \\ \leq \left\langle \left(\frac{\partial \psi_1}{\partial \sigma}(\sigma) + \frac{\partial \psi_n}{\partial \sigma}(\sigma) \right) : \sigma \right\rangle = \langle \dot{\epsilon} : \sigma \rangle, \end{aligned} \quad (33)$$

and finally using Hill's lemma

$$\dot{\mathbf{E}} : \Sigma \geq \left(\frac{\partial \Psi_1}{\partial \Sigma}(\Sigma) + \frac{\partial \Psi_n}{\partial \Sigma}(\Sigma) \right) : \Sigma. \quad (34)$$

Therefore, replacing the exact effective potential Ψ with its lower bound $\Psi_1 + \Psi_n$ yields a rigorous lower bound for the overall strain rate $\dot{\mathbf{E}}$ in the direction of the applied stress Σ .

5.3. Estimate using the model of Leblond–Perrin–Suquet (LPS) (Leblond et al., 1994)

It remains to bound or estimate the two partial effective potentials Ψ_1 and Ψ_n . Following Leblond et al. (1994), using the fact that ψ_1 and ψ_n are power-law potentials, Ψ_1 and Ψ_n can be written as

$$\Psi_1(\Sigma) = \psi_1(\Lambda_1), \quad \Psi_n(\Sigma) = \psi_n(\Lambda_n), \quad (35)$$

where Λ_1 and Λ_n are positively homogeneous functions of degree 1 with respect to Σ . To simplify notations, ψ_1 and ψ_n , which were introduced in (26) as functions of the tensorial variable σ , are considered in (35) as power-law functions of the single scalar variable σ_{eq} .

$\Lambda_n(\Sigma)$ is obtained by solving the equation (Leblond et al., 1994)

$$\mathcal{F}(Q, M) = 0, \quad (36)$$

where

$$\mathcal{F}(Q, M) = \left(1 + \frac{2}{3}f\right)Q^2 + f\left(h(M) + \frac{n+1}{n-1} \frac{1}{h(M)}\right) - 1 - \frac{n-1}{n+1}f^2, \quad (37)$$

$$Q = \frac{\Sigma_{eq}}{\Lambda_n}, \quad M = \frac{\Sigma_m}{\Lambda_n}, \quad h(M) = \left(1 + \frac{1}{n} \left(\frac{3|M|}{2}\right)^{\frac{n+1}{n}}\right)^n, \quad (38)$$

Λ_1 is found from Eq. (36) with $n = 1$ and f denotes porosity,

$$\Lambda_1 = \left(\frac{9}{4} \frac{f}{1-f} \Sigma_m^2 + \frac{1 + \frac{2}{3}f}{1-f} \Sigma_{eq}^2\right)^{1/2}. \quad (39)$$

There is no expression in closed-form for Λ_n when $n \neq 1$ and the equation (36) has to be solved numerically. This can be done by a Newton–Raphson method, initialized by the approximation provided by the hollow sphere model of Michel and Suquet (1992) (see Appendix A).

The strain rate predicted by the effective potential $\Psi = \Psi_1 + \Psi_n$ reads as

$$\dot{\mathbf{E}} = \left[\psi_1'(\Lambda_1) \frac{\partial \Lambda_1}{\partial \Sigma} + \psi_n'(\Lambda_n) \frac{\partial \Lambda_n}{\partial \Sigma} \right]. \quad (40)$$

$\frac{\partial \Lambda_n}{\partial \Sigma}$ is obtained by taking the derivative of (36) with respect to Σ and the resulting expression is

$$\frac{\partial \Lambda_n}{\partial \Sigma} = \frac{\Lambda_n}{\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial M} \Sigma_m + \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial Q} \Sigma_{eq}} \left(\frac{1}{3} \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial M} \mathbf{i} + \frac{3}{2} \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial Q} \frac{\Sigma_d}{\Sigma_{eq}} \right). \quad (41)$$

The lower bound (34) can be given a simple form. Using Euler's relation for the positively homogeneous functions Λ_1 and Λ_n , one gets

$$\frac{\partial \Lambda_1}{\partial \Sigma} : \Sigma = \Lambda_1, \quad \frac{\partial \Lambda_n}{\partial \Sigma} : \Sigma = \Lambda_n, \quad (42)$$

and therefore

$$\dot{\mathbf{E}} : \Sigma = \psi_1'(\Lambda_1) \Lambda_1 + \psi_n'(\Lambda_n) \Lambda_n = A \Lambda_1^2 + B \Lambda_n^{n+1}. \quad (43)$$

6. Full-field simulations versus analytical model

6.1. Modified porosity

In order for the comparison between full-field simulations and the analytical models developed in Section 5 to be meaningful, a

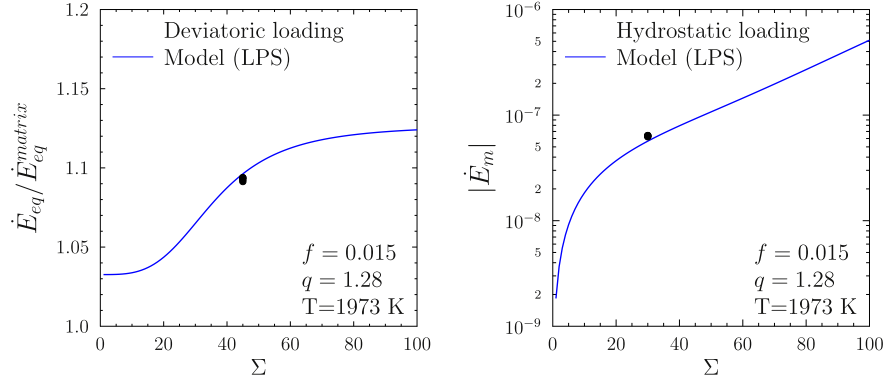


Fig. 8. Identification of the parameter q using deviatoric and hydrostatic loadings. Comparison between the model (40) (solid line) and full-field simulations (full circles corresponding to the 4 different microstructures: 1.1, 1.2, 1.3 and 1.4). Void volume fraction $f = 0.015$. \dot{E}_{eq}^{matrix} denotes the equivalent strain rate in the fully dense material.

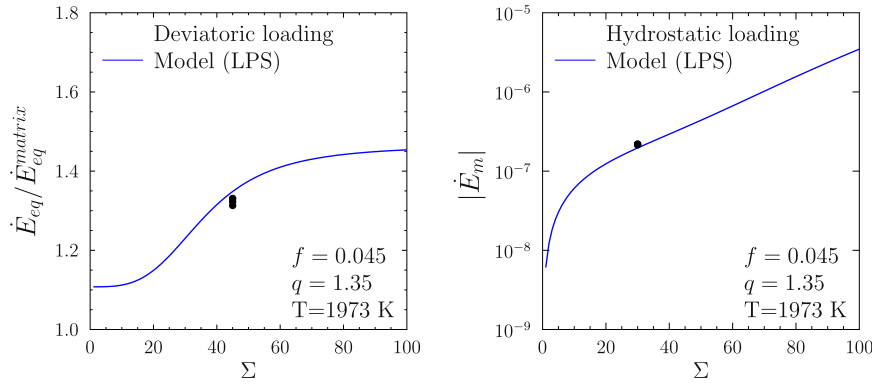


Fig. 9. Identification of the parameter q using deviatoric and hydrostatic loadings. Comparison between the model (40) (solid line) and full-field simulations (full circles corresponding to the 3 different microstructures: 2.1, 2.2 and 2.3). Void volume fraction $f = 0.045$. \dot{E}_{eq}^{matrix} denotes the equivalent strain rate in the fully dense material.

consistent definition of porosity has to be adopted on both sides. This is the role played in the GTN model by the parameters q_1 , q_2 , q_3 introduced by Tvergaard (1982). Roughly speaking these parameters account for the fact that in the model, the porous material will lose its carrying capacity when $f = 1$, whereas in the numerical simulation, the pores will percolate much earlier. Therefore the results of the full-field simulations at porosity f should be compared to the analytical model with a modified porosity $f^* = qf$ where q is a parameter between 1 and 2 (when the voids are spherical a classical value for the parameter q is 1.25). A similar notion of modified porosity has been used in several different studies (see Fritzen et al., 2012; Vincent et al., 2014, among others) (Fig. 8).

In the present study, the q parameter was identified from two simulations performed at $T = 1973$ K for all available microstructures (at each void volume fraction) under hydrostatic and axisymmetric deviatoric loadings in the form (24), with $\Sigma = 30$ MPa (hydrostatic loading) and $\Sigma = 45$ MPa (axisymmetric deviatoric loading) (Fig. 9).

The q parameter in the model was adjusted from its usual value for spherical voids ($q = 1.25$) to give a reasonable agreement between the model and the simulations (different microstructures at each void volume fraction) for both loadings and the following values were found

$$q = 1.28 \text{ when } f = 0.015, \quad q = 1.35 \text{ when } f = 0.045.$$

Then these values of q were used, with no further fitting, to simulate uniaxial compression tests at different stress levels and different temperatures. Comparisons with full-field simulations are shown in Figs. 10 and 11. The agreement is seen to be quite satisfactory over the whole range of stress and temperature investigated.

6.2. Discussion

From the results shown in Figs. 10 and 11, the following observations can be made.

- As expected, the ratio $\dot{E}_{11}/\dot{E}_{11}^{matrix}$ is always above 1, which is a clear indication that the cavities enhance the overall strain rate and soften the material.
- The effect of cavities increases with the stress: for example, when $f = 0.045$ and $T = 2473$ K, the model predicts that the ratio $\dot{E}_{11}/\dot{E}_{11}^{matrix}$ increases from 1.21 to 1.53 when the stress increases from 10 to 100 MPa. It shows that in the high-stress regime (mainly associated with the non-linear term in the viscoplastic law of the matrix) the material is more sensitive to cavities than in the low-stress regime (mainly associated with the linear term in the viscoplastic law of the matrix).
- The evolution of the ratio $\dot{E}_{11}/\dot{E}_{11}^{matrix}$ with respect to the stress is highly nonlinear: a strong increase of this ratio is observed in a transition zone between a lower and an upper plateau where this ratio seems to be stabilizing. The effect of cavities saturates at high stress or low stress. The slope in this transition zone increases with temperature. Since the temperature strongly enhances the nonlinear term in the viscoplastic behavior, this observation is in line with the previous comment: an increase in temperature implies an increase in the nonlinear term, and thus, the transition zone from the low stress to the high stress regime is shortened.
- The effect of porosity on the ratio $\dot{E}_{11}/\dot{E}_{11}^{matrix}$ is quite significant. For example, when $\Sigma = 100$ MPa and $T = 2473$ K, both the simulations and the model show that this ratio increases from 1.14 to 1.53 when the porosity goes from 1.5% to 4.5%. This increase is less pronounced in the low stress-low temperature regime: when $\Sigma = 10$ MPa and $T = 1573$ K, the model predicts an in-

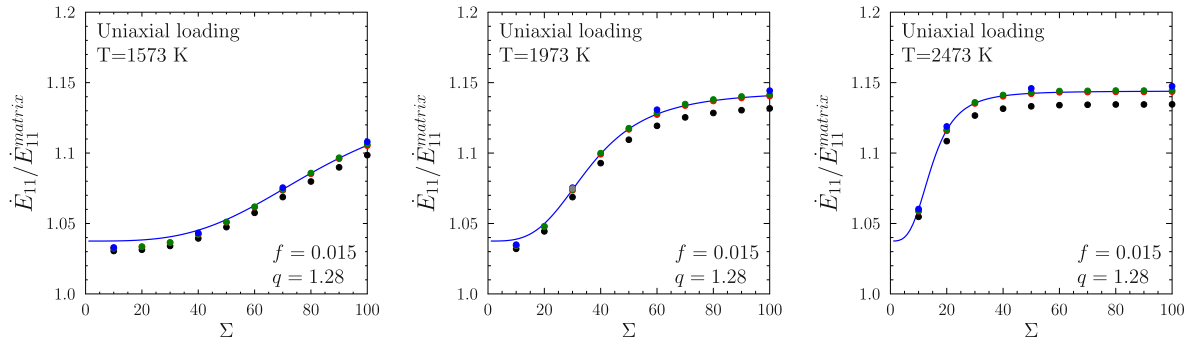


Fig. 10. Uniaxial compression. Void volume fraction $f = 0.015$. Comparison between the model (40) (solid line) and full-field simulations (full circles) performed with the FFT-based method. Microstructure 1.0 (black circle), 1.1 (red), 1.2 (green), 1.3 (blue), 1.4 (grey). \dot{E}_{11}^{matrix} denotes the equivalent strain rate in the fully dense material. (For interpretation of the references to color in this figure legend, the reader is referred to the web version of this article.)

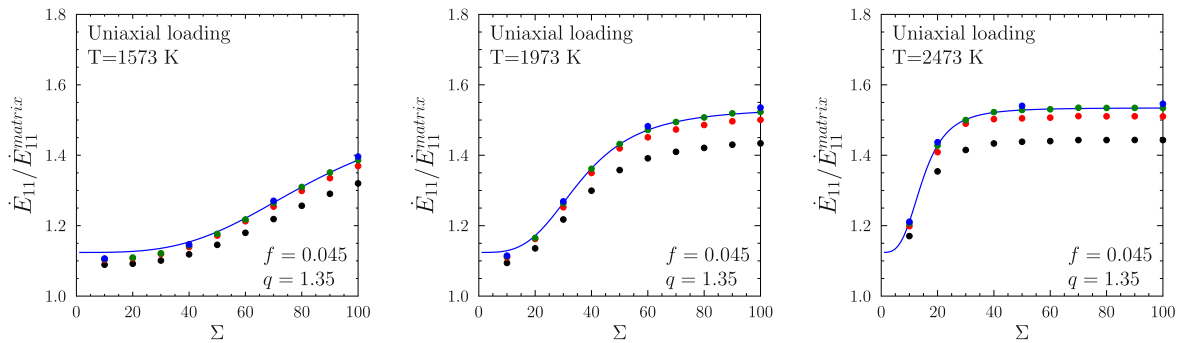


Fig. 11. Uniaxial compression. Void volume fraction $f = 0.045$. Comparison between the model (40) (solid line) and full-field simulations (full circles) performed with the FFT-based method. Microstructure 2.0 (black circle), 2.1 (red), 2.2 (green), 2.3 (blue). \dot{E}_{11}^{matrix} denotes the equivalent strain rate in the fully dense material. (For interpretation of the references to color in this figure legend, the reader is referred to the web version of this article.)

crease in this ratio from 1.03 to 1.12 when the porosity goes from 1.5% to 4.5%. Consequently the high stress-high temperature regime (mainly associated with the nonlinear term in the viscoplastic behavior) is more sensitive to the cavities than the low stress-low temperature regime (mainly associated with the linear term in the viscoplastic behavior).

- The influence of porosity on the overall strain rate is significant: in the range of porosities, temperatures and stresses studied here, it can induce a strain rate up to 50% higher than in the dense case (i.e. without porosity). We thus conclude that the presence of cavities plays a key role in the viscoplastic behavior of this material. In other words, taking into account the porosity due to irradiation when studying the viscoplasticity of this irradiated MOX fuel is of prime importance.
- In the case of a 1.5% porosity, the changes in the strain rates with respect to the microstructures (1.1, 1.2, 1.3) are quite limited: as an example, when $\Sigma = 100$ MPa and $T = 2473$ K, the relative difference in strain rate between the microstructures 1.1 and 1.3 is only 0.3%. It is more pronounced but still weak in the 4.5% porosity case: when $\Sigma = 100$ MPa and $T = 2473$ K, the relative difference in strain rate between the microstructures 2.1 and 2.3 is 2.3%. It may be concluded that moving from a microstructure with a small number of pores inside each cluster to a microstructure with a huge number of pores inside each cluster without modifying the porosity (it induces a decrease in the size of each cavity) has only a limited impact on the overall strain rate. This conclusion is strongly linked to the specific modeling of the material studied here under the physical conditions specified above. Note that, since the size of the cavities considered here are above a few microns, no size effect has been considered in the modeling: as a general rule, surface effects are predominant for nanosized inclusions and

vanish when their size increases. Moreover, differences of about 5% can be observed in the strain rate between the microstructure 2.0 (relative to voids distributed according to a cubic lattice in the matrix) and the other microstructures. From these comments, it may be concluded that the void clustering has only a rather limited impact on the overall strain rate.

7. Conclusion

MIMAS MOX fuels exhibit a very specific microstructure, strongly heterogeneous and evolutive with irradiation. Fresh fuels contain Pu-rich clusters. During irradiation, accumulation of rare gases generated by the fission triggers the onset of irradiation bubbles within the material. The Pu-rich clusters become highly porous, with pressurized bubbles.

Concerning the Pu-rich clusters and their irradiation bubbles, data on their sizes and surface fractions have been collected from a literature review. A covariogram analysis for the Pu-rich clusters has been performed based on available digital images of fuels, showing a good agreement with the collected data.

Then, the geometry of this material has been idealized as a two-phase microstructure, a matrix in which spherical pores are gathered into spherical clusters. The matrix is governed by a strain-rate potential exhibiting two creep mechanisms and the pores are subjected to a homogeneous internal pressure (irradiation bubbles). Only the secondary creep regime was addressed here.

Periodic cells have been generated with a single spatial distribution of 13 clusters in which pores are randomly distributed. Two porosities have been considered together with four different pore diameters. The microstructure with the smallest pore size contains more than 1500 pores in each cluster.

These periodic cells have been discretized into a regular cubic array of voxels and FFT-based numerical full-field simulations have been performed. First of all, the nonlinear behavior of the matrix has been integrated in time by a fully implicit algorithm which has been implemented in the FFT software. Then, a discretization study has been performed on a simplified cell with a single porous cluster. The spatial resolution for the different periodic cells required to achieve mesh independence ranges from 324^3 to 2592^3 voxels. In terms of degrees of freedom, the problem to be solved for the highest resolution amounts to several tens of billions of dofs. These massive full-field simulations have been performed on a super-computer, with up to 1296 cores and 4 TB of RAM.

An analytical estimate for the effective behavior of this porous viscoplastic material has been derived through a variational approach. A modified porosity has been introduced in the model and identified from two simulations for all microstructures at a given temperature under hydrostatic and deviatoric loadings. Then, the model has been used to simulate the uniaxial compression tests at different stress levels and different temperatures. Comparisons with full-field simulations show a good agreement over the whole range of stress and temperature investigated.

As expected, it has been observed that the presence of cavities leads to an increase in the overall strain rate and thus softens the material. Moreover, it seems that the nonlinear term in the viscoplastic law is more sensitive to cavities than the linear term. The effect of the cavities tends to saturate at high stress or low stress and the transition zone between these two regimes depends on the temperature. From the full-field simulations, it may be concluded that gathering the voids into clusters has only a rather limited impact on the overall strain rate of the voided material. But the global influence of the cavities on the overall strain rate is significant: a strain rate up to 50 % higher than in the dense case (i.e. without porosity) has been obtained. It can be concluded that porosity plays a key role in the creep behavior of this material.

Acknowledgments

Some of the full-field simulations presented here were made possible thanks to the resources of the CCRT (Centre de Calcul Recherche et Technologie) of the CEA/DIF. HM and PS have received funding from Excellence Initiative of Aix-Marseille University - A*MIDEX, a French "Investissements d'Avenir" programme in the framework of the Labex MEC.

Appendix A. The hollow sphere model of Michel and Suquet (1992)

Michel and Suquet (1992) have noticed that the two effective potential Ψ_1 and Ψ_n can be written as

$$\Psi_1(\Sigma) = (1-f)\psi_1\left(\frac{\bar{\Sigma}_1}{1-f}\right), \quad \Psi_n(\Sigma) = (1-f)\psi_n\left(\frac{\bar{\Sigma}_n}{1-f}\right), \quad (\text{A.1})$$

where $\bar{\Sigma}_1$ and $\bar{\Sigma}_n$ are positively homogeneous functions of degree 1 of Σ such that (Michel and Suquet, 1992)

$$\bar{\Sigma}_n \geq \bar{\Sigma}_p \quad \forall n \geq p. \quad (\text{A.2})$$

The effective stresses $\bar{\Sigma}_1$ and $\bar{\Sigma}_n$ are related to Λ_1 and Λ_n through

$$\bar{\Sigma}_1 = \Lambda_1(1-f)^{\frac{1}{2}}, \quad \bar{\Sigma}_n = \Lambda_n(1-f)^{\frac{n}{n+1}}. \quad (\text{A.3})$$

Combining (30) and (A.2) yields a first simple and rigorous lower bound for Ψ :

$$\Psi(\Sigma) \geq (1-f)(\psi_1 + \psi_n)\left(\frac{\bar{\Sigma}_1}{1-f}\right). \quad (\text{A.4})$$

It can easily be checked that the lower bound (A.4) is nothing else than the variational lower bound obtained by means of an isotropic linear elastic comparison material (Ponte Castañeda, 1991; Suquet, 1992; Ponte Castañeda and Suquet, 1997).

$\bar{\Sigma}_1$ is related to the linear effective properties of a linear porous material with the same microstructure as the original nonlinear one, but with an incompressible matrix with a shear modulus μ^0 through

$$\Sigma : \tilde{M} : \Sigma = \frac{1}{3\mu^0} \frac{\bar{\Sigma}_1^2}{1-f}. \quad (\text{A.5})$$

When the pores are randomly distributed (shape, orientation and location are random), the Hashin–Strikman upper bound can be used to bound \tilde{M} and therefore $\bar{\Sigma}_1$ from below

$$\begin{aligned} \tilde{M}^{HS+} &= \frac{3}{4\mu^0} \frac{f}{1-f} \mathbf{J} + \frac{1}{2\mu^0} \frac{1 + \frac{2}{3}f}{1-f} \mathbf{K}, \\ \bar{\Sigma}_1 &\geq \left(\frac{9}{4} f \Sigma_m^2 + \left(1 + \frac{2}{3}f\right) \Sigma_{eq}^2 \right)^{1/2}, \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

and a rigorous lower bound for Ψ can be obtained by combining (A.4) with (A.6).

However, as is well-known from other studies, the variational lower bound (A.4), where $\bar{\Sigma}_n$ is replaced by its lower bound $\bar{\Sigma}_1$, is rather sharp when the overall stress is deviatoric, but rather poor under hydrostatic loading. We therefore use the sharper lower bound

$$\Psi(\Sigma) \geq (1-f) \left[\psi_1\left(\frac{\bar{\Sigma}_1}{1-f}\right) + \psi_n\left(\frac{\bar{\Sigma}_n}{1-f}\right) \right], \quad (\text{A.7})$$

with a more accurate estimate for $\bar{\Sigma}_n$. Michel and Suquet (1992) have proposed to use the exact response of a hollow sphere under hydrostatic loading to get an estimate for $\bar{\Sigma}_n$ which is more accurate under hydrostatic stress:

$$\bar{\Sigma}_n \sim \left[\frac{9}{4} \left(\frac{1-f}{n(f^{-\frac{1}{n}}-1)} \right)^{\frac{2n}{n+1}} \Sigma_m^2 + \left(1 + \frac{2}{3}f\right) \Sigma_{eq}^2 \right]^{1/2}. \quad (\text{A.8})$$

The strain-rate predicted by this sharper lower bound reads as

$$\dot{\mathbf{E}} = \left[\psi_1' \left(\frac{\bar{\Sigma}_1}{1-f} \right) \frac{\partial \bar{\Sigma}_1}{\partial \Sigma} + \psi_n' \left(\frac{\bar{\Sigma}_n}{1-f} \right) \frac{\partial \bar{\Sigma}_n}{\partial \Sigma} \right]. \quad (\text{A.9})$$

where $\frac{\partial \bar{\Sigma}_1}{\partial \Sigma}$ and $\frac{\partial \bar{\Sigma}_n}{\partial \Sigma}$ can be deduced from (A.6) and (A.9) respectively

$$\frac{\partial \bar{\Sigma}_1}{\partial \Sigma} = \frac{1}{2\bar{\Sigma}_1} \left(\frac{3}{2} f \Sigma_m \mathbf{i} + 3 \left(1 + \frac{2}{3}f\right) \Sigma_d \right), \quad (\text{A.10})$$

$$\frac{\partial \bar{\Sigma}_n}{\partial \Sigma} = \frac{1}{2\bar{\Sigma}_n} \left[\frac{3}{2} \left(\frac{1-f}{n(f^{-\frac{1}{n}}-1)} \right)^{\frac{2n}{n+1}} \Sigma_m \mathbf{i} + 3 \left(1 + \frac{2}{3}f\right) \Sigma_d \right], \quad (\text{A.11})$$

where it is recalled that Σ_d denotes the overall stress deviator. Using Euler's relation for the positively homogeneous functions and $\bar{\Sigma}_n$, one gets

$$\frac{\partial \bar{\Sigma}_1}{\partial \Sigma} : \Sigma = \bar{\Sigma}_1, \quad \frac{\partial \bar{\Sigma}_n}{\partial \Sigma} : \Sigma = \bar{\Sigma}_n, \quad (\text{A.12})$$

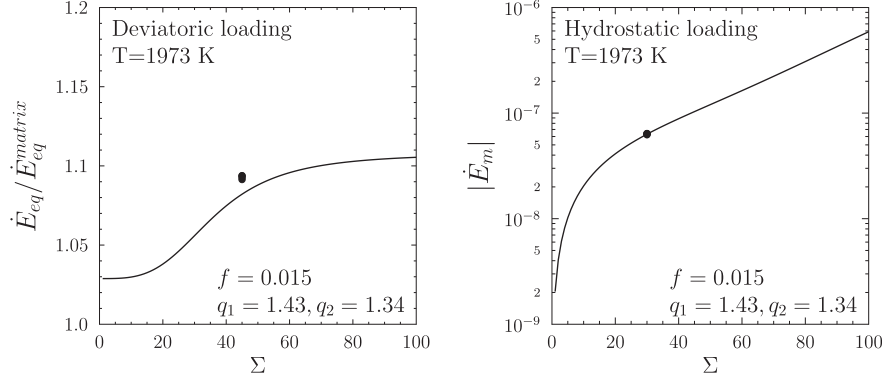


Fig. A.12. Deviatoric and hydrostatic loadings. Comparison between the model (A.16) (solid line) and full-field simulations (full circles corresponding to the 4 different microstructures: 1.1, 1.2, 1.3 and 1.4). Void volume fraction $f = 0.015$. $\dot{\epsilon}_{eq}^{matrix}$ denotes the equivalent strain rate in the fully dense material.

and therefore

$$\dot{\mathbf{E}} : \boldsymbol{\Sigma} = \psi'_1 \left(\frac{\bar{\Sigma}_1}{1-f} \right) \bar{\Sigma}_1 + \psi'_n \left(\frac{\bar{\Sigma}_n}{1-f} \right) \bar{\Sigma}_n = \frac{A \bar{\Sigma}_1^2}{1-f} + \frac{B \bar{\Sigma}_n^{n+1}}{(1-f)^n}. \quad (\text{A.13})$$

For uniaxial compression with $\boldsymbol{\Sigma} = -\Sigma \mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1$ ($\Sigma \geq 0$) one gets

$$\bar{\Sigma}_1 = \left(1 + \frac{11}{12} f \right)^{1/2} \Sigma, \quad \bar{\Sigma}_n = \left[\frac{1}{4} \left(\frac{1-f}{n(f^{-\frac{1}{n}}-1)} \right)^{\frac{2n}{n+1}} + 1 + \frac{2}{3} f \right]^{1/2} \Sigma$$

and

$$-\dot{\epsilon}_{11} = A \frac{1 + \frac{11}{12} f}{1-f} \Sigma + B \frac{\left[\frac{1}{4} \left(\frac{1-f}{n(f^{-\frac{1}{n}}-1)} \right)^{\frac{2n}{n+1}} + 1 + \frac{2}{3} f \right]^{\frac{n+1}{2}}}{(1-f)^n} \Sigma^n. \quad (\text{A.14})$$

A first comparison between full-field simulations and the hollow sphere with the actual porosity shows that the model with the actual porosity f underestimates the overall strain-rate. Conversely, introducing the modified porosity $f^* = qf$ and applying the same methodology of identification of the q parameter as in Section 6.1, leads to an overestimation of the overall strain rate for uniaxial loading over the whole range of temperature. Therefore, two parameters q_1 and q_2 , corresponding to two modified porosities $f_1 = q_1 f$ and $f_2 = q_2 f$ are introduced. These modified porosities enter the prefactors of the mean overall stress and the equivalent overall stress respectively:

$$\begin{cases} \bar{\Sigma}_1 = \left(\frac{9}{4} f_1 \Sigma_m^2 + \left(1 + \frac{2}{3} f_2 \right) \Sigma_{eq}^2 \right)^{1/2}, \\ \bar{\Sigma}_n = \left[\frac{9}{4} \left(\frac{1-f_1}{n(f_1^{-\frac{1}{n}}-1)} \right)^{\frac{2n}{n+1}} \Sigma_m^2 + \left(1 + \frac{2}{3} f_2 \right) \Sigma_{eq}^2 \right]^{1/2}. \end{cases} \quad (\text{A.15})$$

The corresponding effective relation under triaxial stress reads as

$$\dot{\mathbf{E}} = \frac{3}{4} \left[A \frac{f_1}{1-f} + B \frac{\bar{\Sigma}_n^{n-1}}{(1-f)^n} \left(\frac{1-f_1}{n(f_1^{-\frac{1}{n}}-1)} \right)^{\frac{2n}{n+1}} \right] \boldsymbol{\Sigma}_m \mathbf{i} + \frac{3}{2} \left(1 + \frac{2}{3} f_2 \right) \left[\frac{A}{1-f} + B \frac{\bar{\Sigma}_n^{n-1}}{(1-f)^n} \right] \boldsymbol{\Sigma}_d \quad (\text{A.16})$$

Under hydrostatic loading $\boldsymbol{\Sigma} = -\Sigma (\mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_3)$ ($\Sigma \geq 0$) one gets

$$\bar{\Sigma}_1 = \frac{3}{2} f_1^{1/2} \Sigma, \quad \bar{\Sigma}_n = \frac{3}{2} \left(\frac{1-f_1}{n(f_1^{-\frac{1}{n}}-1)} \right)^{\frac{n}{n+1}} \Sigma$$

which leads to the following estimation of $\text{Tr} \dot{\mathbf{E}}$:

$$-\text{Tr} \dot{\mathbf{E}} = \frac{9}{4} A \frac{f_1}{1-f} \Sigma + \left(\frac{3}{2} \right)^{n+1} B \frac{1}{(1-f)^n} \left(\frac{1-f_1}{n(f_1^{-\frac{1}{n}}-1)} \right)^n \Sigma^n. \quad (\text{A.17})$$

Similarly, under deviatoric loading with $\boldsymbol{\Sigma} = \Sigma_{eq} (-\frac{2}{3} \mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1 + \frac{1}{3} \mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_2 + \frac{1}{3} \mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_3)$

$$\bar{\Sigma}_1 = \bar{\Sigma}_n = \left(1 + \frac{2}{3} f_2 \right)^{1/2} \Sigma_{eq}$$

which gives:

$$\dot{\epsilon}_{eq} = \frac{A}{1-f} \left(1 + \frac{2}{3} f_2 \right) \Sigma_{eq} + \left(\frac{3}{2} \right)^{n+1} \frac{B}{(1-f)^n} \left(1 + \frac{2}{3} f_2 \right)^{\frac{n+1}{2}} \Sigma_{eq}^n. \quad (\text{A.18})$$

Finally, for uniaxial compression with: $\boldsymbol{\Sigma} = -\Sigma \mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1$ ($\Sigma \geq 0$) one gets:

$$\bar{\Sigma}_1 = \left(1 + \frac{1}{4} f_1 + \frac{2}{3} f_2 \right)^{1/2} \Sigma, \quad \bar{\Sigma}_n = \left[\frac{1}{4} \left(\frac{1-f_1}{n(f_1^{-\frac{1}{n}}-1)} \right)^{\frac{2n}{n+1}} + 1 + \frac{2}{3} f_2 \right]^{1/2} \Sigma$$

and the overall strain-rate in the direction of the compressive stress reads as:

$$-\dot{\epsilon}_{11} = A \frac{1 + \frac{1}{4} f_1 + \frac{2}{3} f_2}{1-f} \Sigma + \frac{B}{(1-f)^n} \left[\frac{1}{4} \left(\frac{1-f_1}{n(f_1^{-\frac{1}{n}}-1)} \right)^{\frac{2n}{n+1}} + 1 + \frac{2}{3} f_2 \right]^{\frac{n+1}{2}} \Sigma^n. \quad (\text{A.19})$$

The parameters q_i are identified for each microstructure separately. The parameter q_1 is found from the hydrostatic creep test, the parameter q_2 from the uniaxial test at $T = 2473$ K and under the largest applied stress $\Sigma = 100$ MPa. Finally the obtained parameters are averaged among different microstructures, at each value of porosity.

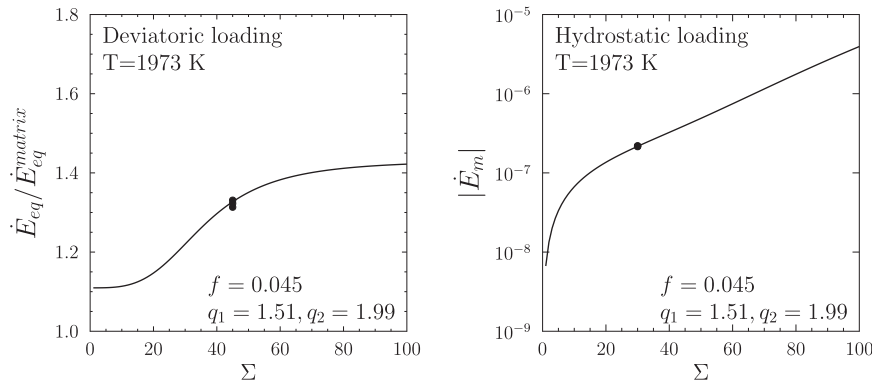


Fig. A.13. Deviatoric and hydrostatic loadings. Comparison between the model (A.16) (solid line) and full-field simulations (full circles corresponding to the 3 different microstructures: 2.1, 2.2 and 2.3). Void volume fraction $f = 0.045$. \dot{E}_{eq}^{matrix} denotes the equivalent strain rate in the fully dense material.

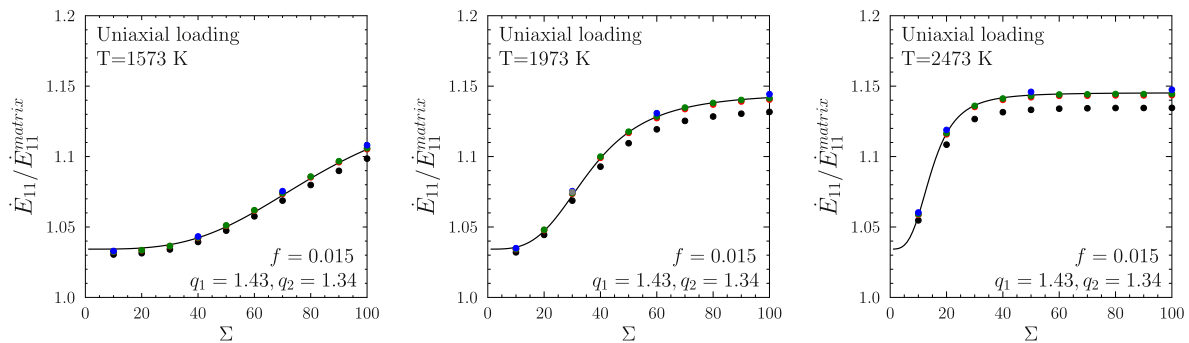


Fig. A.14. Uniaxial compression. Void volume fraction $f = 0.015$. Comparison between the model (A.16) (solid line) and full-field simulations (full circles) performed with the FFT-based method. Microstructure 1.0 (black circle), 1.1 (red), 1.2 (green), 1.3 (blue), 1.4 (grey). \dot{E}_{11}^{matrix} denotes the equivalent strain-rate in the fully dense material. (For interpretation of the references to color in this figure legend, the reader is referred to the web version of this article.)

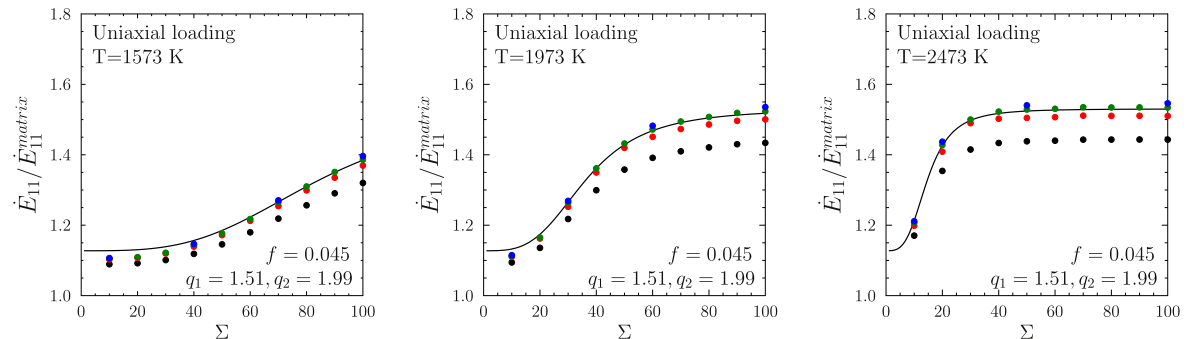


Fig. A.15. Uniaxial compression. Void volume fraction $f = 0.045$. Comparison between the model (A.16) (solid line) and full-field simulations (full circles) performed with the FFT-based method. Microstructure 2.0 (black circle), 2.1 (red), 2.2 (green), 2.3 (blue). \dot{E}_{11}^{matrix} denotes the equivalent strain-rate in the fully dense material. (For interpretation of the references to color in this figure legend, the reader is referred to the web version of this article.)

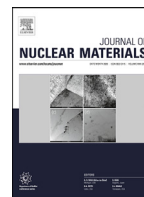
The predictions of the calibrated model (by identification of q_i) are compared with full-field simulations in Figs. A.14 and A.15. The agreement is seen to be quite satisfactory.

References

- Eyre, D., Milton, G., 1999. A fast numerical scheme for computing the response of composites using grid refinement. *J. Physique III* 6, 41–47.
- Fisher, S., White, R., Cook, P., Bremier, S., Corcoran, R., Stratton, R., Walker, C., Iverson, P., Palmer, I., 2002. Measurement and analysis of fission gas release from BNFL's SBR MOX fuel. *J. Nucl. Mater.* 306, 153–172.
- Fritzen, F., Forest, S., Böhlke, T., Kondo, D., Kanit, T., 2012. Computational homogenization of elastic-plastic porous materials. *Int. J. Plast.* 29, 102–109.
- Fuketa, T., 2012. Transient response of LWR fuels (RIA). In: Konings, R.J. (Ed.), *Comprehensive Nuclear Materials*. Elsevier, Oxford, pp. 579–593.
- Guérin, Y., Noirot, J., Lespiaux, D., Struzik, C., Garcia, P., Blanpain, P., Chaigne, G., 2000. Microstructure evolution and in-reactor behaviour of MOX fuel. *Proceedings of the International Topical Meeting on Light Water Reactor Fuel Performance*, Park City, USA, 10–13 April 2000.
- Jeulin, D., 2000. Random texture models for material structures. *Stat. Comput.* 10 (2), 121–132.
- Kabel, M., Böhlke, T., Schneider, M., 2014. Efficient fixed point and Newton-Krylov solvers for FFT-based homogenization of elasticity at large deformations. *Comput. Mech.* 54, 1497–1514.
- Koo, Y.H., Sohn, D.S., Volkov, B., 1997. A comparative analysis of UO₂ and MOX fuel behavior under reactivity initiated accident. *Ann. Nucl. Energy* 24 (11), 859–870.
- Lantuejoul, C., 2002. *Geostatistical Simulations Models and Algorithms*. Springer, Berlin, Germany.
- Largenton, R., 2012. MOX Fuel Effective Behavior Modeling by a Micro-Mechanical Nonuniform Transformation Field Analysis. Université de Provence Aix-Marseille 1 Thesis. <http://www.theses.fr/170317846>
- Leblond, J., Perrin, G., Suquet, P., 1994. Exact results and approximate models for porous viscoplastic solids. *Int. J. Plast.* 10, 213–235.
- Massih, A.R., 2006. *Models for MOX Fuel Behavior*. 2006:10, SKI
- Matheron, G., 1967. *Eléments Pour Une Théorie Des Milieux poreux*. Masson, Paris.
- Matheron, G., 1975. *Random Set and Integral Geometry*. Wiley, New York, USA.
- Metropolis, N., Rosenbluth, A.W., Rosenbluth, M.N., Teller, A.H., 1953. Equation of state calculations by fast computing machines. *J. Chem. Phys.* 21 (6), 1087–1092. Teller, E.

- Michel, J., Suquet, P., 1992. The constitutive law of nonlinear viscous and porous materials. *J. Mech. Phys. Solids* 40 (4), 783–812.
- Monchiet, V., Bonnet, G., 2012. A polarization-based FFT iterative scheme for computing the effective properties of elastic composites with arbitrary contrast. *Int. J. Numer. Meth. Eng.* 89, 1419–1436.
- Monerie, Y., Gatt, J., 2006. Overall viscoplastic behavior of non-irradiated porous nuclear ceramics. *Mech. Mater.* 38, 608–619.
- Moulinec, H., Suquet, P., 1994. A fast numerical method for computing the linear and the nonlinear mechanical properties of composites. *C. R. Acad. Sci. Paris II* 318, 1417–1423.
- Moulinec, H., Suquet, P., 1998. A numerical method for computing the overall response of nonlinear composites with complex microstructure. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* 157 (1), 69–94.
- Moulinec, H., Suquet, P., Milton, G., 2018. Convergence of iterative methods based on Neumann series for composite materials: theory and practice. *Int. J. Numer. Meth. Eng.* 114, 1103–1130.
- Muller, D.E., 1956. A method for solving algebraic equations using an automatic computer. *Math. Tables Other Aids Comput.* 10 (56), 208–215.
- Müller, W., 1996. Mathematical versus experimental stress analysis of inhomogeneities in solids. *J. Physique IV* 6, 1–148. C1.139–C
- Noiro, J., Desgranges, L., Lamontagne, J., 2008. Detailed characterisations of high burn-up structures in oxide fuels. *J. Nucl. Mater.* 372 (2), 318–339.
- Oudinet, G., Munoz-Viallard, I., Aufore, L., Gotta, M.J., Becker, J., Chiarelli, G., Castelli, R., 2008. Characterization of plutonium distribution in MIMAS MOX by image analysis. *J. Nucl. Mater.* 375 (1), 86–94.
- Ponte Castañeda, P., 1991. The effective mechanical properties of nonlinear isotropic composites. *J. Mech. Phys. Solids* 39 (1), 45–71.
- Ponte Castañeda, P., Suquet, P., 1997. Nonlinear composites. vol. 34 of advances in applied mechanics. Academic Press 171–302.
- Roberts, J.T.A., Voglewede, J.C., 1973. Application of deformation maps to the study of in-reactor behavior of oxide fuels. *J. Am. Ceram. Soc.* 56 (9), 472–475.
- Routbort, J., Javed, N., Voglewede, J., 1972. Compressive creep of mixed-oxide fuel pellets. *J. Nucl. Mater.* 44, 247–259.
- Routbort, J., Voglewede, J., 1973. Creep of mixed-oxide fuel pellets at high stress. *J. Am. Ceram. Soc.* 56 (6), 330–333.
- Sasajima, H., Fuketa, T., Nakamura, T., Nakamura, J., Kikuchi, K., 2000. Behavior of irradiated ATR/MOX fuel under reactivity initiated accident conditions. *J. Nucl. Sci. Technol.* 37 (5), 455–464.
- Schmitz, F., Papin, J., 1999. High burnup effects on fuel behaviour under accident conditions: the tests CABRI REP-Na. *J. Nucl. Mater.* 270 (1), 55–64.
- Schneider, M., Ospald, F., Kabel, M., 2016. Computational homogenization of elasticity on a staggered grid. *Int. J. Numer. Meth. Eng.* 105 (9), 693–720.
- Serra, J., 1982. *Image Analysis and Mathematical Morphology* Vol. 1. Academic Press, New York, USA.
- Slagle, O., Bard, F., Gneiting, B., Thielges, J., 1984. Fuel transient deformation. *Nucl. Eng. Des.* 79 (3), 301–307.
- Suquet, P., 1992. On bounds for the overall potential of power law materials containing voids with an arbitrary shape. *Mech. Res. Commun.* 19 (1), 51–58.
- Suzuki, M., Sugiyama, T., Fuketa, T., 2008. Thermal stress analysis of high-burnup LWR fuel pellet pulse-irradiated in Reactivity-Initiated Accident conditions. *J. Nucl. Sci. Technol.* 45 (11), 1155–1164.
- Torquato, S., 1982. *Random Heterogeneous Materials*. Springer, New York, USA.
- Tvergaard, V., 1982. On localization in ductile materials containing spherical voids. *Int. J. Fract.* 18 (4), 237–252.
- Vincent, P.G., Monerie, Y., Suquet, P., 2009. Porous materials with two populations of voids under internal pressure: I. instantaneous constitutive relations. *Int. J. Solids Struct.* 46, 480–506. (3–4)
- Vincent, P.G., Suquet, P., Monerie, Y., Moulinec, H., 2014. Effective flow surface of porous materials with two populations of voids under internal pressure: II. full-field simulations. *Int. J. Plast.* 56, 74–98.
- White, R., Fisher, S., Cook, P., Stratton, R., Walker, C., Palmer, I., 2001. Measurement and analysis of fission gas release from BNFL's SBR MOX fuel. *J. Nucl. Mater.* 288, 43–56.
- Willot, F., Abdallah, B., Pellegrini, Y., 2014. Fourier-based schemes with modified Green operator for computing the electrical response of heterogeneous media with accurate local fields. *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.* 98 (7), 518–533.
- Wojtacki, K., Daridon, L., Monerie, Y., 2017. Computing the elastic properties of sandstone submitted to progressive dissolution. *Int. J. Rock Mech. Min. Sci.* 95, 16–25.
- Zeman, J., Vondřejc, J., Novák, J., Marek, I., 2010. Accelerating a FFT-based solver for numerical homogenization of periodic media by conjugate gradients. *J. Comput. Phys.* 229 (21), 8065–8071.

7.4 Article : "Porous polycrystal plasticity modeling of neutron- irradiated austenitic stainless steels"



Porous polycrystal plasticity modeling of neutron-irradiated austenitic stainless steels

Pierre-Guy Vincent^{a,*}, Hervé Moulinec^b, Louis Joëssel^a, Martín I. Idiart^{c,d}, Mihail Găărăjeu^b

^a Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire, B.P. 3, Saint-Paul-lez-Durance Cedex 13115, France

^b Aix-Marseille Univ, CNRS, Centrale Marseille, LMA, 4 Impasse Nikola Tesla, CS 40006, Marseille Cedex 13 13453, France

^c Centro Tecnológico Aeroespacial / Departamento de Aeronáutica, Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de La Plata Avda. 1 esq. 47 S/N, La Plata B1900TAG, Argentina

^d Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET) CCT La Plata, Calle 8 N 1467, La Plata B1904CMC, Argentina

ARTICLE INFO

Article history:

Received 12 March 2020

Revised 16 July 2020

Accepted 12 August 2020

Available online 19 August 2020

Keywords:

Crystal plasticity

Irradiation hardening

Void swelling

Fast Fourier Transforms simulations

Austenitic stainless steel

Micromechanics of porous media

ABSTRACT

A micromechanical model for quantifying the simultaneous influence of irradiation hardening and swelling on the mechanical stiffness and strength of neutron-irradiated austenitic stainless steels is proposed. The material is regarded as an aggregate of equiaxed crystalline grains containing a random dispersion of pores (large voids due to large irradiation levels) and exhibiting elastic isotropy but viscoplastic anisotropy. The overall properties are obtained via a judicious combination of various bounds and estimates for the elastic energy and viscoplastic dissipation of voided crystals and polycrystals. Reference results are generated with full-field numerical simulations for dense and voided polycrystals with periodic microstructures and crystal plasticity laws accounting for the evolution of dislocation and Frank loop densities. These results are calibrated with experimental data available from the literature and are employed to assess the capabilities of the proposed model to describe the evolution of mechanical properties of highly irradiated Solution Annealed 304L steels at 330°C. The agreement between model predictions and simulations is seen to be quite satisfactory over the entire range of porosities and loadings investigated. The expected decrease of overall elastic properties and strength for porosities observed at large irradiation levels is reported. The mathematical simplicity of the proposed model makes it particularly apt for implementation into finite-element codes for structural safety analyses.

© 2020 Elsevier B.V. All rights reserved.

1. Introduction

Many structural components within the vessel of Pressurized Water Reactors (PWR) are made of austenitic stainless steels. These so-called “internals” are found, for instance, in subsystems associated with many safety functions in western-type PWR, such as for core support, reactivity control, core cooling, and instrumentation availability [1]. In French 1300 MWe nuclear power plants operating under normal conditions, internals are subject to temperatures ranging from 286°C to 370°C [1] and to neutron irradiation doses producing up to a hundred displacements per atoms (dpa) over the reactor lifetime [2]. Such operating environments can induce significant changes in the microstructure and microchemistry of the steel that degrade its mechanical properties [3]. However, the operating environment and ensuing degradation of a particular internal depends on its location relative to the core. This has motivated

the development of engineering models to assess the influence of prolonged irradiation periods on the mechanical properties of internals as a function of environmental conditions.

Recent models proposed in [4,5] rely on finite-element descriptions wherein bulk steel is represented as a periodic aggregate of single crystals and the elastoplastic deformations within the crystals are described by constitutive laws that account for the evolution of dislocation and Frank loop densities [6,7]. These micromechanical models are able to reproduce the increase in macroscopic tensile strength along with the significant reduction of strain hardening typically observed in irradiated steels, and therefore serve to quantify the degradation of mechanical properties due to irradiation. However, a basic assumption of these models is that the crystals are fully dense. Now, some microscopic analyses of internals of PWR have revealed the occasional presence of intragranular voids or cavities that could be associated with incipient swelling [8,9]. Many observations of macroscopic void swelling in Fast Breeder Reactors (FBR) have also been reported in the open literature [9]. Swelling normally exhibits an incubation period followed by a steady growth rate in the range of 1% per dpa [9]; it

* Corresponding author.

E-mail address: pierre-guy.vincent@irsn.fr (P.-G. Vincent).

is sensitive to several parameters including chemical composition, heat treatment and mechanical processing of the material, irradiation temperature, dpa and dpa rate, and irradiation spectrum. The presence of such intragranular porosity levels is expected to further degrade the mechanical properties. Motivated by these observations, the purpose of this work is to propose a micromechanical model for quantifying the simultaneous influence of irradiation hardening and swelling on the mechanical stiffness and strength of austenitic steels subject to general stress states. The model regards bulk steel as a polycrystalline aggregate of equiaxed grains containing a random dispersion of voids and exhibiting an elasto-viscoplastic microscopic response. The focus is on large irradiation doses whereby the microscopic response no longer evolves with irradiation damage. The macroscopic elasto-viscoplastic response for a given degree of swelling is then obtained via a judicious combination of various bounds and estimates for the elastic energy and viscoplastic dissipation of voided crystals and polycrystals. Reference results are also generated with full-field numerical simulations for dense and voided polycrystals with periodic microstructures and the crystal plasticity laws of [6,7]. These results are calibrated with experimental data available from the literature and employed to assess the capabilities of the proposed micromechanical model to describe the evolution of mechanical properties of highly irradiated Solution Annealed 304L steels at 330°C. The proposed model provides the elasto-viscoplastic deformation rate in terms of the stress, the stress rate, and the degree of swelling, as required by common phenomenological models for irradiated stainless steels [10].

2. Analytical model

2.1. Microstructure

Austenitic stainless steels are regarded as random aggregates of perfectly bonded single crystals, or grains, containing a dispersion of microvoids or pores whose level depends on the irradiation dose. Only large voids due to large irradiation levels are considered in this study. Individual grains are assumed to be of similar size, much smaller than the size of the aggregate and the scale of variation of the applied loads, while the voids are assumed to be much smaller than the grains. Furthermore, the aggregates are assumed to have statistically uniform and ergodic microstructures. For simplicity, the model assumes that aggregates are untextured and porosity dispersion is isotropic. This is motivated by an observation reported in [11] on an irradiated SA304L stainless steel, in which the spatial distribution of the cavities was found to be homogeneous.

2.2. Microscopic response

The local deformation of the grains is assumed to be the additive composition of an elastic part and a viscoplastic part due to slip along the standard twelve slip systems of face-centered cubic crystals ($\{111\}\langle 110 \rangle$). The total strain rate is thus written as

$$\dot{\boldsymbol{\epsilon}} = \dot{\boldsymbol{\epsilon}}^{el} + \sum_{s=1}^{12} \dot{\gamma}^{(s)} \boldsymbol{\mu}^{(s)} \quad (1)$$

with each term characterized by

$$\dot{\boldsymbol{\epsilon}}^{el} = \mathbb{S} : \dot{\boldsymbol{\sigma}} \quad \text{and} \quad \dot{\gamma}^{(s)} = \dot{\gamma}_0 \left| \frac{\boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\mu}^{(s)}}{\tau_0} \right|^n \text{sign}(\boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\mu}^{(s)}), \quad (2)$$

where $\boldsymbol{\sigma}$, $\boldsymbol{\epsilon}$, $\boldsymbol{\epsilon}^{el}$, and $\boldsymbol{\mu}^{(s)}$ denote the local stress, total infinitesimal strain, elastic strain, and Schmid tensors, respectively, $\dot{\gamma}^{(s)}$ denotes the slip rate along the system s , and a dot over a variable denotes

its time derivative. The inner product $\boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\mu}^{(s)}$ of the two second-order tensors $\boldsymbol{\sigma}$ and $\boldsymbol{\mu}^{(s)}$ is defined as $\sigma_{ij} \mu_{ij}^{(s)}$. The Schmid tensor $\boldsymbol{\mu}^{(s)}$ is obtained from the symmetrized dyadic product of the two unit vectors $\mathbf{n}^{(s)}$, normal to the slip plane, and $\mathbf{m}^{(s)}$, along the slip direction of the s^{th} system. They are specified in Appendix A for face-centered cubic crystals. The elastic compliance tensor is taken of the form

$$\mathbb{S} = \frac{1}{3k} \mathbb{J} + \frac{1}{2\mu} \mathbb{K}, \quad (3)$$

where \mathbb{J} and \mathbb{K} denote the standard fourth-order isotropic projection tensors [12]. The microscopic response is therefore fully characterized by the bulk and shear moduli k and μ , the creep exponent n , the flow stress τ_0 , and the reference strain rate $\dot{\gamma}_0$. Thus, the description neglects elastic anisotropy, plastic hardening, and variability of flow stress amongst slip systems, allowing for analytical treatment. These simplifications are introduced in order to get an analytical model together with few parameters to be identified. The comparisons provided in Section 4 suggest that this simplified description of the local deformation does not compromise the capabilities of the model.

2.3. Macroscopic response

The macroscopic response is characterized by the relation between the macroscopic stress $\boldsymbol{\Sigma}$ and strain \boldsymbol{E} tensors, which are identified with the volume averages of their local counterparts over a representative volume element of the voided polycrystal. The proposed model neglects any elastoplastic coupling at this level, so that the macroscopic strain rate $\dot{\boldsymbol{E}}$ is the additive composition of an elastic part $\dot{\boldsymbol{E}}^{el}$ and a viscoplastic part $\dot{\boldsymbol{E}}^{vp}$:

$$\dot{\boldsymbol{E}} = \dot{\boldsymbol{E}}^{el} + \dot{\boldsymbol{E}}^{vp}. \quad (4)$$

The dependence of each term on the macroscopic stress tensor $\boldsymbol{\Sigma}$ is obtained by a judicious combination of various bounds and estimates for the elastic energy and viscoplastic dissipation of voided crystals and polycrystals. Mathematical derivations and definitions of the model are provided in Appendix A. The resulting constitutive relations are

$$\begin{aligned} \dot{\boldsymbol{E}}^{el} &= \tilde{\mathbb{S}} : \dot{\boldsymbol{\Sigma}} \quad \text{and} \\ \dot{\boldsymbol{E}}^{vp} &= \dot{\gamma}_0 \left| \frac{\lambda}{\tau_0} \right|^n \frac{f^* \left(1 - \frac{n-1}{n+1} h^{-2}(\Sigma_m/\lambda) \right) h^i(\Sigma_m/\lambda) \mathbf{i} + \frac{3}{\beta} (\Sigma_d/\lambda)}{f^* \left(1 - \frac{n-1}{n+1} h^{-2}(\Sigma_m/\lambda) \right) h^i(\Sigma_m/\lambda) (\Sigma_m/\lambda) + \frac{2}{\beta} (\Sigma_{eq}/\lambda)^2} \text{sign}(\lambda), \end{aligned} \quad (5)$$

where \mathbf{i} and $\boldsymbol{\Sigma}_d$ denote the identity and stress deviator tensors, respectively, $\Sigma_m = \text{tr} \boldsymbol{\Sigma} / 3$ and $\Sigma_{eq} = \sqrt{(3/2) \boldsymbol{\Sigma}_d : \boldsymbol{\Sigma}_d}$ are the macroscopic hydrostatic and von Mises equivalent stresses, f is the total porosity of the aggregate for the irradiation level considered – henceforth simply referred to as porosity –, $f^* = qf$ is a modified porosity by a fixed parameter q , the overall compliance tensor is given by

$$\tilde{\mathbb{S}} = \frac{1}{3\tilde{k}} \mathbb{J} + \frac{1}{2\tilde{\mu}} \mathbb{K} \quad (6)$$

with

$$\begin{aligned} \tilde{k} &= k - f \frac{k}{1 - (1-f) \frac{k}{k+k^*}}, \quad \tilde{\mu} = \mu - f \frac{\mu}{1 - (1-f) \frac{\mu}{\mu+\mu^*}}, \\ k^* &= \frac{4}{3} \mu, \quad \mu^* = \frac{\mu}{6} \frac{9k+8\mu}{k+2\mu}, \end{aligned} \quad (7)$$

the gauge factor λ is solution to the nonlinear equation

$$\frac{1}{\beta} (\Sigma_{eq}/\lambda)^2 + f^* \left(h(\Sigma_m/\lambda) + \frac{n-1}{n+1} h^{-1}(\Sigma_m/\lambda) \right) = 1 + \frac{n-1}{n+1} f^{*2}, \quad (8)$$

Table 1
Values of α and β entering the gauge surface (8) for some values of exponent n .

n	1	2	3	5	10	15
α	0.651	1.165	1.397	1.597	1.743	1.789
β	1.502	2.732	3.586	4.541	5.457	5.793

Table 2
Description of the microstructures.

Porosity (f)	Number of voids	Mean number of voids per grain	Approximate number of voxels per void
0	0	0	-
0.02	2048	4	1310
0.04	4096	8	1310
0.06	6144	12	1310
0.08	8192	16	1310

and the function h , with derivative h' , is given by

$$h(x) = \left(1 + \frac{|x|^{1+\frac{1}{n}}}{\alpha n}\right)^n \quad (9)$$

The coefficients α and β in these expressions depend on the creep exponent n and local plastic anisotropy as discussed in Appendix A. Table 1 specifies numerical values for common creep exponents and the local plastic anisotropy assumed by (1)–(2) for face-centered cubic crystals. This set of expressions serves to fully characterize the elasto-viscoplastic response of the porous polycrystalline aggregate for any multiaxial loading history. As irradiation dose progresses, the porosity f —and eventually some local material parameters— will evolve. The resulting stiffness is dictated by expressions (7) —the Young’s modulus following from $\tilde{E} = 9\tilde{k}\tilde{\mu}/(\tilde{\mu} + 3\tilde{k})$ —, while the resulting strength is identified with the flow stress deep in the plastic range.

3. Numerical model

3.1. Microstructure

In contrast to the analytical model considered above, the numerical model idealizes stainless steels as periodic aggregates of grains describing a Voronoi tessellation and containing an isotropic distribution of spherical voids. Fig. 1 shows the various unit cells employed in this study. These cells contain 512 grains and a varying number of intragranular mono-sized voids. The same Voronoi tessellation is used for all these microstructures. For porosity levels of 0.02 or 0.04, three distinct sets of positions of the centers of the voids are considered. For each of these microstructures, the porosity over the whole volume and the number of voids in the total volume is prescribed. It is noted that the voids are always of the same size, and are located entirely inside the grains, even though numerous voids may fall in areas close to the grain boundaries. The centers of the voids are supposed to be randomly distributed inside the grains. The precise number of grains and voids employed follows from the parametric study reported in Appendix B. A summary of these microstructural parameters is provided in Table 2.

3.2. Microscopic response

The local deformation of the grains is assumed to follow a physically-based crystal plasticity law recently developed by [6,7] specifically for irradiated SA304L steels at 330°C. This crystal plasticity law was used by [4] for studying the intergranular stress distribution in irradiated stainless steels, by [13] for studying the void growth and coalescence of voids in irradiated face-centered

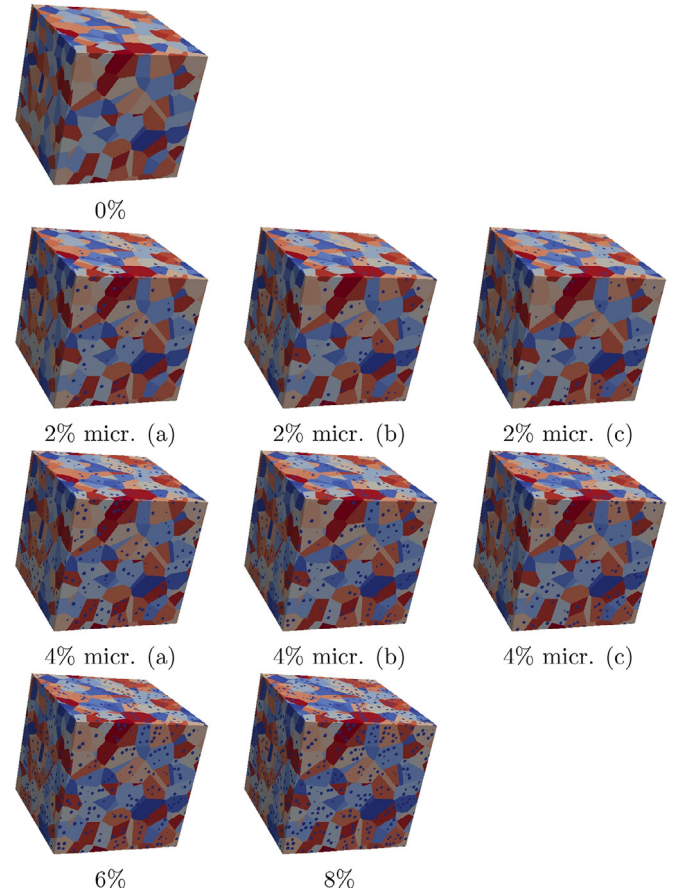


Fig. 1. Microstructures employed in numerical model for various porosity levels and number of voids. Three different void distributions are considered in microstructures with porosity levels 2% and 4%.

cubic single crystals, and by [14] for a comparison between finite element and Fast Fourier transforms-based methods simulations. This law assumes the same additive form (1) to (2) for the local deformation but with the slip rates given by

$$\dot{\gamma}^{(s)} = \left\{ \frac{|\sigma : \mu^{(s)}| - \tau_c^{(s)}}{K_0} \right\}^n \text{sign}(\sigma : \mu^{(s)}), \quad (10)$$

where K_0 is a Norton parameter and $\{ \cdot \}$ denote the Macaulay brackets. In turn, the material parameters $\tau_c^{(s)}$ represent critical resolved shear stresses that evolve with plastic deformation according to a hardening law of the form

$$\tau_c^{(s)} = \bar{\tau}_0 + \tau_a \exp\left(-\frac{|\gamma^{(s)}|}{\bar{\gamma}_0}\right) + \bar{\mu} \sqrt{\sum_{u=1}^{12} a_{su} r_D^{(u)}} + \alpha_L \bar{\mu} \sqrt{\sum_{p=1}^4 r_L^{(p)}}, \quad (11)$$

where the internal variables $r_D^{(s)}$ and $r_L^{(p)}$ represent, respectively, normalized densities of dislocations moving along the twelve crystallographic directions $\{111\}\langle 110 \rangle$ and densities of Frank loops defined on the four crystallographic planes $\{111\}$, which in turn evolve with plastic deformation according to

$$\dot{r}_D^{(s)} = \left(\frac{1}{\bar{K}} \sqrt{\sum_{u=1}^{12} b_{su} r_D^{(u)}} + \frac{1}{\bar{K}} \sqrt{K_{dl} \sum_{p=1}^4 r_L^{(p)}} - G_c r_D^{(s)} \right) |\dot{\gamma}^{(s)}| \quad (12)$$

and

$$\dot{r}_L^{(p)} = -A_L (r_L^{(p)} - r_L^{sat}) \left(\sum_{s \in \text{plane } p} |\dot{\gamma}^{(s)}| \right) \left(\sum_{s \in \text{plane } p} r_D^{(s)} \right). \quad (13)$$

Table 3

Model parameters for SA304L stainless steel at 330°C and irradiated to 13 dpa, taken from [6]. Top row: parameters in absolute units. Middle and bottom row: normalized parameters.

C_{11}	C_{12}	C_{44}	$\bar{\mu}$	K_0	τ_a				
199 GPa	136 GPa	105 GPa	65.5 GPa	10 MPa s ^{1/n}	61.2 MPa				
n	G_c	$\bar{\kappa}$	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6	
15	10.4	42.8	0.124	0.124	0.070	0.625	0.137	0.122	
b_{ii}	$b_{ij} i \neq j$	r_D^0	r_L^0	K_{dl}	α_L	A_L	r_L^{sat}		
0	1	1.03 10 ⁻¹¹	4.9 10 ⁻⁶	2.50 10 ⁻⁷	0.57	5.548 10 ⁸	3.234 10 ⁻⁶		

Unlike the law employed in the analytical model, this law accounts for elastic anisotropy and plastic hardening. Elastic anisotropy is accounted for by assuming a cubic elasticity tensor $\mathbb{C} \equiv \mathbb{S}^{-1}$; plastic hardening is accounted for via twelve dislocation densities and four Frank loop densities. The critical resolved stresses are coupled with the dislocation densities via a twelve by twelve dislocation interaction matrix a_{su} with six independent parameters (general form specified in Appendix A), while the various dislocation densities are themselves coupled via a twelve by twelve matrix b_{su} indicated in Table 3. Initially, the normalized dislocation densities are assumed to take the same value r_D^0 in all slip systems, and the normalized Frank loop densities are assumed to take the same value r_L^0 for all slip planes. To account for a dislocation unlock mechanism, a reference slip denoted by $\bar{\gamma}_0$ has been introduced to adjust the speed of avalanche after unlocking the dislocations. For a detailed description of the physical basis behind this description the reader is referred to [4,6,7].

3.3. Macroscopic response

As in the analytical model, the macroscopic response is identified with the relation between the volume averages of the stress and strain fields over a representative volume element. To compute these fields for given loading conditions, the above constitutive equations were implemented in the software CraFT [15] which solves the mechanical field equations by means of a Fast-Fourier Transform (FFT) algorithm proposed by [16,17] to determine the effective properties of periodic composites, and integrates the response in time with a fully implicit scheme [18]. Following the work of [19] on porous viscoplastic crystals, we adopt the FFT algorithm often referred to as the “basic scheme” which ensures strain compatibility. The scheme discretizes the unit cell with a regular grid composed of voxels. Based on the parametric study reported in Appendix B we adopt a grid of 512³ voxels so that there are 64³ voxels per grain on average and about 1310 voxels per void.

Results are generated by imposing mixed loading conditions [20]: the direction of the overall stress (Σ^o) is prescribed together with the strain-rate in this direction. At each iteration j of the general algorithm, two errors are computed to check convergence. One is relative to the local equilibrium condition,

$$\text{err}_1(j) = \frac{\langle \|\text{div } \sigma^{(j)}\|^2 \rangle^{1/2}}{\|\langle \sigma^{(j)} \rangle\|}, \quad (14)$$

while the other is relative to the prescribed direction of the macroscopic stress:

$$\text{err}_2(j) = \frac{\|\langle \sigma^{(j)} \rangle - \bar{k} \Sigma^o\|}{\|\bar{k} \Sigma^o\|}. \quad (15)$$

Here, \bar{k} indicates the unknown level of overall stress, $\langle \sigma^{(j)} \rangle$ is the volume average of the stress at iteration j (with the following notation $\langle \cdot \rangle = 1/|\Omega| \int_{\Omega} d\Omega$, where Ω is the entire domain) and $\|\cdot\|$ denotes the Euclidean norm squared. The iterative procedure is stopped when the errors err_1 and err_2 are respectively smaller than 10⁻² and 10⁻⁴.

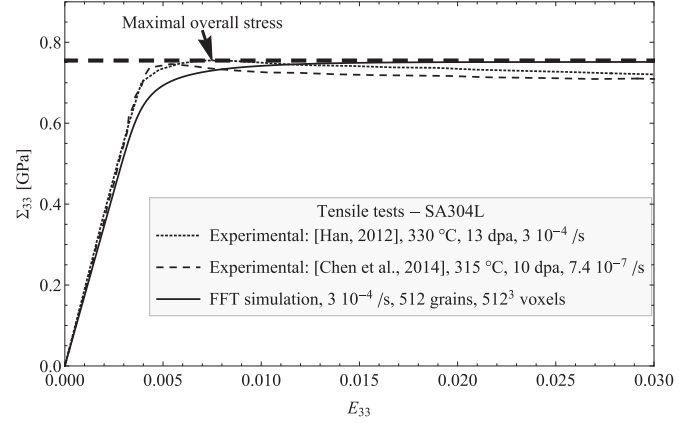


Fig. 2. Tensile response. Comparison between experiments and numerical model.

In the sequel, predictions for a tensile loading are obtained by fixing a macroscopic stress direction with only one non-vanishing component $\Sigma_{33} > 0$, applying a strain rate $\dot{E}_{33} = 3 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$, and stopping when E_{33} reaches 3×10^{-2} . In turn, predictions for a purely hydrostatic loading are obtained by fixing Σ^o equal to the identity tensor, applying a hydrostatic strain rate $\dot{E}_m = (\dot{E}_{11} + \dot{E}_{22} + \dot{E}_{33})/3 = 3 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$, and stopping when E_m reaches 3×10^{-2} . Finally, mixed stress states are obtained by fixing

$$\Sigma^o = \begin{pmatrix} \Sigma_{11}^o & 0 & 0 \\ 0 & \Sigma_{11}^o & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{with } 0 \leq \Sigma_{11}^o \leq 1, \quad (16)$$

applying the rate $\Sigma_{11}^o \dot{E}_{11} + \Sigma_{11}^o \dot{E}_{22} + \dot{E}_{33} = 9 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$, and stopping when that combination reaches 9×10^{-2} . Another stress state including simple shear is tested by fixing

$$\Sigma^o = \begin{pmatrix} 1 & \Sigma_{12}^o & 0 \\ \Sigma_{12}^o & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{with } 0 \leq \Sigma_{12}^o \leq 1.732, \quad (17)$$

applying the rate $\dot{E}_{11} + \dot{E}_{22} + \dot{E}_{33} + 2\Sigma_{12}^o \dot{E}_{12} = 9 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$, and stopping when that combination reaches 9×10^{-2} .

4. Results

4.1. Numerical model versus experimental observations

We begin by calibrating the numerical model of Section 3 with available experimental observations for fully dense steels. To that end, we adopt all material parameters from reference [6] with the exception of $\bar{\gamma}_0$ and $\bar{\tau}_0$. The various numerical values are given in Table 3 with the elastic constants reported in Voigt notation. A relatively high creep exponent is employed to represent a low strain-rate sensitivity. The remaining parameters $\bar{\gamma}_0$ and $\bar{\tau}_0$ are then used to fit various tensile curves of irradiated SA304L steels at about 300°C and high exposure levels—at least 10 dpa—reported by [4,6,21]. Fig. 2 shows comparisons between those measurements and numerical predictions obtained with $\bar{\gamma}_0 = 0.5$ and

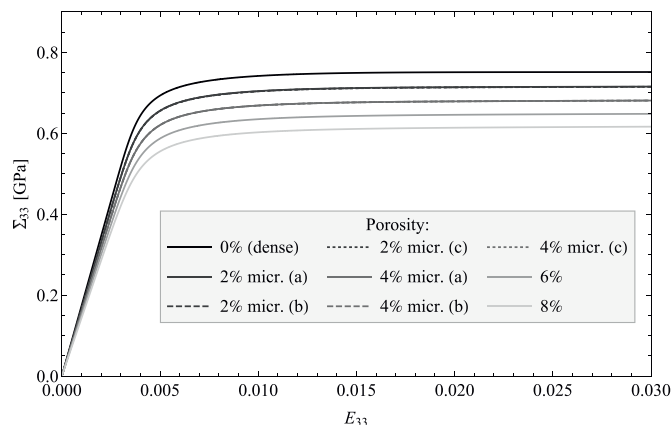


Fig. 3. Numerical predictions for the tensile response of porous polycrystals with the microstructures of Fig. 1.

$\bar{\tau}_0 = 58$ MPa. These values are seen to reproduce the experimental measurements with reasonable accuracy. In this connection, it is observed that the experimental curves exhibit a slight softening just after the maximal stress. In line with [6], we understand that this softening is not due to the stretching of the tensile specimen or to the ductile damage, but rather due to the specific dislocation dynamics. The crystal plasticity laws of Section 3.2 can reproduce such a peak with a suitable choice of parameters. Indeed, $\bar{\gamma}_0$ adjusts the speed of avalanche after unlocking the dislocations, and therefore decreasing its value enhances the peak on the overall stress–strain curve of the polycrystal –often called “yield point” phenomenon–, while $\bar{\tau}_0$ adjusts the maximum stress level. However, numerical results for material responses with well-defined peaks were found to exhibit pronounced dependences on the grid size. For this reason, we have opted for a description that identifies maximum stress levels with those developed deep in the plastic range.

The calibrated model is now used to generate results for porous materials. Fig. 3 shows the tensile curves obtained with the various microstructures presented in Section 3. As expected, intragranular porosity reduces the overall Young’s modulus and the maximal overall stress. It is seen that the three microstructures with 2% porosity –microstructures (a), (b) and (c) in Fig. 1– lead to similar tensile curves: the full-line, dashed and dotted curves in Fig. 3 are visually indistinguishable. A similar conclusion is reached for 4% porosity. This confirms the appropriate representativeness of the distribution voids within the unit cell. Thus, we can extract from these curves representative results for the evolution of Young’s modulus and maximal stress with swelling, and compare them with experimental measurements.

The evolution of the overall Young’s modulus \tilde{E} as a function of swelling is reported in Fig. 4, along with experimental measurements of [22,23] on a Russian cold-worked austenitic steel. Here, the swelling is defined in terms of the porosity f as $f/(1-f)$, and \tilde{E}_0 denotes the Young’s modulus for the fully dense material. The tested samples were cut from fuel element cladding tubes that had been irradiated in the BN-600 fast reactor. The numerical model is found to be in reasonable accord with experiments. According to the model, a porosity level of 8% causes a 15% reduction in Young’s modulus.

The corresponding evolution of overall maximal stress \tilde{R}_m in simulations and experiments is reported in Fig. 5, along with experimental measurements of [24] on a Russian Kh18H10T annealed austenitic stainless steel. The tested samples come from a duct irradiated in the BOR-60 fast reactor. In this connection, it is recalled that the Kh18H10T steel is the primary construction material of in-

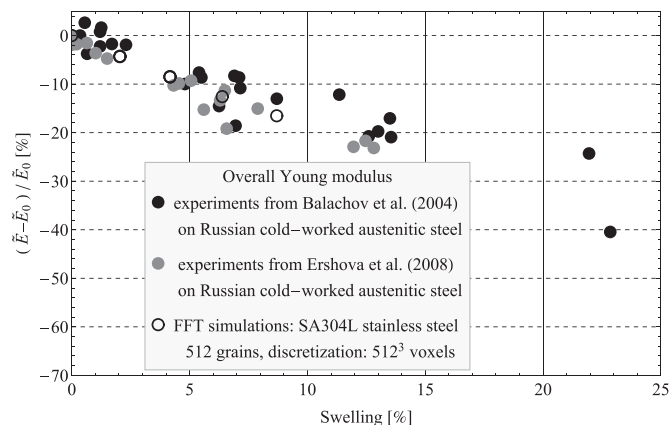


Fig. 4. Overall Young’s modulus as a function of swelling.

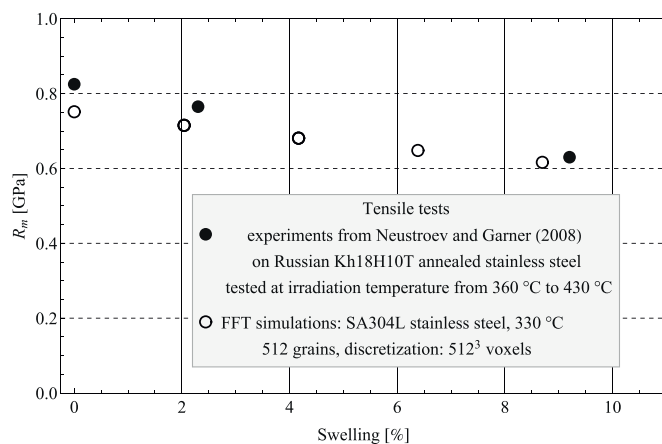


Fig. 5. Overall maximal stress as a function of swelling.

ternals in Russian water-cooled, water-moderated energy reactors, and that the closest Western analog of this material is the 321 stainless steel [24]. Results reported in Fig. 5 correspond to tests conducted at or near the irradiation temperature, from 360°C to 430°C. Once again, the numerical model is found to be in reasonable accord with experiments. According to the model, a porosity level of 8% causes a 20% reduction in maximal stress.

4.2. Analytical versus numerical models

The above numerical model is now used to assess the capabilities of the simple analytical model presented in Section 2.3 to reproduce the response of a SA304L at 330°C. We begin by calibrating the analytical model with the tensile response of a fully dense material predicted by the numerical model. To that end, analytical predictions are obtained by integrating in time Eqs. (4) and (5) using an explicit Runge–Kutta 3(2) method with adaptive time step. At each iteration, the value of $|\lambda|$ is obtained by solving the non-linear Eq. (8) with a Newton method. Following [6], the local elastic moduli are set to $k = 156.7$ GPa and $\mu = 65.7$ GPa. In turn, the creep exponent n is set to the same value as in the numerical model, i.e. $n = 15$, and the reference strain-rate is set to $\dot{\gamma}_0 = 1$ s⁻¹. For that creep exponent, the coefficients α and β are given by 1.789 and 5.793, respectively. Finally, a suitable value for the flow stress τ_0 is identified by confronting the analytical and numerical responses. The comparison shown in Fig. 6 corresponds to $\tau_0 = 498$ MPa, which is deemed suitable. The complete set of material parameters is summarized in Table 4.

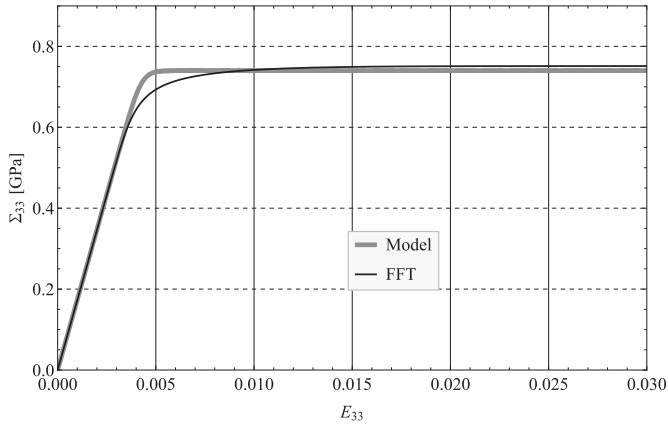


Fig. 6. Tensile curves: comparison between analytical and numerical predictions for the choice $\tau_0 = 498$ MPa.

Table 4
Parameters of the analytical model.

k	μ	n	$\dot{\gamma}_0$	τ_0	α	β	q
156.7 GPa	65.7 GPa	15	1 s^{-1}	498 MPa	1.789	5.793	2

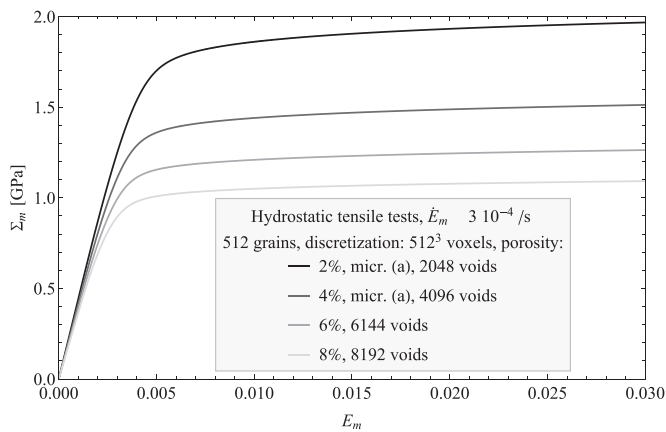


Fig. 7. Porous polycrystals under purely hydrostatic loading. Numerical simulations performed on the microstructures of Fig. 1.

Having calibrated the analytical model with the response for fully dense materials, we can confront the analytical and numerical predictions for porous materials. Figs. 8 and 9 show comparisons for the overall Young's modulus and bulk modulus versus porosity. It is recalled that, in view of the overall isotropy, these two parameters completely characterize the elastic response. The agreement between the models is seen to be quite satisfactory over the entire range of porosity levels considered. This is in line with the observations of [25] and theoretical predictions of [26]. Note that the numerical predictions for the bulk modulus are obtained from the purely hydrostatic loading case presented in Section 3.3 and reported in Fig. 7.

The analytical description of the viscoplastic response contains an additional parameter q in the definition of the modified porosity f^* . This parameter has been introduced following the experience of [27] with the so-called standard GTN model for isotropic porous plasticity to adjust the porosity percolation threshold at which the material is expected to completely lose its load carrying capacity [28]. A suitable value for q is identified by comparing the analytical and numerical predictions for the overall maximal stress un-

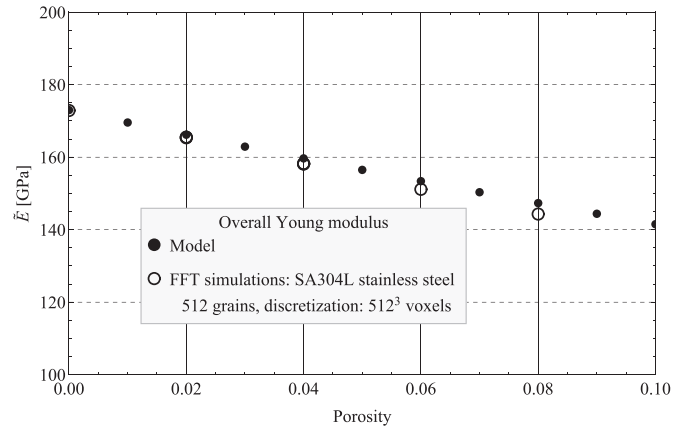


Fig. 8. Evolution of the overall Young modulus with respect to the porosity: micromechanical model and FFT-based numerical full-field simulations.

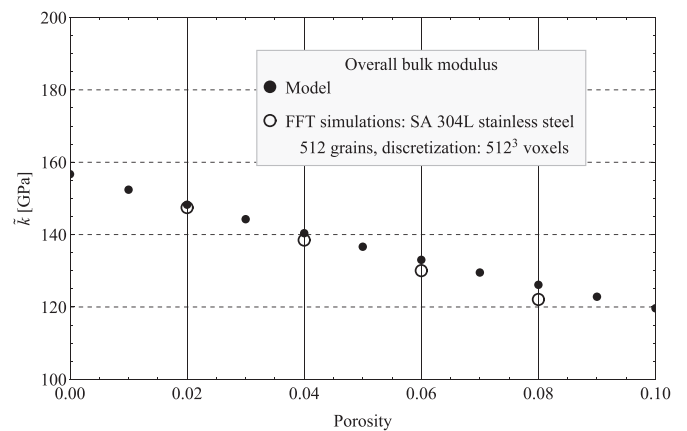


Fig. 9. Evolution of the overall bulk modulus with respect to the porosity: micromechanical model and FFT-based numerical full-field simulations.

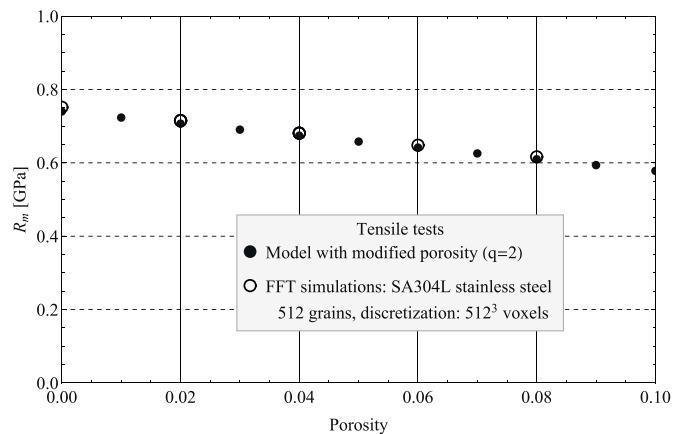


Fig. 10. Overall maximal stress under uniaxial tension versus porosity: comparison between analytical and numerical models.

der uniaxial tension. Fig. 10 shows a comparison for $q = 2$. Based on the good agreement observed, this value is deemed suitable. In this connection, it should be noted that the analytical model does not account for plastic softening and therefore does not exhibit a rigorous maximal stress. The maximal stress reported in this figure corresponds to the stress level deep in the plastic range. Given the large creep exponent employed, this stress level is relatively insensitive to the strain rate, at least within the range of strain

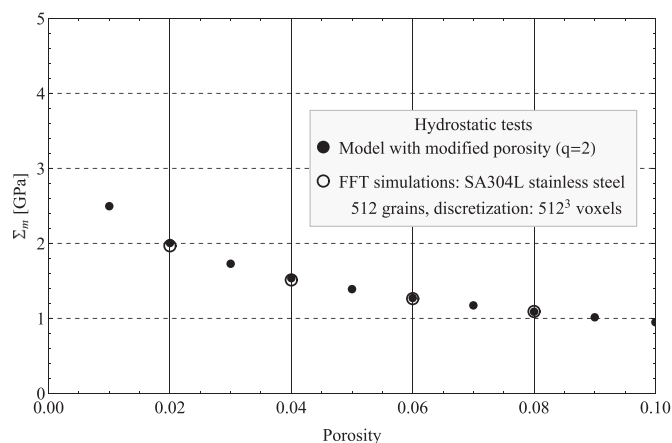


Fig. 11. Overall maximal stress under hydrostatic tension versus porosity: comparison between the analytical and numerical models.

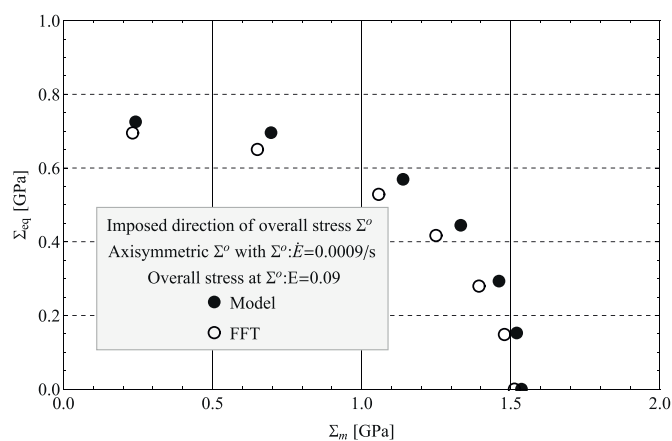


Fig. 12. Axisymmetric direction of macroscopic stress Σ^o as specified in (16). Macroscopic hydrostatic and equivalent stresses obtained at the end of the simulations. Comparison between the micromechanical model and the FFT simulations. FFT simulations performed on the microstructure (a) with 4% porosity of Figure 1.

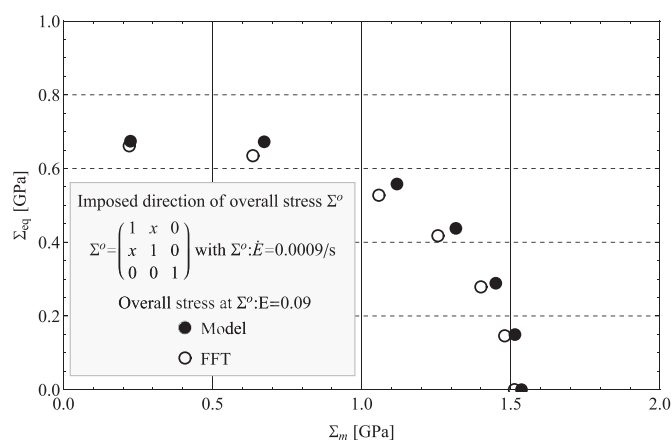


Fig. 13. Direction of macroscopic stress Σ^o including simple shear as specified in (17). Macroscopic hydrostatic and equivalent stresses obtained at the end of the simulations. Comparison between the micromechanical model and the FFT simulations. FFT simulations performed on the microstructure (a) with 4% porosity of Figure 1.

rates of interested in applications. Having fixed this last parameter, no further fitting is required. The analytical model now provides a predictive tool for the material response under general loading conditions. Fig. 11 shows a comparison between the analytical and numerical estimates for the overall maximal stress under hydrostatic tension. Analytical predictions are seen to remain accurate for this loading condition in the entire range of porosity levels considered. To confirm the accuracy of the model for more general loading conditions, further comparisons are reported for the multiaxial stress states defined in Section 3.3. The macroscopic hydrostatic and equivalent stresses obtained at the end of the simulations of a specimen with moderate porosity level are plotted in Figs. 12 and 13. Once again, the agreement is seen to be satisfactory over the whole range of stress states investigated despite the fact that some of these stress states induce a different plastic anisotropy from that induced by the uniaxial loading employed in the calibration of the model.

5. Conclusions

A micromechanical model for quantifying the simultaneous influence of irradiation hardening and swelling on the mechanical stiffness and strength of neutron-irradiated austenitic stainless steels has been proposed. The model makes use of several simplifying assumptions allowing for a fully explicit elasto-viscoplastic description. In turn, reference results were generated with full-field numerical simulations for dense and voided polycrystals with periodic microstructures and crystal plasticity laws accounting for the evolution of dislocation and Frank loop densities. These results were calibrated with experimental data available from the literature and were employed to assess the capabilities of the proposed model to describe the evolution of mechanical properties of highly irradiated Solution Annealed 304L steels at 330°C. The agreement between analytical and numerical predictions for stiffness and mechanical strength was found to be quite satisfactory over the entire range of porosities and loadings investigated. The expected decrease of these properties for porosities observed at large irradiation levels has been reported for porosity levels up to 8%. The simplicity of the analytical model comes at the expense of neglecting the influence of local elastic anisotropy and plastic hardening on the overall response. While the former is indeed negligible, the latter may be non-negligible at least for some aspects of the overall response not considered in this work, such as strain to failure. Fortunately, the multiscale nature of the analytical model could be exploited to incorporate plastic hardening through appropriate evolution laws for the local flow stress. In terms of the mechanical properties considered in this work, however, the analytical model seems suitable. Furthermore, in view of its capabilities and mathematical simplicity, the model is considered particularly apt for implementation into finite-element codes for structural safety analyses.

Data availability

The raw and processed data required to reproduce these findings are available from the corresponding author upon reasonable request.

Declaration of Competing Interest

The authors declare that they have no known competing financial interests or personal relationships that could have appeared to influence the work reported in this paper.

Acknowledgments

H.M. and P-G.V. acknowledge the financial support from European Committee through the SOTERIA H2020 research project funded under the Euratom research and training programme 2014–2018 under grant agreement No. 661913. Some of the full-field simulations presented here were made possible thanks to the resources of the CCRT (Centre de Calcul Recherche et Technologie) of the CEA/DIF.

Appendix A. Analytical model: derivations

Micromechanical models for the elastic properties of austenitic stainless steels subjected to radiation swelling are proposed in [25]. In their work, the voids due to irradiation are considered as randomly located, spherical in shape and embedded in an isotropic elastic matrix. In [25], the most widely used mean-field methods in micromechanics are implemented to calculate the effective elastic properties, such as the non-interaction approximation (often called dilute limit approximation), the Hashin-Shtrikman upper bound [26] with the matrix as the reference medium (which coincides with the Mori-Tanaka scheme [29] in the present case), the differential scheme, the self-consistent scheme (see [30] among others for a description of these models). The results are compared with the experimental data of [22]. It is shown that, for the effective Young modulus, all the schemes give reasonable approximation and none can be called preferential. Here, following [25], we make use of the Hashin and Shtrikman upper bound to estimate the effect of voids on the elastic properties of irradiated SA304L austenitic stainless steel. The overall compliance tensor is given in (6).

The macroscopic viscoplastic strain-rate is estimated through a recent model proposed by [18] which is based on the definition of a gauge surface for a porous FCC polycrystal with intragranular voids.

A1. A model for porous media with isotropic viscoplastic matrix

First, let us recall a result from [31] in the case of an isotropic porous material with an isotropic viscoplastic matrix described by a simple Norton law of exponent n and spherical voids. In this work, the local behavior of the matrix is governed by a stress potential

$$\dot{\epsilon}^{vp} = \frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{\sigma}}(\boldsymbol{\sigma}) \quad \text{with} \quad u(\boldsymbol{\sigma}) = \frac{\dot{\epsilon}_0 \sigma_0}{n+1} \left(\frac{\sigma_{eq}}{\sigma_0} \right)^{n+1}, \quad (\text{A.1})$$

where $\dot{\epsilon}_0$ and σ_0 are constants. The macroscopic response can be characterized by an effective dissipation potential \tilde{u} such that [32]

$$\dot{\mathbf{E}}^{vp} = \frac{\partial \tilde{u}}{\partial \boldsymbol{\Sigma}}(\boldsymbol{\Sigma}), \quad (\text{A.2})$$

where \tilde{u} , in the present case, is a homogeneous function of degree $n+1$ which can be written under the following form

$$\tilde{u}(\boldsymbol{\Sigma}) = \frac{\dot{\epsilon}_0 \sigma_0}{n+1} \left(\frac{|\lambda(\boldsymbol{\Sigma})|}{\sigma_0} \right)^{n+1}. \quad (\text{A.3})$$

$\lambda(\boldsymbol{\Sigma})$ is a homogeneous function of degree 1 in $\boldsymbol{\Sigma}$. Gauge surfaces are equipotential surfaces used to characterize the domain of statically admissible stresses. They completely characterizes the effective response and they correspond to the yield surfaces in rate-independent plasticity [31]. The effective gauge surface is defined as

$$S = \{ \tilde{\boldsymbol{\Sigma}} : \tilde{u}(\tilde{\boldsymbol{\Sigma}}) = \frac{\sigma_0^{-n} \dot{\epsilon}_0}{n+1} \}. \quad (\text{A.4})$$

[31] proposed an estimate for the gauge surface under the form of Eqs. (8) and (9). These equations give the value of the function $\lambda(\boldsymbol{\Sigma})$ for any tensor $\boldsymbol{\Sigma}$, since the normalized tensor $\tilde{\boldsymbol{\Sigma}} = \boldsymbol{\Sigma}/\lambda(\boldsymbol{\Sigma})$ belongs to the effective gauge surface.

A2. A model for porous FCC polycrystals with intragranular voids

Then, the case of a porous FCC polycrystal with intragranular spherical voids (isotropic distribution) is considered following [18]. In each grain of the polycrystal, the material surrounding the voids is governed by this stress potential ($n \geq 1$)

$$\dot{\epsilon}^{vp} = \frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{\sigma}}(\boldsymbol{\sigma}) \quad \text{with} \quad u(\boldsymbol{\sigma}) = \frac{\dot{\gamma}_0 \tau_0}{n+1} \sum_{s=1}^{12} \left(\frac{|\boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\mu}^{(s)}|}{\tau_0} \right)^{n+1}, \quad (\text{A.5})$$

where $\dot{\gamma}_0$ and τ_0 are two constants. It corresponds to a simple power law function without hardening and the corresponding viscoplastic strain rate is specified in Eq. (2). Since the potential u in (A.5) is still a positively homogeneous function of degree $n+1$ in $\boldsymbol{\sigma}$ (as in the previous subsection), the effective dissipation potential \tilde{u} can be written under the following form

$$\tilde{u}(\boldsymbol{\Sigma}) = \frac{\dot{\gamma}_0 \tau_0}{n+1} \left(\frac{|\lambda(\boldsymbol{\Sigma})|}{\tau_0} \right)^{n+1}, \quad (\text{A.6})$$

where $\lambda(\boldsymbol{\Sigma})$ is still a homogeneous function of degree 1 in $\boldsymbol{\Sigma}$. As previously, the gauge surface is defined as

$$S = \{ \tilde{\boldsymbol{\Sigma}} : \tilde{u}(\tilde{\boldsymbol{\Sigma}}) = \frac{\tau_0^{-n} \dot{\gamma}_0}{n+1} \}, \quad (\text{A.7})$$

and, again, an estimate of the gauge surface (A.7) leads to an estimate of the effective potential (A.6). The model proposed in [18] is based on a double up-scaling process. First, an estimate is derived for porous FCC single crystals. In this first up-scaling process, the voided single crystal is idealized as a hollow sphere assemblage (the representative volume element is idealized as an assemblage of an infinite number of homothetic hollow spheres filling up the entire volume). Then, this estimate for a porous single crystal is used together with a Voigt-type assumption (homogeneous strain rate in the polycrystal) to derive a model for the overall behavior of the polycrystal. For a purely hydrostatic loading, this model predicts that the orientation of the cubic crystal has no influence: the obtained estimate is equivalent to the estimate for the porous monocrystal under hydrostatic loading. A fully analytical gauge surface of [31] type is then derived from this result (Eqs. (8) and (9)). α is adjusted in order to match with the hydrostatic stress obtained in [19], in which the porous monocrystal was idealized as a sequential laminate of infinite rank obeying an isotropic lamination sequence. This estimate based on sequential laminates was found to be superior to more classical estimates based on hollow sphere assemblages. Then, β is adjusted in order to match with the equivalent stress obtained with the model of [33] in the case of a dense polycrystal ($f = 0$). The two up-scaling processes are presented hereafter.

A2.1. First up-scaling: porous FCC monocrystal

Let us consider a representative volume element (RVE) made with a statistically uniform distribution of voids and a crystalline matrix with FCC structure. Matrix is identified as phase $r = 1$ and voids are collectively identified as phase $r = 2$. The behavior of the crystalline matrix is purely viscoplastic. The domains occupied by the crystalline matrix, the voids, and the RVE are respectively denoted by $\Omega^{(1)}$, $\Omega^{(2)}$, and Ω . The viscoplastic response of the matrix is characterized by a convex potential u such that the stress and strain rate tensors are related by (A.5). The potential u can be written under the following form

$$u(\boldsymbol{\sigma}) = \frac{\tau_0 \dot{\gamma}_0}{n+1} \sum_{s=1}^{12} \left(\frac{\boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\mu}^{(s)} \otimes \boldsymbol{\mu}^{(s)} : \boldsymbol{\sigma}}{\tau_0} \right)^{(n+1)/2}, \quad (\text{A.8})$$

where \otimes denotes the tensor product. Alternatively, the viscoplastic behavior of the matrix can be derived from the dissipation potential w (which is the Legendre transform of u):

$$w(\dot{\boldsymbol{\epsilon}}^{vp}) = \sup_{\boldsymbol{\sigma}} \{ \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\epsilon}}^{vp} - u(\boldsymbol{\sigma}) \}. \quad (\text{A.9})$$

The macroscopic response (defined as the relation between the volume averages of the stress and strain-rate) can be characterized by an effective dissipation potential \tilde{w} such that (e.g. [32])

$$\boldsymbol{\Sigma} = \frac{\partial \tilde{w}}{\partial \dot{\boldsymbol{E}}^{vp}}(\dot{\boldsymbol{E}}^{vp}), \quad (\text{A.10})$$

$$\tilde{w}(\dot{\boldsymbol{E}}^{vp}) = (1-f) \min_{\dot{\boldsymbol{\epsilon}}^{vp} \in \mathcal{K}(\dot{\boldsymbol{E}}^{vp})} \frac{1}{|\Omega^{(1)}|} \int_{\Omega^{(1)}} w(\dot{\boldsymbol{\epsilon}}^{vp}(\boldsymbol{x})) d\Omega. \quad (\text{A.11})$$

Introducing the following notation $\langle \cdot \rangle_{\Omega^{(1)}}$ for the average over $\Omega^{(1)}$, it reads

$$\tilde{w}(\dot{\boldsymbol{E}}^{vp}) = (1-f) \min_{\dot{\boldsymbol{\epsilon}}^{vp} \in \mathcal{K}(\dot{\boldsymbol{E}}^{vp})} \langle w(\dot{\boldsymbol{\epsilon}}^{vp}) \rangle_{\Omega^{(1)}}, \quad (\text{A.12})$$

where $f = |\Omega^{(2)}|/|\Omega|$ is the volume fraction occupied by the voids. $\mathcal{K}(\dot{\boldsymbol{E}}^{vp})$ is the set of kinematically admissible strain-rate fields

$$\mathcal{K}(\dot{\boldsymbol{E}}^{vp}) = \{ \dot{\boldsymbol{\epsilon}}^{vp} \in \mathcal{T} \mid \dot{\boldsymbol{\epsilon}}^{vp}(\boldsymbol{x}) = \nabla \otimes_s \dot{\boldsymbol{u}}(\boldsymbol{x}) \text{ in } \Omega \wedge \dot{\boldsymbol{u}} = \dot{\boldsymbol{E}}^{vp} \cdot \boldsymbol{x} \text{ on } \partial\Omega \}, \quad (\text{A.13})$$

where \otimes_s denotes the symmetric part of the tensor product, $\partial\Omega$ is the boundary of Ω , \mathcal{T} is the set of symmetric second-order tensors.

An estimate of the effective dissipation potential \tilde{w} can be obtained from (A.12) following the the approach initiated by Gurson [34]. Let us introduce the following fourth-order tensor

$$\mathbb{M} = \frac{1}{\tau_0} \sum_{s=1}^{12} \boldsymbol{\mu}^{(s)} \otimes \boldsymbol{\mu}^{(s)}. \quad (\text{A.14})$$

Using the following general property for a convex function $\phi(x)$ such that $\sum_{k=1}^K \lambda_k \phi(x_k) \geq \phi(\sum_{k=1}^K \lambda_k x_k)$ for $\sum_{k=1}^K \lambda_k = 1$, the convex potential u can be bounded by

$$u(\boldsymbol{\sigma}) \geq u_-(\boldsymbol{\sigma}) = \frac{12 \tau_0 \dot{\gamma}_0}{n+1} \left(\frac{1}{12 \tau_0} \boldsymbol{\sigma} : \mathbb{M} : \boldsymbol{\sigma} \right)^{(n+1)/2}. \quad (\text{A.15})$$

When deriving this expression with respect to $\boldsymbol{\sigma}$, one gets

$$\dot{\boldsymbol{\epsilon}}^{vp} = \dot{\gamma}_0 \left(\frac{1}{12 \tau_0} \boldsymbol{\sigma} : \mathbb{M} : \boldsymbol{\sigma} \right)^{(n-1)/2} \mathbb{M} : \boldsymbol{\sigma}. \quad (\text{A.16})$$

Introducing \mathbb{L} the pseudo-inverse of \mathbb{M} such that $\mathbb{M} : \mathbb{L} : \mathbb{M} = \mathbb{M}$, one gets

$$\dot{\boldsymbol{\epsilon}}^{vp} : \mathbb{L} : \dot{\boldsymbol{\epsilon}}^{vp} = 12 \tau_0 \dot{\gamma}_0^2 \left(\frac{1}{12 \tau_0} \boldsymbol{\sigma} : \mathbb{M} : \boldsymbol{\sigma} \right)^n \quad (\text{A.17})$$

and

$$\frac{1}{12 \tau_0} \boldsymbol{\sigma} : \mathbb{M} : \boldsymbol{\sigma} = \left(\frac{1}{12 \tau_0 \dot{\gamma}_0^2} \dot{\boldsymbol{\epsilon}}^{vp} : \mathbb{L} : \dot{\boldsymbol{\epsilon}}^{vp} \right)^{1/n}. \quad (\text{A.18})$$

The potential u_- is homogeneous of degree $n+1$ in $\boldsymbol{\sigma}$. Thus, one can write $\boldsymbol{\sigma} : \partial_{\boldsymbol{\sigma}} u_-(\boldsymbol{\sigma}) = (n+1)u_-(\boldsymbol{\sigma})$ and $\boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\epsilon}}^{vp} = (n+1)u_-(\boldsymbol{\sigma})$. Taking into account the incompressibility of the matrix together with expressions (A.18) and (A.15), the dissipation potential can be bounded by

$$w(\dot{\boldsymbol{\epsilon}}^{vp}) \leq w_+(\dot{\boldsymbol{\epsilon}}^{vp}) = \begin{cases} \frac{12 \tau_0 \dot{\gamma}_0}{m+1} \left(\frac{1}{12 \tau_0 \dot{\gamma}_0^2} \dot{\boldsymbol{\epsilon}}^{vp} : \mathbb{L} : \dot{\boldsymbol{\epsilon}}^{vp} \right)^{(m+1)/2} & \text{if } \text{tr}(\dot{\boldsymbol{\epsilon}}^{vp}) = 0 \\ +\infty & \text{otherwise} \end{cases} \quad (\text{A.19})$$

where $m = 1/n$. The fourth-order tensor \mathbb{M} is cubic and can be expressed in closed-form, considering the following fourth-order tensors \mathbb{I} , \mathbb{J} , \mathbb{S} with components

$$\mathbb{I}_{ijkl} = 1/2(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}) \quad (\text{A.20})$$

$$\mathbb{J}_{ijkl} = 1/3\delta_{ij}\delta_{kl} \quad (\text{A.21})$$

$$\mathbb{S}_{ijkl} = \delta_{ri}\delta_{rj}\delta_{rk}\delta_{rl}, \quad (\text{A.22})$$

where δ is the Kronecker symbol. \mathbb{I} is the usual fourth-order identity tensor and \mathbb{J} is the usual fourth-order projector on hydrostatic symmetric tensors of order 2. Two additional fourth-order tensors are introduced $\mathbb{K}_a = \mathbb{S} - \mathbb{J}$ and $\mathbb{K}_b = \mathbb{I} - \mathbb{S}$, so that each fourth-order cubic tensor can be decomposed into \mathbb{J} , \mathbb{K}_a , and \mathbb{K}_b . Some direct algebra leads to the following expressions for \mathbb{M} and \mathbb{L}

$$\mathbb{M} = \frac{2}{\tau_0} \mathbb{K}_a + \frac{2}{3\tau_0} \mathbb{K}_b, \quad \mathbb{L} = \frac{\tau_0}{2} \mathbb{K}_a + \frac{3\tau_0}{2} \mathbb{K}_b. \quad (\text{A.23})$$

Note that potential w_+ in (A.19) together with this closed form expression for \mathbb{L} is no longer explicitly dependent on the Schmid tensors. The present model follows an approach initiated in the seminal work of [34]. It consists in using the non-linear variational principle (A.11) with suitably chosen velocity fields leading to an upper bound for the effective potential. The representative volume element is considered as an assemblage of an infinite number of homothetic hollow spheres filling up the entire volume. The effective potential is bounded by using the following velocity field in any given sphere

$$\dot{\boldsymbol{u}}(\boldsymbol{x}) = \dot{E}_m \frac{b^3}{r^2} \boldsymbol{\xi} + \dot{\boldsymbol{E}}_d \cdot \boldsymbol{x}, \quad (\text{A.24})$$

where b is the radius of the sphere, $r = |\boldsymbol{x}|$, $\boldsymbol{\xi} = \boldsymbol{x}/|\boldsymbol{x}|$, and \boldsymbol{x} is the position vector relative to the center of the sphere. For clarity, $\dot{\boldsymbol{E}}^{vp}$ is replaced here by $\dot{\boldsymbol{E}}$. \dot{E}_m is the hydrostatic component of $\dot{\boldsymbol{E}}$, $\dot{E}_m = 1/3 \text{tr} \dot{\boldsymbol{E}}$, and $\dot{\boldsymbol{E}}_d$ its deviatoric part $\dot{\boldsymbol{E}}_d = \dot{\boldsymbol{E}} - \dot{E}_m \mathbb{I}$. The strain rate writes

$$\dot{\boldsymbol{\epsilon}} = -3\dot{E}_m \frac{b^3}{r^3} \boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi} + \dot{\boldsymbol{E}}_d. \quad (\text{A.25})$$

The effective potential is then bounded by

$$\tilde{w}(\dot{\boldsymbol{E}}) \leq \frac{1-f}{(4/3)\pi(b^3-a^3)} \int_S \int_a^b w \left(-3\dot{E}_m \frac{b^3}{r^3} \boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi} + \dot{\boldsymbol{E}}_d \right) r^2 dr dS(\boldsymbol{\xi}), \quad (\text{A.26})$$

where S is the unit sphere and a is the void radius so that $f = (a/b)^3$. Using inequality (A.19), one gets

$$\tilde{w}(\dot{\boldsymbol{E}}) \leq \frac{1}{(4/3)\pi b^3} \int_S \int_a^b w_+ \left(-3\dot{E}_m \frac{b^3}{r^3} \boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi} + \dot{\boldsymbol{E}}_d \right) r^2 dr dS(\boldsymbol{\xi}) \quad (\text{A.27})$$

or

$$\tilde{w}(\dot{\boldsymbol{E}}) \leq \frac{1}{(4/3)\pi b^3} \int_S \int_a^b \frac{12 \tau_0 \dot{\gamma}_0}{m+1} \left(\frac{1}{12 \tau_0 \dot{\gamma}_0^2} \dot{\boldsymbol{\epsilon}} : \mathbb{L} : \dot{\boldsymbol{\epsilon}} \right)^{(m+1)/2} r^2 dr dS(\boldsymbol{\xi}). \quad (\text{A.28})$$

This right hand expression is then bounded by applying the Cauchy-Schwarz inequality to this surface integral

$$\tilde{w}(\dot{\boldsymbol{E}}) \leq \frac{1}{(4/3)\pi b^3} \int_a^b (4\pi)^{(1-m)/2} \frac{12 \tau_0 \dot{\gamma}_0}{m+1} \times \left(\int_S \frac{1}{12 \tau_0 \dot{\gamma}_0^2} \dot{\boldsymbol{\epsilon}} : \mathbb{L} : \dot{\boldsymbol{\epsilon}} dS(\boldsymbol{\xi}) \right)^{(m+1)/2} r^2 dr. \quad (\text{A.29})$$

By using the velocity field (A.25), in this expression, one gets

$$\tilde{w}(\dot{\mathbf{E}}) \leq \frac{12 \tau_0 \dot{\gamma}_0}{m+1} \int_f^1 \left(\frac{1}{12 \tau_0 \dot{\gamma}_0^2} 9 \dot{E}_m^2 \frac{\kappa}{y^2} + \frac{1}{12 \tau_0 \dot{\gamma}_0^2} \dot{\mathbf{E}}^d : \mathbb{L} : \dot{\mathbf{E}}^d \right)^{(m+1)/2} dy, \quad (\text{A.30})$$

where $\kappa = (11/15)\tau_0$.

A2.2. Second up-scaling: polycrystal

In the second transition of scales, the domain Ω consists of the polycrystal idealized as an heterogeneous material with N phases (domains $\Omega^{(r)}$, volume fractions $c^{(r)}$) described by the overall behavior of a porous single crystal. Random orientation is considered for each phase of the polycrystal. The local potential $w^{(r)}$ in each phase r is obtained by the first scale transition and corresponds to the right hand side in expression (A.30). As before, the effective strain rate potential reads

$$\tilde{w}(\dot{\mathbf{E}}) = \min_{\dot{\mathbf{e}} \in \mathcal{K}(\dot{\mathbf{E}})} \sum_{r=1}^N c^{(r)} \langle w^{(r)}(\dot{\mathbf{e}}) \rangle_{\Omega^{(r)}}. \quad (\text{A.31})$$

Using a Voigt-type assumption (homogeneous strain rate in the whole volume), one gets

$$\tilde{w}(\dot{\mathbf{E}}) \leq \sum_{r=1}^N c^{(r)} \langle w^{(r)}(\dot{\mathbf{E}}) \rangle_{\Omega^{(r)}}. \quad (\text{A.32})$$

Note that, in this expression, the tensor $\dot{\mathbf{E}}$ has to be expressed in the local basis of each phase r . For any phase r , there is a second order tensor $\mathbf{Q}^{(r)}$ such that

$$w^{(r)}(\dot{\mathbf{E}}) = w^{(0)}(\mathbf{Q}^{(r)} \cdot \dot{\mathbf{E}} \cdot (\mathbf{Q}^{(r)})^T), \quad (\text{A.33})$$

where

$$w^{(0)}(\dot{\mathbf{e}}) = \frac{12 \tau_0 \dot{\gamma}_0}{m+1} \int_f^1 \left(\frac{1}{12 \tau_0 \dot{\gamma}_0^2} 9 \dot{e}_m^2 \frac{\kappa}{y^2} + \frac{1}{12 \tau_0 \dot{\gamma}_0^2} \dot{\mathbf{e}}^d : \mathbb{L} : \dot{\mathbf{e}}^d \right)^{(m+1)/2} dy. \quad (\text{A.34})$$

For a statistically uniform distribution of grains and for an infinity number of grains, the representative volume element can be considered as a spherical in shape volume in which each point corresponds to a grain. Then (A.32) can be evaluated by an integration over the unit sphere S such that

$$\tilde{w}(\dot{\mathbf{E}}) \leq \langle w^{(0)}(\mathbf{Q} \cdot \dot{\mathbf{E}} \cdot \mathbf{Q}^T) \rangle_S, \quad (\text{A.35})$$

where the following notation is used $\langle x \rangle_S = 1/(4\pi) \int_S x dS$. One gets

$$\tilde{w}(\dot{\mathbf{E}}) \leq \frac{\tau_0 \dot{\gamma}_0}{m+1} \int_f^1 \left\langle \left(\frac{1}{\dot{\gamma}_0^2} 9 \dot{E}_m^2 \frac{\kappa^*}{y^2} + \frac{1}{\dot{\gamma}_0^2} \dot{\mathbf{E}}^d(\mathbf{Q}) : \mathbb{L}^* : \dot{\mathbf{E}}^d(\mathbf{Q}) \right)^{(m+1)/2} \right\rangle_S dy, \quad (\text{A.36})$$

where $\kappa^* = (12^{(1-m)/(m+1)}/\tau_0)\kappa$ and $\mathbb{L}^* = (12^{(1-m)/(m+1)}/\tau_0)\mathbb{L}$. Then the Cauchy-Schwarz inequality is applied

$$\tilde{w}(\dot{\mathbf{E}}) \leq \frac{\tau_0 \dot{\gamma}_0}{m+1} \int_f^1 \left(\frac{1}{\dot{\gamma}_0^2} 9 \dot{E}_m^2 \frac{\kappa^*}{y^2} + \frac{1}{\dot{\gamma}_0^2} \langle \dot{\mathbf{E}}^d(\mathbf{Q}) : \mathbb{L}^* : \dot{\mathbf{E}}^d(\mathbf{Q}) \rangle_S \right)^{(m+1)/2} dy. \quad (\text{A.37})$$

Then, considering $\dot{\mathbf{E}}^d(\mathbf{Q}) : \mathbb{L}^* : \dot{\mathbf{E}}^d(\mathbf{Q}) = \dot{\mathbf{E}}^d : \mathbb{L}^*(\mathbf{Q}) : \dot{\mathbf{E}}^d$ together with a result from [35] to get the orientation average of a fourth order tensor, one gets

$$\langle \dot{\mathbf{E}}^d : \mathbb{L}^*(\mathbf{Q}) : \dot{\mathbf{E}}^d \rangle_S = \frac{33}{20} 12^{(1-m)/(m+1)} \dot{E}_{eq}^2, \quad (\text{A.38})$$

where $\dot{E}_{eq} = \sqrt{2/3 \dot{\mathbf{E}}^d : \dot{\mathbf{E}}^d}$. Then (A.37) writes

$$\tilde{w}(\dot{\mathbf{E}}) \leq \frac{\tau_0 \dot{\gamma}_0}{m+1} \int_f^1 \left(\frac{1}{\dot{\gamma}_0^2} 9 \dot{E}_m^2 \frac{\kappa^*}{y^2} + \frac{1}{\dot{\gamma}_0^2} q^* \dot{E}_{eq}^2 \right)^{(m+1)/2} dy, \quad (\text{A.39})$$

where $q^* = (33/20)12^{(1-m)/(m+1)}$.

A2.3. Derivation of a gauge surface

In the case of perfect plasticity ($m \rightarrow 0$), the inequality (A.39) writes

$$W(\dot{\mathbf{E}}) \leq \tau_0 \int_f^1 \left(9 \dot{E}_m^2 \frac{\kappa^*}{y^2} + q^* \dot{E}_{eq}^2 \right)^{1/2} dy. \quad (\text{A.40})$$

The yield surface associated with this effective strain-rate potential writes

$$\frac{1}{q^*} \left(\frac{\Sigma_{eq}}{\tau_0} \right)^2 + 2f \cosh \left(\frac{1}{\sqrt{\kappa^*}} \frac{\Sigma_m}{\tau_0} \right) - 1 - f^2 = 0. \quad (\text{A.41})$$

This result can be found directly by using a lemma given in [36] (Appendix A). By analogy with the work of [31] it is then proposed to extend this yield surface in plasticity to the following gauge surface in viscoplasticity

$$\frac{1}{q^*} \frac{\Sigma_{eq}^2}{\lambda^2} + f \left(h^* \left(\frac{\Sigma_m}{\lambda} \right) + \frac{n-1}{n+1} (h^*)^{-1} \left(\frac{\Sigma_m}{\lambda} \right) \right) - 1 - \frac{n-1}{n+1} f^2 = 0, \quad (\text{A.42})$$

where

$$h^*(x) = \left(1 + \frac{1}{n} \left| \frac{1}{\sqrt{\kappa^*}} x \right|^{1+\frac{1}{n}} \right)^n. \quad (\text{A.43})$$

Accurate homogenization estimates are already available for two particular cases: fully dense polycrystals under pure shear loadings [33], and porous polycrystals under pure hydrostatic loadings [19]. As it stands, the above gauge surface does not recover those accurate estimates, but it can be easily modified to do so. First, the coefficient κ^* entering h^* is adjusted in order to match with the hydrostatic stress predicted by the homogenization estimate of [19], in which the porous monocrystal was idealized as a sequential laminate of infinite rank obeying an isotropic lamination sequence. This estimate based on sequential laminates was found to be superior to more classical estimates based on hollow sphere assemblages. Second, q^* is adjusted in order to match with the shear stress predicted by the linear-comparison homogenization model of [33] for fully dense polycrystals ($f = 0$). In conclusion, the gauge surface is expressed as

$$\left(\frac{1}{\tilde{\sigma}_0/\tau_0} \right)^{2n/(n+1)} \frac{\Sigma_{eq}^2}{\lambda^2} + f \left(h^{**} \left(\frac{\Sigma_m}{\lambda} \right) + \frac{n-1}{n+1} (h^{**})^{-1} \left(\frac{\Sigma_m}{\lambda} \right) \right) - 1 - \frac{n-1}{n+1} f^2 = 0, \quad (\text{A.44})$$

where

$$h^{**}(x) = \left(1 + \frac{1}{n} \frac{1}{\alpha_{LAM}/\tau_0} |x|^{1+\frac{1}{n}} \right)^n. \quad (\text{A.45})$$

For simplicity, α_{LAM}/τ_0 and $(\tilde{\sigma}_0/\tau_0)^{2n/(n+1)}$ are respectively denoted by α and β in Eqs. (8) and (9). Thus function h^{**} coincides with function h (Eq. (9)). Eqs. (A.2) and (A.6) give

$$\dot{\mathbf{E}}^{\nu p} = \dot{\gamma}_0 \left(\frac{|\lambda|}{\tau_0} \right)^n \text{sign}(\lambda) \frac{\partial \lambda}{\partial \Sigma}. \quad (\text{A.46})$$

The definition of the gauge surface (A.7) together with this relation

$$\frac{\partial S}{\partial \Sigma} \frac{\partial \Sigma}{\partial \Sigma} = 0, \quad (\text{A.47})$$

lead to the following equality

$$\frac{\partial \lambda}{\partial \bar{\Sigma}} = \frac{\lambda}{\Sigma} : \frac{\partial \mathcal{S}}{\partial \bar{\Sigma}} \frac{\partial \mathcal{S}}{\partial \bar{\Sigma}}. \quad (\text{A.48})$$

Thus, Eq. (A.46) writes

$$\dot{\mathbf{E}}^{vp} = \dot{\gamma}_0 \left(\frac{|\lambda|}{\tau_0} \right)^n \frac{1}{\bar{\Sigma}} : \frac{\partial \mathcal{S}}{\partial \bar{\Sigma}} \frac{\partial \mathcal{S}}{\partial \bar{\Sigma}} \text{sign}(\lambda). \quad (\text{A.49})$$

By writing

$$\frac{\partial \mathcal{S}}{\partial \bar{\Sigma}} = \frac{1}{3} \frac{\partial \mathcal{S}(\bar{\Sigma}_m \mathbf{i})}{\partial \bar{\Sigma}_m} \mathbf{i} + \frac{\partial \mathcal{S}(\bar{\Sigma}_d)}{\partial \bar{\Sigma}_d} \quad (\text{A.50})$$

and

$$\frac{\partial \mathcal{S}(\bar{\Sigma}_m \mathbf{i})}{\partial \bar{\Sigma}_m} = f \left(h^{**}(\bar{\Sigma}_m) - \frac{n-1}{n+1} (h^{**})^{-2}(\bar{\Sigma}_m) h^{**}(\bar{\Sigma}_m) \right), \quad (\text{A.51})$$

$$\frac{\partial \mathcal{S}(\bar{\Sigma}_d)}{\partial \bar{\Sigma}_d} = 3 \left(\frac{1}{\bar{\sigma}_0/\tau_0} \right)^{2n/(n+1)} \bar{\Sigma}_d, \quad (\text{A.52})$$

$$h^{**}(x) = \frac{1}{\alpha_{LAM}/\tau_0} \frac{n+1}{n} \left(1 + \frac{1}{\alpha_{LAM}/\tau_0} \frac{1}{n} |x|^{1+\frac{1}{n}} \right)^{n-1} |x|^{\frac{1}{n}} \text{sign}(x), \quad (\text{A.53})$$

it leads to Eq. (5).

A3. Time-integration of the micromechanical model

In closed form, the analytical model presented in Section 2.3 writes

$$\dot{\bar{\Sigma}} = \tilde{\mathbb{C}} : \left(\dot{\mathbf{E}} - \dot{\gamma}_0 \left| \frac{\lambda}{\tau_0} \right|^n \frac{f \left(1 - \frac{n-1}{n+1} h^{-2}(\Sigma_m/\lambda) \right) |h'(\Sigma_m/\lambda)| \text{sign}(\Sigma_m) \mathbf{i} + \frac{3}{\beta} (\Sigma_d/|\lambda|)}{f \left(1 - \frac{n-1}{n+1} h^{-2}(\Sigma_m/\lambda) \right) |h'(\Sigma_m/\lambda)| |\Sigma_m/\lambda| + \frac{2}{\beta} (\Sigma_{eq}/\lambda)^2} \right) \quad (\text{A.54})$$

with $\tilde{\mathbb{C}} = \tilde{\mathbb{S}}^{-1}$. This equation can be written under the form $\dot{\mathbf{Y}} = F(\mathbf{Y}, \dot{\mathbf{E}})$ where \mathbf{Y} is a vector containing the stress $\bar{\Sigma}$. For a time increment ΔT , vector \mathbf{Y} is updated by a Runge–Kutta (3)2 FSAL (First Same As Last) method. Tolerance factor ε is set to 10^{-5} . General algorithm writes

- Initialization $\mathbf{k}_{FSAL} = F(\mathbf{Y}_0)$, $\delta t = \Delta T$, $\Delta t = 0$, $p = 0$
- While $\Delta t < \Delta T$ do
 1. Evaluate \mathbf{Y}_{p+1} by a Runge–Kutta method with order 3

$$\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_{FSAL}$$

$$\mathbf{k}_2 = F(\mathbf{Y}_p + \bar{a}_{21} \mathbf{k}_1 \delta t)$$

$$\mathbf{k}_3 = F(\mathbf{Y}_p + \bar{a}_{31} \mathbf{k}_1 \delta t + \bar{a}_{32} \mathbf{k}_2 \delta t)$$

$$\mathbf{Y}_{p+1} = \mathbf{Y}_p + (\bar{b}_1 \mathbf{k}_1 + \bar{b}_2 \mathbf{k}_2 + \bar{b}_3 \mathbf{k}_3) \delta t$$
 2. Evaluate $\hat{\mathbf{Y}}_{p+1}$ by a Runge–Kutta method with order 2

$$\mathbf{k}_{FSAL} = F(\mathbf{Y}_{p+1})$$

$$\hat{\mathbf{Y}}_{p+1} = \mathbf{Y}_p + (\bar{d}_1 \mathbf{k}_1 + \bar{d}_2 \mathbf{k}_2 + \bar{d}_3 \mathbf{k}_3 + \bar{d}_4 \mathbf{k}_{FSAL}) \delta t$$
 3. Evaluate the relative error η between the 2 methods

$$\eta = \max_i \left(|Y_{p+1}^{(i)} - \hat{Y}_{p+1}^{(i)}| / |Y_{p+1}^{(i)}| + 10^{-20} \right)$$
 where $Y^{(i)}$ denotes the i th component for \mathbf{Y}
 4. Convergence criterion
 - if $\eta \leq \varepsilon$ then

$$\mathbf{Y}_p := \mathbf{Y}_{p+1}$$

$$\Delta t := \Delta t + \delta t$$

$$p := p + 1$$
 - endif
 5. Evaluate the optimal time step δt

if $\eta \leq \varepsilon$ then

$$\delta t_{opt} = \min(2, (\varepsilon/\eta)^{1/3}) \delta t$$

- else

$$\delta t_{opt} = \max(1/2, 0.9(\varepsilon/\eta)^{1/3}) \delta t$$
- endif
- $\delta t = \min(\delta t_{opt}, \Delta T - \Delta t)$
- end

where coefficients \bar{a}_{ij} , \bar{b}_j and \bar{d}_j are defined as $\bar{a}_{21} = 1/2$, $\bar{a}_{31} = 0$, $\bar{a}_{32} = 3/4$, $\bar{b}_1 = 2/9$, $\bar{b}_2 = 1/3$, $\bar{b}_3 = 4/9$, $\bar{d}_1 = 7/24$, $\bar{d}_2 = 1/4$, $\bar{d}_3 = 1/3$ and $\bar{d}_4 = 1/8$. During the algorithm, when function F needs to be evaluated, the scalar $|\lambda|$ is obtained by solving the non linear Eq. (8) by a Newton method. Particular care must be taken when initializing the Newton algorithm. Eq. (8) can be written under the following form

$$\frac{1}{\beta} (\Sigma_{eq}/\lambda)^2 + f \sqrt{\frac{n-1}{n+1}} \left(\sqrt{\frac{n+1}{n-1}} h(\Sigma_m/\lambda) + \sqrt{\frac{n-1}{n+1}} h^{-1}(\Sigma_m/\lambda) \right) - 1 - \frac{n-1}{n+1} f^2 = 0. \quad (\text{A.55})$$

The inequality $x + 1/x \geq 2$ when $x \geq 0$ allows to write the following inequality ($\beta \geq 0$)

$$|\lambda| \geq |\lambda_0| = \frac{\Sigma_{eq}}{\sqrt{\beta} |1 - f \sqrt{\frac{n-1}{n+1}}|}. \quad (\text{A.56})$$

Newton algorithm is initialized using this lower bound for $|\lambda|$. Note also that the purely hydrostatic case ($\Sigma_{eq} = 0$) leads to the straightforward solution for $|\lambda|$

$$|\lambda| = (\alpha n (f^{-1/n} - 1))^{-n/(n+1)} |\Sigma_m|. \quad (\text{A.57})$$

Similarly, the purely deviatoric case ($\Sigma_m = 0$) leads to the straightforward solution for $|\lambda|$

$$|\lambda| = \frac{\Sigma_{eq}}{\sqrt{\beta} (1 + \frac{n-1}{n+1} f^2)}. \quad (\text{A.58})$$

To the end, Newton algorithm writes

- From \mathbf{Y} , compute the absolute value of the stress triaxiality $X_\Sigma = |\Sigma_m|/\Sigma_{eq}$, compute $|\lambda_0|$ with Eq. (A.56)
- if $X_\Sigma > 10^5$ then evaluate $|\lambda|$ from the purely hydrostatic solution (A.57), endif and exit.
- if $X_\Sigma < 10^{-5}$ then evaluate $|\lambda|$ from the purely deviatoric solution (A.58), endif and exit.
- while $q < 1000$, do

$$\lambda_q := \lambda_{q+1}$$

$$\lambda_{q+1} = \lambda_q - \mathcal{S}(\lambda_q) / \partial_{\lambda_q} \mathcal{S}(\lambda_q)$$
 Convergence criterion
 - if $|\lambda_{q+1} - \lambda_q| - TOL < 0$ then $|\lambda| = |\lambda_{q+1}|$ exit
 - else $q := q + 1$ endif
- end

The derivative $\partial_\lambda \mathcal{S}(\lambda)$ writes

$$\frac{\partial \mathcal{S}}{\partial \lambda}(\lambda) = -\frac{2}{\beta} \frac{(\Sigma_{eq})^2}{\lambda^3} - f \frac{\Sigma_m}{\lambda^2} \left(h'(\Sigma_m/\lambda) - \frac{n-1}{n+1} h^{-2}(\Sigma_m/\lambda) h'(\Sigma_m/\lambda) \right). \quad (\text{A.59})$$

A4. Slip systems

Unit vectors $\mathbf{n}^{(s)}$ and $\mathbf{m}^{(s)}$ used to define the Schmid tensors $\boldsymbol{\mu}^{(s)}$ are recalled in Table A.1.

The dislocation interaction matrix \mathbf{a} writes under the form specified in Table A.2.

Table A1
Slip systems for face-centered cubic crystals with Schmid and Boas notations.

$\mathbf{n}^{(s)}$	(111)	($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$)	($\bar{1}\bar{1}1$)	($\bar{1}1\bar{1}$)	($\bar{1}11$)	(110)	(011)	(101)	($1\bar{1}0$)	(011)	($10\bar{1}$)	(110)
$\mathbf{m}^{(s)}$	[01 $\bar{1}$]	[10 $\bar{1}$]	[$1\bar{1}0$]	[01 $\bar{1}$]	[101]	[110]	[011]	[101]	[$1\bar{1}0$]	[011]	[$10\bar{1}$]	[110]

Table A2
General form of the dislocation interaction matrix \mathbf{a} .

k	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
1	a_1	a_2	a_2	a_4	a_5	a_5	a_5	a_6	a_3	a_5	a_3	a_6
2	a_2	a_1	a_2	a_5	a_3	a_6	a_4	a_5	a_5	a_5	a_6	a_3
3	a_2	a_2	a_1	a_5	a_6	a_3	a_5	a_3	a_6	a_4	a_5	a_5
4	a_1	a_5	a_5	a_1	a_2	a_2	a_6	a_5	a_3	a_6	a_3	a_5
5	a_5	a_3	a_6	a_2	a_1	a_2	a_3	a_5	a_6	a_5	a_5	a_4
6	a_5	a_6	a_3	a_2	a_2	a_1	a_5	a_4	a_5	a_3	a_6	a_5
7	a_5	a_4	a_5	a_6	a_3	a_5	a_1	a_2	a_2	a_6	a_5	a_3
8	a_6	a_5	a_3	a_5	a_5	a_4	a_2	a_1	a_2	a_3	a_3	a_6
9	a_3	a_5	a_6	a_3	a_6	a_5	a_3	a_2	a_1	a_5	a_4	a_5
10	a_5	a_5	a_4	a_6	a_5	a_3	a_6	a_3	a_5	a_1	a_2	a_3
11	a_3	a_6	a_5	a_3	a_5	a_6	a_5	a_3	a_4	a_2	a_1	a_2
12	a_6	a_3	a_5	a_5	a_4	a_5	a_3	a_6	a_5	a_2	a_2	a_1

leads to 512^3 voxels. For each case, 10 realizations of microstructures are drawn as depicted on Figs. B.14–B.16, except for the case with 4096 grains (512^3 voxels), for which only one microstructure is considered (Fig. B.17). The tensile curves obtained from these microstructures are shown in Fig. B.18: only one case per volume size is reported here, as the same trend has been observed with the other realizations. The simulations are performed using the parameters reported in Table 3 along with the values $\bar{\gamma}_0 = 0.5$ and $\bar{\tau}_0 = 58$ MPa determined in Section 4. The overall maximal stress R_m versus the number of grains in the cells is plotted in Fig. B.19. One can observe that dispersion is low when 512 grains are considered. Thus, these figures tend to indicate that a single realization with 512 grains in the aggregate seems to be a good compromise between size and accuracy.

Appendix B. Numerical model: parametric studies

B1. Statistical representativeness

A parametric study has been carried out in order to determine the number of grains within a unit cell required for statistical representativeness. This is a difficult issue that cannot be addressed thoroughly. First, it is clear that the notion of representativeness is an asymptotic notion (the exact representativeness can only be reached for an infinite medium) and secondly, it depends on the “quantity of interest”. Here, stationarity is only studied for the effective tensile curve, and particularly for the maximal overall stress. Computations are performed on cells with 64^3 , 128^3 , 256^3 and 512^3 voxels. The mean number of voxels per grain is fixed to 32^3 . By doing so, a cell with 8 grains contains 64^3 voxels, 64 grains leads to 128^3 voxels, 512 grains leads to 256^3 voxels, 4096 grains

B2. Spatial resolution

A second parametric study has been carried out in order to determine a suitable spatial discretization (in voxels) of the microstructures. This parameter is closely related to the number of voxels which should be used for each grain of the aggregate in order to capture the field fluctuations in each grain leading to an accurate overall response of the aggregate. A specific microstructure with 100 grains is considered. The number of voxels used in its spatial discretization is increasing as shown in Fig. B.20. Once again, the simulations are performed using the set of parameters reported in Table 3 along with $\bar{\gamma}_0 = 0.5$ and $\bar{\tau}_0 = 58$ MPa.

The simulated tensile curves are shown in Fig. B.21. A very good agreement between the different cases is observed: all curves superimpose almost perfectly. Then, the question of spatial discretization of the microstructures in the porous case is

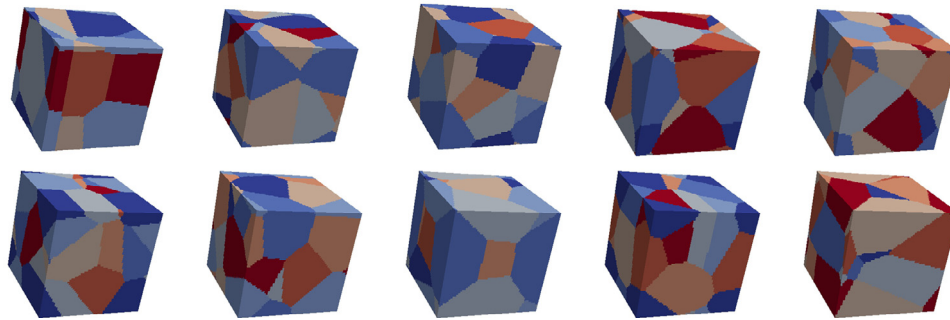


Fig. B14. 10 different microstructures considered for the statistical representativeness study. 8 grains in each cell.

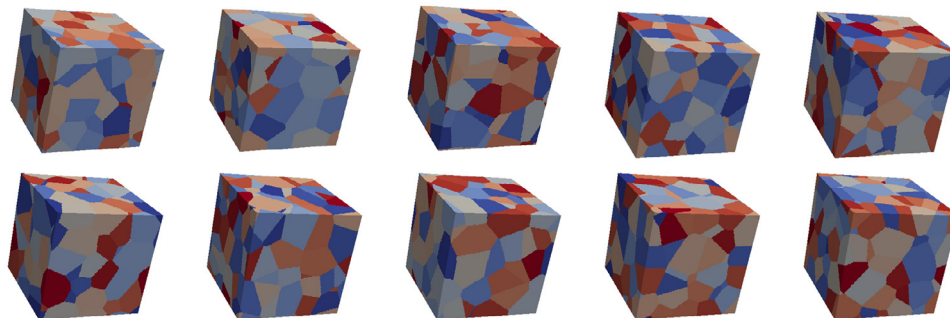


Fig. B15. 10 different microstructures considered for the statistical representativeness study. 64 grains in each cell.

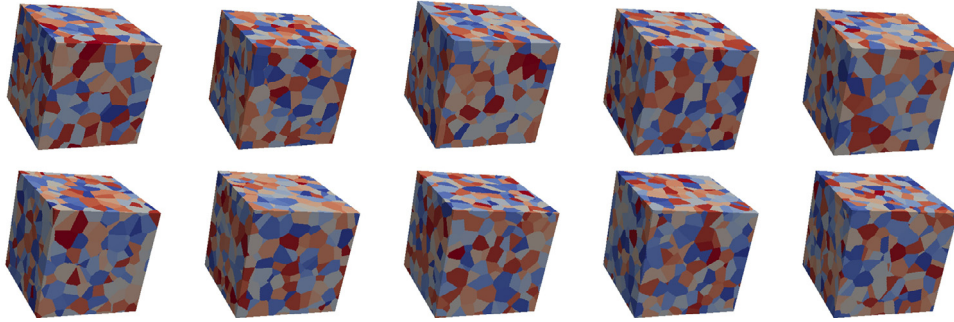


Fig. B16. 10 different microstructures considered for the statistical representativeness study. 512 grains in each cell.

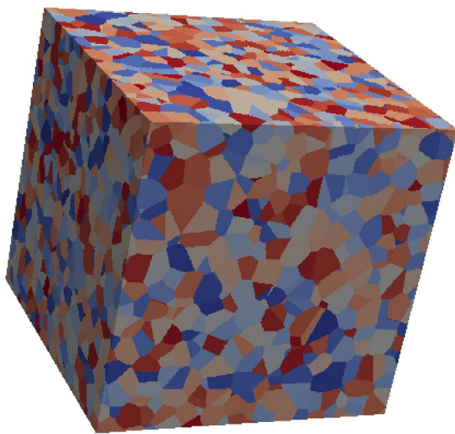


Fig. B17. Microstructure with 4096 grains considered for the statistical representativeness study.

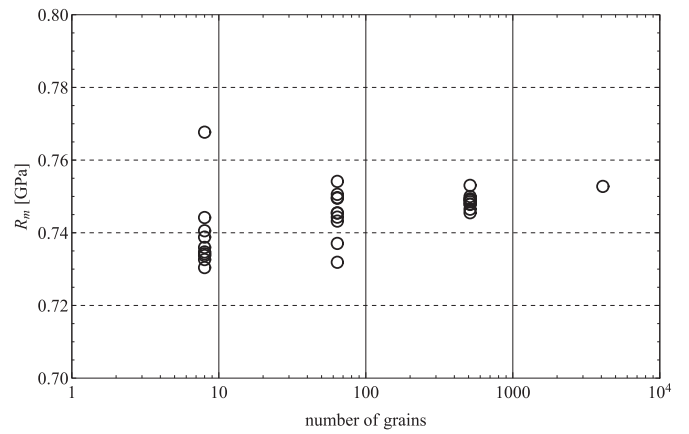


Fig. B19. Maximal overall stress obtained from the simulated tensile curves. Effect of the number of grains in the cell. Simulations performed on the microstructures of Fig. B.14 with 8 grains, Fig. B.15 with 64 grains, Fig. B.16 with 512 grains and the microstructure of Fig. B.17 with 4096 grains.

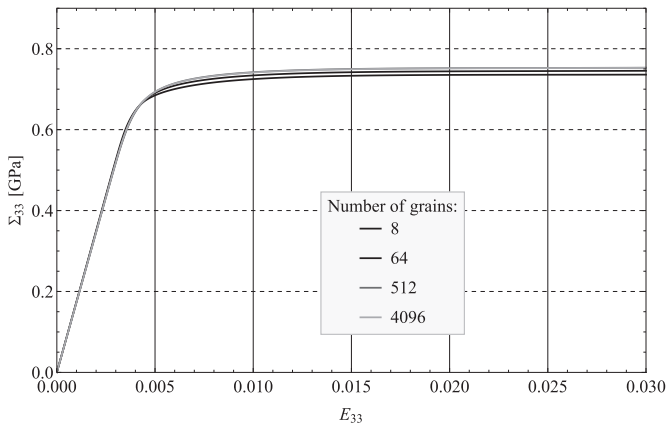


Fig. B18. Simulated tensile curves. Effect of the number of grains in the cell. Simulations performed on the top left microstructures of Fig. B.14 with 8 grains, Fig. B.15 with 64 grains, Fig. B.16 with 512 grains and the microstructure of Fig. B.17 with 4096 grains.

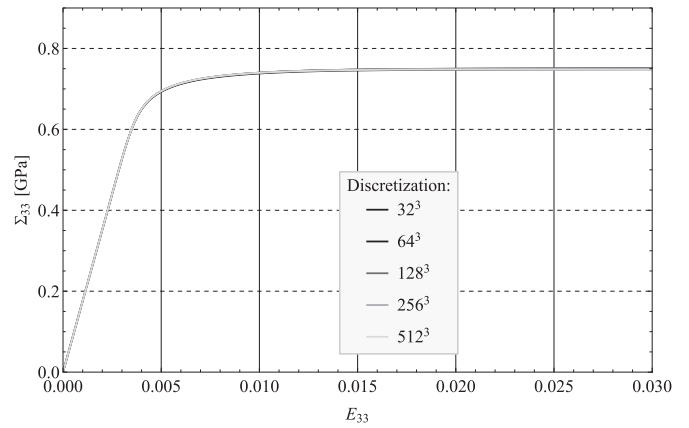


Fig. B21. Simulated tensile curves. Effect of the number of voxels (discretization). Simulations performed on the microstructures of Fig. B.20 with 100 grains.

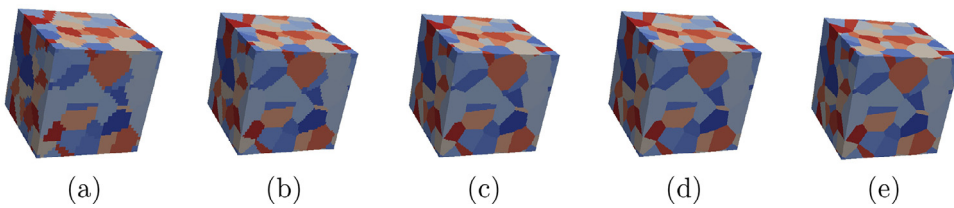


Fig. B20. For the same microstructure, increase of the number of voxels used for the spatial discretization: (a) 32^3 voxels, (b) 64^3 voxels, (c) 128^3 voxels, (d) 256^3 voxels, (e) 512^3 voxels.

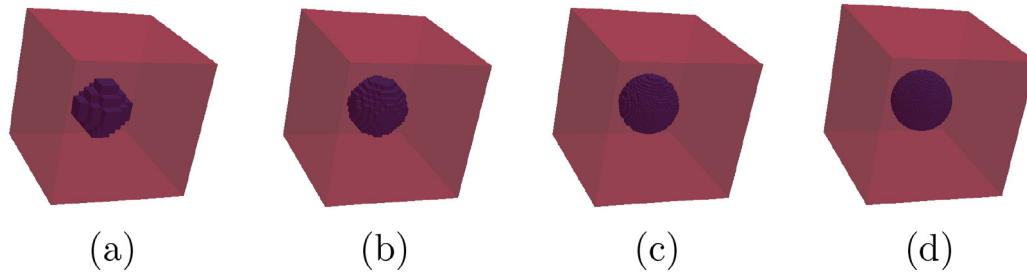


Fig. B.22. For the same microstructure, increase of the number of voxels used for the spatial discretization (porous case, single void): (a) 16^3 voxels, (b) 32^3 voxels, (c) 64^3 voxels, (d) 128^3 voxels.

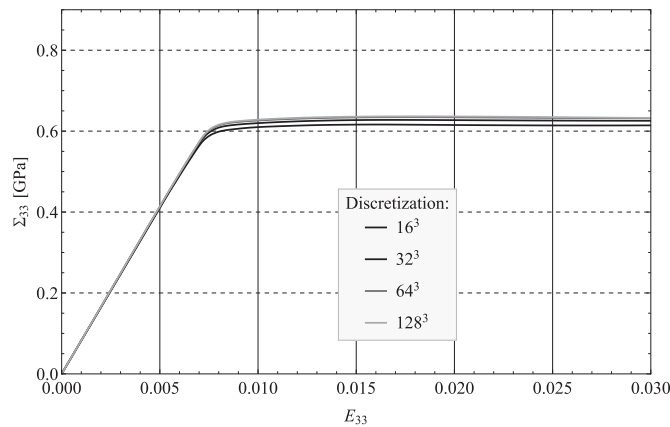


Fig. B.23. Simulated tensile curves for porous monocrystal with the microstructures displayed in Fig. B.22. Effect of the number of voxels (discretization).

addressed. The question is closely related to the number of voxels which should be used for each intragranular void inside the aggregate. As explained in [37], this question should be addressed, ideally, realization by realization, by conducting parametric studies in which the number of voxels is increased until stationarity of the quantities of interest (here the maximal overall stress) is reached. Following this procedure would require a formidable computational effort in the porous polycrystal case where we want to put as many as possible of the smallest possible voids inside the grains with respect to the available RAM memory. To fix ideas, a simulation with 512^3 voxels already requires 140 GB RAM. Instead of that, we followed a procedure already implemented in past studies [28,37,38] which consists in examining a cubic unit-cell with a single void at its center and determining how many voxels are required to achieve a reasonable compromise for a single void. The porosity is set to 4% and a study relative to the spatial discretization is performed. The microstructures are plotted on Fig. B.22. The crystal surrounding the void is oriented along the laboratory basis (Euler angles $(\phi_1, \Phi, \phi_2) = (0, 0, 0)$). For each discretization, the obtained tensile curve is plotted in Fig. B.23. This figure tends to indicate that the discretization with 32^3 voxels is a good compromise between size and accuracy. It corresponds to a number of 1310 voxels per void. In Section 3 we adopt a discretization with 512^3 voxels so as not to increase too much the amount of required memory. For each porous microstructure, the porosity and the number of voids are specified to get approximately 1310 voxels per void.

References

[1] INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY, Assessment and Management of Ageing of Major Nuclear Power Plant Components Important to Safety: PWR Vessel Internals, International Atomic Energy Agency, Vienna, 1999. IAEA-TEC-DOC-1119.

- [2] F. Garner, L. Greenwood, D. Harrod, Potential high fluence response of pressure vessel internals constructed from austenitic stainless steels, in: 6th International Symposium on Environmental Degradation of Materials in Nuclear Power Systems-Water Reactors, 1993, pp. 783–790.
- [3] O. Chopra, A. Rao, A review of irradiation effects on LWR core internal materials neutron embrittlement, *J. Nucl. Mater.* 412 (1) (2011) 195–208.
- [4] J. Hure, S.E. Shawish, L. Cizelj, B. Tanguy, Intergranular stress distributions in polycrystalline aggregates of irradiated stainless steel, *J. Nucl. Mater.* 476 (2016) 231–242.
- [5] S.E. Shawish, J. Hure, Intergranular normal stress distributions in untextured polycrystalline aggregates, *Eur. J. Mech. - A/Solids* 72 (2018) 354–373.
- [6] X. Han, Modélisation de la fragilisation due au gonflement dans les aciers inoxydables austénitiques irradiés, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2012 Ph.D. thesis.
- [7] B. Tanguy, X. Han, J. Besson, S. Forest, C. Robertson, N. Rupin, Dislocations and irradiation defects-based micromechanical modelling for neutron irradiated austenitic stainless steels, International Symposium on Plasticity 2013 and Its Current Applications, 2013.
- [8] F.A. Garner, D.J. Edwards, S.M. Brummer, S.I. Porollo, Y.V. Konobeev, V.S. Neustroev, V.K. Shamardin, A.V. Kozlov, I.I. Balachov, Y. Isobe, Recent developments concerning void swelling in PWR internals at relatively low irradiation temperatures, in: The Fifth International Ural Seminar on the Radiation Physics of Metals and Alloys: Abstracts of Papers, 2003, p. 133. February 1 March 1, 2003, Snezhinsk.
- [9] F. Garner, 4.02 - radiation damage in austenitic steels, in: R.J. Konings (Ed.), Comprehensive Nuclear Materials, Elsevier, Oxford, 2012, pp. 33–95.
- [10] J.-L. Fléjou, Comportement élasto-plastique sous irradiation des métaux : application aux internes de cuve, Manuel de référence. Code_Aster, 2010. 4284.
- [11] A. Renault, J. Malaplate, C. Pokor, P. Gavaille, TEM and EFTEM characterization of solution annealed 304L stainless steel irradiated in PHENIX, up to 36dpa and at 390°C, *J. Nucl. Mater.* 421 (1) (2012) 124–131.
- [12] P. Suquet, M. Bornert, Rappels de calcul tensoriel et d'élasticité, in: M. Bornert, T. Bretheau, P. Gilormini (Eds.), Homogénéisation en mécanique des matériaux, 2, Hermès Science Publications, Paris, 2001, pp. 171–202.
- [13] C. Ling, B. Tanguy, J. Besson, S. Forest, F. Latourte, Void growth and coalescence in triaxial stress fields in irradiated FCC single crystals, *J. Nucl. Mater.* 492 (2017) 157–170.
- [14] S.E. Shawish, P.-G. Vincent, H. Moulinec, L. Cizelj, L. Gélébart, Full-field polycrystal plasticity simulations of neutron-irradiated austenitic stainless steel: a comparison between FE and FFT-based approaches, *J. Nucl. Mater.* 529 (2020) 151927.
- [15] P. Suquet, H. Moulinec, O. Castelnau, M. Montagnat, N. Lahellec, F. Grennerat, P. Duval, R. Brenner, Multi-scale modeling of the mechanical behavior of polycrystalline ice under transient creep, *Procedia IUTAM* 3 (2012) 76–90. IUTAM Symposium on Linking Scales in Computations: From Microstructure to Macro-scale Properties.
- [16] H. Moulinec, P. Suquet, A fast numerical method for computing the linear and nonlinear properties of composites, *C. R. Acad. Sci. Paris II* 318 (1994) 1417–1423.
- [17] H. Moulinec, P. Suquet, A numerical method for computing the overall response of nonlinear composites with complex microstructure, *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* 157 (1998) 69–94.
- [18] L. Joëssel, Micromechanical Modeling of the Viscoplastic Behavior of a Porous Polycrystal: Application to an Irradiated Austenitic Stainless Steel, Université d'Aix-Marseille, 2018 Ph.D. thesis.
- [19] L. Joëssel, P.-G. Vincent, M. Gărăjeu, M.I. Idiart, Viscoplasticity of voided cubic crystals under hydrostatic loading, *Int. J. Solids Struct.* 147 (2018) 156–165.
- [20] J. Michel, H. Moulinec, P. Suquet, Effective properties of composite materials with periodic microstructure: a computational approach, *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* 172 (1) (1999) 109–143.
- [21] Y. Chen, A. Rao, B. Alexandreanu, K. Natesan, Slow strain rate tensile tests on irradiated austenitic stainless steels in simulated light water reactor environments, *Nuclear Engineering and Design* 269 (2014) 38–44. Special Issue - The International Conference on Structural Mechanics in Reactor Technology (SMIRT21), New Delhi India, Nov 06–11, 2011.

- [22] I.I. Balachov, E. Shcherbakov, A. Kozlov, I. Portnykh, F. Garner, Influence of radiation-induced voids and bubbles on physical properties of austenitic structural alloys, *Journal of Nuclear Materials* 329-333 (2004) 617–620. Proceedings of the 11th International Conference on Fusion Reactor Materials (ICFRM-11).
- [23] O.V. Ershova, E.N. Shcherbakov, P.I. Yagovitin, M.V. Evseev, V.S. Shikhalev, A.V. Kozlov, Relation between the physicomechanical properties of an austenitic ChS-68 steel and its swelling during high-dose irradiation, *Phys. Met. Metallogr.* 106 (6) (2008) 624–629.
- [24] V. Neustroev, F. Garner, Very high swelling and embrittlement observed in a Fe18Cr10NiTi hexagonal fuel wrapper irradiated in the BOR-60 fast reactor, *J. Nucl. Mater.* 378 (3) (2008) 327–332.
- [25] E.A. Berndt, I. Sevostianov, Micromechanical analysis of the effect of void swelling on elastic and electric properties of irradiated steel, *J. Nucl. Mater.* 446 (1) (2014) 148–154.
- [26] Z. Hashin, S. Shtrikman, A variational approach to the theory of the elastic behaviour of multiphase materials, *J. Mech. Phys. Solids* 11 (2) (1963) 127–140.
- [27] V. Tvergaard, On localization in ductile materials containing spherical voids, *Int. J. Fract.* 18 (4) (1982) 237–252.
- [28] K. Wojtacki, P.-G. Vincent, P. Suquet, H. Moulinec, G. Boittin, A micromechanical model for the secondary creep of elasto-viscoplastic porous materials with two rate-sensitivity exponents: application to a mixed oxide fuel, *Int. J. Solids Struct.* (2018).
- [29] T. Mori, K. Tanaka, Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions, *Acta Metall.* 21 (5) (1973) 571–574.
- [30] D. François, A. Pineau, A. Zaoui, *Mechanical Behaviour of Materials. Vol 1: Micro and Macroscopic Constitutive Behaviour, Solid Mechanics and Its Applications*, Vol. 180, Springer, 2012.
- [31] J.-B. Leblond, G. Perrin, P. Suquet, Exact results and approximate models for porous viscoplastic solids, *Int. J. Plast.* 10 (1994) 213–235.
- [32] P. Ponte Castañeda, P. Suquet, Nonlinear composites, *Adv. Appl. Mech.* 34 (1998) 171–302.
- [33] Y. Liu, P. Ponte Castañeda, Homogenization estimates for the average behavior and field fluctuations in cubic and hexagonal viscoplastic polycrystals, *J. Mech. Phys. Solids* 52 (2004) 1175–1211.
- [34] A.L. Gurson, Continuum theory of ductile rupture by void nucleation and growth: Part I – yield criteria, *J. Eng. Mater. Technol.* 99 (1977) 2–15.
- [35] J.-M. Gatt, Y. Monerie, D. Laux, D. Baron, Elastic behavior of porous ceramics: application to nuclear fuel materials, *J. Nucl. Mater.* 336 (2005) 145–155.
- [36] M. Gărăjeu, P. Suquet, Effective properties of porous ideally plastic or viscoplastic materials containing rigid particles, *J. Mech. Phys. Solids* 45 (6) (1997) 873–902.
- [37] P.-G. Vincent, P. Suquet, Y. Monerie, H. Moulinec, Effective flow surface of porous materials with two populations of voids under internal pressure: II. full-field simulations, *Int. J. Plast.* 56 (2014) 74–98.
- [38] G. Boittin, P.-G. Vincent, H. Moulinec, M. Gărăjeu, Numerical simulations and modeling of the effective plastic flow surface of a biporous material with pressurized intergranular voids, *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* 323 (2017) 174–201.