



HAL
open science

Modélisation et simulation des effets mécaniques d'expansions internes dues à la corrosion d'inclusions métalliques dans des matrices cimentaires

Mohamed Amine Benaimeche

► **To cite this version:**

Mohamed Amine Benaimeche. Modélisation et simulation des effets mécaniques d'expansions internes dues à la corrosion d'inclusions métalliques dans des matrices cimentaires. Génie civil. Université Gustave Eiffel, 2022. Français. NNT : 2022UEFL2021 . tel-03690607

HAL Id: tel-03690607

<https://theses.hal.science/tel-03690607>

Submitted on 8 Jun 2022

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.

THÈSE DE DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ GUSTAVE EIFFEL

SPÉCIALITÉ : GÉNIE CIVIL

**Modélisation et simulation des effets mécaniques
d'expansions internes dues à la corrosion
d'inclusions métalliques dans des matrices
cimentaires**

BENAIMECHE Mohamed Amine

Soutenue le 28 janvier 2022

Jury :

<i>Rapporteurs :</i>	KERFRIDEN Pierre	Professeur assistant École des Mines Mines ParisTech
	MALECOT Yann	Professeur des universités Université Grenoble Alpes
<i>Examineurs :</i>	LA BORDERIE Christian	Professeur des universités Université de Pau et des Pays de l'Adour
	BEN LAGHA Sabah	Chef de projet ORANO
<i>Directeur de thèse :</i>	YVONNET Julien	Professeur des Universités Université Gustave Eiffel
<i>Co-directeur de thèse :</i>	BARY Benoit	Ingénieur chercheur CEA Saclay
	HE Qi-Chang	Professeur des Universités Université Gustave Eiffel



Résumé

Cette thèse s'inscrit dans le cadre des études pour le conditionnement de déchets issus de démantèlement des réacteurs UNGG, constitués majoritairement de graphite, de magnésium et de résidus d'uranium. Une des solutions possibles serait d'immobiliser les déchets dans un conteneur métallique par une matrice à base de ciment de laitier Alkali-Activé. La solution porale de la matrice peut interagir avec les phases métalliques et provoquer des réactions de corrosion. L'expansion due à la formation de produits de corrosion pourrait alors entraîner la formation de microfissures dans la matrice cimentaire. Le colis de déchets cimentés est caractérisé par une forte hétérogénéité matérielle à différentes échelles, et son comportement mécanique pourrait être impacté par l'existence d'éventuelles fissures à l'échelle microscopique. Les travaux de cette thèse ont pour objectif de définir un modèle qui permettra de prédire le comportement mécanique de ce type de colis. Une nouvelle méthode multi-échelle basée sur un algorithme de machine-learning, appelée k-means FE², est développée ici pour résoudre des problèmes multi-échelles non linéaires généraux avec des variables internes et des comportements dépendant de l'histoire du chargement. Le problème à l'échelle macroscopique est réduit en construisant des clusters de points de Gauss qui sont estimés être dans le même état mécanique. L'algorithme de machine-learning k-means clustering est utilisé pour sélectionner les points de Gauss en fonction de leur état de déformation. Ensuite, pour tous les points de Gauss d'un cluster, un seul problème non linéaire de VER (Volume Élémentaire Représentatif) à l'échelle microscopique est résolu, et sa réponse en termes de propriétés mécaniques est transférée à tous les points d'intégration du cluster. La convergence de la méthode k-means FE² doit être vérifiée par rapport au nombre de clusters dans la structure macroscopique, et la solution de référence FE² [117, 116]. La méthode de champ de phase a été utilisée à l'échelle microscopique, puis étendue aux grandes déformations, pour simuler l'initiation et la propagation des microfissures liées à la corrosion. Le mécanisme de fissuration de la matrice cimentaire a été étudié en considérant l'effet de la taille du VER, des conditions aux limites, de la fraction volumique des hétérogénéités, de l'énergie de fissuration, et du maillage. La méthode k-means FE² est appliquée à un cas de type « colis de déchets cimentés en considérant des microstructures avec plusieurs fractions volumiques de déchet graphite ». Il est important de noter que ce modèle est un cas d'étude en cours de développement et donc pas suffisamment abouti pour simuler le comportement d'un colis définitif.

Abstract

This thesis is part of the studies for the conditioning of waste from the dismantling of UNGG reactors, which is mainly composed of graphite, magnesium and uranium residues. One of the possible solutions would be to immobilize the waste in a metal container using a matrix based on Alkali-Activated slag cement. The pore solution of the matrix can interact with the metal phases and cause corrosion reactions. The expansion due to the formation of corrosion products could then lead to the formation of micro-cracks in the cement matrix. The cemented waste package is characterized by a strong material heterogeneity at different scales, and its mechanical behavior could be impacted by the existence of potential cracks at the microscopic scale. The objective of this thesis is to define a model that will allow the prediction of the mechanical behavior of this type of package. A new machine-learning based multiscale method, called k-means FE^2 , is developed to solve general nonlinear multiscale problems with internal variables and loading history-dependent behavior. The macroscale problem is reduced by constructing clusters of Gauss points that are estimated to be in the same mechanical state. A machine-learning k-means clustering algorithm is used to select the Gauss points based on their strain state. Then, for all Gauss points in a cluster, a single nonlinear problem of RVE (Representative Volume Element) at the microscale is solved, and its response is transferred to all integration points in the cluster in terms of mechanical properties. The convergence of the k-means FE^2 method has to be verified with respect to the number of clusters in the macroscopic structure, and the FE^2 reference solution [117, 116]. The phase field method is used at the microscopic scale, and then extended to large strains, to simulate the initiation and propagation of corrosion-induced microcracks. The cracking mechanisms of the cementitious matrix are studied by considering the effect of the size of the RVE, the boundary conditions, the volume fraction of the heterogeneities, the cracking energy, and the mesh size. The k-means FE^2 method is applied to a cemented waste package problem considering microstructures with several volume fractions of graphite waste. It is important to note that this model is a case study under development and therefore not sufficiently completed to simulate the behavior of a final package.

Table des matières

Table des figures	ix
Liste des tableaux	xv
1 Introduction Générale	1
1.1 Contexte industriel et problématique	1
1.2 Organisation du manuscrit	6
2 Modélisation et simulation de la fissuration : État de l’art	9
2.1 Introduction	9
2.2 Méthodes basées sur des éléments discrets	10
2.2.1 Modèle des éléments discrets	10
2.2.1.1 Forme des particules	10
2.2.1.2 Loi d’interaction des particules	11
2.2.1.3 Modélisation de la rupture	12
2.2.2 <i>Lattice Element Models</i> (LEM)	13
2.3 Méthodes basées sur la mécanique de la rupture dans un cadre éléments finis	16
2.3.1 Mécanique élastique linéaire de la rupture	16
2.3.1.1 Méthode de simulation de la fissuration avec remaillage .	18
2.3.1.2 Approche en énergie - Critère de Griffith	19
2.3.2 Modèle de zone cohésive	21
2.3.3 <i>Extended Finite Element Method</i> X-FEM	23
2.3.4 <i>Embedded Finite Element Method</i> E-FEM	25
2.3.5 <i>Augmented Finite Element Method</i> A-FEM	26
2.4 Méthodes continues d’endommagement discrétisées par éléments finis . . .	28
2.4.1 Mécanique de l’endommagement	28
2.4.2 Modèle d’endommagement non-local	29
2.4.3 Modèle à gradient	31

2.4.4	Thick Level Set TLS	32
2.4.5	Méthode de champ de phase	33
2.4.5.1	Régularisation de la discontinuité liée à la présence de la fissure	34
2.4.5.2	Cadre variationnel régularisé de la fissure	39
2.5	Modélisation des fissures dues à la corrosion dans les matériaux cimentaires	42
2.6	Modélisation multi-échelle de l'endommagement	45
2.7	Conclusion	49
3	Une méthode k-means FE² pour modéliser la fissuration à deux échelles dans le colis	51
3.1	Introduction	51
3.2	Modèle de fissuration à l'échelle microscopique : modèle de champ de phase	53
3.2.1	Problème mécanique	53
3.2.2	Problème du champ de phase	54
3.2.3	Implémentation numérique	57
3.3	Méthode des éléments finis au carré FE ²	60
3.4	k-means clustering	65
3.5	k-means FE ²	67
3.5.1	Mise à jour des clusters dans les modèles avec des variables internes	69
3.5.2	Exemples numériques	73
3.5.2.1	Exemple 1 : Plaque trouée en traction uniaxiale	73
3.5.2.2	Exemple 2 : Poutre en flexion 3 points	78
3.6	Conclusion	83
4	Modélisation de la fissuration de la matrice due à la corrosion d'inclusions métalliques par la méthode de champ de phase	85
4.1	Introduction	85
4.2	Expansion due à la corrosion des phases métalliques : hypothèses	86
4.3	Modèle à l'échelle microscopique	89
4.4	Résultats et discussion	91
4.4.1	Effet des conditions aux limites	91
4.4.2	Effet de la fraction volumique de graphite et d'uranium	93
4.4.3	Définition de la taille des VERs	99
4.4.4	Effet de l'énergie de fissuration g_c	106
4.4.5	Effet de la densité du maillage	106

4.5	Modélisation des grandes déformations liées à la corrosion des inclusions métalliques	109
4.5.1	Cinématique des déformations finies et modélisation mécanique . .	110
4.5.2	Lois de comportements en grandes déformations dans Cast3M / Mfront	114
4.5.3	Formulation du champ de phase pour les déformations finies	115
4.5.4	Comparaison entre les formulations linéaires et non linéaires	117
4.6	Conclusion	121
5	Application de la méthode k-means FE² à un colis de déchets	123
5.1	Introduction	123
5.2	Données de base	124
5.2.1	Descriptif du fût métallique	124
5.2.2	Déchets à traiter	125
5.2.3	Génération des microstructures hétérogènes	126
5.3	Comportement différé de la matrice cimentaire	128
5.3.1	Retrait endogène	129
5.4	Application numérique	131
5.4.1	Application 1 : Convergence par rapport au nombre de clusters . .	131
5.4.2	Application 2 : Endommagement lié à la corrosion d'uranium, effet de l'incorporation du graphite	132
5.4.3	Application 3 : Endommagement lié au retrait endogène	136
5.4.4	Application 4 : Endommagement lié au retrait endogène + corrosion	138
5.5	Conclusion	141
6	Conclusion générale et perspectives	145
6.1	Conclusion générale	145
6.2	Perspectives	148
	Bibliographie	151

Table des figures

1.1	Présentation d'une cartouche de combustible UNGG [126]	2
1.2	(a) chemise de graphite (inactif) après dégainage (b) Concassage du graphite (c) Démonstrateur à l'échelle 1 réalisé par ORANO.	3
1.3	Une vue 3D d'une tomographie d'un cube de ciment contenant une barre d'uranium corrodée : les flèches noires indiquent les fissures, le point bleu désigne la zone d'uranium (non-corrodé), le point rouge la zone des produits de corrosion [308].	6
2.1	Rupture dans la MED avec différentes formes de particules : (a) rupture dans un essai de flexion semi-circulaire avec des particules sphériques [278] (b) trajectoire de la fissure (rouge) au-dessus de la zone entaillée d'une poutre en flexion 3 points avec des particules de clusters rigides [291].	11
2.2	Loi de contact dans la MED proposée par [381]	12
2.3	Illustration du modèle PBM présenté dans [428]	13
2.4	Exemples de réseaux triangulaires réguliers : (a) représentation de la rupture due à la corrosion d'une barre d'acier dans le béton [345] (b) représentation de matériaux hétérogènes par le LEM [209]	14
2.5	Types d'éléments utilisés dans le LEM	15
2.6	Modes d'ouverture des fissures	17
2.7	(a) Fissure locale et domaine J-intégral (b) Comparaison des propagations de fissures obtenues par simulation avec remaillage et expérimentalement [72]	19
2.8	(a) Principe du modèle de zone cohésive [324] (b) fissuration due à la corro- sion d'armature dans le béton [413]	22
2.9	Principe des éléments enrichis dans le modèle X-FEM	24
2.10	(a) Principe des éléments enrichis dans le modèle E-FEM (b) comparaison entre la méthode X-FEM et E-FEM [296], (c) ouverture des fissure dans une éprouvette de béton comprimée [366]	26
2.11	Superposition des éléments séparés par une discontinuité dans A-FEM	27

2.12	Principe du modèle TLS [265]	32
2.13	Courbe force déplacement d'une simulation d'un essai de traction uniaxiale [63].	33
2.14	(a) Solide avec une fissure discontinue (b) solide avec une description régularisée de la fissure	35
2.15	Représentation régularisée d'une fissure (cas unidimensionnel) en $x = L/2$: (a) représentation discontinue de la fissure (b) représentation régularisée par champ de phase pour différentes longueurs de régularisation ℓ [288].	36
2.16	Approximations de la fissure avec la variable de champ de phase $d \in [0, 1]$ pour différentes longueurs de régularisation $\ell_a > \ell_b > \ell_c > \ell_d$ [258].	37
2.17	Variable de champ de phase d pour différentes fonctions géométriques de fissure $\alpha(d)$ [409].	38
2.18	Vues 3D de développement des (i) produits de corrosion (couleur orange) (ii)(iii) d'une barre d'uranium (couleur bleu) enrobée dans une matrice cimentaire (iv) (v) fissuration de l'enrobage [369]	43
2.19	Endommagement d'échantillons de béton dû à la corrosion uniforme/non-uniforme d'armatures : la rangée supérieure montre l'endommagement pour une microstructure homogène, et la rangée inférieure l'endommagement pour une microstructure hétérogène [99, 97].	44
2.20	(a) schémas d'homogénéisation linéaire (champ moyen) (b) schémas d'homogénéisation non linéaire FE ² (champ complet)	46
2.21	Illustration de la méthode d'auto-clustering du VER [227]	48
3.1	Principe de la méthode FE ²	60
3.2	Application de l'algorithme des k-means clustering pour la classification des éléments dans un calcul par éléments finis linéaire par rapport aux composantes du tenseur de déformation : (a), (b), (c) : composantes du tenseur de déformation; (d) : initialisation des clusters en choisissant des éléments aléatoires dans la structure; (e)-(l) : positions des clusters aux itérations 1, 2, 3, 5, 9, 15, 20 et 25 respectivement.	68
3.3	Principe de la méthode k-means FE ²	69
3.4	Évolution des clusters et du nombre de VER dans la structure macroscopique (exemple illustratif), chaque sous-cluster représente un problème de VER non linéaire.	71
3.5	Macro-structure d'une plaque perforée : (a) : géométrie et conditions aux limites; (b) maillage macroscopique.	73

3.6	(a) VER d'une microstructure de mortier. Les inclusions de sable sont représentées en gris foncé; (b) maillage du VER.	74
3.7	Plaque perforée : convergence de la solution k-means FE ² suivant le critère de contrainte maximale de von Mises dans la structure par rapport au nombre de clusters.	75
3.8	Plaque perforée : convergence de la courbe force-déplacement en fonction du nombre de clusters k et de la solution de référence FE ²	75
3.9	Position des clusters au premier pas de chargement (a) (b) (c), et au dernier pas de chargement (d) (e) (f) dans la structure macroscopique pour $k = 5, 6, 8$	76
3.10	Contrainte de von Mises dans la structure macroscopique pour le nombre de clusters $k = 5, 6, 8$; solutions k-means FE ² (a), (b) et (c), et solution de référence FE ² (d).	77
3.11	Poutre en flexion 3 points (a) géométrie et conditions aux limites; (b) maillage grossier; (c) maillage moyen; (d) maillage fin.	78
3.12	Convergence par rapport à la contrainte maximale de von Mises des solutions k-means FE ² en fonction du nombre de clusters pour différents maillages macroscopique.	79
3.13	Courbes force-déplacement des 3 maillages avec différents nombres de clusters et la solution de référence FE ² (a)-(c); (d) Comparaison des courbes pour les trois maillages à la convergence par rapport au nombre de clusters.	80
3.14	Position des clusters au premier pas de chargement (a) (b) (c), et au dernier pas de chargement (d) (e) (f) dans la structure macroscopique (maillage moyen) pour $k = 5, 6, 8$	81
3.15	Endommagement macroscopique $D = 1 - \sqrt{\bar{C}_{1111}/\bar{C}_{1111}^0}$ pour (a) $K = 5$; (b) $K = 6$, et (c) $K = 9$ clusters; (d) solution de référence FE ²	82
4.1	Schéma de corrosion d'uranium dans la matrice d'enrobage	86
4.2	Processus de déformation dû à l'expansion induite par la corrosion d'uranium	87
4.3	Trois configurations de microstructure (a), (b) et (c) avec différentes fractions volumiques de graphite 0%, 20%, et 40% respectivement, avec une inclusion d'uranium au centre; (d) zoom sur une partie du maillage.	91
4.4	Schémas de rupture de la microstructure 4.3(c) pour différentes conditions aux limites.	93
4.5	Modules effectifs \bar{C}_{1111}^{eff} et \bar{C}_{2222}^{eff} en fonction du taux de corrosion pour différentes conditions aux limites.	94

4.6	Différentes réalisations de microstructures pour 20% et 40% de fraction volumique de graphite.	94
4.7	Champ perturbé de module d'Young de la matrice cimentaire	95
4.8	Schémas de rupture de la microstructure 4.7 pour quatre réalisations de champ de modules de Young R_1, R_2, R_3 et R_4 à des taux de corrosion $\tau = 2\%$, $\tau = 6\%$, et $\tau = 7\%$	96
4.9	Schémas de rupture des microstructures de la figure 4.6(b) à des taux de corrosion $\tau = 2\%$, $\tau = 6\%$, et $\tau = 10\%$	96
4.10	Schémas de rupture des microstructures de la figure 4.6(a) à des taux de corrosion $\tau = 2\%$, $\tau = 6\%$, et $\tau = 10\%$	97
4.11	Modules effectifs \bar{C}_{1111}^{eff} et \bar{C}_{2222}^{eff} en fonction du taux de corrosion pour cinq réalisations : (a)(b) effet de l'incorporation du graphite dans les microstructures de la figure 4.6 ; (c)(d) effet de l'incorporation du graphite pour deux fractions volumiques d'uranium 0.005% et 0.1%.	98
4.12	Trois configurations de microstructures : (a), (b) et (c) pour des inclusions de graphite de petites, moyennes, et grandes tailles à différentes échelles, respectivement. (b) approche 2 (une inclusion d'uranium au centre). (c) approche 1 (cellules unitaires).	100
4.13	Schémas de fissuration dans les trois configurations de la figure 4.12(a)(b)(c) : approche 2 (une inclusion au centre).	102
4.14	Modules effectifs moyens \bar{C}_{1111}^{eff} et \bar{C}_{2222}^{eff} en fonction du taux de corrosion pour les trois configurations : Approche 2.	103
4.15	Schémas de fissuration dans les trois configuration de la figure 4.12(a)(b)(c) : approche 1 (cellules unitaires).	104
4.16	Modules effectifs moyens \bar{C}_{1111}^{eff} et \bar{C}_{2222}^{eff} en fonction du taux de corrosion pour les trois configurations : Approche 1.	105
4.17	(a)(b) Modules effectifs \bar{C}_{1111}^{eff} et \bar{C}_{2222}^{eff} en fonction du taux de corrosion pour différentes valeurs de g_c , (c) faciès de fissuration à $\tau = 5\%$	107
4.18	(a)(b) Modules effectifs \bar{C}_{1111}^{eff} et \bar{C}_{2222}^{eff} en fonction du taux de corrosion pour différents maillage, (c) faciès de fissuration à $\tau = 8\%$	108
4.19	(a)(b) Modules effectifs \bar{C}_{1111}^{eff} et \bar{C}_{2222}^{eff} en fonction du taux de corrosion pour différentes valeurs de ℓ , (c) faciès de fissuration.	109
4.20	Décomposition multiplicative	111
4.21	Vecteur de contrainte dans la configuration de référence/actuelle	112

4.22	(a)(b) Modules effectifs \bar{C}_{1111}^{eff} et \bar{C}_{2222}^{eff} en fonction du taux de corrosion pour les deux formulations sous les conditions aux limites CL2, (c) faciès de fissuration à des taux de corrosion $\tau = 3.4\%$, $\tau = 6\%$, et $\tau = 10\%$	118
4.23	(a)(b) Modules effectifs \bar{C}_{1111}^{eff} et \bar{C}_{2222}^{eff} en fonction du taux de corrosion pour les deux formulations sous les conditions aux limites CL4, (c) faciès de fissuration à des taux de corrosion $\tau = 10\%$, $\tau = 35\%$, $\tau = 58\%$, et $\tau = 88\%$. 120	
5.1	Démonstrateur de colis de déchet : (a) géométrie et (b) maillage macroscopique.	124
5.2	Exemples d'inclusions de graphite obtenues	127
5.3	Microstructures générées : (a) avec une inclusion d'uranium au centre; (b) avec 20% et (c) 40% de graphite	127
5.4	Mesures de retrait endogène de mortier de laitier alcali-activé et évolutions issues de modèles analytiques [331]	130
5.5	Position des clusters dans la structure macroscopique pour $k = 5, 6, 7, 8$	132
5.6	Déformations macroscopiques $\bar{\epsilon}_{xx}$, $\bar{\epsilon}_{yy}$, et $\bar{\epsilon}_{zz}$ pour le taux de corrosion $\tau = 100\%$	133
5.7	Modules effectifs \bar{C}_{1111}^{eff} , \bar{C}_{2222}^{eff} et \bar{C}_{3333}^{eff} en fonction du taux de corrosion pour les éléments ①, ②, et ③ dans la structure macroscopique pour différents nombres de clusters.	134
5.8	Modules effectifs \bar{C}_{1111}^{eff} , \bar{C}_{2222}^{eff} et \bar{C}_{3333}^{eff} en fonction du taux de corrosion pour les éléments ①, ② et ③ dans la structure macroscopique : effet de l'incorporation de graphite.	135
5.9	Champ d'endommagement $0.9 < d < 1$ dans l'élément ① pour différentes fractions volumiques.	135
5.10	Modules effectifs \bar{C}_{1111}^{eff} , \bar{C}_{2222}^{eff} et \bar{C}_{3333}^{eff} de la structure macroscopique sous l'effet du retrait endogène pour différentes fractions volumiques de graphite. 137	
5.11	Champ d'endommagement dans la microstructure dans le cas du retrait endogène pour différentes fractions volumiques.	138
5.12	Modules effectifs \bar{C}_{1111}^{eff} , \bar{C}_{2222}^{eff} et \bar{C}_{3333}^{eff} en fonction du taux de corrosion pour les éléments ①, ②, et ③ dans la structure macroscopique pour différentes fractions volumiques de graphite, dans le cas du retrait endogène et de la corrosion de l'uranium.	140
5.13	Champ d'endommagement $0.9 < d < 1$ dans l'élément ① dans le cas du retrait endogène de la matrice cimentaire et de la corrosion d'uranium pour les fractions volumiques de 20% et 40%.	141

5.14 Champ d'endommagement dans la microstructure dans le cas du retrait endogène de la matrice cimentaire et de la corrosion d'uranium pour différentes fractions volumiques. 142

Liste des tableaux

2.1	Fonction de dégradation d'énergie $g(d)$	41
3.1	Nombre total de problèmes de VERs non linéaires et temps de calcul en fonction du nombre de clusters pour les solutions k-means FE ² et FE ²	76
3.2	Comparaison des coûts de calcul pour les méthodes k-means FE ² et FE ²	83
4.1	Paramètres élastiques des différentes phases	89
4.2	Fraction volumique de graphite	99
4.3	Taille d'élément des différents maillages	107
5.1	Caractéristique du fût métallique	124
5.2	Fractions volumiques de graphite	125

Chapitre 1

Introduction Générale

1.1 Contexte industriel et problématique

Cette thèse en partenariat avec Orano s'inscrit dans le contexte des études de conditionnement des déchets issus du retraitement des combustibles des réacteurs de la filière Uranium Naturel Graphite Gaz (UNGG) de l'usine de La Hague. Cette filière de réacteurs nucléaires a été développée dans les années 1950 et exploitée en France jusqu'aux années 1980. Elle utilise l'uranium naturel comme combustible, le graphite comme modérateur et le gaz carbonique comme caloporteur.

Les éléments de combustible UNGG sont constitués d'un tube d'uranium métallique gainé en alliage de magnésium (Mg-0,6%Zr) et muni de deux bouchons en extrémité fabriqués en un alliage de magnésium différent (Mg-1,2%Mn). Ces bouchons sont soudés à la gaine pour assurer l'étanchéité de la cartouche. L'ensemble est ensuite positionné dans des chemises de graphite comme le montre la Figure 1.1 [126]. Le retraitement des assemblages de combustible (cartouches) pendant le fonctionnement de cette filière a mené à la génération d'un volume important de déchets. Ces déchets sont constitués principalement de graphite (chemises), de magnésium (gaines, bouchons, centreurs), d'acier inoxydable (fils de selles), et de résidus d'uranium. Les déchets sont actuellement entreposés dans des curseurs dans l'atelier de dégainage et entreposés au SOD (Stockage Organisé des Déchets) sur le site de La Hague dans l'attente d'une solution de stockage. L'ensemble des déchets devait ensuite être cimenté dans un fût métallique avec une matrice cimentaire spécifique permettant de limiter la réactivité des déchets (voir la figure 1.2). Il est important de noter que ce modèle de colis est en cours de développement par Orano et qu'il n'est pas similaire au colis définitif.

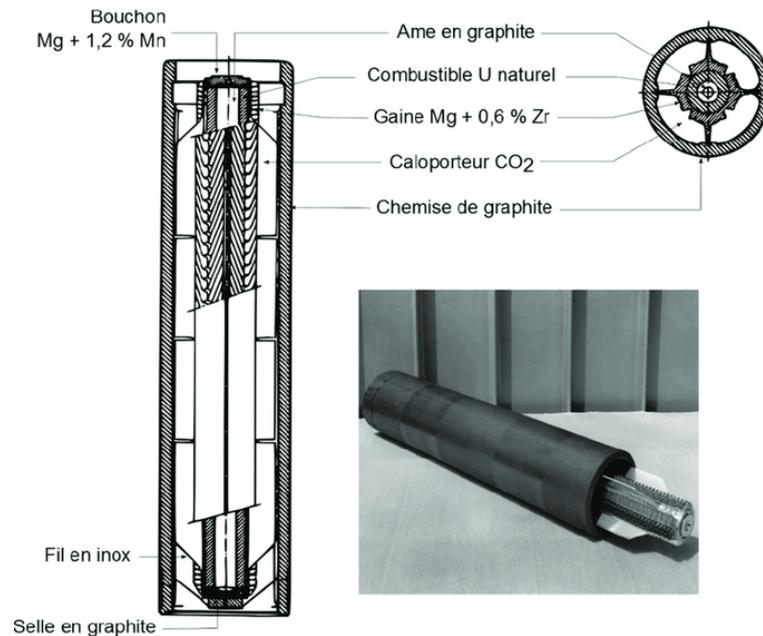


FIGURE 1.1 Présentation d'une cartouche de combustible UNGG [126]

La solidification/stabilisation est un processus qui consiste à mélanger un déchet avec un liant hydraulique afin de réduire la lixiviation¹ des substances radioactives par des moyens physiques et chimiques et de transformer les déchets en colis de déchets plus facilement transportables et stockables. L'utilisation du liant hydraulique de type « ciment » comme une matrice de solidification est une technique largement appliquée pour le conditionnement des déchets de faible et moyenne activité [369]. La solidification des déchets par des matrices cimentaires comprend trois aspects : (a) fixation chimique des déchets - interactions chimiques entre les produits d'hydratation du ciment et les déchets, (b) adsorption physique des déchets à la surface des produits d'hydratation des ciments et (c) enrobage physique des déchets (faible perméabilité des colis durcis) [356, 357]. Les deux premiers aspects dépendent de la nature des produits d'hydratation et des déchets, et le troisième aspect concerne à la fois la nature des produits d'hydratation et les caractéristiques de la structure poreuse des colis. Contrairement à d'autres techniques de solidification (la vitrification, l'enrobage par liants organiques...), le processus de cimentation est relativement simple et peu coûteux. Néanmoins, l'ensemble matrice cimentaire/déchets doit répondre à certaines exigences de sûreté, telles que la stabilité dimensionnelle et la durabilité. Ainsi, la fissuration de la matrice d'enrobage doit être limitée. Ce critère oriente le choix du liant hydraulique et du rapport volumique déchets/enrobage à utiliser. L'efficacité de l'immobilisation des déchets radioactifs

1. la migration de radionucléides confinés dans la matrice cimentaire vers le milieu extérieur.



(a) Graphite après dégainage



(b) Concassage du graphite



(c) Test de colis UNGG à l'échelle 1 réalisé par Orano

FIGURE 1.2 (a) chemise de graphite (inactif) après dégainage (b) Concassage du graphite (c) Démonstrateur à l'échelle 1 réalisé par ORANO.

est fortement liée à la microstructure de la matrice cimentaire durcie, en particulier à la distribution de la taille des pores et à la porosité.

Les matériaux à base de ciment Portland sont les plus utilisés pour immobiliser les déchets de faible et de moyenne activité [108, 134, 292, 293]. Cependant, les matrices à base de ciment Portland présentent l'inconvénient d'une lixiviation relativement élevée des radionucléides du fait de la grande distribution de taille des pores [392]. Afin d'améliorer les propriétés de la matrice d'enrobage, en particulier sa résistance à la lixiviation des radionucléides, des matériaux supplémentaires tels que le laitier de haut fourneau, les cendres volantes, et différents types d'argiles ou de zéolites sont mélangés au ciment Portland pour être utilisés dans l'immobilisation des déchets radioactifs [40, 134, 62, 326, 188].

Au cours des dernières décennies, les liants alcali-activés notamment les ciments à base de laitier alcali-activé (CLAA) ont été développés avec succès comme une alternative prometteuse au ciment Portland [302, 323]. Les matrices à base de CLAA se caractérisent par leur capacité à immobiliser les déchets radioactifs, telles que les métaux lourds. L'avantage de l'utilisation de ce type de liant pour l'immobilisation de certains déchets nucléaires a été également souligné par plusieurs travaux de recherche [418, 76, 19, 171]. La lixiviation moindre de l'élément Césium dans les matrices de laitier alcali-activé a poussé vers leur utilisation pour enrober ce radionucléide dans plusieurs pays [418, 21].

La structure poreuse fine des pâtes de ciment de laitier activé limite la pénétration et la lixiviation d'espèces nocives telles que les radionucléides. Les résultats expérimentaux montrent que le CLAA a une résistance mécanique élevée, une faible porosité, une résistance à la corrosion chimique et à la chaleur, une faible perméabilité, et une faible solubilité [418]. De tous ces aspects, il a été montré que le CLAA constitue une meilleure matrice de solidification que le ciment Portland pour les déchets radioactifs [418, 19, 355, 302, 323]. De nombreuses recherches ont confirmé que les pores dans les CLAA sont nettement plus petits que ceux des ciments Portland, et que l'activation alcaline du laitier entraîne une réduction de la porosité totale et de la taille moyenne des pores [354, 338, 73]. Par conséquent, la migration des solutions dans la matrice de CLAA durcie est limitée [377, 239, 87]. De plus, des études récentes concernant l'enrobage de déchets radioactifs métalliques ont reporté l'effet bénéfique du remplacement du ciment ordinaire par les liants à base de laitier alcali-activé notamment vis-à-vis de la corrosion [418, 21]. Bai et al. [21], ont montré que l'activation du laitier par 10% de ciment ordinaire a pu réduire d'un facteur 5 la vitesse de corrosion de l'aluminium.

Le pH élevé de la solution porale des matrices à base de CLAA [377, 73, 240, 364] entraîne la corrosion de certains déchets métalliques, notamment l'uranium (U) qui est connu pour sa capacité à se corroder dans des environnements humides [147, 353, 88, 369]. Dans le contexte du conditionnement des déchets radioactifs, la corrosion des métaux réactifs est considérée comme problématique pour deux raisons : (1) la formation de produits de corrosion expansifs (par exemple UO_2) qui du fait des changements volumiques (expansions) peuvent conduire à des états de contraintes/déformations à l'intérieur de la matrice cimentaire susceptibles d'initier des microfissures [308, 369] et (2) la formation d'hydrogène gazeux, qui doit être gérée pendant l'entreposage, le transport et le stockage. Ces deux phénomènes sont susceptibles d'entraîner une pression et une déformation du colis de déchets cimentés. Par conséquent, la durabilité du colis et sa capacité à retenir la radioactivité peuvent être affectées de manière significative.

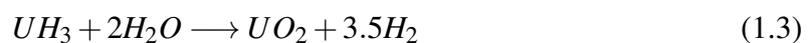
La présence d'eau libre dans les pores de la matrice cimentaire au très jeune âge ainsi que tout au long de la vie du colis peut accélérer les réactions de corrosion des inclusions métalliques (l'uranium par exemple) et conduire à de forts dégagements d'hydrogène selon la réaction (1.1) [368] :



Par ailleurs, l'hydrogène libéré et piégé peut par la suite réagir avec l'uranium pour former de l'hydride d'uranium UH_3 via la réaction (1.2) [368, 301, 201, 245] :



En raison de la diffusion rapide de l'hydrogène, l' UH_3 se retrouve souvent le long des fissures ou des joints au cours de la corrosion d'uranium métal. L' UH_3 se comporte alors comme un intermédiaire et peut lui-même réagir avec l'eau pour former l'oxyde UO_2 selon la réaction (1.3). L'hydrogène libéré par la réaction de l' UH_3 avec l'eau est alors disponible pour réagir avec les formes d'uranium présentes, ou il peut être libéré en solution ou en phase gazeuse [368, 201].



Ces mécanismes de type électrochimiques dépendent essentiellement de la stabilité thermodynamique du métal dans les conditions de pH et de température que présente la solution porale dans la matrice cimentaire. D'autres paramètres peuvent également influencer le développement de ces produits de corrosion : la saturation du milieu poreux, et le rapport de surface des métaux. Le taux d'oxydation de l'uranium incorporé dans une matrice cimentaire dans des conditions humides a été observé dans [369] comme étant initialement rapide, suivi d'une diminution et d'une stabilisation vers 50 semaines à un taux correspondant au régime permanent d'échange de gaz à travers la matrice.

L'expansion causée par la corrosion des métaux dans le colis pourrait, si la corrosion est importante, générer des contraintes/déformations internes suffisantes pour provoquer la fissuration du colis [110, 368, 308, 340]. Des systèmes simplifiés simulant des échantillons de déchets radioactifs cimentés ont été produits dans [308], corrodés artificiellement de manière contrôlée pour entraîner une dégradation rapide des échantillons, puis analysés à l'aide d'un rayonnement synchrotron à haute énergie au Diamond Light Source (DLS) [95]. La figure 1.3 montre une vue 3D d'un cube de ciment contenant une barre d'uranium, les flèches noires indiquent les fissures générées après l'expansion d'uranium, tandis que le point bleu désigne la zone d'uranium (non-corrodé) et le point rouge la zone des produits de corrosion.

De nombreuses recherches ont rapporté que les matériaux à base de CLAA présentent des déformations différées (fluage, retrait) plus importantes que les matériaux à base de ciment Portland [331, 61, 420, 76, 275, 16]. Rifai [331] a montré que les matériaux à base de CLAA exhibent des déformations de retrait endogène et de fluage propre ayant des amplitudes significatives, et continuant à évoluer sur le long terme. Collins et al. [76] ont expliqué le retrait élevé du CLAA par la contrainte capillaire plus importante liée à la taille des pores plus fine. Des résultats expérimentaux et des conclusions similaires ont également été obtenus

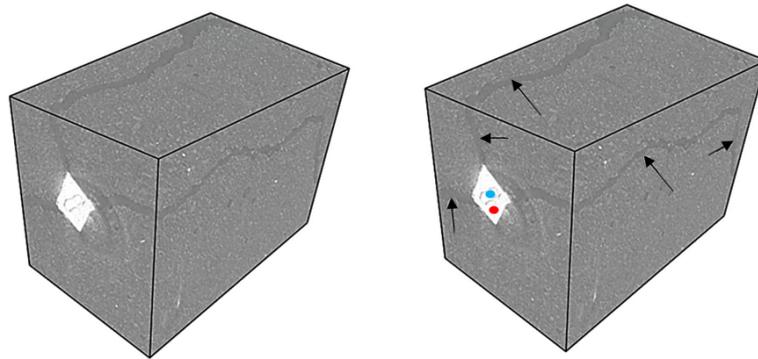


FIGURE 1.3 Une vue 3D d'une tomographie d'un cube de ciment contenant une barre d'uranium corrodée : les flèches noires indiquent les fissures, le point bleu désigne la zone d'uranium (non-corrodé), le point rouge la zone des produits de corrosion [308].

dans [275, 16]. Les gradients de température, et la restriction des déformations de retrait de la matrice cimentaire, du fait de la présence des déchets et des parois du fût contenant les déchets cimentés, peuvent être responsables de l'apparition d'une fissuration et d'une redistribution des contraintes dans le colis.

1.2 Organisation du manuscrit

L'objectif principal de la thèse est de simuler le comportement macroscopique d'un colis soumis à l'expansion des inclusions métalliques d'uranium à l'échelle microscopique, et d'étudier l'impact du gonflement des produits de corrosion sur la matrice cimentaire afin de développer des colis industriels capables de faire face à cette problématique. Le colis de déchets cimentés sera supposé être composé d'un fût métallique dans lequel différents types de déchets radioactifs sont incorporés dans une matrice à base de ciment de laitier activé. Pour simplifier, les déchets radioactifs seront caractérisés par deux phases différentes : (i) une phase solide inerte, et (ii) une phase métallique corrosive. La résolution des problèmes non-linéaires, tel que la fissuration due à la corrosion, dans un colis hétérogène avec une description explicite de tous les constituants à différentes échelles n'est pas réalisable avec les ressources informatiques actuelles. Afin de surmonter cet obstacle, nous choisissons d'utiliser des approches multi-échelles, notamment des méthodes d'homogénéisation numérique. Les comportements mécaniques considérés à différentes échelles sont (i) l'expansion effective du colis, et le comportement différé (retrait endogène) de la matrice cimentaire à l'échelle macroscopique, (ii) l'endommagement dû à la corrosion des inclusions métalliques, et le comportement différé (retrait) de la matrice cimentaire à l'échelle microscopique (échelle de l'inclusion). Dans ce travail, nous supposons : (a) une matrice cimentaire durcie (pas d'évo-

lution du module de Young au jeune âge), (b) une forme sphérique des inclusions d'uranium, ainsi qu'une corrosion uniforme autour de l'inclusion, et (c) une liaison parfaite entre les différentes phases et la matrice cimentaire. L'étude se limite aux conditions endogènes où les échanges hydriques entre le colis et son environnement ne sont pas possibles puisque les parois des conteneurs sont considérées étanches. Le plan choisi pour cette thèse comporte quatre parties :

- **État de l'art** Nous nous concentrerons dans ce chapitre bibliographique sur quelques thèmes en lien direct avec les travaux présentés dans cette thèse. Dans un premier temps, une partie sera dédiée à un état de l'art concernant les différents modèles et méthodes numériques permettant de modéliser la fissuration dans les matériaux quasi fragiles. En effet, au cours des dernières décennies, de nombreuses méthodes de simulation numérique de la propagation des fissures ont été développées, mais chacune d'entre elle possède des avantages et des inconvénients que nous décrivons ici, en vue de choisir la meilleure stratégie pour notre étude. Une autre partie présentera des travaux de la littérature concernant la modélisation des fissures dues à la corrosion dans les matériaux cimentaires. Enfin, nous présenterons une étude bibliographique sur les techniques multi échelle décrivant l'endommagement par fissuration.
- **Modélisation multi échelle des matériaux durant leur fissuration : la méthode k-means FE²**

La résolution des problèmes de fissuration non-linéaires dans des structures fortement hétérogènes comme les colis cimentés par une description explicite de tous les constituants à différentes échelles est hors de portée des moyens de calculs actuels. Afin de pallier cette difficulté et disposer d'un outil de modélisation pour la suite de l'étude applicable à notre problème, nous proposons dans ce chapitre une méthode numérique originale, développée durant ce travail de thèse. L'approche éléments finis au carré FE² [117, 116] permet de décrire le comportement des hétérogénéités de structure par un calcul éléments finis à deux échelles : macroscopique et microscopique, les non-linéarités (endommagement) étant directement traitées par un calcul en champs complets de l'état mécanique à l'échelle microscopique. Toutefois, l'inconvénient de cette méthode est le coût prohibitif en matière de temps de calcul et d'espace mémoire car il est requis pour chaque étape de résoudre un problème non-linéaire à chaque point d'intégration à l'échelle macroscopique. L'approche proposée ici se base sur la méthode FE² que nous avons modifiée en combinant celle-ci avec une technique de type machine learning afin de sélectionner "intelligemment" les points d'intégration dans lesquels un problème non linéaire doit être résolu. La méthode, baptisée méthode k-means FE², utilise la technique de classement automatique des informations appelée

"k-means clustering", utilisée notamment pour la reconnaissance d'images, et utilisée ici dans le but de réduire les temps de calcul de l'approche multi échelle FE². Au cours de ce chapitre, nous présentons la méthode et évaluons celle-ci au travers de plusieurs exemples numériques.

- **Modélisation des grandes transformations durant la fissuration liée au gonflement des inclusions métalliques** Dans ce chapitre, nous présentons une extension de la méthode de champ de phase, outil utilisé dans cette thèse pour modéliser la propagation des fissures, dans un cadre de grandes déformations. En effet, s'il y a suffisamment d'eau dans les pores de la matrice cimentaire et d'hydrogène emprisonné, l'oxydation d'uranium métal (réaction (1.1) et (1.2)) peut s'auto-propager [301, 12] et le volume des phases formées peut devenir important par rapport au volume initial de l'inclusion d'uranium [340]. Dans ce cas, l'hypothèse des petites perturbations ne peut plus être raisonnablement considérée. Nous présentons dans ce chapitre le cadre théorique ainsi que les développements numériques pour l'application de la méthode de champ de phase en grandes déformations, qui sera utilisée dans le chapitre suivant.

- **Etude de cas : application de la méthode k-means FE² à un colis de déchets**

Dans ce dernier chapitre, nous utilisons les différents outils de modélisation numérique développés, notamment la méthode k-means FE² ainsi que la méthode de champ de phase en grande transformations, à un cas industriel de colis de déchets. L'objectif est d'étudier le comportement global du colis et sa sensibilité à la variation de paramètres tels que l'effet de l'incorporation ou non du graphite, la forme des inclusions ou leur orientation. Trois cas sont étudiés : (1) sans retrait endogène ; (2) avec retrait endogène ; (3) avec prise en compte des grandes déformations.

Enfin, nous concluons en établissant un bilan des contributions et des résultats obtenus dans ce travail de thèse, et dresserons quelques perspectives.

Chapitre 2

Modélisation et simulation de la fissuration : État de l'art

2.1 Introduction

La prédiction de l'initiation et de la propagation des fissures à l'aide de modèles numériques de calcul est d'une grande importance pour les applications industrielles. Les bases théoriques de la théorie classique de la rupture fragile dans les solides sont exposées dans les travaux de [139, 167, 23] qui ont établi la théorie de la Mécanique Élastique Linéaire de la Rupture (MELR). La mécanique de la rupture est une partie de la mécanique des solides dans laquelle la présence d'une fissure est supposée. Celle-ci fournit des outils pour déterminer un critère de propagation de la fissure reliant quantitativement la longueur de la fissure et les propriétés mécaniques du matériau. La rupture des solides peut être modélisée numériquement en utilisant une approche discontinue (également appelée approche discrète) ou une approche continue. Dans la première approche, le champ de déplacement peut être discontinu sur les surfaces de la fissure, tandis que dans la seconde, les déplacements sont continus dans tout le domaine, mais les propriétés mécaniques sont dégradées progressivement pour modéliser le processus de fissuration. De nombreuses méthodes de simulation numérique de la propagation des fissures ont été développées au cours des dernières décennies. Chacune d'entre elles possède des avantages et des inconvénients, que nous discutons dans ce chapitre en vue de choisir l'outil le plus adapté pour notre étude. Nous passerons également en revue les études liées à la fissuration de corrosion dans les bétons ainsi que les aspects multi-échelle de la fissuration.

2.2 Méthodes basées sur des éléments discrets

Les modèles présentés ci-dessous reposent tous sur une représentation discrète du milieu continu. De cette manière, les discontinuités telles que les fissures sont naturellement représentées.

2.2.1 Modèle des éléments discrets

La méthode des éléments discrets (MED) a été proposée par Cundall et Strack [79] pour étudier les lois constitutives des sols. La MED suppose que le matériau peut être représenté par un assemblage de particules rigides qui interagissent entre elles. Le comportement global du système est déterminé par les lois de contact cohésif/frictionnel. La loi de contact peut être considérée comme la formulation du modèle de matériau à l'échelle microscopique. Les liens cohésifs peuvent être rompus, ce qui permet de simuler la rupture du matériau et sa propagation. Les paramètres constitutifs des contacts entre les éléments discrets, tels que la rigidité et la force de contact, influencent le comportement du modèle à l'échelle macroscopique. Ces paramètres sont généralement calibrés afin de reproduire les résultats expérimentaux [127]. La prise en compte de la cohésion entre les particules a permis la modélisation du comportement des matériaux quasi-fragiles tels que le béton [57, 247, 155, 387, 372, 154, 246] et les roches [164, 404, 164, 309, 186].

2.2.1.1 Forme des particules

Dans les modèles d'éléments discrets, des éléments simples qui interagissent par contact avec les éléments voisins sont souvent utilisés. Le choix de la forme et de la taille des particules est très lié à l'application (échelle, type de matériaux, et comportement) et influence significativement le comportement physique et mécanique des matériaux granulaires [341, 342]. Les éléments discrets de forme circulaires (2D) et sphérique (3D) sont couramment utilisés [74, 94, 320, 381, 278], voir la figure 2.1(a). Cela se comprend par la simplicité, l'efficacité, et la rapidité des calculs. Il a été montré dans [335, 342] que les simulations par MED utilisant des particules sphériques ont tendance à sous-estimer l'angle de frottement et la résistance au cisaillement dans les matériaux granulaires. En outre, les vides entre les particules sphériques sont peu représentatifs d'un milieu continu car ils surestiment généralement la quantité des pores. Enfin, le contact entre deux sphères est uniquement ponctuel, ce qui n'est pas le cas du contact entre les surfaces des fissures.

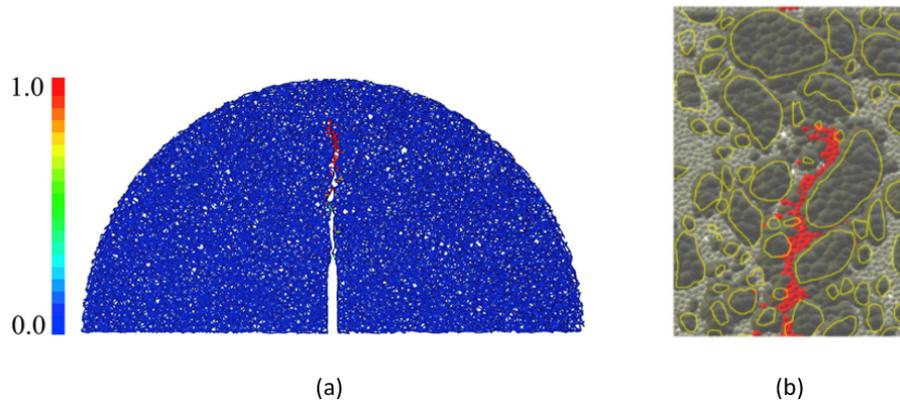


FIGURE 2.1 Rupture dans la MED avec différentes formes de particules : (a) rupture dans un essai de flexion semi-circulaire avec des particules sphériques [278] (b) trajectoire de la fissure (rouge) au-dessus de la zone entaillée d'une poutre en flexion 3 points avec des particules de clusters rigides [291].

De nombreux travaux de recherche ont utilisé la MED avec des formes de particules complexes, telles que les particules de forme ovales 3D [211, 315], les clusters rigides¹ [206, 291], les polyèdres convexes [135], les super ellipsoïdes [432], et récemment des formes réalistes de granulats [206, 416, 210, 226], voir la figure 2.1(b). En fonction de l'échelle choisie, chaque particule peut représenter un ensemble de granulats, un granulat, ou une partie de granulat [20].

2.2.1.2 Loi d'interaction des particules

Le module d'Young et le coefficient de Poisson sont les deux constantes élastiques utilisées pour caractériser le comportement élastique linéaire macroscopique des matériaux isotropes. Cundal et al. [79] ont proposé une loi d'interaction caractérisant la liaison entre particules par des ressorts linéaires, un ressort de raideur k_n est utilisé pour représenter la raideur normale et un ressort de raideur k_t représente la raideur tangentielle. Tavares et al. [381] ont proposé un modèle qui regroupe un terme élastique linéaire et un terme de dissipation visqueuse d'énergie. L'interaction entre les particules se traduit par des forces de contact, chaque force se décompose en une composante normale et tangentielle, respectivement appelées forces normales et tangentielles. Prenons deux particules en contact i et j dans la figures 2.2, la particule j applique à la particule i deux forces selon le vecteur normal \mathbf{n}_{ij} [381] :

- Une force élastique linéaire $\mathbf{N}_{ij}^e = k_n \delta_n \mathbf{n}_{ij}$, où δ_n est le déplacement relatif normal.

1. Plusieurs sphères superposées afin de représenter une phase dans un matériau granulaire.

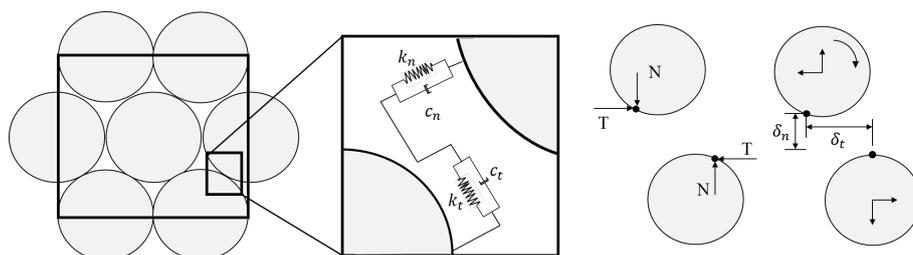


FIGURE 2.2 Loi de contact dans la MED proposée par [381]

- Une force visqueuse $\mathbf{N}_{ij}^v = c_n \dot{\delta}_n \mathbf{n}_{ij}$, où c_n est le coefficient d'amortissement visqueux normal, et $\dot{\delta}_n$ est la dérivée du déplacement relatif normal par rapport au temps.

La force de contact tangentielle selon \mathbf{t}_{ij} s'écrit à partir de deux contributions :

- Une force élastique linéaire $\mathbf{T}_{ij}^e = k_t \delta_t \mathbf{t}_{ij}$, où δ_t est le déplacement tangential relatif entre deux particules.
- Une force visqueuse $\mathbf{T}_{ij}^v = c_t \dot{\delta}_t \mathbf{t}_{ij}$, où c_t est le coefficient d'amortissement visqueux tangential, $\dot{\delta}_t$ est la dérivée du déplacement relatif tangential par rapport au temps.

Généralement, la MED comprend un cycle de calcul en trois étapes qui résout l'interaction entre éléments. Ces trois étapes sont : la détection des contacts, le calcul des forces d'interaction et l'intégration numérique par rapport au temps. Les forces internes résultant des interactions entre les éléments sont déterminées à l'aide des lois de déplacement des forces contenues dans les modèles de contact. La deuxième loi du mouvement de Newton est ensuite utilisée pour fournir un terme d'accélération pour chaque élément, basé sur la somme des forces internes et externes. En considérant une évolution dans le temps, la position de chaque élément peut être mise à jour et une nouvelle liste de contacts formée. Ce processus de calcul en fonction du temps se poursuit jusqu'à ce qu'une condition préalable soit satisfaite, généralement lorsqu'un nombre déterminé de cycles de calcul a été effectué. En admettant uniquement des petits pas de temps, la stabilité numérique du modèle est améliorée et seules des superpositions d'éléments relativement faibles sont obtenues ; en outre, les forces résultantes agissant sur un élément individuel proviennent exclusivement de ses interactions avec les éléments avec lesquels il est en contact [79].

2.2.1.3 Modélisation de la rupture

La méthode des éléments discrets est largement appliquée pour modéliser le comportement à la rupture des matériaux fragiles et quasi-fragiles, tels que le verre [425, 401], les céramiques [378, 242], et le béton [298, 381]. La plupart des modèles d'éléments discrets limitent la force de traction pour caractériser la rupture d'un contact [52, 93, 243]. Autrement

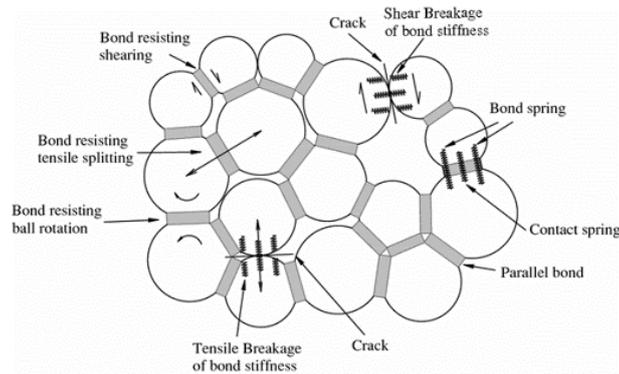


FIGURE 2.3 Illustration du modèle PBM présenté dans [428]

dit, si la force de traction d'une liaison dépasse une valeur limite, une fissure va se créer. Cette force limite est déterminée par calibration sur des résultats expérimentaux. D'autres travaux ont imposé parallèlement des résistances limites en traction et en cisaillement pour la rupture des liaisons [238].

Une autre méthode proposée par [320, 428, 426], appelée BPM², consiste à relier le centre des particules à l'aide de poutres, donnant une représentation duale du matériau avec d'un côté l'assemblage de particules indéformables et de l'autre l'assemblage de liens déformables (voir figure 2.3). La rupture d'un contact dans ce modèle ne dépend pas uniquement des relations entre les forces normale et tangentielle, mais aussi des moments calculés à partir des déplacements angulaires des particules [320]. Dans la figure 2.3 la rigidité de contact est toujours active même après la rupture de la liaison de contact, tant que les particules restent en contact, tandis que la rigidité des poutres est instantanément supprimée lorsqu'une liaison se rompt. Une autre solution proposée par Hentz et al. [153] permet l'introduction d'un effort d'interaction entre deux particules. L'interaction entre deux particules est définie dans un domaine d'interaction et n'implique pas nécessairement que deux éléments soient en contact. Cette force d'interaction contient une composante normale et une composante tangentielle. Ainsi, une loi de rupture de type Mohr-Coulomb peut être utilisée.

2.2.2 Lattice Element Models (LEM)

Le concept général du LEM repose sur la discrétisation d'un milieu continu en plusieurs éléments de ressort (treillis) ou de poutres connectés, et la réalisation d'une série d'analyses linéaires sur le modèle discret. La forme triangulaire régulière [349] ou irrégulière [396] est

2. *bonded-particle model*

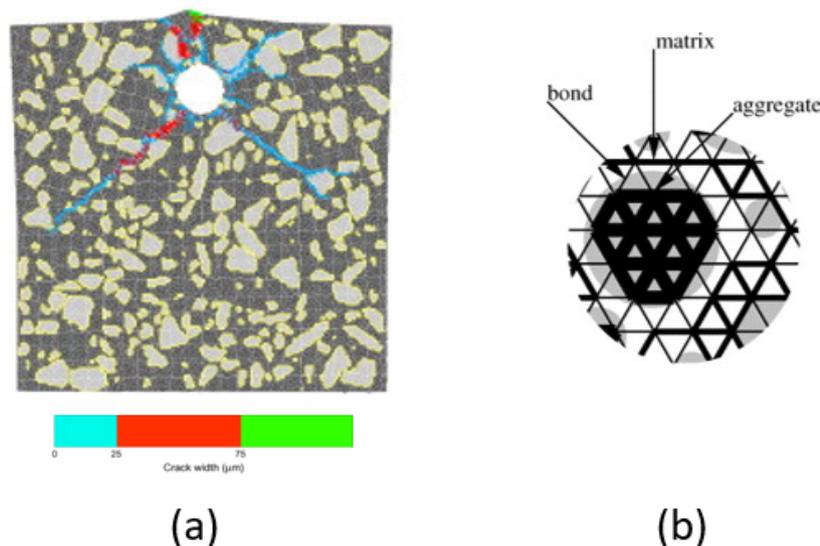


FIGURE 2.4 Exemples de réseaux triangulaires réguliers : (a) représentation de la rupture due à la corrosion d'une barre d'acier dans le béton [345] (b) représentation de matériaux hétérogènes par le LEM [209]

cependant plus souvent utilisée, car elle améliore la description des matériaux granulaires comme le béton. La figure 2.4a montre un exemple de réseaux triangulaires réguliers utilisés dans [345]. L'hétérogénéité du matériau est prise en compte en attribuant différentes résistances aux poutres (en utilisant une distribution gaussienne ou de Weibull) [347] ou en affectant aux liens des paramètres mécaniques différents selon qu'ils représentent des granulats, de la pâte de ciment ou une interface. Une autre façon de prendre en compte l'hétérogénéité, est de superposer la méso-structure du matériau (réelle) au treillis afin de connaître la nature des liens (voir figure 2.4b) [209].

Dans le LEM, des ressorts normaux, qui ne permettent que des déformations axiales, ont été utilisés pour décrire le comportement des éléments. Cependant, il a été constaté que le coefficient de Poisson résultant basé uniquement sur ces ressorts normaux est toujours fixe dans le cas d'un maillage régulier [365, 123, 310]. Pour résoudre ce problème, deux approches ont été adoptées. La première approche nécessite l'introduction de ressorts de cisaillement supplémentaires dans le modèle, comme le montre la figure 2.5. Cette approche a été développée et appelée dans la littérature le Lattice Spring Model (LSM) [55, 433, 69]. La deuxième approche consiste à inclure davantage de degrés de libertés nodaux, par exemple la déformation en cisaillement et la rotation dans le LEM (voir la figure 2.5). Grâce aux degrés de libertés nodaux ajoutés, les ressorts normaux sont remplacés par des éléments de poutre. Ainsi, le LEM développé par la deuxième approche est appelé dans la littérature

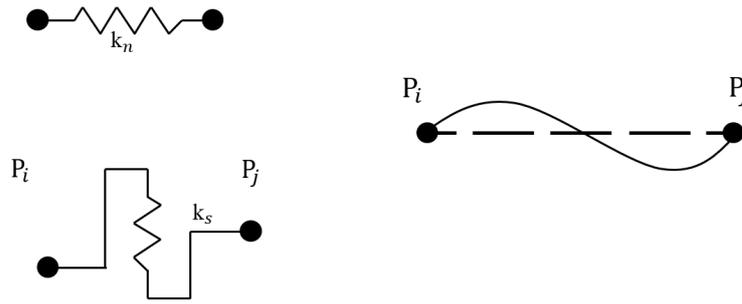


FIGURE 2.5 Types d'éléments utilisés dans le LEM

Lattice Beam Model (LBM) [219, 209, 337].

Plusieurs travaux de recherche ont utilisé le modèle lattice pour décrire le processus de rupture dans le béton [181, 221, 220, 209, 219], et la fissuration due à la corrosion dans les bétons [345]. La simulation de la rupture est réalisée en effectuant une analyse élastique linéaire du réseau sous chargement, et en retirant du maillage un élément qui dépasse un critère de rupture, par exemple, un critère en contrainte [220, 209], un critère en déformation [431, 166, 181], ou un critère d'énergie [189, 429]). Cette analyse est ensuite répétée, en retirant un seul élément à chaque étape. En utilisant cette méthode, des fissures réalistes sont obtenues. En outre, même si les éléments individuels se comportent tous de manière fragile, une réponse globale ductile peut être obtenue [348, 390].

Dans un critère en contrainte, l'élément rompu est défini comme l'élément dont la contrainte nominale dépasse un seuil, qui est généralement la résistance à la traction ou à la compression :

$$\sigma \geq \sigma_{max} \quad (2.1)$$

où σ est la contrainte nominale de l'élément, et σ_{max} est la contrainte de rupture. Le critère de rupture général de l'équation 2.1 peut prendre différentes formes spécifiques. Par exemple, dans le critère de contrainte de traction maximale, qui est largement utilisé dans les LBMs [345], la contrainte nominale est remplacée par la contrainte de traction, qui est calculée comme suit :

$$\sigma_t = \alpha_N \frac{F}{A_e} + \alpha_M \frac{(|M_i|, |M_j|)_{max}}{W_e} \quad (2.2)$$

où F est la force de traction normale dans l'élément, A_e et W_e sont la surface de la section transversale et le module de flexion de l'élément, respectivement, M_i et M_j sont les moments de flexion des nœuds de l'élément, et α_N et α_M sont le facteur d'influence de la force normale et le facteur d'influence de flexion, respectivement.

Le critère en déformation est similaire au critère en contrainte :

$$\varepsilon \geq \varepsilon_{max} \quad (2.3)$$

où ε est la déformation nominale de l'élément, et ε_{max} est la déformation de rupture. Dans le LBM, ε peut être remplacée par la déformation de traction ε_t , qui est simplement calculée à partir des déplacements nodaux.

$$\varepsilon_t = \frac{\Delta u + \Delta\varphi \cdot s \cdot \alpha_s}{l_e} \quad (2.4)$$

où u est le déplacement nodal dans la direction axiale, $\Delta\varphi$ est la différence entre les angles de flexion nodaux, α_s est le facteur d'influence de flexion, s et l_e sont des paramètres géométriques. Les critères de rupture en contrainte et en déformation présentent l'inconvénient de dépendance à la taille des éléments du maillage [348, 268].

2.3 Méthodes basées sur la mécanique de la rupture dans un cadre éléments finis

2.3.1 Mécanique élastique linéaire de la rupture

Dans une description plane d'un corps, les modes d'ouverture des fissures dépendent de la direction du chargement par rapport à l'orientation des surfaces de fissure et de la pointe de fissure (voir la figure 2.6). Le mode I est caractérisé par une discontinuité dans le champ de déplacement dans la direction y , c'est-à-dire $|u_y(x)| \neq 0$, un déplacement discontinu symétrique au plan (\mathbf{x}, \mathbf{z}) . L'ouverture de fissure en mode II est aussi appelée cisaillement plan ou mode glissant. La discontinuité de déplacement apparaît dans la direction x perpendiculaire au front de la fissure, donc $|u_x(x)| \neq 0$. Enfin, pour la fissure en mode III, le mode de cisaillement ou de fissure anti-plan décrit une séparation dans la direction z tangentielle à la pointe de la fissure avec $|u_z(x)| \neq 0$. En général, chaque fissure peut être décrite comme une superposition des trois modes de rupture.

La mécanique élastique linéaire de la rupture (MELR) prend en compte les corps ayant un comportement élastique linéaire. Les éventuelles non-linéarités matérielles ou géométriques qui se produisent autour de la pointe de fissure doivent être négligeables. Par conséquent, la MELR convient à la description de la rupture fragile. Le mécanisme de fissuration d'un solide pré-fissuré est déterminé par la concentration de contrainte et de déformation à proximité de

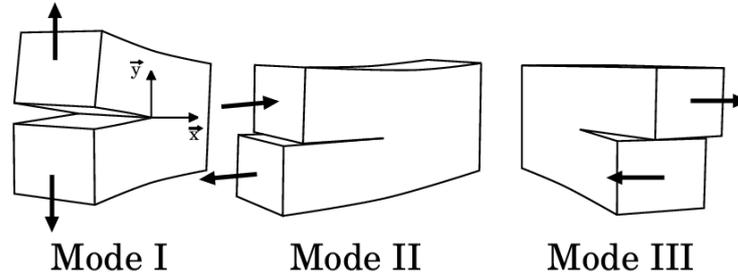


FIGURE 2.6 Modes d'ouverture des fissures

la pointe de fissure. Le champ singulier de pointe de fissure d'intensité K_i décrit l'intensité de la charge dans une zone étroite R autour de la pointe de fissure. En élasticité linéaire, la distribution spatiale étant fixe pour chaque mode, les seuls degrés de liberté restants sont les facteurs d'intensité des contraintes. Le tenseur des contraintes de Cauchy est alors défini de la façon suivante :

$$\sigma_{ij} = K_I \frac{F_{Iij}(\theta)}{\sqrt{r}} + K_{II} \frac{F_{IIij}(\theta)}{\sqrt{r}} + K_{III} \frac{F_{IIIij}(\theta)}{\sqrt{r}} \quad (2.5)$$

où r est la distance à la pointe de la fissure, θ est l'angle par rapport au plan de la fissure, et F_{ij} sont des fonctions qui dépendent de la géométrie de la fissure et des conditions de chargement.

Dans le cadre de la rupture fragile, un critère de propagation lié à la contrainte d'ouverture critique au-delà de laquelle la fissure va se propager ne peut fonctionner, puisque les contraintes tendent vers l'infini en $r = 0$. L'idée d'Irwin [168] est de faire porter le critère sur le facteur d'intensité K_i , qui caractérise l'intensité de la singularité. Un critère indique qu'une fissure commence à se propager lorsqu'elle atteint un état critique du matériau dans la zone de traitement.

$$K_i = K_{ic} \quad (2.6)$$

Cet état critique est caractérisé par la ténacité à la rupture K_{ic} . La ténacité à la rupture peut être interprétée comme la résistance du matériau à l'évolution des fissures, tandis que le facteur d'intensité des contraintes représente l'état du matériau induit par la charge correspondante. Considérons un état de fissuration d'un matériau comme une combinaison des trois modes de rupture, les contraintes peuvent être écrites à l'aide d'une fonction B , en fonction des trois facteurs K_i . Le critère général de propagation de la fissure est le suivant :

$$B(K_I, K_{II}, K_{III}) = B_c(K_{ic}) \quad (2.7)$$

où B_c est une fonction liée à l'état critique de rupture.

La ténacité à la rupture est obtenue à partir de données expérimentales (voir [168] pour plus de détails). La mécanique élastique linéaire de la rupture (MELR) s'est avérée un outil utile pour résoudre les problèmes de rupture, à condition qu'une fissure initiale existe dans la structure et que la zone non linéaire en amont de la pointe de la fissure soit négligeable. Cependant, cette condition n'est pas toujours satisfaite, notamment pour les matériaux cimentaires la taille de la zone non linéaire - due à la microfissuration - n'est pas négligeable par rapport aux autres dimensions de la structure. La taille relative de la zone de rupture par rapport à la plus petite dimension critique de la structure est importante pour le choix du modèle de rupture [128, 319, 60].

2.3.1.1 Méthode de simulation de la fissuration avec remaillage

L'utilisation de la méthode des éléments finis EF dans le cadre de la mécanique élastique linéaire de la rupture implique : (a) l'estimation de l'état de contrainte à la pointe de la fissure ; (b) la définition d'une condition de propagation, et (c) le remaillage du domaine dans la région de la nouvelle pointe de fissure. L'utilisation de lois de propagation des fissures basées sur le critère des facteurs d'intensité (2.5) est l'application technique la plus utilisée dans la mécanique de la rupture. Dans l'analyse des ruptures élastiques, les facteurs d'intensité définissent le champ de contrainte près de la pointe de la fissure et fournissent des informations fondamentales sur la façon dont la fissure va se propager. En principe, les méthodes d'estimation peuvent être classées en deux groupes, celles basées sur l'extrapolation du champ près de la pointe de la fissure et celles qui utilisent la libération d'énergie lorsque la fissure se propage. Ce dernier groupe comprend l'intégrale de contour-J (2.8) [329], l'extension virtuelle de la fissure et la méthode du taux de libération de l'énergie de déformation. Le calcul par ces méthodes peut être effectué loin de la pointe de la fissure, afin de ne pas impliquer les singularités (voir la figure 2.7), par l'équation :

$$\mathcal{J} = \int_J \left(\frac{\partial u}{\partial x} \cdot (\sigma \cdot n) - \frac{1}{2} (\sigma : \varepsilon) n_x \right) dS \quad (2.8)$$

où n est la normale à la pointe de fissure. Les méthodes basées sur l'extrapolation du champ près de la pointe de la fissure nécessitent des maillages très fins pour produire une bonne représentation numérique des champs en pointe de fissure générés pour faciliter le calcul. Le principal inconvénient de ces méthodes est que les composantes du facteur d'intensité de contrainte dans les problèmes de rupture en mode mixte sont très difficiles à séparer. Après chaque propagation de fissure, le maillage doit être reconstruit, ce qui peut être coûteux et

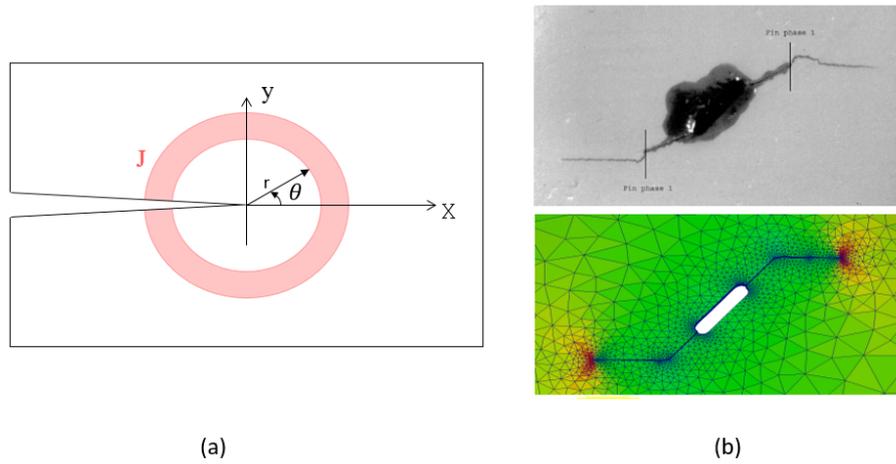


FIGURE 2.7 (a) Fissure locale et domaine J-intégral (b) Comparaison des propagations de fissures obtenues par simulation avec remaillage et expérimentalement [72]

non robuste, en particulier pour les problèmes 3D.

2.3.1.2 Approche en énergie - Critère de Griffith

Le taux de libération d'énergie a été introduit pour les matériaux élastiques fragiles par Griffith [139]. Il a observé que la rupture se produit dès qu'une valeur critique du taux de libération d'énergie est atteinte. Cette valeur critique est, contrairement au facteur d'intensité des contraintes décrit ci-dessus, indépendante de la géométrie du corps. Il dépend uniquement des propriétés du matériau, c'est-à-dire qu'il s'agit d'un paramètre matériel. Le taux de libération d'énergie critique peut être interprété comme l'énergie nécessaire à la formation des deux surfaces de fissure. La théorie de Griffith est une approche globale de la mécanique de la rupture basée sur l'équilibre énergétique. Cette partie commence par l'étude d'un corps fissuré ayant un comportement élastique, ce qui se traduit par un mécanisme de fissuration fragile. Selon le premier principe de la thermodynamique, le changement dans le temps de l'énergie totale $\frac{d}{dt}(\mathcal{E} + \mathcal{K} + \mathcal{D}) = P_{int}$ qui est équivalent à la puissance interne, égale la puissance due au chargement externe $P_{ext} = \mathcal{P} + \mathcal{Q}$

$$\frac{d}{dt}(\mathcal{E} + \mathcal{K} + \mathcal{D}) = \mathcal{P} + \mathcal{Q} \quad (2.9)$$

où \mathcal{E} , \mathcal{K} , et \mathcal{D} sont l'énergie interne, l'énergie cinétique, et la dissipation spatiale respectivement, \mathcal{P} et \mathcal{Q} sont le travail mécanique et la chaleur thermique respectivement. Le taux d'énergie cinétique $\dot{\mathcal{K}}$ tient compte des effets dynamiques. Les effets thermiques sont pris en compte par \mathcal{Q} . Pour simplifier, nous étudions un problème isotherme, quasi statique avec

$\mathcal{Q} = 0$, et $\mathcal{K} = 0$. Le chargement externe \mathcal{P} représente l'alimentation en énergie due au travail mécanique. L'énergie dissipée dans la zone de fissuration \mathcal{D} est introduite. Elle est nécessaire pour la création des surfaces de fissure et peut être liée à la surface A et à la constante de matériau g (énergie de fissuration) :

$$\mathcal{D} = g.A \quad (2.10)$$

Nous considérons un corps avec un comportement élastique, l'énergie interne est un potentiel interne $\mathcal{E} = \Pi_{int}$. De même, on suppose que les charges externes sont des charges conservatrices, il est donc possible de définir un potentiel Π_{ext} , qui diminue avec la puissance externe $\dot{\Pi}_{ext} = -\mathcal{P}$. L'équilibre énergétique se simplifie en [139] :

$$\dot{\mathcal{E}} + \dot{\mathcal{D}} = \mathcal{P} \quad (2.11)$$

$$-\dot{\Pi}_{ext} = \dot{\Pi}_{int} + \mathcal{D} \quad (2.12)$$

$$\frac{d\Pi}{dt} + \frac{d\mathcal{D}}{dt} = 0 \quad (2.13)$$

avec le potentiel total $\Pi = \Pi_{ext} + \Pi_{int}$. Pour une extension infinitésimale dA de la zone de fissure le long d'un trajet de fissure, l'équation (2.13) est équivalente à :

$$\left(\frac{d\Pi}{dA} + \frac{d\mathcal{D}}{dA} \right) \frac{dA}{dt} = 0 \quad (2.14)$$

avec le taux de libération d'énergie défini par $g = -\frac{d\Pi}{dA}$.

Le critère de rupture énergétique de Griffith suppose que pour l'initiation de fissures et la propagation quasi statique de fissures dans un système conservateur, le taux de libération d'énergie disponible doit être égal à l'énergie de fissure critique dissipée par surface $g_c = \frac{d\mathcal{D}}{dA}$. Le taux de libération d'énergie critique g_c est un paramètre matériel qui correspond à l'énergie nécessaire à la propagation des fissures. Ainsi, une fissure ne peut commencer à se propager que si l'énergie disponible atteint cette valeur critique. L'équation (2.14) devient :

$$(g_c - g)\dot{A} = 0 \quad (2.15)$$

Griffith [139] a calculé, pour une plaque en traction uniaxiale en contrainte plane, avec une fissure de longueur $2a$, le taux de libération d'énergie $g = \frac{2\pi\sigma^2 a}{E}$, en fonction du module de Young E . Avec cette expression, on obtient directement la contrainte critique σ_c qui peut être liée au facteur K :

$$\sigma_c = \frac{K_{Ic}}{\sqrt{\pi a}} \quad (2.16)$$

La loi d'évolution pour la zone de fissure A peut-être reformulée avec trois conditions complémentaires [66] : (i) l'irréversibilité ($\dot{A} \geq 0$), (ii) le critère de Griffith ($g_c - g \leq 0$), et (iii) la conservation d'énergie ($g_c - g$) $\dot{A} = 0$. Les avantages de cette approche sont une représentation exacte de la discontinuité liée à la fissure. Les principaux inconvénients de cette approche sont : (a) la difficulté à construire un critère d'initiation en présence d'un milieu non fissuré et (b) la non description des branchements entre fissures. Ainsi, les méthodes numériques basées sur cette théorie souffriront de ces mêmes inconvénients.

2.3.2 Modèle de zone cohésive

Les Modèles de Zone Cohésive (MZC) remontent aux années 60 et ont été développés à l'origine par Dugdale [103] et Barenblatt [23]. Hillerborg et al. [160] ont étendu ce concept pour modéliser la propagation des fissures dans les bétons. Le principe de la fissure cohésive est représenté dans la figure 2.8. Le modèle de zone cohésive représente les processus mécaniques en amont de la pointe de la fissure dans la zone de rupture appelée la zone cohésive [207]. La représentation de la fissure est obtenue par l'introduction d'éléments cohésifs, qui représentent l'interface entre les éléments continus définissant le matériau sain. Cette technique divise le comportement du matériau en deux parties : les éléments continus et les éléments cohésifs. L'énergie du système Ω avec éléments cohésifs Γ peut s'écrire comme suit :

$$E = \int_{\Omega} \Psi(\varepsilon) d\Omega + \int_{\Gamma} \Psi^i([[u]]) d\Gamma \quad (2.17)$$

avec Ψ l'énergie libre de déformation, et $[[u]]$ le saut de déplacement à travers Γ . La variation de l'énergie par rapport au champ de déplacement donne la forme faible :

$$E = \int_{\Omega} \sigma(\varepsilon) : \varepsilon(\delta u) d\Omega + \int_{\Gamma} f([[u]]) : [[\delta u]] dS = \int_{\partial\Omega_F} F^{ext} \cdot \delta u dS \quad (2.18)$$

Dans cette formulation, $f([[u]])$ est interprétée comme la force cohésive entre les lèvres de Γ en fonction de la valeur du saut de déplacement $[[u]]$, définissant l'effet local de l'interface sur la réponse globale. La première approche de Hillerborg et al. [160] était limitée à la fissure en mode I. Cependant, de nombreux modèles capables de gérer la fissure en mode mixte et d'autres phénomènes complexes, notamment les déformations irréversibles, rupture

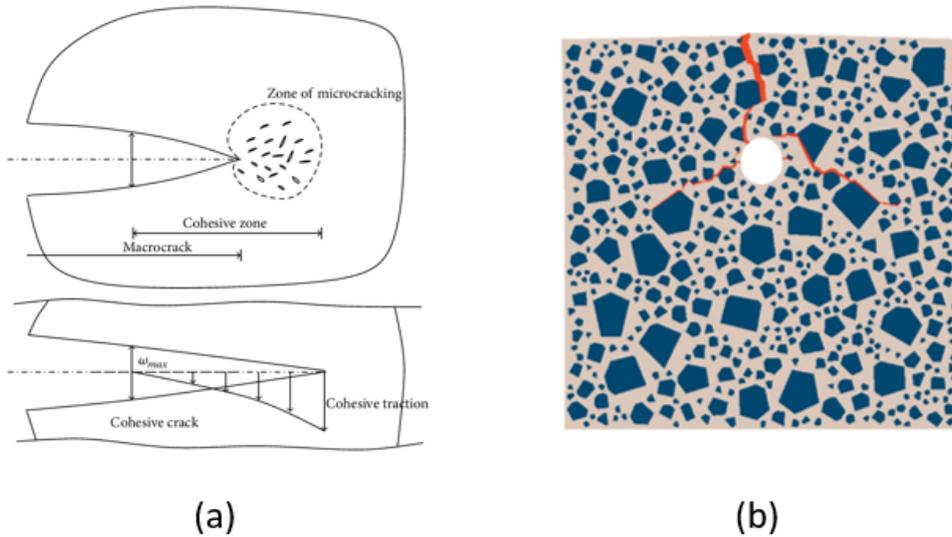


FIGURE 2.8 (a) Principe du modèle de zone cohésive [324] (b) fissuration due à la corrosion d'armature dans le béton [413]

dynamique, et la triaxialité des contraintes, ont été développés [185, 435, 304, 56].

La réponse des éléments cohésifs est contrôlée par la définition de la loi de traction-séparation cohésive [346]. La loi de traction-séparation cohésive est définie par deux paramètres principaux : la traction maximale, connue sous le nom de force de cohésion, et le déplacement correspondant, connu sous le nom de séparation critique [397]. Il existe plusieurs modèles de traction-séparation dans la littérature qui peuvent représenter les processus de fissuration. Les modèles de traction-séparation diffèrent dans la forme fonctionnelle utilisée pour définir la courbe de la loi de traction-séparation. Certaines formes de la loi de traction-séparation qui sont publiées dans la littérature sont : la forme bilinéaire, la forme tri-linéaire, la forme polynômiale, parabolique, exponentielle, et trapézoïdale [397, 91]. La forme la plus fréquente et la plus répandue de la loi de traction-séparation est la forme exponentielle, utilisée avec des variations mineures. Un paramètre matériel important du MZC est l'énergie de rupture g_c . Dans le cas unidimensionnel de la rupture en mode I, l'énergie de rupture $g_c = \int_0^{w_{max}} t(w) dw$ est l'énergie qui est dissipée pendant l'ouverture de la fissure. Elle est liée à la surface de la fissure cohésive, t est la traction cohésive, w est l'ouverture de la fissure et w_{max} est l'ouverture critique de la fissure, voir également la figure 2.8.

La forme intrinsèque des MZCs utilise des éléments cohésifs dans la zone de fissure potentielle avant la simulation [172, 417]. Une autre méthode consiste à insérer des éléments

cohésifs pendant la simulation lorsqu'un critère est satisfait. Dans ce cas, le modèle est dit "extrinsèque" (parfois aussi appelé modèle initialement rigide) [306, 299, 195]. L'inconvénient du MZC intrinsèque est la présence préalable d'une zone de rupture, tandis que la version extrinsèque doit être employée avec un maillage adaptatif [65, 64, 430]. Les modèles extrinsèques sont mieux adaptés dans le contexte de la rupture dynamique [430, 192].

Il a été démontré que les modèles extrinsèques entraînent des difficultés numériques lorsque le déchargement élastique se produit au début du calcul, de sorte que la rigidité tend vers l'infini [430, 324]. Un autre inconvénient de la méthode est le trajet de fissuration qui suit les frontières entre les éléments cohésifs prédéfinis, ce qui entraîne de forts problèmes de dépendance au maillage, mais cette difficulté peut être levée en associant la méthode des zones cohésives avec la X-FEM (présentée dans la section 2.3.3) [271, 262, 48, 111, 399].

2.3.3 *EXtended Finite Element Method X-FEM*

De nombreux travaux de recherche ont été réalisés pour développer des méthodes capables d'éviter l'étape du remaillage dans le processus de propagation des fissures dans les éléments finis. Duarte and Oden [101] and Babuska and Melenk [248] ont montré que lorsque les fonctions de forme d'un schéma d'approximation forment une partition de l'unité ($\sum_i N_i(x) = 1$), il est alors possible d'enrichir ces fonctions de forme avec d'autres fonctions quelconques, reproduites exactement par le schéma d'approximation. Belyschko and Black [34] ont appliqué ce principe pour reproduire les champs singuliers et les discontinuités associées aux fissures en élasticité. La méthode a été améliorée et nommée méthode XFEM (eXtended Finite Element Method) by Moës et al. [263, 373] en utilisant des fonctions de Heaviside pour représenter séparément les discontinuités des singularités. Dans la méthode XFEM, les inconnues supplémentaires sont définies aux nœuds du maillage pour les éléments contenant des discontinuités ou la pointe de la fissure. L'approximation du champ de déplacement prend la forme suivante :

$$u^h = \sum_{i \in I} u_i N_i + \sum_{j \in J} b_j N_j H(x) + \sum_{k \in K} N_k \left(\sum_{l=1}^n c_k^l F_l(x) \right) \quad (2.19)$$

où J est l'ensemble des nœuds enrichis dans la surface de fissures, $H(x)$ est la fonction de Heaviside, K est l'ensemble des nœuds enrichis par les fonctions de pointe de fissure $F_l(x)$ (voir la figure 2.9), et b et c sont des vecteurs de degrés de liberté supplémentaires. Dans une région qui a été séparée en deux morceaux (c'est-à-dire loin de la pointe de la fissure),

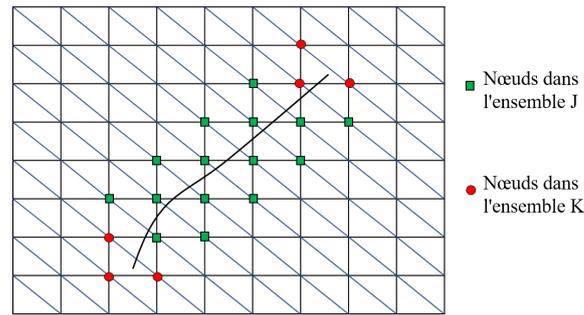


FIGURE 2.9 Principe des éléments enrichis dans le modèle X-FEM

l'enrichissement est fourni par une fonction de Heaviside, définie pour être 1 d'un côté de la fissure et -1 de l'autre côté (voir la figure 2.9). Ceci est facile dans le cas d'une seule fissure droite, mais plus difficile lorsque la géométrie de la fissure devient compliquée [330]. Dans la formulation basée sur X-FEM, seule la fonction de forme de l'élément contenant la fissure est modifiée [17]. Par conséquent, les propriétés de la matrice de rigidité restent les mêmes que celles de la méthode des éléments finis standard. En outre, les fonctions d'enrichissement de la pointe de la fissure sont utilisées pour améliorer localement la description des champs de contrainte et de déplacement autour de la pointe de la fissure. Ainsi, le raffinement et le remaillage des fissures ne sont pas nécessaires autour de la pointe de la fissure.

Daux et al. [81] ont traité le cas des fissures ramifiées en utilisant des enrichissements séparés pour chaque fissure, puis ont proposé une autre fonction d'enrichissement pour représenter la jonction. Ils ont ensuite généralisé cette technique aux fissures qui ont des branches multiples, mais leur méthode nécessite que les fissures aient été décomposées hiérarchiquement en une fissure principale et ses composants ramifiés. Dans [54, 436], le modèle a été étendu pour incorporer des fissures multiples et pour traiter le problème des fissures qui s'intersectent. Par la suite, une loi cohésive a été utilisée pour modéliser la croissance des fissures dans la méthode X-FEM. Des lois cohésives ont été introduites sur la surface de la fissure dans [204]. Sutula et al. [374–376] ont étudié la propagation de fissures multiples à énergie minimale dans un solide élastique linéaire dans des conditions quasi-statiques.

Il a été montré que dans la méthode X-FEM, il est difficile de décrire l'initiation d'une fissure et il est nécessaire de construire une ou plusieurs fonction de distance (level-set) pour décrire la géométrie de la fissure, ce qui peut se révéler compliqué lorsque plusieurs fissures interagissent. Des applications et des développements de la méthode X-FEM pour les problèmes de fissures 3D peuvent être trouvés dans [264, 138, 393, 165] et dans [162] dans un cadre multi-échelle. Certains exemples de propagation de fissures par X-FEM nécessitent

des techniques ad hoc (voir par exemple [36, 81]) et conduisent à des algorithmes lourds et complexes.

2.3.4 *Embedded Finite Element Method E-FEM*

Oliver [295] a proposé une nouvelle méthode qui permet une modélisation efficace des zones avec des déformations très localisées en introduisant des sauts dans le champ de déplacement, également appelés "fortes discontinuités". Le développement initial de cette méthode remonte aux travaux de Dvorkin et al [104] et au cadre général des éléments finis avec des discontinuités fortes intégrées présenté dans Armero et Garikipati [13, 14], Oliver [294], Larsson et al. [199] et dans Linder et Armero [213, 214] où les éléments finis qui incorporent de fortes discontinuités avec des interpolations linéaires des sauts de déplacement sont développés dans les domaines de la déformation infinitésimale, de la déformation finie, et dans les problèmes multiphysiques dans [216, 215, 212, 367].

Ces fortes discontinuités peuvent avoir une orientation arbitraire et se propager également à travers l'élément fini, ce qui facilite grandement la représentation d'une fissure qui se propage sans avoir recours à des méthodes de remaillage. Cette classe de méthodes est généralement appelée *Embedded Finite Element Method E-FEM*. Le principal avantage de l'E-FEM réside dans la nature locale des degrés de liberté supplémentaires qui sont introduits pour représenter la forte discontinuité à travers un élément fini (voir la figure 2.10a). Ces degrés de liberté locaux (supplémentaires) sont condensés statiquement au niveau de l'élément en préservant le système global d'équations, c'est-à-dire que le total des degrés de liberté reste le même que dans un élément sans discontinuité. L'implémentation numérique d'une telle méthodologie peut être facilement réalisée par de petites modifications à tout code d'éléments finis existant. Une application à la fissuration dans les modèles de bétons issus d'imagerie par micro tomographie peut être trouvée dans [366] d'une éprouvette du béton en compression (voir la figure 2.10 (c)).

Cette approche a l'avantage de séparer le champ de déplacements en une partie globale (partie élément fini classique) et une partie locale (partie enrichie), ce qui permet une résolution des inconnues ajoutées à l'échelle locale. L'approximation du champ de déplacement prend la forme suivante :

$$u = \sum_{i \in I} u_i N_i + \sum_{j \in J} b_j M \quad (2.20)$$

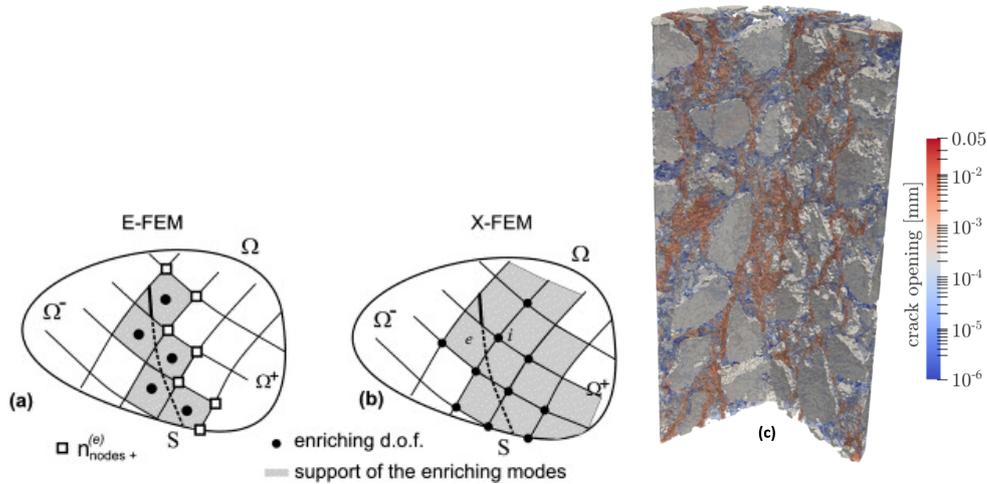


FIGURE 2.10 (a) Principe des éléments enrichis dans le modèle E-FEM (b) comparaison entre la méthode X-FEM et E-FEM [296], (c) ouverture des fissures dans une éprouvette de béton comprimée [366]

où J est l'ensemble des éléments enrichis, M est la fonction d'enrichissement, et b est un vecteur de degrés de liberté supplémentaires.

Une différence entre les méthodes XFEM et E-FEM réside dans l'enrichissement, qui est lié aux nœuds dans XFEM, et associé aux éléments dans E-FEM [296] (voir la figure 2.10 (a)-(b)). Les coûts de calcul de X-FEM et E-FEM ont été comparés dans [296]. Les inconvénients de l'E-FEM résident dans les erreurs d'approximation imprévues dues au manque de continuité du champ de déplacement entre deux éléments conduisant à une forte dépendance du maillage ainsi qu'au manque de convergence de la solution par rapport à la taille du maillage [410]. Plus de détails sur l'E-FEM peuvent être trouvés dans [410].

2.3.5 Augmented Finite Element Method A-FEM

Une méthode numérique alternative qui peut également traiter les problèmes de fissuration, indépendamment du maillage, est la méthode du nœud fantôme (*Phantom Node Method* PNM-FEM), développée pour la première fois par Song et al. [363] sur la base des travaux initiaux de Hansbo et al. [143]. Le principe de cette méthode est d'utiliser des éléments superposés par paires pour décrire une discontinuité forte ou faible dans un élément coupé en deux par une fissure (discontinuité forte) ou une interface matérielle (discontinuité faible). Sur cette base, Ling et al. [217] ont introduit des nœuds internes directement dans un élément fissuré, de sorte que le champ de déplacement discontinu de l'élément est un résultat de la solution, tout en restant un élément EF standard. Cet élément dit "augmenté" est entièrement

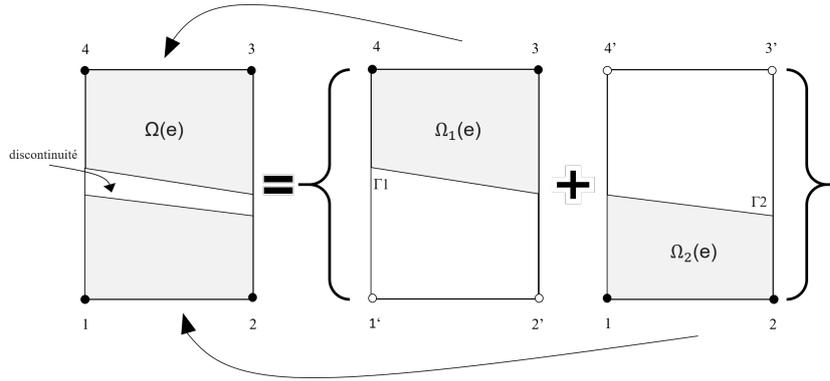


FIGURE 2.11 Superposition des éléments séparés par une discontinuité dans A-FEM

compatible avec les codes éléments finis existants.

Dans chaque élément "augmenté", des fonctions de forme standards sont utilisées afin d'interpoler le champ de déplacement u'_α ($\alpha = 1, 2$) dans le sens d'éléments finis, en utilisant les déplacements nodaux classiques d'_α et les fonctions d'interpolation N'_α

$$u'_\alpha = N'_\alpha \cdot d'_\alpha \quad (2.21)$$

Le système linéaire est donné par :

$$K'_\alpha \cdot d'_\alpha = \bar{f}'_\alpha + f'_\alpha \quad (2.22)$$

avec

$$K'_\alpha = \int_{\Omega_\alpha} B'^T_\alpha \cdot C_\alpha \cdot B'_\alpha d\Omega \quad f'_\alpha = \int_{\Gamma_\alpha} N'^T_\alpha \cdot t_\alpha d\Gamma \quad \bar{f}'_\alpha = \int_{\Gamma_\alpha} N'^T_\alpha \cdot F_\alpha d\Gamma \quad (2.23)$$

où K'_α est la matrice de rigidité élémentaire, F_α la force extérieure, t_α la force interne due à la discontinuité. C est la matrice d'élasticité du matériau. Il est à noter que dans la formulation actuelle, le saut de déplacement w à travers la discontinuité peut être obtenu par interpolation nodale des deux éléments séparés :

$$w = N'_2(\Gamma_2) \cdot d'_2 - N'_1(\Gamma_1) \cdot d'_1 \quad (2.24)$$

Par conséquent, une discontinuité faible peut être obtenue en imposant $w = 0$ et une discontinuité forte peut être obtenue en introduisant une description constitutive adéquate telle que la loi cohésive discutée dans la section 2.3.2.

Les principales caractéristiques de la méthode A-FEM sont : (i) elle ne nécessite pas de degrés de libertés externes supplémentaires pour prendre en compte les discontinuités évolutives et leur interaction [224, 223]; (ii) elle utilise un nouvel algorithme de condensation élémentaire qui garantit l'équilibre élémentaire avec une précision mathématique, en évitant l'itération non linéaire numériquement coûteuse [222]; et (iii) il est très facile de prendre en compte l'hétérogénéité du matériau et l'évolution multiple des discontinuités intra-élémentaires (par exemple la coalescence de fissures ou du branchement) sans connaissance préalable de la position des fissures et de leur trajet de propagation [78]. Il a été montré dans [222] que le modèle A-FEM améliore l'efficacité numérique 50 fois plus par rapport au modèle PNM-FEM. Le modèle A-FEM a été récemment étendu aux problèmes 3D et à la propagation dynamique des fissures [270, 269]. Cependant l'extension de la méthode A-FEM pour traiter la propagation complexe des fissures en 3D est délicat.

2.4 Méthodes continues d'endommagement discrétisées par éléments finis

2.4.1 Mécanique de l'endommagement

La mécanique de l'endommagement traite principalement des micro-défauts (c'est-à-dire les microfissures et les microcavités) et des effets de leurs évolutions au moyen de variables d'endommagement. La première modélisation de l'endommagement a été proposée par Kachanov [176] concernant le fluage des métaux sous sollicitation unidimensionnelle. Les modèles d'endommagement locaux décrivent la rupture des matériaux par une variable interne supplémentaire modifiant la rigidité élastique et entraînant une dissipation d'énergie interne dans le matériau. Dans le cas des matériaux quasi fragiles tels que le béton, la courbe contrainte-déformation en traction est caractérisée par une chute de la contrainte après l'atteinte du pic de la contrainte maximale. Cet adoucissement peut être expliqué par l'endommagement dû à l'initiation, la propagation et la concentration de microfissures qui réduisent la surface effective de la section résistante. Afin de modéliser la rupture de tels matériaux, les modèles d'endommagement doivent inclure l'adoucissement des contraintes (c'est-à-dire la réduction des contraintes pour un endommagement croissant).

Les modèles d'endommagement locaux présentent de nombreux inconvénients lorsqu'ils sont implémentés dans des méthodes de résolution numérique telles que la méthode des éléments finis, notamment la dépendance au maillage [158, 234, 322, 339, 35]. Bazant et al [28] ont montré que la dissipation d'énergie s'approche de zéro avec le raffinement du

maillage, ce qui n'est pas fondé physiquement. Pour résoudre ces problèmes de sensibilité au maillage mentionnés ci-dessus, plusieurs schémas de régularisation ont été proposés dans la littérature, tels que : (i) les modèles micro-polaires (milieu de Cosserat) [82, 197] (ii) les modèles non locaux [31, 174] (iii) les modèles avec régularisation visqueuse [109] (iv) et les modèles à gradient [273, 274].

Ces modèles régularisés introduisent une longueur caractéristique dans la discrétisation. Autrement dit, le caractère local de la déformation est perdu, et la fissure est "étalée" sur un certain domaine impliquant plusieurs éléments. Par conséquent, un maillage très fin doit être utilisé afin de résoudre le problème de la fissure.

2.4.2 Modèle d'endommagement non-local

Le modèle d'endommagement non local repose sur l'hypothèse selon laquelle la réponse du matériau en un point ne dépend pas seulement de son état de contrainte, mais dépend également de l'état de contrainte dans la région voisine. Cela s'explique par le fait que la zone endommagée est constituée de microfissures et qu'un certain niveau d'interactions existe entre elles [32]. Ce comportement non local est utilisé dans la mécanique de l'endommagement continu en utilisant une longueur de régularisation interne qui prend en compte ces interactions. Le modèle d'endommagement non local vise à fournir des solutions indépendantes du maillage, c'est-à-dire que la largeur de la localisation de la déformation et l'énergie de rupture sont indépendantes du maillage [175].

Le modèle non local fonctionne en remplaçant certaines propriétés locales du matériau par leur moyenne pondérée sur un sous-domaine pour décrire l'état du matériau. Les modèles ont été initialement implémentés sous forme intégrale par [23, 317, 173]. L'utilisation du paramètre non local, qui est la moyenne des déformations, permet de tenir compte des effets d'hétérogénéité [29]. Autrement dit, la propagation d'une fissure dépend de la libération globale d'énergie dans un voisinage du point. L'utilisation des modèles non locaux permet d'obtenir une fissuration régularisée qui est observée physiquement.

Le voisinage spatial, appelé domaine d'influence ou domaine d'interaction, est défini par la longueur de régularisation interne. La moyenne non locale $\bar{f}(x)$ de la quantité locale $f(x)$ dans un domaine Ω est introduite sous la forme d'un produit de convolution par une fonction de poids $\Phi(x, s)$:

$$\bar{f}(x) = \int_{\Omega} \Phi(x, s) \cdot f(s) ds \quad (2.25)$$

La fonction de poids $\Phi(x, s)$ définit la contribution des éléments voisins à la moyenne non locale. De manière classique, la fonction de poids dépend de la distance r entre le point source s et le point cible x . La fonction de poids est une fonction monotone décroissante lorsque r augmente, du fait que les points sources les plus proches du point cible ont la plus grande influence par rapport aux points plus éloignés. Lorsqu'il est appliqué aux matériaux quasi-fragile, il est nécessaire que l'opérateur non local soit un champ uniforme, ce qui exige que la fonction de poids satisfasse la condition de normalisation suivante :

$$\int_{\Omega} \Phi(x, s) ds = 1 \quad (2.26)$$

Différentes formes ont été proposées pour la fonction poids. Généralement, la fonction Gaussienne est utilisée pour décrire les interactions entre points :

$$\Phi_0(x, s) = \exp\left(-\frac{4\|x-s\|^2}{l_c^2}\right) \quad (2.27)$$

avec l_c la longueur de régularisation interne du modèle. La fonction de poids est définie comme suit :

$$\Phi(x, s) = \frac{\Phi_0(x, s)}{\int_{\Omega} \Phi_0(x, s) ds} \quad (2.28)$$

Des formulations différentes du comportement non local ont été implémentées par Peerlings et al. [312] en utilisant le modèle d'endommagement isotrope local. Il est également possible d'appliquer la régularisation directement sur la variable d'endommagement, il a été démontré dans [317, 231] que le calcul de la déformation moyenne équivalente fournit les solutions les plus stables. Par conséquent, la déformation moyenne équivalente peut être écrite comme suit :

$$\bar{\varepsilon}_{eq}(x) = \frac{\int_{\Omega} \Phi(x, s) \cdot \varepsilon_{eq}(s) ds}{\int_{\Omega} \Phi(x, s)} \quad (2.29)$$

Les modèles non locaux présentent certains inconvénients : (a) l'initiation erronée de l'endommagement à la pointe de la fissure qui entraîne une augmentation incorrecte de la résistance, (b) la diffusion des zones endommagées après la rupture complète de la structure, (c) les interactions non locales erronées à travers des fissures macroscopiques, (d) une déficience pour décrire la fragmentation[318]. Plusieurs travaux de recherche ont été publiés, afin d'améliorer les modèles non locaux (voir [89, 30, 132, 191]).

2.4.3 Modèle à gradient

Les modèles à gradient sont généralement décrits par des équations différentielles qui contiennent des dérivées spatiales d'ordre supérieur. Les coefficients multipliant les termes d'ordre différent ont des dimensions physiques différentes. Il est possible de déduire la longueur caractéristique à partir de leur rapport [324]. Les modèles à gradient peuvent être utilisés dans les modèles de plasticité [83, 120], dans les modèles d'endommagement [312, 311] ou dans une combinaison des deux [84]. Les modèles d'endommagement à gradient d'endommagement ont été largement adoptés pour modéliser la rupture de matériaux quasi fragiles, voir par exemple [312, 359, 360] pour la modélisation macroscopique de la rupture et [229, 290, 179] pour la modélisation multi-échelle de la rupture.

Pour résoudre les problèmes de sensibilité au maillage et régulariser le problème de localisation des déformations dû à l'endommagement, les modèles à gradient d'endommagement utilisent des développements en série de Taylor pour obtenir une approximation de la déformation effective. En les remplaçant dans l'équation (2.29), on obtient une expression différente pour la déformation équivalente non locale. Cependant, il est bien connu que de telles formulations nécessitent une continuité d'ordre C^1 pour les modèles à gradient de second ordre (continuité d'ordre C^2 pour les modèles à gradient de quatrième ordre), ce qui complique leur mise en œuvre dans l'analyse par éléments finis basée sur les polynômes de Lagrange. Les formulations implicites permettent de résoudre ces problèmes [312]. En différenciant deux fois et en négligeant les termes de gradient d'ordre supérieur de la déformation équivalente locale, le modèle implicite de gradient d'ordre 2 est formulé comme suit :

$$\varepsilon(x) = \bar{\varepsilon}(x) - l_c^2 \nabla^2 \bar{\varepsilon}(x) \quad (2.30)$$

Cette formulation implicite nécessite également l'introduction de conditions limites dont l'expression correspond à l'imposition d'un flux nul normal au bord :

$$\nabla \bar{\varepsilon}(x) \cdot n = 0 \quad (2.31)$$

avec n , le vecteur normal au bord. Cette expression implicite de la régularisation en gradient de variables internes est équivalente à la régularisation non locale intégrale pour une fonction de Green comme fonction poids. Cette approche reste très intrusive dans un code aux éléments finis. Les modèles à gradient d'endommagement peuvent résoudre les problèmes de dépendance au maillage en présence de localisation, mais ils entraînent une initiation incorrecte de la fissure, comme indiqué dans [359]. Des améliorations à ces problèmes ont été proposées dans des travaux plus récents, par exemple [280, 132].

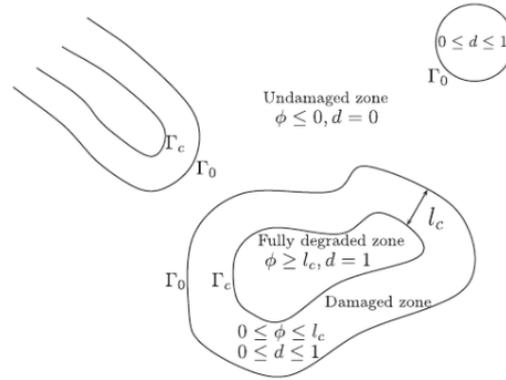


FIGURE 2.12 Principe du modèle TLS [265]

2.4.4 Thick Level Set TLS

Moës et al. [265] ont proposé un modèle alternatif d'endommagement non local appelé modèle "*Thick Level Set*" TLS . Ce modèle est basé sur la définition d'une fonction de distance Φ qui contrôle l'évolution d'une variable d'endommagement d . Connaissant Φ , l'endommagement est calculé en utilisant une fonction de forme d'endommagement $d(\Phi)$ définie par l'utilisateur. Avec ce modèle, l'iso-zéro de Φ (l'ensemble des points tels que $\Phi = 0$) est supposé représenter le front de la zone endommagée. Un avantage de l'utilisation de la fonction de distance Φ est que la zone entièrement endommagée (qui peut être assimilée à une fissure) est localisée facilement en utilisant un critère de la forme $\Phi > l_c$, où l_c représente une longueur critique du modèle, conduisant à l'effet non local du modèle (figure 2.12). Selon [41], cette zone peut être éliminée du calcul en ajoutant des fonctions de forme d'enrichissement aux éléments qui sont traversés par sa frontière. L'énergie totale d'un domaine Ω est donnée en fonction de $d(\Phi)$:

$$E(u, \phi) = \int_{\Omega} \Psi(\varepsilon(u), d(\Phi)) d\Omega \quad (2.32)$$

où Ψ est l'énergie libre de déformation.

Comme le modèle est basé sur une représentation de l'endommagement continu, il est capable de capturer la ramification et la fusion des fissures de manière simple, même en trois dimensions [41]. En définissant la fonction de distance dans les zones d'endommagement non locales, les fissures sont définies indépendamment du maillage d'éléments finis et ne nécessitent aucun post-traitement [265]. De plus, la mise à jour des champs d'endommagement dans le TLS est effectuée indépendamment dans chaque zone d'endommagement, ce qui

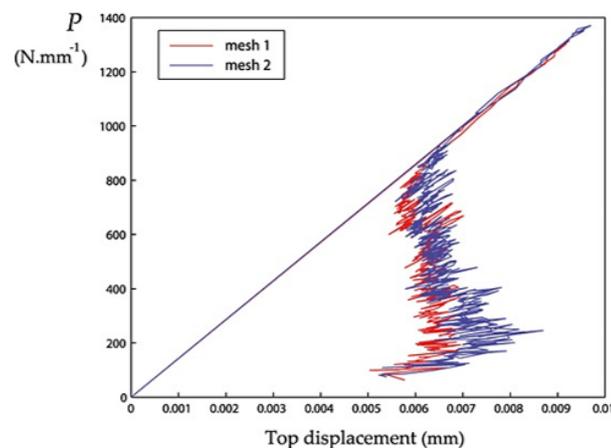


FIGURE 2.13 Courbe force déplacement d'une simulation d'un essai de traction uniaxiale [63].

élimine la nécessité d'une résolution globale du champ indicateur d'endommagement [265]. Par contre, le TLS induit des oscillations parasites dans les réponses d'endommagement observées dans [63], voir la figure 2.13 .

2.4.5 Méthode de champ de phase

Récemment, une nouvelle approche pour la description de la propagation des fissures a été développée. La méthode de champ de phase est devenue une approche répandue dans la modélisation de l'initiation et la propagation des fissures dans les matériaux. Cela provient de sa simplicité, elle peut en effet prédire la propagation des fissures uniquement en résolvant un système d'équations différentielles. Le système permet ainsi d'estimer simultanément la formation de la fissure et la création d'une nouvelle surface de fissure.

Les bases des méthodes de champ de phase pour modéliser la propagation des fissures dans les matériaux fragiles ont été établies à la fin des années 1990, avec la formulation variationnelle de la rupture fragile par Francfort [121] et Bourdin [50]. Dans ces premiers modèles, le processus de rupture fragile quasi-statique est basé sur la minimisation de l'énergie totale, qui est une fonction de l'énergie de déformation et de la dissipation de la fissure. Aranson et al. [9] ont présenté un modèle de rupture à champ de phase pour résoudre le problème de fissuration en mode I. Karma et al. [182, 141] ont modifié la fonction de densité d'énergie de déformation d'Aranson et al. [9] pour simuler une fissure en mode III, tandis

que Henry et al. [152] l'ont modifié pour traiter les fissures en mode I et II.

Kuhn et Muller [193] ont été les premiers à proposer le modèle de champ de phase basé sur la thermodynamique. Dans ce modèle, un champ de variable continu a été utilisé pour représenter l'état de fissuration du matériau. La densité d'énergie de déformation du système était déterminée en résolvant l'équation de divergence des contraintes et l'évolution du champ variable de la fissure était définie par une équation différentielle partielle qui minimisait l'énergie. Miehe et al. [253, 258] ont introduit un cadre algorithmique simple pour l'application de la méthode de champ de phase, ainsi qu'un critère pour traiter le contact unilatéral séparant les parties compressives et extensives de la déformation pour activer l'endommagement, tandis que le critère proposé par Amor et al. [8] utilisait plutôt une séparation en parties hydrostatiques et déviatoriques de la déformation pour traiter le contact unilatéral dans la fissure. Enfin, Borden et al. [46, 45] ont étudié l'utilisation d'une fonction d'ordre supérieur pour décrire la densité de fissure et l'évolution du paramètre de champ de phase.

La méthode de champ de phase a l'avantage de pouvoir traiter des géométries de fissures arbitraires, de permettre l'initiation, la coalescence et le branchement des fissures. Ces atouts fournissent un cadre très robuste pour la simulation de la propagation des fissures. Cependant, la méthode nécessite le choix d'un paramètre de régularisation lié à l'approximation des discontinuités. Ce paramètre définit une longueur de régularisation ℓ dans le modèle, qui doit être choisie par l'utilisateur. Amor et al. [8] et Nguyen et al. [286] ont montré qu'une relation peut être établie entre ℓ et d'autres paramètres matériau (la contrainte à la rupture, le module de Young, l'énergie de fissuration). La méthode du champ de phase a été largement développée et appliquée à de nombreux problèmes, tels que : la rupture fragile [7, 288, 380, 427], la rupture dynamique [51, 90, 218], la rupture hydraulique [105, 254, 407], la rupture anisotrope des matériaux [43, 281], la rupture élastoplastique fragile/ductile [6, 5, 44], et la fissuration dans les modèles de microstructures basées sur l'imagerie tomographique [284, 285, 288]. Le problème de la fissuration en zone cohésive a été reformulé dans le contexte du champ de phase [394].

2.4.5.1 Régularisation de la discontinuité liée à la présence de la fissure

Considérons un domaine Ω décrivant un solide fissuré de dimension D et de frontière $\partial\Omega$, de dimension $D - 1$. Soit Γ la surface de fissure de dimension $D - 1$. Les frontières du domaine sont composées de $\partial\Omega_U$ (conditions aux limites de Dirichlet) et $\partial\Omega_F$ (conditions

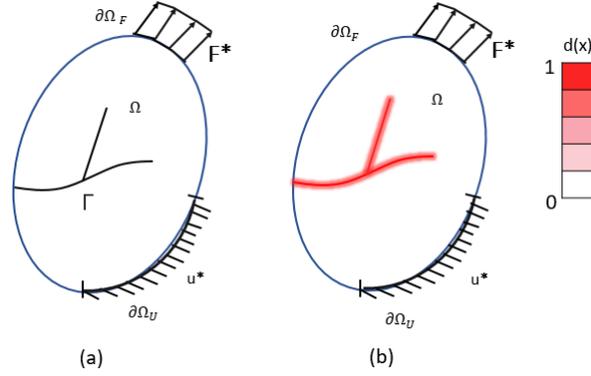


FIGURE 2.14 (a) Solide avec une fissure discontinue (b) solide avec une description régularisée de la fissure

aux limites de Neumann) telle que $\partial\Omega = \partial\Omega_U \cup \partial\Omega_F$ et $\partial\Omega_U \cap \partial\Omega_F = \emptyset$ (voir la figure 2.14). Dans un cadre régularisé, la géométrie de la fissure est approximée par une représentation régularisée définie par un paramètre scalaire $d(x) \in [0, 1], x \in \Omega$, caractérisant le solide endommagé pour $d(x) = 1$, et le solide non-endommagé pour $d(x) = 0$. Dans ce qui suit, cette variable auxiliaire $d(x)$ est appelée la variable de champ de phase (ou d'endommagement). Cette approche est liée à la théorie d'endommagement continu, où le champ de la variable d'endommagement décrit le développement de microfissures et de micro-vides de manière macroscopique.

Pour un problème unidimensionnel, un choix possible pour approximer l'endommagement (champ de phase) autour de la fissure est la fonction exponentielle :

$$d(x) = \exp^{-|x|/\ell} \quad (2.33)$$

Cette fonction étale la fissure sur le domaine axial $L = [-\infty, +\infty]$ de la barre, ce qui représente une topologie de fissure régularisée ou diffuse. La régularisation est gouvernée par la longueur de régularisation ℓ et donne la représentation discontinue des fissures pour $\ell \rightarrow 0$ (voir la figure 2.15). La fonction exponentielle (Eq. 2.33) a la propriété $d(0) = 1$ et $d(\pm\infty) = 0$, elle est la solution de l'équation différentielle :

$$d(x) - \ell^2 d''(x) = 0 \quad \text{dans } \Omega \quad (2.34)$$

Sous conditions limites de type Dirichlet, cette équation différentielle est l'équation d'Euler du principe variationnel défini par :

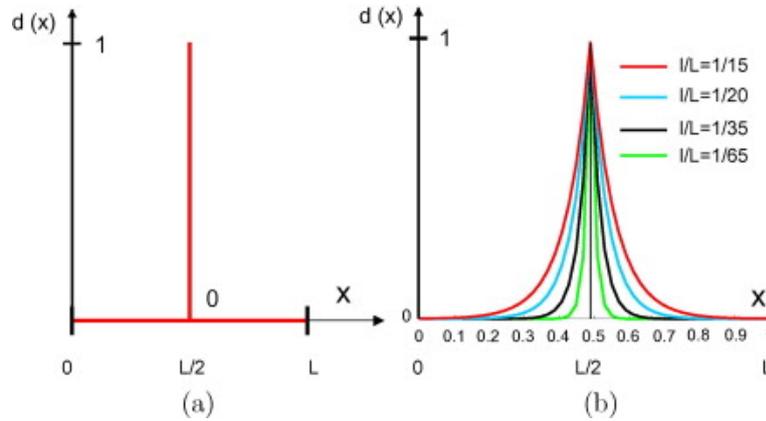


FIGURE 2.15 Représentation régularisée d'une fissure (cas unidimensionnel) en $x = L/2$: (a) représentation discontinue de la fissure (b) représentation régularisée par champ de phase pour différentes longueurs de régularisation ℓ [288].

$$d = \underset{d \in W}{\text{Arg}} \{ \inf I(d) \} \quad \text{avec} \quad W = \{ d \mid d(0) = 1, d(\pm\infty) = 0 \} \quad (2.35)$$

avec

$$I(d) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} (d^2 + \ell^2 \cdot d'^2) d\Omega \quad (2.36)$$

Cette fonction peut facilement être construite en intégrant une forme faible de type Galerkin de l'équation différentielle (2.34). L'insertion de la fonction exponentielle (2.33) dans (2.36) donne une relation entre la fonction I et la surface de la fissure Γ . En divisant la fonction (2.36) par la longueur de régularisation ℓ , on obtient la fonction :

$$\Gamma_{\ell} = \frac{1}{\ell} I(d) = \frac{1}{2\ell} \int_{\Omega} (d^2 + \ell^2 \cdot d'^2) d\Omega \quad (2.37)$$

La minimisation de cette fonction permet également d'obtenir la topologie de fissure régularisée (2.33). Dans le problème unidimensionnel considéré, l'évaluation de $\Gamma_{\ell}(d)$ au point de solution $x = 0$ donne la surface de fissure Γ pour des valeurs de la longueur de régularisation ℓ arbitraires. Cette propriété caractérise la fonction Γ_{ℓ} comme un ingrédient important de la modélisation constitutive de la propagation diffuse des fissures.

L'extension de la fonction de fissure régularisée au problème multidimensionnel est donnée par :

$$\Gamma_{\ell} = \int_{\Omega} \gamma(d, \nabla d) d\Omega \quad (2.38)$$

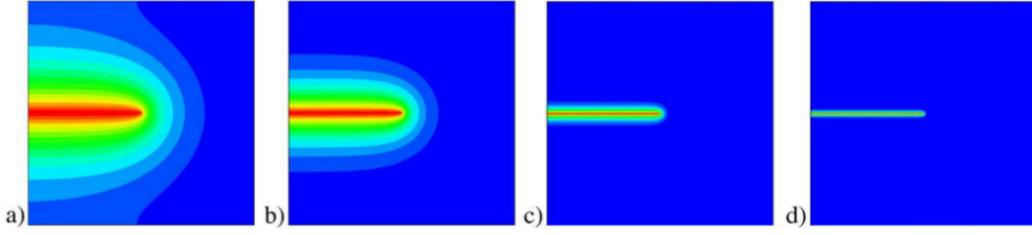


FIGURE 2.16 Approximations de la fissure avec la variable de champ de phase $d \in [0, 1]$ pour différentes longueurs de régularisation $\ell_a > \ell_b > \ell_c > \ell_d$ [258].

où la densité surfacique de fissure par unité de volume a été introduite [258] :

$$\gamma(d, \nabla d) = \frac{d^2}{2\ell} + \frac{\ell}{2} |\nabla d|^2 \quad (2.39)$$

Cette fonction dépend de la variable de champ de phase d et de son gradient spatial ∇d . Elle est gouvernée par la longueur de régularisation ℓ qui joue un rôle clé dans la modélisation de la propagation des fissures. Supposons une surface de fissure discontinue $\Gamma(t)$ de dimension $D - 1$ dans le corps solide Ω à l'instant t comme illustré dans la figure 2.14. Par analogie avec le principe variationnel unidimensionnel (2.35), la variable d'endommagement $d(x, t)$ dans Ω est obtenue à partir du principe de minimisation de la fissure régularisée [258] :

$$d(x, t) = \text{Arg} \left\{ \inf_{d \in W_{\Gamma(t)}} \Gamma_{\ell}(d) \right\} \quad (2.40)$$

avec les conditions aux limites de type Dirichlet $W_{\Gamma(t)} = \{d \mid d(x, t) = 1 \text{ dans } x \in \Gamma(t)\}$; les équations d'Euler sont données par :

$$d - \ell^2 \Delta d = 0 \quad \text{dans } \Omega \quad \text{et} \quad \nabla d \cdot n = 0 \quad \text{sur } \partial\Omega \quad (2.41)$$

où ∇d est le Laplacien du champ de phase et n est la normale sur $\partial\Omega$. La figure 2.16 illustre les solutions numériques du problème variationnel (2.41) pour les problèmes bidimensionnels, qui montrent l'influence de la longueur de régularisation ℓ . Notons que la limite du principe (2.41) lorsque $\ell \rightarrow 0$ donne la surface de fissure discontinue Γ .

La définition d'une fonction de densité de fissures appropriée, et d'une fonction de dégradation énergétique adéquate constituent les éléments clés de la formulation du champ de phase. La densité surfacique de fissure $\gamma(d, \nabla d)$ dans l'équation (2.39) n'est pas la seule qui peut être utilisée pour régulariser la topologie des fissures. Wu [409] considère la forme générale suivante de la densité surfacique de fissure :

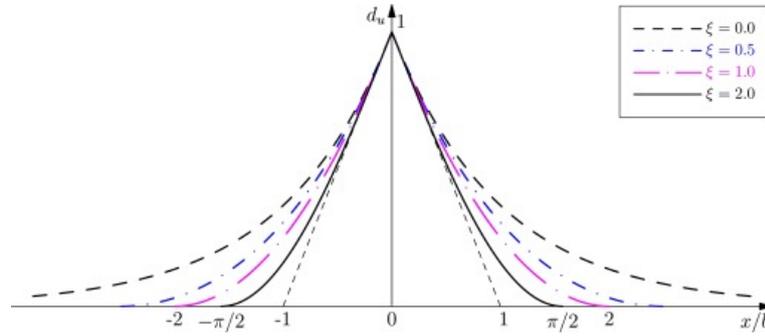


FIGURE 2.17 Variable de champ de phase d pour différentes fonctions géométriques de fissure $\alpha(d)$ [409].

$$\gamma(d, \nabla d) = \frac{1}{c_0} \left(\frac{1}{\ell} \alpha(d) + \ell |\nabla d|^2 \right) \quad (2.42)$$

où la densité surfacique de fissure $\gamma(d, \nabla d)$ est caractérisée par la fonction géométrique de fissure $\alpha(d)$, et un paramètre d'échelle $c_0 = 4 \int_0^1 \sqrt{\alpha(x)} dx$. La fonction géométrique de fissure $\alpha(d)$ est supposée satisfaire aux conditions suivantes :

$$\alpha(0) = 0 \quad \text{et} \quad \alpha(1) = 1; \quad (2.43)$$

La fonction quadratique proposée par Wu [409] s'écrit sous la forme :

$$\alpha(d) = \xi d + (1 - \xi) d^2 \quad (2.44)$$

pour le paramètre non négatif $\xi \in [0, 2]$; sinon, $\alpha(d) \in [0, 1]$ ne peut être garantie. Pour différentes valeurs de $\xi \in [0, 2]$, les évolutions des variables de champ de phase résultantes $d(x)$ sont illustrées dans la figure 2.17. Comme on peut le voir, la largeur de bande de localisation diminue pour des valeurs croissantes de $\xi \in [0, 2]$. Plusieurs cas particuliers de ce cadre peuvent être trouvés dans la littérature.

— Le choix de $\alpha(d) = d^2$ et $\xi = 0$ est utilisé dans [50] et conduit à $c_0 = 2$, alors :

$$\gamma(d, \nabla d) = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\ell} d^2 + \ell \nabla(d) \cdot \nabla(d) \right) \quad (2.45)$$

le schéma 1D correspondant est alors donné par $d(x) = \exp^{-|x|/\ell}$.

— La définition de $\alpha(d) = d$ et $\xi = 1$ considérée dans [316] donne $c_0 = 8/3$, alors :

$$\gamma(d, \nabla d) = \frac{8}{3} \left(\frac{1}{\ell} d^2 + \ell |\nabla d|^2 \right) \quad (2.46)$$

cette forme induit une partie linéaire de la réponse avant la rupture, le schéma 1D est donné par $d(x) = (1 - (|x|/2\ell))^2$

— La forme $\alpha(d) = 2d - d^2$ et $\xi = 2$ est proposée dans [409] et donne

$$\gamma(d, \nabla d) = \frac{1}{\pi} \left(\frac{1}{\ell} (2d - d^2) + \ell |\nabla d|^2 \right) \quad (2.47)$$

le profil 1D de l'endommagement est une fonction sinusoïdale avec une bande de localisation finie $\pi\ell$.

— Une extension impliquant des gradients d'ordre supérieur a été introduite dans [45] avec :

$$\gamma(d, \nabla d) = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\ell} d^2 + \frac{\ell}{2} \nabla(d) \nabla(d) + \frac{\ell^3}{16} \nabla(d)^2 \right) \quad (2.48)$$

cette forme conduit à un profil d'endommagement plus régulier donné en 1D par $d(x) = 1 - \exp^{-|x|/\ell} \left(1 + \frac{|x|}{\ell} \right)$. Le principal inconvénient de ce choix est que la continuité C^1 est nécessaire pour le modèle d'éléments finis, ce qui peut augmenter la complexité du calcul, particulièrement en 3D.

On peut se référer à [411] pour plus de détails. Notez que chaque modèle de champ de phase introduit le paramètre de régularisation ℓ , une discussion sur le choix de ℓ peut être trouvée dans [286].

2.4.5.2 Cadre variationnel régularisé de la fissure

L'approche variationnelle de la mécanique de la rupture fournie par Francfort et Marigo [121] introduit la fonction d'énergie suivante pour un solide fissuré :

$$E = \int_{\Omega} \Psi(\varepsilon, \Gamma) d\Omega + g_c \int_{\Gamma} d\Gamma - \int_{\partial\Omega_F} F^* \cdot u d\Gamma \quad (2.49)$$

où Ψ est la densité d'énergie de déformation, $\varepsilon(u) = \frac{1}{2} (\nabla u + \nabla^T u)$, u est le champ de déplacement, g_c est l'énergie de fissuration de Griffith. Cette approche variationnelle n'implique aucune pointe de fissure et permet l'initiation et la ramification des fissures, tant que l'ensemble de fissures est la solution du problème de minimisation. Toutefois, la surface de fissure Γ est inconnue, et la résolution de ce problème n'est pas triviale. La formulation d'énergie E peut être remplacée par une forme régularisée [50, 253] donnée par :

$$E = \int_{\Omega} (g(d) + k) \Psi(\varepsilon, d) d\Omega + g_c \int_{\Omega} \gamma(d, \nabla d) d\Omega - \int_{\partial\Omega_F} F^* \cdot u d\Gamma \quad (2.50)$$

où $g(d)$ est une fonction de dégradation, et k est un paramètre numérique très petit.

Un des problèmes que pose l'utilisation de l'équation (2.50) dans les simulations est que la fissuration peut être induite en mode de compression, comme le montrent les exemples numériques dans [121], car les deux comportements (traction et compression) sont traités de la même façon dans l'équation (2.50). Pour éviter de telles situations, certaines formulations de décomposition ont été proposées dans la littérature [8, 258, 7, 253, 122].

Amor [8] a proposé une décomposition de la densité d'énergie élastique Ψ en contributions volumique et déviatorique :

$$\Psi_0^+(\boldsymbol{\varepsilon}) = \frac{1}{2}k \langle Tr(\boldsymbol{\varepsilon}) \rangle_+^2 + \mu \boldsymbol{\varepsilon}^{dev} : \boldsymbol{\varepsilon}^{dev} \quad (2.51)$$

$$\Psi_0^-(\boldsymbol{\varepsilon}) = \frac{1}{2}k \langle Tr(\boldsymbol{\varepsilon}) \rangle_-^2 \quad (2.52)$$

où k est μ sont le module de compressibilité et le module de cisaillement respectivement, $\langle x \rangle_{\pm} = \frac{1}{2}(x \pm |x|)$, et $\boldsymbol{\varepsilon}^{dev} = \boldsymbol{\varepsilon} - \frac{1}{3}Tr(\boldsymbol{\varepsilon})\mathbf{1}$.

Miehe dans [258] a décomposé le tenseur de déformation $\boldsymbol{\varepsilon}$ en une partie positive et une partie négative :

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}_+ + \boldsymbol{\varepsilon}_- \quad \rightarrow \quad Tr(\boldsymbol{\varepsilon}) = \langle Tr(\boldsymbol{\varepsilon}) \rangle_+ + \langle Tr(\boldsymbol{\varepsilon}) \rangle_- \quad (2.53)$$

où $\boldsymbol{\varepsilon}_{\pm} = \sum_{i=1}^D \langle \boldsymbol{\varepsilon}^i \rangle_{\pm} \mathbf{n}^i \otimes \mathbf{n}^i$, $\boldsymbol{\varepsilon}^i$ et \mathbf{n}^i sont les valeurs propres et les vecteurs propres de $\boldsymbol{\varepsilon}$ tels que $\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{n}^i = \boldsymbol{\varepsilon}^i \mathbf{n}^i$. Dans le cas des matériaux quasi-fragiles, les fissures sont créées par la contrainte de traction dans le solide, alors seule la partie positive $\langle . \rangle_+$ contribue à l'initiation et la propagation des fissures. Ainsi, la densité de l'énergie de déformation $\Psi(\boldsymbol{\varepsilon}(u), d)$ a été reformulée afin de distinguer les contributions dues à la compression et la traction de l'énergie de déformation [253] :

$$\Psi(\boldsymbol{\varepsilon}(u), d) = (g(d) + k)\Psi_0^+(\boldsymbol{\varepsilon}) + \Psi_0^-(\boldsymbol{\varepsilon}) \quad (2.54)$$

où

$$\Psi_0^+(\boldsymbol{\varepsilon}) = \frac{\lambda}{2} \langle Tr(\boldsymbol{\varepsilon}) \rangle_+^2 + \mu Tr(\boldsymbol{\varepsilon}_+^2) \quad (2.55)$$

$$\Psi_0^-(\boldsymbol{\varepsilon}) = \frac{\lambda}{2} \langle Tr(\boldsymbol{\varepsilon}) \rangle_-^2 + \mu Tr(\boldsymbol{\varepsilon}_-^2) \quad (2.56)$$

Récemment, He et Shao [149] ont développé une méthode générale pour obtenir des décompositions orthogonales des tenseurs d'ordre 2 de déformation et de contrainte. Le modèle est basé sur la décomposition du tenseur des déformations en deux parties complémentaires, qui sont orthogonales au sens d'un produit interne où les deux tenseurs de rigidité élastique et de souplesse d'ordre 4 agissent comme des opérateurs métriques. Cette méthode de décomposition a été implémentée dans un modèle de champ de phase dans [287] (voir [149, 287] pour plus de détails).

Dans le modèle de champ de phase, la fonction de dégradation énergétique $g(d) : [0, 1] \rightarrow [0, 1]$ joue un rôle important car elle relie la variable de champ de phase d et le champ mécanique (contrainte). Elle décrit la réponse de l'énergie stockée face aux changements du champ de phase. La fonction de dégradation énergétique doit satisfaire aux conditions suivantes :

$$g(0) = 1 \quad g(1) = 0 \quad g'(1) = 0 \quad (2.57)$$

Les choix les plus répandus dans la littérature pour la fonction de dégradation $g(d)$ sont donnés dans le tableau 2.1. Bien que les trois dernières fonctions de dégradations de type rationnel peuvent aussi être appliquées à la fissure fragile, elles ont été proposées dans la littérature principalement pour les fissures cohésives et les fissures quasi-fragiles.

$g(d)$	Auteurs
$(1-d)^2$	[50]
$3(1-d)^2 - 2(1-d)^3$	[182]
$\frac{(1-d)^2}{(1-d)^2 + Q(d)}$ $Q(d) = d + p.d^2$	[232, 233]
$\frac{(1-d)^2}{1+(k-1)Q(d)}$ $Q(d) = 1 - (1-d)^2$	[4]
$\frac{(1-d)^2}{(1-d)^2 + Q(d)}$ $Q(d) = a_1d + a_1a_2d^2 + a_1a_2a_3d^3$	[409]

TABLEAU 2.1 Fonction de dégradation d'énergie $g(d)$

Un paramètre numérique k choisi très petit est communément utilisé dans la fonction de dégradation énergétique $g(d)$ afin de garantir un bon conditionnement du système d'équations. Le paramètre a_1 dans le modèle de Wu [409] n'est pas une propriété matériau mais est inversement proportionnel à la longueur de régularisation ℓ dont dépend la fonction de dégradation énergétique $g(d)$.

Dans cette thèse, la méthode de champ de phase sera choisie comme outil de modélisation pour simuler la fissuration à l'échelle de la microstructure du béton au vu de ses avantages

liées à la capacité à modéliser simplement l'initiation, la propagation, le branchement et la coalescence de fissures multiples.

2.5 Modélisation des fissures dues à la corrosion dans les matériaux cimentaires

Comme mentionné dans l'introduction, les déchets radioactifs provenant du retraitement des combustibles des réacteurs de la filière UNGG sont constitués principalement de graphite, de magnésium, et de résidus d'uranium. L'uranium provient généralement de l'entraînement du métal fixé à la gaine, qui est retiré du combustible utilisé avant le retraitement. La plupart des déchets de faible activité sont actuellement enrobés dans un colis de mortier contenu dans des conteneurs en acier inoxydable, prêts pour un stockage provisoire et une élimination éventuelle. Le conditionnement à long terme de ces déchets (plus de 100 ans) est un objectif essentiel de l'industrie nucléaire et, par conséquent, il est primordial de pouvoir évaluer ou même surveiller directement l'état de corrosion des colis de déchets contenant de l'uranium sur de longues périodes.

Comme déjà mentionné en introduction, le conditionnement à long terme des déchets métalliques (uranium, aluminium, magnésium...) pose deux problèmes principaux. Tout d'abord, la production de produits de corrosion expansifs (oxyde d'uranium UO_2 et hydrure d'uranium UH_3 par exemple) et la production d'hydrogène gazeux posent un problème de sécurité [110, 368, 308, 340], voir les réactions (1.1) et (1.2), où H_2 peut être issu de la corrosion de l'uranium et d'autres métaux réactifs dans les déchets. L'expansion du volume interne causée par la corrosion des métaux dans le colis pourrait, si la corrosion est importante, générer des contraintes internes suffisantes pour provoquer la fissuration du colis [110].

Expérimentalement, la caractérisation de la corrosion de l'uranium (et d'autres métaux) constitue un défi majeur lorsque les déchets sont enrobés dans un colis. La plupart des travaux de recherche dans la littérature traitant la corrosion de l'uranium sont focalisés sur son comportement dans des environnements non confinés [201, 301, 245, 386, 33]. Sttit et al. [369] ont utilisé des méthodes non-destructives, notamment la tomographie à rayons X, afin d'observer l'évolution des produits de corrosion d'échantillons d'uranium enrobés dans un coulis de mortier dans des conditions humides, et d'identifier les produits de corrosion. La figure 2.18 montre le développement des produits de corrosion (couleur orange) d'une barre d'uranium (couleur bleu) enrobée dans une matrice cimentaire. Le taux d'oxydation de l'uranium incorporé dans une matrice cimentaire dans des conditions humides a été observé

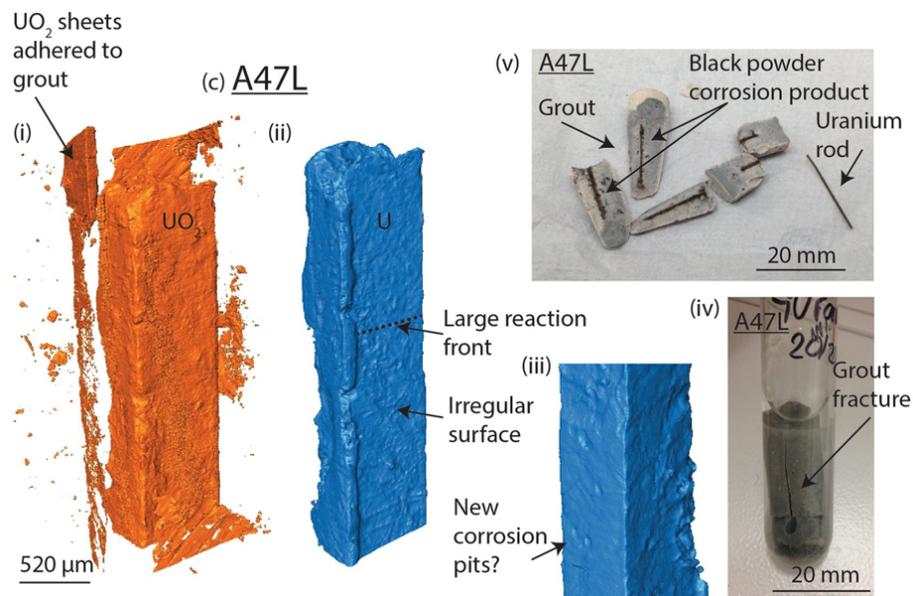


FIGURE 2.18 Vues 3D de développement des (i) produits de corrosion (couleur orange) (ii)(iii) d'une barre d'uranium (couleur bleu) enrobée dans une matrice cimentaire (iv) (v) fissuration de l'enrobage [369]

dans [369] comme étant initialement rapide, suivi d'une diminution et d'une stabilisation vers 50 semaines à un taux correspondant au régime permanent d'échange de gaz à travers le coulis. En outre, une rupture dans le coulis a été constatée, voir la figure 2.18(iv). Des systèmes simplifiés simulant des échantillons d'une barre d'uranium cimentés ont été produits dans [308, 307], corrodés artificiellement de manière contrôlée pour entraîner une dégradation rapide des échantillons, puis analysés à l'aide d'un rayonnement synchrotron à haute énergie au Diamond Light Source (DLS) [95]. La figure 1.3 montre une vue 3D d'un cube de ciment contenant une barre d'uranium, les flèches noires indiquent les fissures générées après l'expansion d'uranium, tandis que le point bleu désigne la zone d'uranium (non-corrodé) et le point rouge la zone des produits de corrosion.

Analytiquement, la solution du problème d'un cylindre à paroi épaisse soumis à une pression interne uniforme en contraintes planes a été utilisée par Bažant [27] pour modéliser la pression interne exercée par une barre d'acier (armature) corrodée sur le béton environnant. Liu et Weyers [225], Bhargava et al. [42], et Zhao et al. [434] ont établi un modèle théorique élastique pour prédire la fissuration du béton due à la corrosion de l'acier. Uddin et al. [388] ont établi un modèle basé sur la mécanique de la rupture pour déterminer la cinématique des fissures en termes de position, de type et d'orientation. Ces modèles ont été largement utilisés pour évaluer le taux critique de corrosion et prédire le temps d'initiation des fissures

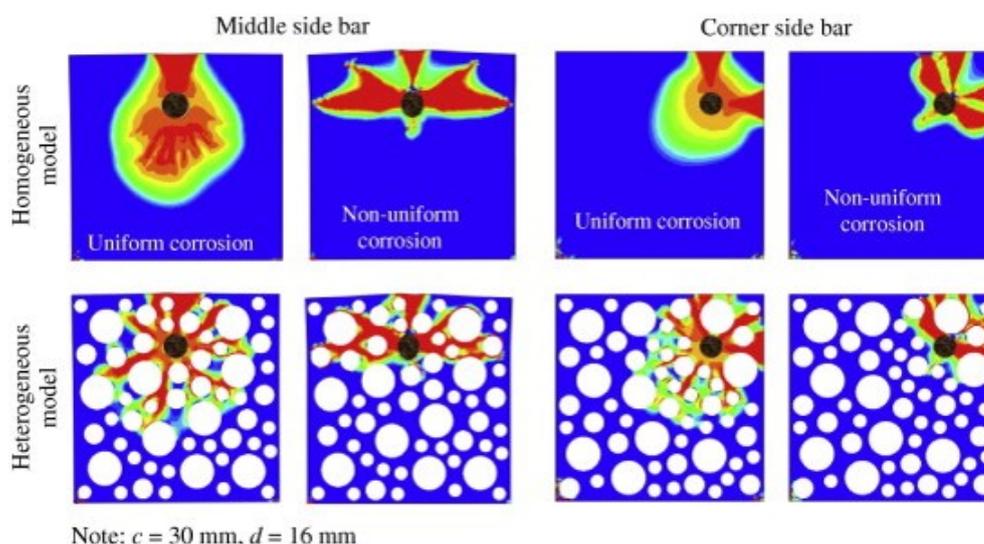


FIGURE 2.19 Endommagement d'échantillons de béton dû à la corrosion uniforme/non-uniforme d'armatures : la rangée supérieure montre l'endommagement pour une microstructure homogène, et la rangée inférieure l'endommagement pour une microstructure hétérogène [99, 97].

dans le béton environnant. Cependant, la plupart de ces modèles analytiques étaient basés sur la théorie de l'élasticité et l'effet de la résistance résiduelle du béton fissuré n'était pas pris en compte. En outre, toutes ces méthodes analytiques ont supposé que la corrosion de la barre d'armature était uniforme et donc que la pression d'expansion correspondante était uniforme. Dans certaines situations, la corrosion peut se produire de manière non uniforme (pénétration d'ions chlorure depuis l'extérieur), le processus de corrosion peut commencer dans la barre à partir de la région la plus proche de l'extrémité [408, 169, 345]. La corrosion non uniforme conduit à une distribution non uniforme des pressions d'expansion, ce qui peut avoir un effet sur la fissuration de l'enrobage en béton car les pressions les plus élevées sont concentrées dans la région extérieure du béton [169, 303]. Dans le cadre des déchets métalliques enrobés dans un colis, en raison des faibles fractions volumiques et de la forte séparation d'échelle entre les phases expansives et le colis, on considère que la corrosion est uniforme autour de l'inclusion.

Numériquement, la méthode des éléments finis a été largement utilisée pour étudier la fissuration due à la corrosion des phases métalliques dans les bétons. Du et al. [100] ont étudié la fissuration du béton induite par l'expansion radiale de barres d'armature corrodées en se basant sur des simulations par éléments finis. L'influence de la résistance des barres d'armature et du rapport entre la distance d'enrobage et le diamètre de la barre sur le taux de corrosion a été discutée. Jang et Oh [169] ont utilisé la méthode des éléments finis à l'échelle

macro pour étudier l'effet de la corrosion non uniforme sur la fissuration de l'enrobage en béton, et ils ont constaté que les pressions qui provoquent la fissuration de l'enrobage dans des conditions de corrosion non uniforme sont beaucoup plus faibles que dans des cas de corrosion uniforme. Val et al. [389] ont étudié la fissuration de l'enrobage en béton soumis à une expansion par corrosion en utilisant des approches expérimentales et numériques. Un modèle de zone cohésive a été utilisé dans l'étude de la fissuration dans le cas d'un gonflement interne dû à la corrosion dans [343, 352, 413]. Dans l'étude de Sanz et al. [343], l'expansion des produits de corrosion a été simulée par des éléments de joints expansifs et la fissuration du béton a été modélisée à l'aide d'un modèle d'éléments cohésifs. Dans [413], un modèle de corrosion non-uniforme de von Mises a été établi pour formuler l'expansion de la couche de produit de corrosion autour de la barre d'armature, des éléments cohésifs ont été utilisés afin de modéliser la propagation de la fissure dans la structure hétérogène du béton. La méthode X-FEM a été utilisée dans la simulation de la propagation des fissures dues à la corrosion interne dans les matrices cimentaires dans [26, 261, 421, 203]. Considérant l'influence des hétérogénéités du béton, Du et Jin [99, 97] ont adopté un modèle à l'échelle mésoscopique dans lequel un modèle d'endommagement plastique isotrope [202] a été considéré pour la matrice cimentaire ainsi que les interfaces, les agrégats ont été explicitement représentés. La figure 2.19 montre la propagation des fissures dans le cas de la corrosion uniforme et non uniforme de l'armature, pour des microstructures homogènes et hétérogènes. Chen et al. [68] et Šavija et al. [345] ont utilisé une méthode basée sur des éléments discrets, de type Lattice element method à l'échelle mesoscopique, pour analyser numériquement la fissuration causée par des corrosions uniformes et non uniformes de barres d'armature. Chen et al. [68] ont utilisé le LEM pour simuler le temps de fissuration d'une structure en béton hétérogène, et le modèle de corrosion linéaire de [169] a été adopté dans les simulations. Il existe très peu d'études sur l'endommagement dû à la corrosion avec la méthode de champ de phase, citons tout de même les travaux très récents de Wei et al. [405] qui ont étudié l'endommagement induit par la corrosion d'une armature à l'échelle de l'interface acier/mortier.

2.6 Modélisation multi-échelle de l'endommagement

Le comportement mécanique d'une structure à l'échelle macroscopique est influencé par la composition de ses éléments structurels et l'existence d'un éventuel endommagement, de fissures et d'autres hétérogénéités aux échelles macroscopiques et microscopiques. Des simulations directes de fissuration décrivant explicitement toutes les hétérogénéités microscopiques sur toute la structure sont actuellement hors de portée des moyens de calculs. Afin de surmonter cet obstacle, des approches multi-échelles, notamment des méthodes

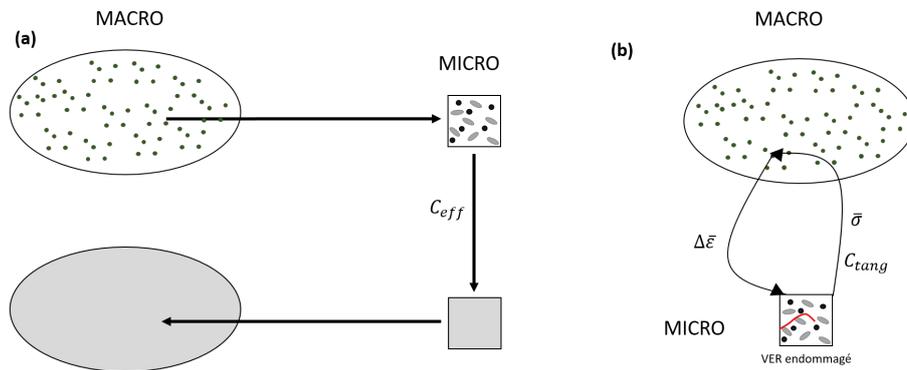


FIGURE 2.20 (a) schémas d'homogénéisation linéaire (champ moyen) (b) schémas d'homogénéisation non linéaire FE^2 (champ complet)

d'homogénéisation numérique ont été développées depuis de nombreuses années.

Les méthodes multi-échelles peuvent être classées en deux catégories : (i) les approches à champ moyen et (ii) les approches à champ complet, voir la figure 2.20. Les approches de champ moyen décrivant le comportement à l'échelle macroscopique à l'aide de méthodes d'homogénéisation analytiques telles que la méthode Mori-Tanaka [266, 92] ou le schéma auto-cohérent [259, 398, 53, 159] sont adéquates pour les cas linéaires mais sont plus difficiles à mettre en œuvre pour les modèles impliquant un comportement constitutif non linéaire. De plus, les approches par champ moyen ne décrivent pas la réponse locale et son interaction au sein du matériau, mais essentiellement le comportement mécanique macroscopique global. Les procédures multi-échelles en champ complet réalisent la transition entre l'échelle macroscopique et microscopique par des méthodes numériques afin de résoudre simultanément les problèmes à ces deux échelles [256, 119, 15, 117]. Au cours des vingt dernières années, les techniques de calcul multi-échelles, telles que la méthode FE^2 [116, 190, 117, 257, 115], les méthodes asymptotiques [47, 118], ont été largement utilisées dans divers problèmes mécaniques, par exemple le flambage des micro-fibres [276], le phénomène d'amortissement [18], les coques hétérogènes [77] et les composites super-élastiques [187].

L'approche élément finis au carré FE^2 [117, 115] permet de décrire le comportement des hétérogénéités de structure par un calcul éléments finis à deux échelles : macroscopique et mesoscopique. Dans un calcul FE^2 , il est possible de remplacer l'intégration d'une équation constitutive du problème non-linéaire par un calcul élément fini d'un problème non-linéaire sur un VER de la microstructure. Ce modèle microscopique pourra donc tenir compte de la géométrie de la microstructure et des non linéarités. Cette méthode multi-échelles ne nécessite ainsi aucune loi constitutive à l'échelle macroscopique. Il est à noter que lors de

la résolution d'un problème par la méthode FE^2 , les calculs d'équilibres locaux de micro-structure sur le VER sont effectués de manière indépendante en chaque point de Gauss. Un autre ingrédient qui doit être vérifié avant l'utilisation de la méthode FE^2 est la séparation d'échelle, qui implique que la taille du VER doit être suffisamment petite par rapport à la taille de la structure à l'échelle macroscopique $l_{micro} \ll l_{macro}$.

Concernant l'endommagement à l'échelle microscopique, des applications peuvent être trouvées dans [80, 131, 325, 395, 75, 180, 148]. Les modèles de zone cohésive ont été intégrés dans un cadre multi-échelle dans [395] pour les micro-systèmes piézoélectriques, où l'homogénéisation numérique est utilisée dans la couche cohésive. Un modèle de fissure multi-échelle pour des matériaux hétérogènes quasi-fragiles sous une charge d'impact [180] a été étudié en utilisant la TSL. Coenen et al. [75] ont développé une extension de la méthode FE^2 à l'endommagement en introduisant un enrichissement discontinu à l'échelle macro. Un travail récent dans [148] présente une analyse multi-échelle hiérarchique (FE^2) de l'endommagement élastique-plastique et du mécanisme de rupture dans les structures composites 3D à haute température. Kouznetsova et al. [190] ont proposé une procédure d'homogénéisation numérique de second ordre pour la modélisation multi-échelle en prenant en compte les effets macroscopiques de localisation et de taille. Nezamabadi et al. [276] ont proposé un schéma multi-échelle non linéaire basé sur la méthode FE^2 pour étudier le phénomène d'instabilité (flambage) des composites à fibres. Cong et al. [77] ont proposé une approche multi-échelle pour les structures de coque basée sur l'homogénéisation numérique. Cette approche peut simuler les grands déplacements et les grandes rotations d'une structure de coque hétérogène.

Au cours des dernières années, la performance des méthodes d'homogénéisation numérique a fait de grands progrès. Cependant, leur inconvénient principal reste leur coût de calcul, qui peut être prohibitif. Par exemple, dans le cadre de la méthode classique FE^2 , l'état de chaque point d'intégration macroscopique est supposé être évalué numériquement à chaque itération, ce qui nécessite d'énormes calculs répétitifs sur les VERs associés. De nombreuses méthodes ont été proposées pour résoudre ce problème en améliorant l'efficacité des calculs. Ces méthodes sont généralement utilisées dans le cadre classique du calcul multi-échelle, dans lequel les problèmes à différentes échelles doivent être résolus simultanément. La première stratégie repose sur la réduction des calculs des VERs à l'échelle microscopique par des techniques efficaces telles que l'utilisation de modèles réduits [424, 156], le calcul parallèle [414, 383], la transformée de Fourier [250, 112], le modèle d'ordre réduit Wavelet [391], la NTFA³ [336], l'analyse d'auto-clustering [227, 228, 379, 142] ou l'accélération

3. *Nonuniform Transformation Field Analysis*

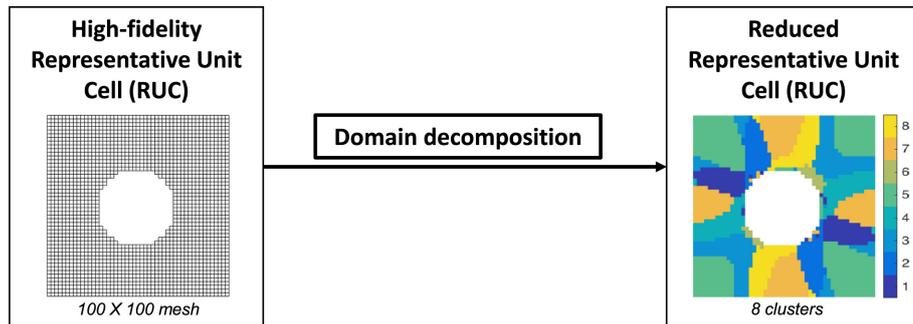


FIGURE 2.21 Illustration de la méthode d'auto-clustering du VER [227]

GPU⁴ [124]. Liu et al. [227, 228] ont proposé une méthode d'auto-clustering des données à l'échelle microscopique. Cette méthode réduit considérablement le nombre de degrés de liberté en effectuant une analyse de compression de données avec la méthode de clustering des VERs complexes, améliorant de manière significative l'efficacité de la résolution. Comme le montre la figure 2.21, un VER de 100×100 éléments est transformé en un VER réduit composé de seulement 8 clusters.

Une autre idée, proposée par [200, 235, 423], est l'utilisation de ce que l'on appelle les approches *data-driven*, dans lesquelles des calculs à l'échelle microscopique sont effectués au cours d'une étape *off-line*, et qui sont ensuite utilisés comme données dans une deuxième étape *on-line* pour reconstruire le comportement macroscopique effectif. Dans cette méthode, un ensemble de calculs *off-line* sur les VERs est d'abord effectué pour construire un modèle de substitution qui remplace les calculs des VERs à l'échelle microscopique. Pour ce faire, plusieurs techniques ont été proposées, notamment les méthodes d'interpolation [423, 125], Neural Network [200, 235, 205, 230, 260, 402, 130], l'inférence bayésienne [412], les développements en séries de Fourier [313], le processus gaussien [334]. Une comparaison de plusieurs techniques de réduction utilisées dans les approches multi-échelles *data-driven* peut être trouvée dans [333]. Dans [423], un modèle de substitution a été construit à l'aide de schémas d'interpolation d'ordre élevé, et dans [200], il a été étendu à l'utilisation de Neural Network. Les Neural Networks (NN) sont des algorithmes inspirés des réseaux neuronaux biologiques. À partir d'exemples (relations entrée-sortie), le NN définit une relation entre l'entrée et la sortie qui peut être utilisée pour prédire la sortie pour toute nouvelle entrée. Cela améliore considérablement l'efficacité du calcul *on-line* des matériaux hétérogènes. Également, Yang et al. [419] ont développé une relation constitutive équivalente implicite de matériaux hétérogènes à l'aide d'algorithmes de NN, réduisant ainsi considérablement le coût nécessaire pour construire le modèle constitutif du matériau. Cette technique consiste

à réaliser des simulations sous différentes conditions sur le VER, et construire une base de données de comportement. Ensuite, un algorithme de NN est utilisé pour établir la relation implicite entre la contrainte équivalente et la déformation équivalente. Cette méthode réduit considérablement le coût de simulation, et peut être utilisée dans un cadre d'homogénéisation multi-échelle.

Cependant, le principal inconvénient de ces techniques est qu'elles ne sont adaptées qu'à certaines classes de comportements et manquent de généralité, et des hypothèses doivent être faites sur le comportement local et que des extensions spécifiques doivent être réalisées pour traiter des comportements locaux non linéaires. Plus précisément, le traitement des variables internes et des comportements dépendant de l'histoire du chargement reste encore délicat. En outre, les Neural Networks et les techniques de substitution associées ne peuvent pas estimer les erreurs, en particulier lorsque les paramètres ne font pas partie de l'ensemble des données [184].

2.7 Conclusion

De nombreux modèles numériques de la littérature pour le traitement du problème de l'endommagement et de la fissuration dans les matériaux ont été présentés. Nous avons montré que les principaux inconvénients des méthodes numériques basées sur la mécanique de la rupture (éléments finis avec remaillage, XFEM...) étaient leur difficulté à initier des fissures dans des milieux non initialement fissurés, et à traiter les interactions de fissures multiples et complexes. De leur côté, les méthodes basées sur l'endommagement souffrent de problèmes de convergence et de dépendance au maillage si aucun traitement de régularisation n'est utilisé. Les méthodes non locales avec convolution sont très lourdes à mettre en place et produisent un étalement non contrôlé de la zone d'endommagement. Enfin, les éléments discrets reposent sur des calibrations ad-hoc de paramètres pour bien représenter les milieux continus et les interfaces et un manque de convergence spatiale et des difficultés à des extensions pour des modèles de comportement plus complexes.

Dans ce travail, nous avons choisi la méthode de champ de phase pour simuler la propagation de fissures en raison de ses divers avantages par rapport aux autres méthodes mentionnées ci-dessus : (i) sa capacité à simuler l'initiation des fissures ; (ii) la possibilité de gérer des morphologies de fissures arbitraires ; (iii) la possibilité de gérer des intersections, coalescences et branchements de fissures ; et (iv) sa régularisation permettant une convergence des résultats par rapport au maillage. Cette méthode sera appliquée dans les chapitres suivants

pour décrire la fissuration de la microstructure dans les colis de déchets nucléaires, et combinée avec des approches multi-échelles pour décrire la dégradation globale du colis.

Chapitre 3

Une méthode k-means FE^2 pour modéliser la fissuration à deux échelles dans le colis

3.1 Introduction

Les phénomènes multi-échelles sont centraux dans de nombreux domaines d'ingénierie et nécessitent le développement d'outils numériques permettant de prendre en compte les différentes échelles spatiales et temporelles des phénomènes. Dans beaucoup de cas pratiques ou industriels, les simulations numériques ne permettent généralement de prévoir que les phénomènes qui se manifestent à l'échelle macroscopique. Les phénomènes qui se produisent à l'échelle microscopique sont souvent pris en compte de manière phénoménologique. Cependant dans certaines situations, afin de pouvoir mettre en lien les constituants microscopiques et leur agencement avec les propriétés macroscopiques dans un cadre non linéaire, les approches phénoménologiques sont limitées. D'un autre côté, réaliser une simulation à l'échelle d'une structure en décrivant finement toutes les hétérogénéités microscopiques est irréaliste, même avec les moyens de calculs actuels.

Les outils de modélisation multi-échelle permettent de lever ce verrou. Par la suite, nous nous focaliserons sur le cas des comportements de matériaux non linéaires. Parmi les différentes approches, les méthodes numériques multi échelles d'homogénéisation constituent des outils puissants pour prédire le comportement de structures tout en prenant en compte explicitement les comportements des constituants décrits à l'échelle microscopique. Comme mentionné dans la section 2.6, une approche très populaire depuis le début des années 2000

est la méthode "d'Éléments Finis au carré" (FE^2), introduite par Feyel [117, 115] et par d'autres auteurs de façon indépendante (voir références dans la section 2.6). Celle-ci repose sur un calcul de structure par éléments finis, dans lequel chaque point d'intégration du maillage macroscopique est attaché à un Volume Élémentaire Représentatif (VER). Pour évaluer la loi de comportement macroscopique, un calcul non linéaire par éléments finis est requis pour chaque évaluation de la loi de comportement dans le calcul macroscopique. Cette stratégie a l'avantage de ne pas être limitée concernant les lois de comportement microscopiques mais souffre du problème de coûts de calculs prohibitifs, en raison des calculs couplés aux deux échelles. De nombreuses méthodes ont été proposées pour résoudre ce problème en améliorant l'efficacité des calculs (voir section 2.6). Cependant, ces techniques sont généralement dédiées à certaines classes de comportements et manquent de généralité. Plus précisément, le traitement des comportements avec variables internes reste délicat.

L'objectif de ce chapitre est de développer une nouvelle méthode multi échelle inspirée de la méthode FE^2 , afin de réduire considérablement les temps de calculs tout en gardant sa généralité et sa capacité à traiter des problèmes avec des comportements non linéaires à variables internes à l'échelle micro (les comportements endommageables). La méthode proposée ici, et baptisée méthode "k-means FE^2 ", se base sur un concept différent par rapport aux techniques mentionnées dans la section 2.6 : plutôt que de tenter de réduire les temps de calcul à l'échelle microscopique (VER), l'objectif est ici de réduire les temps de calculs liés à l'échelle macroscopique. Pour cela, nous utilisons un outil importé des "data sciences" nommé "k-means clustering" permettant de regrouper des données vectorielles. L'idée centrale est ici de regrouper des points d'intégration dans la structure macroscopique ayant des valeurs de composantes de déformations macroscopiques proches afin d'éviter des calculs de VERs redondants. A noter que la méthode proposée ici est complètement différente de la méthode proposée par Liu et al. [227, 228] et appelée "Self-Clustering Analysis" qui permet une réduction des calculs à l'échelle micro, et créant des clusters de champs de déformations dans le VER et en proposant un algorithme de résolution basé sur l'équation de Lippmann-Schwinger. Ce chapitre a fait l'objet d'un article soumis dans une revue internationale [237].

3.2 Modèle de fissuration à l'échelle microscopique : modèle de champ de phase

Nous présentons ici le modèle utilisé pour décrire le comportement du béton à l'échelle microscopique. Nous supposons un comportement fragile et la possible initiation et croissance de fissures dues à l'expansion d'inclusions métalliques. Pour modéliser la rupture de la matrice cimentaire, la méthode de champ de phase [121, 50, 193, 258] est utilisée ici. Nous rappelons ci-dessous les principales équations de la méthode.

La méthode de champ de phase repose sur un principe variationnel impliquant une minimisation de l'énergie totale E par rapport au champ de déplacement u et par rapport à la variable d'endommagement d décrivant les fissures de manière continue. Cette deuxième minimisation est contrainte par une condition d'irréversibilité de l'endommagement $\dot{d} \geq 0$. Pour définir ce problème de minimisation dans un cadre plus simple, une discrétisation en temps est introduite $\mathcal{T} = \{t^0, t^1, \dots, t^n, t^{n+1}, \dots, t^N\}$. A chaque pas de temps t^{n+1} , on cherche le champ de déplacement \mathbf{u}^{n+1} et le champ d'endommagement \mathbf{d}^{n+1} tels que

$$\mathbf{u}^{n+1}, \mathbf{d}^{n+1} = \underset{\substack{0 \leq d_n \leq d^{n+1} \leq 1 \\ u \in \mathcal{C}_A}}{\text{Argmin}} E \quad (3.1)$$

où \mathcal{C}_A est l'ensemble de champs cinématiquement admissibles et E est l'énergie totale du système (2.49). Un algorithme simple permettant de résoudre ce problème, proposé par Miehe [258], consiste à utiliser la résolution séquentielle des deux problèmes de minimisation comme suit :

$$D_{\delta u} E = 0 \quad (3.2)$$

$$D_{\delta d} E = 0, \quad 0 \leq d_n \leq d^{n+1} \quad (3.3)$$

où $D_{\delta v}(\cdot)$ est la dérivée directionnelle, ou dérivée de Gâteaux. La première équation (3.2) définit le problème mécanique tandis que la seconde (3.3) définit le problème du champ de phase. Les deux problèmes mécanique et de champ de phase sont couplés et résolus par la méthode des éléments finis classique.

3.2.1 Problème mécanique

L'équation (3.2) peut être développée comme suit :

$$\int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\delta \mathbf{u}) d\Omega - \int_{\partial\Omega^F} \mathbf{F}^* \cdot \delta \mathbf{u} d\Gamma = 0 \quad (3.4)$$

où

$$\frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}(\boldsymbol{\varepsilon}, d) = \boldsymbol{\sigma} \quad (3.5)$$

En prenant Ψ définie dans l'équation (2.54), on obtient :

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} = (g(d) + k) (\lambda \langle \text{Tr}(\boldsymbol{\varepsilon}) \rangle_+ \mathbf{1} + 2\mu \boldsymbol{\varepsilon}_+) + \lambda \langle \text{Tr}(\boldsymbol{\varepsilon}) \rangle_- \mathbf{1} + 2\mu \boldsymbol{\varepsilon}_- \quad (3.6)$$

En supposant la variable de champ de phase d fixée (calculée comme présenté ci-dessous), la forme faible en déplacement est donnée par :

$$\int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\delta \mathbf{u}) d\Omega = \int_{\partial\Omega^F} \mathbf{F}^* \cdot \delta \mathbf{u} dS \quad (3.7)$$

L'équation d'Euler-Lagrange (formulation forte) associée à l'équation (3.7) est donnée par :

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = 0, \quad \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{F}^* \quad \text{sur } \partial\Omega^F, \quad \mathbf{u} = \mathbf{u}^* \quad \text{sur } \partial\Omega^u \quad (3.8)$$

3.2.2 Problème du champ de phase

La première équation dans (3.3) peut être développée comme suit :

$$\int_{\Omega} \frac{\partial \Psi}{\partial d} \delta d d\Omega + g_c \int_{\Omega} D_{\delta d} \gamma d\Omega = 0 \quad (3.9)$$

En choisissant γ comme (2.39), nous obtenons :

$$\int_{\Omega} \left\{ \frac{\partial \Psi}{\partial d} + \frac{g_c}{\ell} (d \delta d + \ell^2 \nabla d \cdot \nabla(\delta d)) \right\} d\Omega = 0 \quad (3.10)$$

ou

$$\int_{\Omega} \left\{ \left(\frac{\partial \Psi}{\partial d} + \frac{g_c}{\ell} d \right) \delta d + g_c \ell \nabla d \cdot \nabla(\delta d) \right\} d\Omega = 0 \quad (3.11)$$

$$\int_{\Omega} \left\{ \left(g'(d) [\Psi^+] + \frac{g_c}{\ell} d \right) \delta d + g_c \ell \nabla d \cdot \nabla(\delta d) \right\} d\Omega = 0 \quad (3.12)$$

En choisissant $g(d) = (1 - d)^2$, on obtient :

$$\int_{\Omega} \left\{ \left(2[\Psi^+] + \frac{g_c}{\ell} \right) d \delta d + g_c \ell \nabla d \cdot \nabla (\delta d) \right\} d\Omega = \int_{\Omega} 2[\Psi^+] \delta d d\Omega \quad (3.13)$$

En utilisant l'égalité :

$$\nabla d \cdot (\delta d) = \nabla \cdot (\delta d \nabla d) - \Delta d \delta d \quad (3.14)$$

on obtient :

$$\int_{\Omega} g_c \ell \nabla d \cdot \nabla (\delta d) d\Omega = \int_{\Omega} \{ g_c \ell \nabla \cdot (\delta d \nabla d) - g_c \ell \Delta d \delta d \} d\Omega \quad (3.15)$$

et en utilisant le théorème de divergence :

$$\int_{\Omega} g_c \ell \nabla d \cdot \nabla (\delta d) d\Omega = \int_{\partial\Omega} g_c \ell \delta d \nabla d \cdot \mathbf{n} d\Gamma - \int_{\Omega} g_c \ell \Delta d \delta d d\Omega \quad (3.16)$$

Ensuite, les équations d'Euler-Lagrange associées à (3.20) sont données par :

$$\begin{cases} \left(\frac{g_c}{\ell} + 2[\Psi^+] \right) d - g_c \ell \Delta d = 2[\Psi^+] & \text{dans } \Omega \\ \nabla d \cdot \mathbf{n} = 0 & \text{sur } \partial\Omega \\ d = 1 & \text{sur } \Gamma \end{cases} \quad (3.17)$$

où Δd désigne l'opérateur Laplacien. L'application de la condition d'irréversibilité peut être imposée de différentes manières (voir par exemple [194, 253]), en appliquant la condition de Dirichlet $d = 1$ aux nœuds où le champ de phase a atteint une valeur de $d = 1$ ou en appliquant numériquement la condition $d_n \leq d_{n+1}$ à chaque nœud dans l'algorithme de résolution. Il est clair que la valeur du champ de phase d est déterminée par l'énergie positive Ψ_0^+ . Notons que la fissure déjà apparue ne disparaîtra pas même si Ψ_0^+ devient très petit lors du déchargement. Par conséquent, Miehe et al. [258] ont proposé une fonction histoire des déformations \mathcal{H} pour définir le maximum d'énergie élastique dans l'histoire des déformations :

$$\mathcal{H}(x, t) = \max_{t \in [0, t^N]} \{ \Psi^+(x, t) \} \quad (3.18)$$

Le système donné par l'équation (3.17) devient :

$$\begin{cases} \left(\frac{g_c}{\ell} + 2\mathcal{H} \right) d - g_c \ell \Delta d = 2\mathcal{H} & \text{dans } \Omega \\ \nabla d \cdot \mathbf{n} = 0 & \text{dans } \partial\Omega \\ d = 1 & \text{sur } \Gamma \end{cases} \quad (3.19)$$

La formulation faible du problème de champ de phase est alors donnée par [288] :

$$\int_{\Omega} \left[\left(2[\mathcal{H}] + \frac{g_c}{\ell} \right) d\delta d + g_c \ell \nabla d \cdot \nabla(\delta d) \right] d\Omega = \int_{\Omega} 2[\mathcal{H}] \delta d d \Omega \quad (3.20)$$

Nguyen et al. ont montré dans [288] que le problème (3.19) peut être obtenu à partir d'une formulation thermodynamique, en appliquant le principe de dissipation maximale à l'énergie libre identifiée à partir de l'équation (2.49). L'application de la deuxième loi de la thermodynamique dans le contexte des processus irréversibles permet, en combinaison avec l'utilisation de l'approche énergétique, de déterminer l'expression du champ de phase d dans le cas d'un système isolé. Supposant un processus isotherme, l'inégalité de Clausius-Duhem indique que :

$$\Phi = \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\epsilon}} - \dot{W} \geq 0 \quad (3.21)$$

où $\boldsymbol{\sigma}$ est le tenseur de contrainte totale de Cauchy, \dot{W} est la variation de l'énergie libre de Helmholtz, et Φ le taux de dissipation par unité de volume. Le tenseur de contrainte de Cauchy peut être défini comme la dérivée partielle de l'énergie libre par rapport à la déformation totale c.-à-d. , $\boldsymbol{\sigma} = \frac{\partial W}{\partial \boldsymbol{\epsilon}}$, et le taux de dissipation peut être écrit comme :

$$\Phi = \mathcal{A} \dot{d} = - \frac{\partial \Psi}{\partial d} \dot{d} \geq 0 \quad (3.22)$$

avec $\mathcal{A} = - \frac{\partial W}{\partial d}$ est la force thermodynamique associée à d .

La fonction seuil d'endommagement $F(\mathcal{A})$ est définie sous la forme

$$F(\mathcal{A}) = \mathcal{A} \leq 0 \quad (3.23)$$

En supposant que le principe de dissipation maximale impose que la dissipation Φ soit maximale sous la contrainte (3.23), en utilisant la méthode des multiplicateurs de Lagrange et les coefficients de Lagrange $\hat{\lambda}$ suivants

$$\mathcal{L} = -\mathcal{A} \dot{d} + \hat{\lambda} F(\mathcal{A}) \quad (3.24)$$

Ce problème d'optimisation est résolu en utilisant les conditions de Kuhn-Tucker, qui s'écrivent comme suit :

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathcal{A}} = 0 \quad \hat{\lambda} F = 0 \quad \hat{\lambda} \geq 0 \quad F \leq 0 \quad (3.25)$$

La première égalité dans (3.26) donne :

$$\dot{d} = \hat{\lambda} \frac{\partial F(\mathcal{A})}{\partial \mathcal{A}} = \hat{\lambda} \quad (3.26)$$

En utilisant la deuxième inégalité dans (3.26), on obtient $\dot{d} \geq 0$. Identifiant l'énergie libre dans (2.49) comme $W = \Psi + g_c \gamma(d, \nabla d)$, on obtient, pour $\dot{d} \geq 0$, $F = 0$:

$$F(\mathcal{A}) = \mathcal{A} = -\frac{\partial \Psi}{\partial d} = -\frac{\partial \Psi}{\partial d} - g_c \delta \gamma(d) = 0 \quad (3.27)$$

ou

$$\delta \gamma(d) = \frac{d}{\ell} - \ell \Delta d \quad (3.28)$$

qui correspond à l'équation (3.19) pour Ψ choisi comme (2.54).

L'endommagement et le gradient d'endommagement sont approximés dans un élément par :

$$d = \mathbf{N}_d \cdot d^e, \quad \nabla d = \mathbf{B}_d d^e \quad (3.29)$$

où \mathbf{N}_d et \mathbf{B}_d sont des matrices des fonctions de forme de l'endommagement et leurs dérivées, respectivement, et d^e représente l'endommagement nodal dans un élément. La discrétisation du problème d'endommagement (3.20) se traduit par le système d'équations discrètes suivant :

$$\mathbf{K}_d d = \mathbf{F}_d \quad (3.30)$$

dans laquelle

$$\mathbf{K}_d = \int_{\Omega} \left[\left(2[\mathcal{H}] + \frac{g_c}{\ell} \right) \mathbf{N}_d^T \mathbf{N}_d + g_c \ell \mathbf{B}_d^T \mathbf{B}_d \right] d\Omega = \int_{\Omega} 2[\mathcal{H}] \delta d d\Omega \quad (3.31)$$

et

$$\mathbf{F}_d = \int_{\Omega} 2 \mathbf{N}_d^T \mathcal{H} d\Omega \quad (3.32)$$

avec \mathcal{H} donnée dans (3.18).

3.2.3 Implémentation numérique

Dans le cadre de la modélisation quasi-statique des fissures, l'évolution discontinue des fissures se produit sous la forme d'un saut du champ de déplacement. Cela reste un problème difficile à résoudre avec les algorithmes itératifs standard de Newton, car le saut de la solution est difficile à capturer avec l'opérateur tangent. Une façon possible de surmonter ce problème est de passer à des simulations purement dynamiques [51, 198, 46], afin de capturer la perte d'énergie cinétique qui n'est pas prise en compte dans les simulations quasi-statiques.

Un schéma efficace de résolution du champ de phase a été proposé par [258, 253] et amélioré par [288, 289]. Ce type d'approche, appelé schéma explicite, consiste à résoudre l'équation mécanique avec un endommagement constant pour chaque pas de temps. Une fois la solution mécanique convergée obtenue, l'endommagement est alors actualisé pour l'étape suivante. Comme les problèmes mécaniques et d'endommagement sont découplés, le problème à résoudre devient convexe. Cette méthode montre une excellente propriété de convergence même en cas de fissuration discontinue. Cependant, comme la convergence sur l'endommagement n'est pas vérifiée, de petits pas de temps sont généralement exigés. La procédure de résolution est résumée comme suit :

1. Au pas de temps t , $d^* = d_{t-1}$
2. Boucle Newton sur le problème mécanique : trouver \mathbf{u} en minimisant le résidu $\mathbf{R}^u(\mathbf{u}, d^*, t)$
3. Si convergence : $\mathbf{u}_t = \mathbf{u}$
4. Boucle sur le problème de champ de phase : trouver d en minimisant le résidu $\mathbf{R}^d(\mathbf{u}_t, d)$ avec $d \geq 0$.
5. Mise à jour de la variable du champ de phase : $d_t = d$
6. Pas du temps suivant.

Les schémas implicites peuvent alléger cette dépendance du pas de temps (voir par exemple [8, 6, 151]). La méthode implicite proposée par [8, 6] est généralement connue comme un schéma de minimisation alternatif, dans lequel deux problèmes de minimisation pour les champs de déplacement et d'endommagement sont résolus indépendamment en fixant l'un de ces deux champs. Comme pour les schémas explicites, cette méthode calcule le champ de déplacement à endommagement constant, mais met à jour ce dernier au pas de temps actuel et calcule à nouveau un nouveau champ de déplacement. Par conséquent, contrairement au schéma explicite, la convergence du champ d'endommagement peut être assurée pour chaque pas de temps dans la procédure de minimisation alternative.

Dans [151], un algorithme implicite permettant de résoudre directement le problème non linéaire de champ de phase a été proposé et implémenté dans Cast3m (www-cast3m.cea.fr). Classiquement, l'incrément du champ de phase est déterminé ainsi que l'incrément du déplacement, puis la condition d'équilibre mécanique est testée. Ce schéma implicite peut être résumé comme suit :

1. Au pas de temps t , $\mathbf{u}^0 = \mathbf{u}_{t-1}$, $d^0 = d_{t-1}$
2. Boucle Newton sur $i = 0, 1, 2 \dots N$
3. Calcul de l'incrément de déplacement $\delta \mathbf{u}^{i+1} = -\mathbb{K}^{tang^{-1}} \cdot \mathbf{R}^u(\mathbf{u}_{t-1}, d^i, t)$

4. Mettre à jour $\mathbf{u}^{i+1} = \mathbf{u}_{t-1} + \delta\mathbf{u}^{i+1}$ et les variables internes.
5. Boucle sur le problème de champ de phase : trouver d en minimisant le résidu $\mathbf{R}^d(\mathbf{u}^{i+1}, d)$ avec $d \geq 0$.
6. Mettre à jour $d^{i+1} = d$.
7. Si convergence : $\mathbf{u}_t = \mathbf{u}^{i+1}$, $d_t = d^{i+1}$, pas de temps suivant.
8. Sinon, Répéter 2.
9. Fin.

où \mathbb{K}^{tang} est l'opérateur tangent

$$\mathbb{K}^{tang} = \int_{\Omega} \mathbf{B}_u^T \mathbf{C}^{tang} \mathbf{B}_u d\Omega \quad (3.33)$$

et

$$\mathbf{R}^u(\mathbf{u}, d(\mathbf{u})) = \int_{\Omega} \mathbf{B}_u^T \boldsymbol{\sigma}^{(k)} d\Omega - \int_{\partial\Omega^F} \mathbf{N}^T \mathbf{F}^* d\Omega \quad (3.34)$$

où \mathbf{C}^{tang} est la forme matricielle de l'opérateur tangent \mathbb{K}^{tang} , \mathbf{N} est la matrice des fonctions de forme, \mathbf{B}_u leur dérivée, et \mathbf{R}^u est le résidu du problème mécanique.

Ce schéma est similaire à celui de [289] dans sa manière de résoudre itérativement l'équation d'équilibre mécanique, mais, au lieu de conserver l'aspect explicite de la solution de l'équation du champ de phase, elle est résolue implicitement avec un incrément de déplacement donné. D'autre part, on peut voir que le schéma explicite de [258, 253] est un cas particulier de ce schéma implicite lorsque l'incrément de déplacement est pris égal à zéro. Cet algorithme est particulièrement intéressant, car l'intégration de la mise à jour de l'endommagement dans la boucle mécanique rend les deux problèmes couplés de manière plus forte et devrait être utile pour la convergence globale. Cette méthode est très stable mais converge généralement très lentement, bien que des techniques d'accélération [327, 113] disponibles pour la convergence mécanique peuvent être facilement appliquées pour accélérer la convergence globale.

Cette approche a été implémentée dans Cast3m pour une modélisation du champ de phase du combustible nucléaire [151]. Cet exemple montre que les méthodes implicites fonctionnent avec des pas de temps relativement grands mais nécessitent généralement de nombreuses itérations pour trouver les solutions convergées, en particulier lorsqu'elles rencontrent une propagation discontinue des fissures. Néanmoins, ce type d'approche est

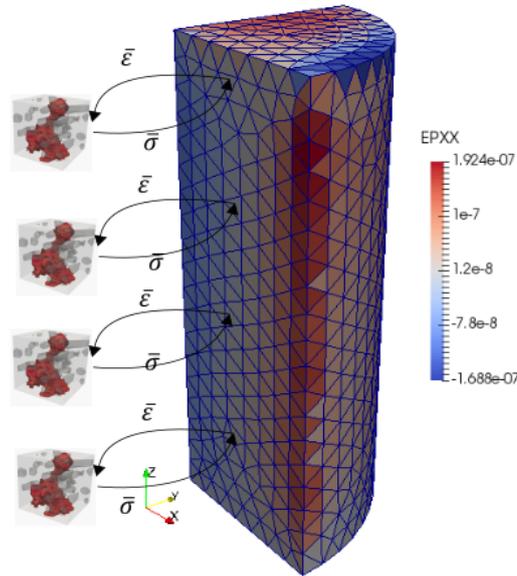


FIGURE 3.1 Principe de la méthode FE^2

intéressant pour de nombreux problèmes d'ingénierie soumis à un chargement à long terme (par exemple, les colis de déchets cimentés), dans lesquels de petits pas de temps ne sont pas acceptables.

3.3 Méthode des éléments finis au carré FE^2

Comme indiqué dans la section 2.6, la méthode des éléments finis au carré FE^2 a été proposée dans [117, 115] comme une méthode générale pour résoudre des problèmes multi-échelle de structures non linéaires. Les références dans la littérature sur les méthodes FE^2 sont associés aux travaux de développement et d'implémentation de la méthode FE^2 [385, 106, 382, 422, 116, 362], et aux applications de la méthode FE^2 pour l'étude du comportement de matériaux [350, 157, 276, 415, 328] et de différents éléments structurels macroscopiques tels que les plaques, les coques et les poutres [140, 150]. En particulier, la méthode FE^2 a été utilisée pour étudier les matériaux composites [350, 157, 305, 300], le comportement thermo-mécanique [140, 150], et la prise en compte des instabilités microscopiques et macroscopiques [256, 277].

L'approche FE^2 permet de décrire le comportement des hétérogénéités de structure par un calcul éléments finis à deux échelles : macroscopique et microscopique (voir la figure 3.1). Dans un calcul FE^2 , il est possible de remplacer l'intégration d'une équation constitutive du

problème non-linéaire par un calcul élément fini d'un problème non-linéaire sur un VER de la microstructure. Ce modèle microscopique pourra donc tenir compte de la géométrie de la microstructure et des non linéarités. Les contraintes obtenues sur le VER sont ensuite moyennées spatialement afin d'obtenir la relation de comportement nécessaire à la poursuite de l'algorithme de résolution à l'échelle macroscopique. Cette méthode multi-échelles ne nécessite ainsi aucune loi de comportement empirique à l'échelle macroscopique. Il est à noter que lors de la résolution d'un problème par la méthode FE², les calculs d'équilibres locaux de microstructure sur le VER sont effectués de manière indépendante en chaque point de Gauss.

Globalement la méthode FE² développée est basée sur deux étapes principales : (1) un calcul macroscopique non linéaire de type éléments finis à l'échelle macroscopique ; (2) des calculs non linéaires par éléments finis sur un modèle de VER associé à chaque point de Gauss fournissant la relation de comportement macro par moyennage des contraintes micro issues de la résolution (voir la figure. 3.1).

Nous considérons une structure macroscopique associée à un domaine $\bar{\Omega} \subset \mathbb{R}^3$, avec une frontière $\partial\bar{\Omega}$. L'hypothèse de séparation d'échelle est adoptée. La microstructure est représentée par un VER associé à un domaine $\Omega \subset \mathbb{R}^3$, avec une frontière $\partial\Omega$. Pour une loi constitutive non linéaire générale, la déformation $\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x})$ est reliée à la contrainte $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x})$ par une relation locale non linéaire (par exemple le comportement présenté dans la section 3.2), où \mathbf{x} est un point matériel dans Ω . Dans ce qui suit, les notations $\bar{(\cdot)}$ désigneront les quantités macroscopiques. En l'absence de forces volumiques, pour une déformation macroscopique donnée $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$ et des variables internes définies par un vecteur $\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{x})$, le problème sur le VER consiste à trouver $\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x})$, tel que :

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = 0 \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega, \quad (3.35)$$

où $\nabla(\cdot)$ est l'opérateur de divergence. La loi constitutive microscopique est donnée par

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \mathcal{F}^{nl}(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}), \boldsymbol{\alpha}). \quad (3.36)$$

où \mathcal{F}^{nl} est un opérateur non linéaire local (par exemple le comportement détaillé dans 3.2). Dans l'hypothèse d'interfaces parfaites, le champ de déformation doit satisfaire :

$$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}} = \frac{1}{V} \int_{\Omega} \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) d\Omega, \quad (3.37)$$

où V est le volume de Ω . L'équation (3.37) peut être vérifiée par la condition aux limites suivante :

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}\mathbf{x} + \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}) \text{ on } \partial\Omega, \quad (3.38)$$

où $\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x})$ est une fonction périodique sur Ω . En supposant toujours des interfaces parfaites dans le VER, la contrainte macroscopique est définie par :

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}} = \frac{1}{V} \int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) d\Omega. \quad (3.39)$$

Dans la méthode FE², la loi constitutive $\bar{\boldsymbol{\sigma}} - \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$ est inconnue, mais peut être obtenue numériquement en résolvant un problème non linéaire sur le VER, détaillé comme suit :

1. Définir les conditions aux limites (3.38) sur $\partial\Omega$.
2. Utiliser une méthode numérique telle que la méthode des EF avec un solveur itératif comme la méthode de Newton pour résoudre les problèmes non linéaires (3.35), (3.36), et (3.38) (voir un exemple dans 3.2).
3. Calculer la moyenne spatiale de la contrainte sur le VER pour obtenir $\bar{\boldsymbol{\sigma}}$.

Dans ce qui suit, une implémentation numérique détaillée d'un problème FE² est présentée. En l'absence de forces volumiques, le problème à l'échelle macroscopique est donné par

$$\nabla \cdot \bar{\boldsymbol{\sigma}} = 0 \text{ in } \Omega, \quad (3.40)$$

avec des conditions aux limites de Neumann $\bar{\mathbf{F}}^*$ sur $\partial\bar{\Omega}_F$ et de Dirichlet $\bar{\mathbf{u}} = \bar{\mathbf{u}}^*$ sur $\partial\bar{\Omega}_u$. La forme faible est donnée par :

$$\int_{\Omega} \bar{\boldsymbol{\sigma}}(\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}, \boldsymbol{\alpha}) : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}(\delta\bar{\mathbf{u}}) d\Omega - \int_{\partial\bar{\Omega}_F} \bar{\mathbf{F}}^* \cdot \delta\bar{\mathbf{u}} d\Gamma = \bar{R}(\bar{\mathbf{u}}) = \mathbf{0}. \quad (3.41)$$

Dans un contexte non linéaire, l'équation (3.41) doit être résolue à l'aide d'une méthode itérative, par exemple une méthode de Newton, comme décrit ci-dessous. Le problème linéarisé lié au problème non linéaire (3.41) est donné par :

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \bar{\mathbb{C}}_{tan}(\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}(\bar{\mathbf{u}}^p), \boldsymbol{\alpha}^p) : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}(\Delta\mathbf{u}) : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}(\delta\mathbf{u}) d\Omega \\ & = - \int_{\Omega} \bar{\boldsymbol{\sigma}}(\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}(\bar{\mathbf{u}}^p), \boldsymbol{\alpha}^p) : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}(\delta\bar{\mathbf{u}}) d\Omega + \int_{\partial\bar{\Omega}_F} \bar{\mathbf{F}}^* \cdot \delta\bar{\mathbf{u}} d\Gamma, \end{aligned} \quad (3.42)$$

où $\bar{\mathbf{u}}^p$, $\boldsymbol{\alpha}^p$ désigne la solution en déplacement et l'ensemble des variables internes à l'itération précédente p de Newton, respectivement, et $\bar{\mathbb{C}}_{tan} = \frac{\partial \bar{\boldsymbol{\sigma}}}{\partial \bar{\boldsymbol{\epsilon}}}$ est le tenseur élastique tangent. En résolvant (3.42) on obtient la correction à appliquer sur les déplacements macroscopiques :

$$\bar{\mathbf{u}}^{p+1} = \bar{\mathbf{u}}^p + \Delta \bar{\mathbf{u}}. \quad (3.43)$$

Le problème (3.42) est résolu jusqu'à ce qu'un critère de convergence soit atteint, c'est-à-dire lorsque la norme du résidu $\bar{\mathbf{R}}$ est inférieure à une certaine tolérance. En introduisant une discrétisation FEM dans (3.42), on obtient un système linéaire d'équations de la forme :

$$\bar{\mathbf{K}}_{tan} \Delta \bar{\mathbf{U}} = -\bar{\mathbf{R}} \quad (3.44)$$

où $\Delta \bar{\mathbf{U}}$ est le vecteur contenant toutes les corrections nodales des composantes du déplacement dans le maillage macroscopique,

$$\bar{\mathbf{K}}_{tan} = \int_{\bar{\Omega}} \bar{\mathbf{B}}^T \bar{\mathbb{C}}_{tan}(\bar{\mathbf{u}}^p) \bar{\mathbf{B}} d\Omega \quad (3.45)$$

et

$$\bar{\mathbf{R}} = - \int_{\bar{\Omega}} \bar{\mathbf{B}}^T [\bar{\boldsymbol{\sigma}}(\bar{\mathbf{u}}^j)] d\Omega + \int_{\partial \bar{\Omega}_F} \mathbf{N}^T \bar{\mathbf{F}}^* d\Omega, \quad (3.46)$$

où $\bar{\mathbb{C}}_{tan}$ est la forme matricielle de $\bar{\mathbb{C}}_{tan}$, $[\bar{\boldsymbol{\sigma}}]$ est la forme vectorielle de $\bar{\boldsymbol{\sigma}}$, et $\bar{\mathbf{B}}$ et $\bar{\mathbf{N}}$ sont des matrices de fonctions de forme et de dérivées de fonctions de forme liées au maillage macroscopique. L'algorithme de calcul multi-échelle FE² est résumé dans l'algorithme 1.

Les composantes de $\bar{\mathbb{C}}_{tan}$ peuvent être évaluées numériquement par perturbation en utilisant :

$$(\bar{\mathbb{C}}_{tan})_{ijkl}(\bar{\boldsymbol{\epsilon}}) = \frac{\partial \bar{\boldsymbol{\sigma}}_{ij}}{\partial \bar{\boldsymbol{\epsilon}}_{kl}}(\bar{\boldsymbol{\epsilon}}) \simeq \frac{\bar{\boldsymbol{\sigma}}_{ij}(\bar{\boldsymbol{\epsilon}} + \boldsymbol{\delta}^{(kl)}) - \bar{\boldsymbol{\sigma}}_{ij}(\bar{\boldsymbol{\epsilon}})}{\theta} \quad (3.47)$$

avec

$$\boldsymbol{\delta}^{(kl)} = \frac{\theta}{2} (\mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_l + \mathbf{e}_l \otimes \mathbf{e}_k) \quad (3.48)$$

où θ est un petit paramètre tel que $\theta \ll |\bar{\boldsymbol{\epsilon}}|$ et \mathbf{e}_k , $k = 1, 2, 3$ sont des vecteurs unitaires. Nous pouvons voir d'après ce qui précède qu'en chaque point d'intégration macroscopique, la détermination de $\bar{\boldsymbol{\sigma}}$ nécessite la résolution d'un problème non linéaire sur le VER tandis que la détermination de $\bar{\mathbb{C}}_{tan}$ nécessite la résolution de 6 calculs supplémentaires en 3D.

Contrairement aux approches classiques d'homogénéisation, le modèle FE² ne nécessite donc pas de définir une expression analytique du tenseur de localisation des déformations

Algorithm 1: FE²

For $n = 1 : N$ (Boucle sur les pas de chargement)

$n = n + 1$

Initialiser : $\bar{\mathbf{u}}_0^{n+1} = \bar{\mathbf{u}}^n$

While $E_{rr} > TOL$ (Boucle de Newton).

$p = p + 1$

Input : $\bar{\boldsymbol{\epsilon}} \bar{\boldsymbol{\epsilon}}^g(\bar{\mathbf{u}}_p^{n+1}) \quad g = 1, 2 \dots N_e$ (pour chaque point de gauss).

For $g = 1 : N_e$ (Boucle sur tous les points de Gauss) .

Calcul non-linéaire à l'échelle microscopique

Input $\bar{\boldsymbol{\epsilon}} \bar{\boldsymbol{\epsilon}}^g$

Résoudre le problème non linéaire (3.35, 3.38), voir l'exemple 3.2.

Output : $\bar{\boldsymbol{\sigma}}^g, \bar{\mathbf{C}}_{tan}^g$.

Calculer $(\bar{\mathbf{K}}_{tan}^g)_{j+1}^{n+1}, (\bar{\mathbf{R}}^g)_{j+1}^{n+1}$.

Assembler $(\bar{\mathbf{K}}_{tan}^g)_{p+1}^{n+1}$ dans $(\bar{\mathbf{K}}_{tan})_{p+1}^{n+1}$.

Assembler $(\bar{\mathbf{R}}^g)_{p+1}^{n+1}$ dans $(\bar{\mathbf{R}})_{p+1}^{n+1}$.

End.

Calcul non-linéaire à l'échelle macroscopique

Résoudre $(\bar{\mathbf{K}}_{tan})_{p+1}^{n+1} \Delta \mathbf{U} = -(\bar{\mathbf{R}})_{p+1}^{n+1}$.

$\bar{\mathbf{u}}_{p+1}^{n+1} = \bar{\mathbf{u}}_p^{n+1} + \Delta \mathbf{U}$.

$\mathbf{E}_{rr} = \|\bar{\mathbf{R}}_{p+1}^{n+1}\|$.

$\bar{\mathbf{u}}_p^{n+1} = \bar{\mathbf{u}}_{p+1}^{n+1}$.

End.

$\bar{\mathbf{u}}^n = \bar{\mathbf{u}}_p^{n+1}$.

End.

ni celui de localisation des contraintes. Cependant, ces tenseurs peuvent être calculés a posteriori pour reconstruire les champs locaux dans la microstructure (on désigne souvent cette étape dans la littérature comme l'étape de "re-localisation"). Nous pouvons faire une estimation du nombre total de calculs de VER à effectuer dans une simulation FE² complète comme suit :

$$N_{tot} \simeq (1 + \beta) \times N_{int} \times N_e \times N_{iter} \times N_{evol}, \quad (3.49)$$

où N_{int} est le nombre de points d'intégration par élément dans le maillage macroscopique, N_e est le nombre d'éléments dans le maillage macroscopique, N_{iter} est le nombre moyen d'itérations macroscopiques de Newton avant convergence à chaque pas de temps, et N_{evol} est le nombre de pas de temps pour l'ensemble de la simulation, ou de pas de chargement dans une simulation quasi-statique. À titre d'illustration, en considérant un maillage 3D contenant 100 000 éléments (ce qui est un maillage plutôt petit par rapport aux applications industrielles) avec des éléments tétraédriques linéaire, $N_{int} = 1$, $N_{iter} = 4$ et 10 pas de temps, $N_{evol} = 10$, on obtient $N_{tot} = 28 \times 10^6$ de calculs non linéaires sur le VER pendant toute la simulation. Cet exemple simple montre que pour la plupart des applications, cette méthode n'est pas adaptée, à moins d'utiliser des maillages très grossiers. Pour réduire drastiquement cette complexité, la méthode k-means FE² est proposée dans la section suivante.

3.4 k-means clustering

L'algorithme classique k-means est largement utilisé dans l'exploration des données pour résoudre les problèmes de classification ou de regroupement des données [146], de data mining [114], de compression de données [129], et de classification de modèles [102]. Nous donnons les grands principes de la technique ci-dessous.

Étant donné un ensemble de N vecteurs :

$$\mathcal{S} = \{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_N\}, \quad (3.50)$$

l'algorithme k-means a pour objectif de définir K clusters \mathcal{S}^k , $k = 1, 2, \dots, K$:

$$\mathcal{S}^k = \{\mathbf{v}_1^k, \mathbf{v}_2^k, \dots, \mathbf{v}_{N_k}^k\}, \quad (3.51)$$

Chaque cluster contient N_k vecteurs \mathbf{v}_i^k , où N_k peut être différent pour chaque cluster k . Nous définissons le centroïde d'un cluster par la formule suivante :

$$\bar{\mathbf{v}}^k = \frac{1}{N_k} \sum_{i \in \mathcal{S}^k} \mathbf{v}_i^k \quad (3.52)$$

et la distance euclidienne entre un point de données (vecteur) \mathbf{v}_j et le centroïde d'un cluster k , comme suit :

$$d_j^k = \|\mathbf{v}_j - \bar{\mathbf{v}}^k\| \quad (3.53)$$

où $\|\mathbf{u}\| = \sqrt{\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}}$. Mathématiquement, l'objectif de l'algorithme de la méthode des k-means est de trouver les ensembles \mathcal{S}^k tels que la fonction J soit minimisée :

$$J = \sum_k \sum_{i \in \mathcal{S}^k} \|\mathbf{v}_i - \bar{\mathbf{v}}^k\|^2 \quad (3.54)$$

Le nombre k est choisi par l'utilisateur. Les centroïdes sont initialisés en choisissant k vecteurs arbitraires $\mathbf{v}_m^k \in \mathcal{S}$, et en affectant $\bar{\mathbf{v}}^k = \mathbf{v}_m^k$ à la première itération. Ensuite, l'algorithme fonctionne comme suit [145] : à chaque itération p , pour chaque point de données $\mathbf{v}_i \in \mathcal{S}$, la distance euclidienne au centroïde de chaque cluster est calculée selon (3.53). Un point de données (vecteur) \mathbf{v}_i est affecté à un cluster k si sa distance au cluster est minimale par rapport à tous les clusters :

$$\mathcal{S}^k = \left\{ \mathbf{v}_i \mid \|\mathbf{v}_i - \bar{\mathbf{v}}^k\| \leq \|\mathbf{v}_i - \bar{\mathbf{v}}^m\|, \forall m, m \neq k \right\}. \quad (3.55)$$

Le processus se répète jusqu'à ce qu'un critère soit atteint. Ici, nous choisissons le critère d'arrêt simple :

$$\Delta J = |J^{(p)} - J^{(p-1)}| = 0 \quad (3.56)$$

où $J^{(p)}$ est donné par (3.54) à l'itération p . L'algorithme k-means est résumé dans l'algorithme 2.

Une illustration dans le contexte d'un calcul par éléments finis 3D est présentée dans la figure. 3.2. Dans cet exemple, l'algorithme est appliqué pour classer les points de Gauss dans le maillage en fonction des valeurs des composantes du tenseur de déformation. On considère une plaque perforée soumise à une traction uniaxiale, dont les dimensions, les conditions aux limites et le chargement sont décrits dans la section 3.5.2. Ici, comme on utilise un point de Gauss par élément, les éléments sont associés aux points de Gauss. Après avoir résolu le problème EF, les composantes du tenseur de déformation sont obtenues dans chaque élément sous forme vectorielle comme suit :

Algorithm 2: k-means clustering

Initialiser $\bar{\mathbf{v}}^k = \mathbf{v}_m^k$, où \mathbf{v}_m^k sont des vecteurs aléatoirement choisis dans \mathcal{S} .

Définir le nombre de clusters.

WHILE $\Delta J \neq 0$

Phase d'affectation : Affecte chaque point de données au cluster \mathcal{S}^k en utilisant le critère du centroïde du cluster le plus proche.

$$\mathcal{S}^k = \{ \mathbf{v}_i \mid \|\mathbf{v}_i - \bar{\mathbf{v}}^k\| \leq \|\mathbf{v}_i - \bar{\mathbf{v}}^m\|, \forall m, m \neq k \}.$$

Mise à jour des centroïdes

$$\bar{\mathbf{v}}^k = \frac{1}{N_k} \sum_{i \in \mathcal{S}^k} \mathbf{v}_i^k$$

Test de convergence

$$J^{(p)} = \sum_k \sum_{i \in \mathcal{S}^{k,(p)}} \|\mathbf{v}_i - \bar{\mathbf{v}}^{k,(p)}\|^2$$

$$\Delta J = |J^{(p)} - J^{(p-1)}|$$

FIN

$$\mathbf{v}_i^T = [\varepsilon_{11}, \varepsilon_{22}, \varepsilon_{33}, 2\varepsilon_{13}, 2\varepsilon_{23}, 2\varepsilon_{12}] \quad (3.57)$$

Les figures 3.2a, 3.2b, 3.2c montrent les composantes de déformation ε_{11} , ε_{22} et ε_{33} dans les éléments du maillage macroscopique. Ici, le nombre de clusters choisi est $k = 5$. La figure 3.2d représente les points de données initiaux (5 éléments) sélectionnés pour initialiser les clusters. Les figures 3.2e-3.2l montrent les positions des clusters à différentes itérations. Dans cet exemple, la convergence est atteinte au bout de 25 itérations. Il est à noter que le taux de convergence de l'algorithme dépend du nombre de clusters k et du nombre de vecteurs N dans \mathcal{S} (ici le nombre d'éléments du maillage EF).

3.5 k-means FE²

Nous décrivons ici la méthode k-means FE² proposée dans ce travail de thèse, en vue de réduire les temps de calculs inhérents à la méthode FE² "classique" décrite ci-dessus.

Dans un calcul de type FE², plusieurs VERs peuvent être soumis à des déformations macroscopiques $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$ très proches. L'idée de la méthode que nous proposons est d'identifier des clusters de points d'intégration dans le maillage macroscopique selon l'algorithme k-means décrit dans la section 3.4 et d'associer un seul VER à chaque cluster \mathcal{S}^k (voir la figure 3.3). La déformation macroscopique est définie pour le cluster \mathcal{S}^k par :

$$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^k = \frac{1}{\sum_{i \in \mathcal{S}^k} V^i \omega^i} \sum_{i \in \mathcal{S}^k} \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^i V^i \omega^i \quad (3.58)$$

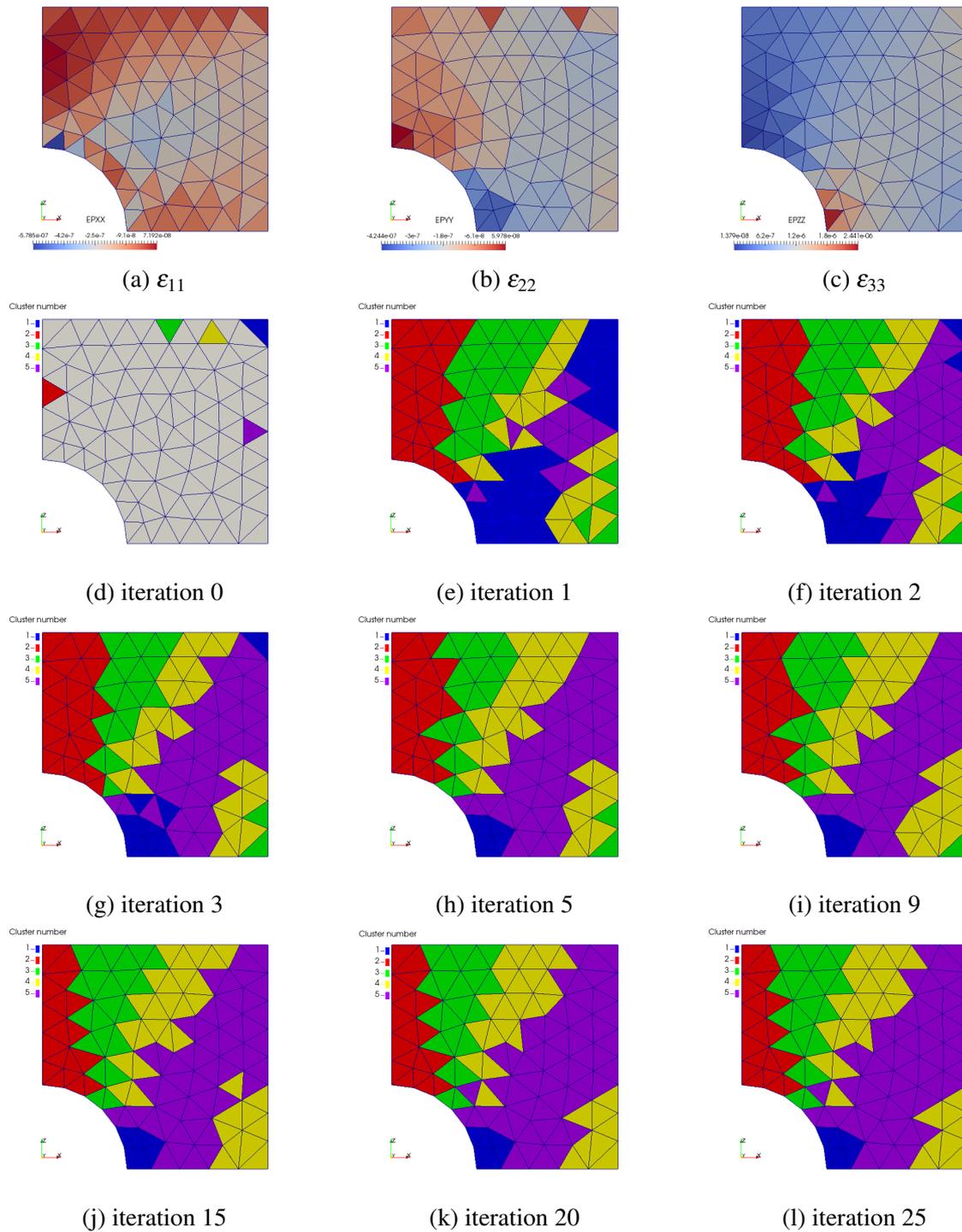
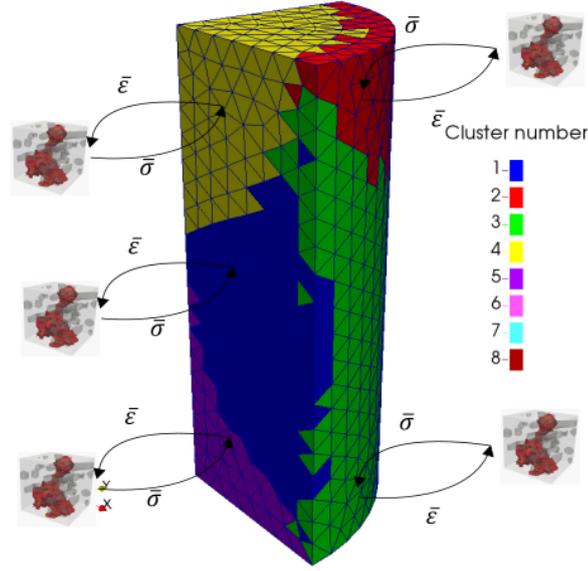


FIGURE 3.2 Application de l'algorithme des k-means clustering pour la classification des éléments dans un calcul par éléments finis linéaire par rapport aux composantes du tenseur de déformation : (a), (b), (c) : composantes du tenseur de déformation ; (d) : initialisation des clusters en choisissant des éléments aléatoires dans la structure ; (e)-(l) : positions des clusters aux itérations 1, 2, 3, 5, 9, 15, 20 et 25 respectivement.

FIGURE 3.3 Principe de la méthode k-means FE²

où $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^i$ est la contrainte macroscopique en un point d'intégration i dans le cluster \mathcal{S}^k , V^i est le volume de l'élément contenant le point d'intégration i , et ω^i est son poids de Gauss associé. Ensuite, après avoir résolu le problème de VER, la contrainte macroscopique correspondante $\bar{\boldsymbol{\sigma}}^k$ est affectée à tous les points d'intégration dans \mathcal{S}^k . L'algorithme k-means décrit dans la section 3.4 a un coût négligeable par rapport aux calculs de VER.

Le nouveau nombre de problèmes de VER non linéaires à résoudre dans la méthode k-means FE² peut alors être évalué comme suit :

$$N_{tot} \simeq (1 + \beta) \times N_{clust} \times N_{iter} \times N_{evol}, \quad (3.59)$$

où N_{clust} est le nombre moyen de clusters tout au long de la simulation. Si $N_{clust} \ll N_{int} \times N_e$, des réductions drastiques du temps de calcul peuvent être obtenues, et l'erreur peut être contrôlée en augmentant progressivement le nombre de clusters à l'échelle macroscopique.

3.5.1 Mise à jour des clusters dans les modèles avec des variables internes

À chaque pas de chargement, l'algorithme k-means est utilisé pour identifier les K clusters de points de Gauss macroscopiques dans le maillage macroscopique. Il faut noter qu'entre deux itérations du schéma macroscopique de Newton, la position et la taille des clusters peut

évoluer. Dans le cas d'un comportement non linéaire avec des variables internes à l'échelle micro, des précautions doivent être prises. L'approche la plus générale serait d'inclure l'état de la variable interne $\boldsymbol{\alpha}$ dans l'analyse de clustering. Cependant, $\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{x})$ est un champ défini en tout point $\mathbf{x} \in \Omega$ du VER et sa description impliquerait un vecteur de très grande dimension. En raison de ce problème, nous choisissons de ne pas inclure l'état de la variable interne $\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{x})$ dans l'analyse de clustering, mais d'affecter les points de Gauss (VERs) qui n'appartiennent pas au même cluster d'une étape de chargement à l'autre à un nouveau sous-cluster. Ensuite, à une nouvelle itération de Newton à l'échelle macroscopique, tous les VERs appartenant à un cluster sont associés une déformation macroscopique proche $\bar{\boldsymbol{\epsilon}}$ et une distribution de variables internes différente. Dans ce qui suit, nous définissons les clusters comme les ensembles de VERs regroupés en fonction de leurs valeurs de déformation macroscopique, telles que définies dans la section 3.4, et les sous-clusters comme ceux regroupés en fonction de la déformation $\bar{\boldsymbol{\epsilon}}$ et des états des variables internes $\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{x})$. Ainsi, le nombre réel de calculs de VER à effectuer est associé au nombre de sous-clusters.

Pour résumer :

- Les clusters définissent des régions du maillage macroscopique avec des états de déformation proches.
- Les sous-clusters sont des régions du maillage macroscopique avec des états de déformation $\bar{\boldsymbol{\epsilon}}$ similaires et un historique des variables internes. Chaque sous-cluster est associé à un calcul VER.
- Le nombre de K clusters est défini par l'utilisateur et ne change pas au fil des itérations. À chaque itération, l'intersection entre les ensembles de clusters précédents et actuels définit les nouveaux sous-clusters, dont le nombre peut augmenter au cours de la simulation.

La figure 3.4 montre un exemple illustratif de l'évolution des clusters et du nombre de VERs dans une structure macroscopique schématique, où chaque carré représente un point de Gauss. La figure 3.4(a) montre la position de 3 clusters initiaux (rouge, bleu et vert) qui contiennent chacun un sous-cluster à la j -ième itération. Les figures 3.4(b)(c)(d) montrent une évolution des 3 clusters à une nouvelle $j + 1$, $j + 2$, $j + 3$ -ième itération respectivement. Le nombre de sous-clusters dans la structure macroscopique a évolué, de sorte qu'à la $j + 1$ -ième itération, le cluster 1 contient 3 sous-clusters (3 VERs) avec des distributions de variables internes différentes, et le cluster 3 contient deux sous-clusters (2 VERs) avec des distributions de variables internes différentes. A la fin de la $j + 3$ -ième itération, le nombre total de sous-clusters (VERs) est mis à jour à 13. Cette procédure de mise à jour du nombre

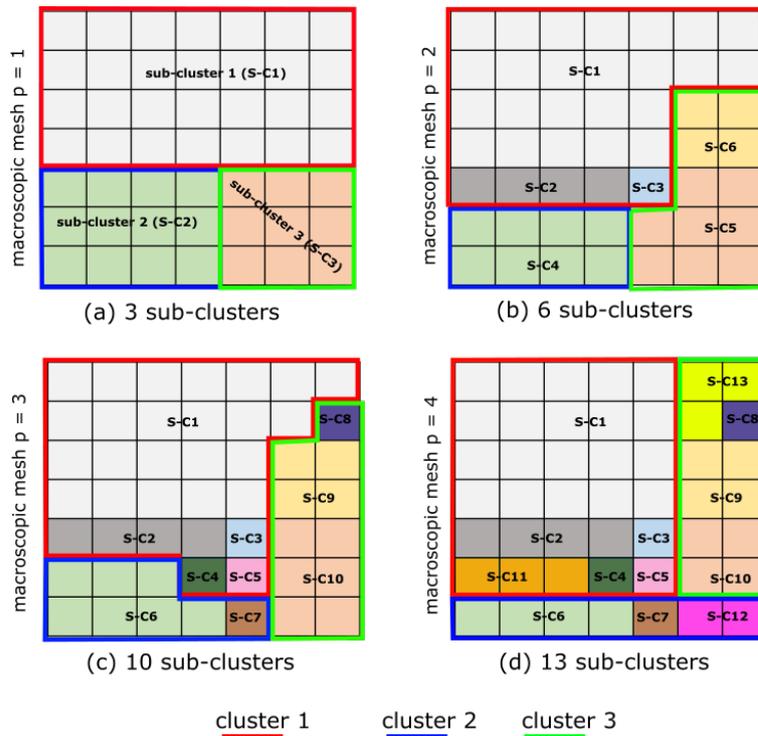


FIGURE 3.4 Évolution des clusters et du nombre de VER dans la structure macroscopique (exemple illustratif), chaque sous-cluster représente un problème de VER non linéaire.

de VERs est intégrée dans la méthode k-means FE². Cette approche présente l'inconvénient de diviser les clusters en plus petits clusters à chaque changement de distribution des clusters. Cependant, nous montrerons dans les applications numériques que ce nombre reste toujours très inférieur au nombre N_{int} . Il est important de noter que la présente approche ne dépend pas du nombre ou du type de variables internes dans le VER. Comme la génération de nouveaux sous-clusters est purement algorithmique (intersections des clusters actuels et précédents), aucune analyse mécanique a priori n'est nécessaire.

La procédure k-means FE² a été implémentée dans le code d'éléments finis Cast3m (www-cast3m.cea.fr). Un résumé de la procédure FE² k-means est présenté dans l'algorithme 3. Il est à noter que pour les comportements non linéaires sans variables internes, le nombre de sous-clusters reste identique à celui des clusters et des gains de temps de calcul encore plus importants peuvent être obtenus. L'approche ci-dessus peut être combinée avec le calcul parallèle pour effectuer toutes les simulations VER associées aux sous-clusters sur différents processeurs. Par ailleurs, si des réductions de modèles ou des méthodes de modèles de substitution sont disponibles pour remplacer les calculs de VER non linéaires, elles peuvent être combinées avec cette méthode.

Algorithm 3: k-means FE²

For $n = 1 : N$ (Boucle sur les pas de chargement)
 $n = n + 1$
 Initialiser : $\mathbf{U}_0^{n+1} = \mathbf{U}^n$
While $E_{rr} > TOL$ (Boucle de Newton macro).
 $j = j + 1$
 Input : $\overline{\boldsymbol{\varepsilon}}^e(\mathbf{U}_j^{n+1}) \quad e = 1, 2, \dots, N_e$.
 Définir les clusters $S^k \quad k = 1, 2, \dots, k$ en utilisant l'Algorithm 2.
 Définir les sous-clusters $Sb_s^k \quad s = 1$ au premier pas de temps, voir la section 3.5.1.
 Calculer $\overline{\boldsymbol{\varepsilon}}^k$ selon 3.58 .
For $k = 1 : K$ (Boucle sur tous les clusters) .
 Input $\overline{\boldsymbol{\varepsilon}}^k$
For $s = 1 : S$ (Boucle sur tous les sous-clusters dans S^k)
 Résoudre le problème non-linéaire(3.35, 3.38).
 Output : $\overline{\boldsymbol{\sigma}}^k, \overline{\mathbf{C}}_{tan}$.
 $\overline{\boldsymbol{\sigma}}^e(\mathbf{U}_j^{n+1}) = \overline{\boldsymbol{\sigma}}^k, \quad \forall e \in Sb_s^k$.
 $\overline{\mathbf{C}}_{tan}^e(\mathbf{U}_j^{n+1}) = \overline{\mathbf{C}}_{tan}^k, \quad \forall e \in Sb_s^k$.
 Calculer $(\overline{\mathbf{K}}_{tan}^e)_{j+1}^{n+1}, (\overline{\mathbf{R}}^e)_{j+1}^{n+1}$.
 Assembler $(\overline{\mathbf{K}}_{tan}^e)_{j+1}^{n+1}$ in $(\overline{\mathbf{K}}_{tan})_{j+1}^{n+1}$.
 Assembler $(\overline{\mathbf{R}}^e)_{j+1}^{n+1}$ in $(\overline{\mathbf{R}})_{j+1}^{n+1}$.
End.
End.
 Résoudre $(\overline{\mathbf{K}}_{tan})_{j+1}^{n+1} \Delta \mathbf{U} = -(\overline{\mathbf{R}})_{j+1}^{n+1}$.
 $\overline{\mathbf{U}}_{j+1}^{n+1} = \overline{\mathbf{U}}_j^{n+1} + \Delta \mathbf{U}$.
 $\mathbf{E}_{rr} = \|\overline{\mathbf{R}}_{j+1}^{n+1}\|$.
 $\overline{\mathbf{U}}_j^{n+1} = \overline{\mathbf{U}}_{j+1}^{n+1}$.
End.
 $\mathbf{U}^n = \overline{\mathbf{U}}_j^{n+1}$.
End.

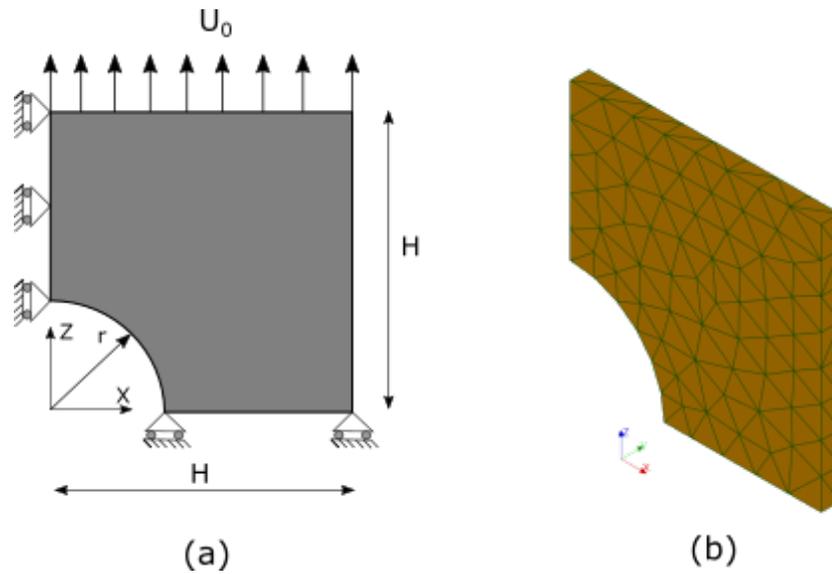


FIGURE 3.5 Macro-structure d'une plaque perforée : (a) : géométrie et conditions aux limites ; (b) maillage macroscopique.

3.5.2 Exemples numériques

Dans cette section, nous présentons plusieurs exemples numériques afin de montrer l'intérêt de la méthode k-means FE² pour les calculs non linéaires multi-échelles. La solution du modèle proposé sera analysée par rapport à : (i) la convergence vis-à-vis du nombre de clusters macroscopiques, (ii) la validation par rapport la solution de référence FE², (iii) la faible dépendance du nombre de clusters par rapport au maillage macroscopique, et (iv) le potentiel de la méthode pour les comportements non linéaires arbitraires microscopiques avec des variables internes telles que l'endommagement.

3.5.2.1 Exemple 1 : Plaque trouée en traction uniaxiale

L'objectif de ce premier exemple est de montrer la précision de la méthode et sa convergence par rapport au nombre de clusters. Nous considérons une plaque de dimension $80 \times 80 \times 3 \text{ mm}^3$ avec un trou de rayon $r = 15 \text{ mm}$ au centre. En raison de la symétrie, seul un quart de la structure est considéré. La géométrie et les conditions aux limites sont représentées dans la figure 3.5 (a). Le maillage est composé de 401 éléments tétraédriques linéaires (voir la figure 3.5 (b)). Sur l'extrémité supérieure de l'échantillon, un déplacement selon la direction \vec{z} est imposé, tandis que les degrés de liberté dans les autres directions sont bloqués.

Dans cet exemple, le VER est composé d'agrégats incorporés dans une matrice cimentaire. Une illustration des agrégats (inclusions) est représentée dans la figure 3.6(a). Le maillage

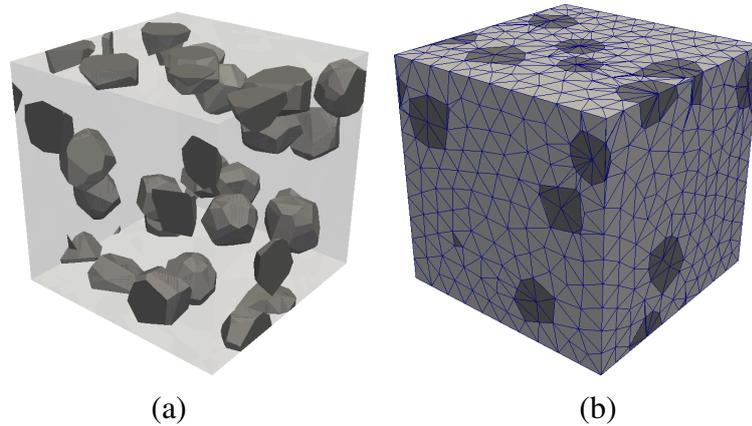


FIGURE 3.6 (a) VER d'une microstructure de mortier. Les inclusions de sable sont représentées en gris foncé ; (b) maillage du VER.

est généré à l'aide du script python Combs [49] fonctionnant dans le code de CAO Salome [3], voir par exemple [37, 24] et ses références. Le maillage contient un total de 28042 éléments tétraédriques. La fraction volumique d'inclusions est de $f = 10\%$. Les inclusions sont supposées être élastiques linéaires avec les propriétés suivantes : $E^i = 80\text{GPa}$, $\nu^i = 0,19$, désignant respectivement le module d'Young et le coefficient de Poisson. La matrice est supposée être quasi fragile et isotrope et décrite par le modèle d'endommagement de champ de phase présenté dans la section 3.2, avec $E^m = 20\text{ GPa}$, $\nu^m = 0,2$ et $g_c^m = 0,12\text{ N/mm}$ désignant respectivement le module d'Young, le coefficient de Poisson et l'énergie de fissuration de la matrice. Le paramètre de régularisation choisi est $\ell = 2,8 \times 10^{-2}\text{mm}$.

La méthode k-means FE² est appliquée pour différents nombres de clusters et sa convergence est vérifiée par rapport à la contrainte maximale de von Mises dans le maillage macroscopique en fonction du nombre de clusters dans la figure 3.7. Nous pouvons noter que 8 clusters sont ici suffisants pour atteindre la convergence par rapport au critère choisi, et que cette solution convergée est proche de la solution FE² de référence. Dans la figure 3.8, nous montrons la courbe force-déplacement de la structure macro en fonction du nombre de clusters, illustrant encore une fois la convergence vers la solution de référence lorsque le nombre de clusters augmente.

La figure 3.9 montre l'évolution des clusters au cours de la simulation, respectivement au premier pas de chargement et au pas de chargement final. Il est intéressant de noter que, comme indiqué dans la section 3.5.1, la position des clusters évolue au cours de la simulation avec le champ de déformation macroscopique.

Nous montrons la convergence de la contrainte macroscopique locale par rapport au nombre de clusters à l'étape de chargement finale dans la figure 3.10, en représentant les

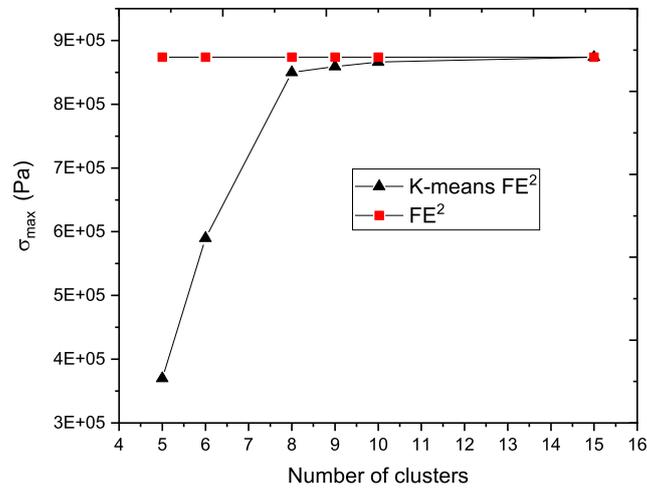


FIGURE 3.7 Plaque perforée : convergence de la solution k-means FE² suivant le critère de contrainte maximale de von Mises dans la structure par rapport au nombre de clusters.

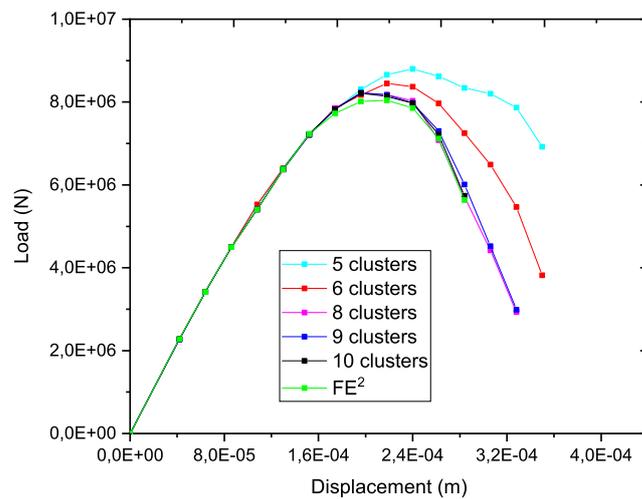


FIGURE 3.8 Plaque perforée : convergence de la courbe force-déplacement en fonction du nombre de clusters k et de la solution de référence FE².

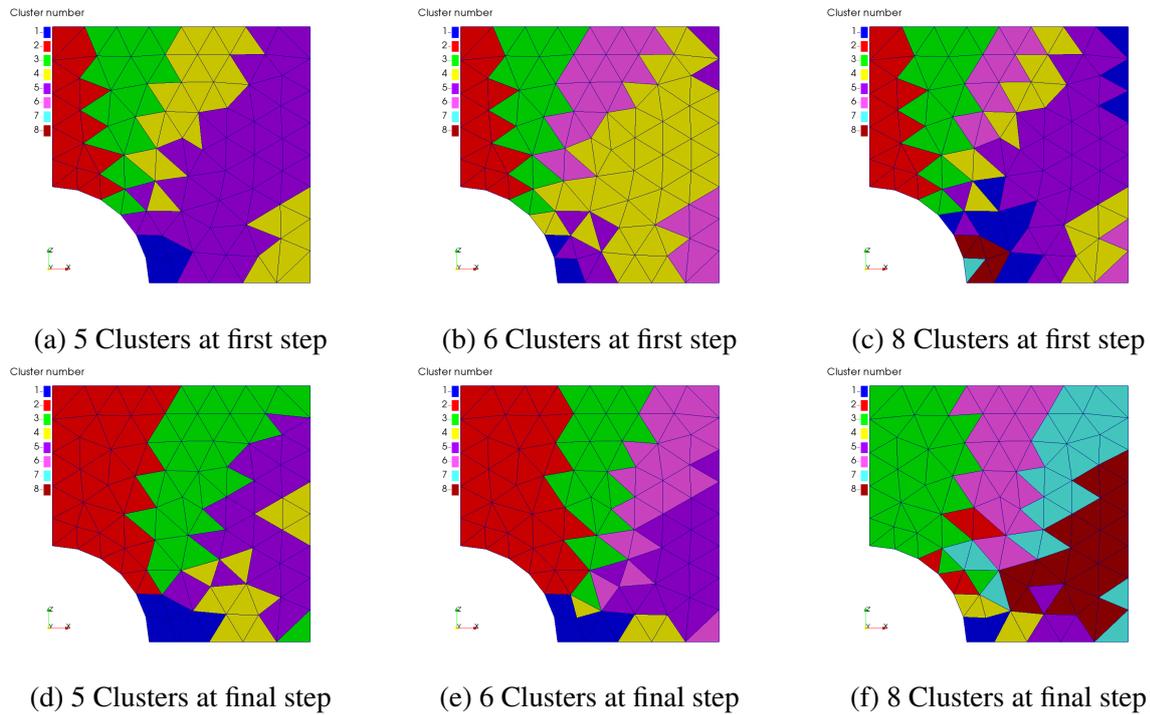


FIGURE 3.9 Position des clusters au premier pas de chargement (a) (b) (c), et au dernier pas de chargement (d) (e) (f) dans la structure macroscopique pour $k = 5, 6, 8$.

champs de contrainte de von Mises dans la structure pour $k = 5, 6, 8$ et en les comparant avec la solution FE^2 de référence. Enfin, nous indiquons dans le tableau 3.1 le nombre total de problèmes de VERs non linéaires à résoudre en utilisant la méthode k-means FE^2 pour différents nombres de clusters, ainsi que les temps de calcul correspondants, et nous les comparons à la méthode FE^2 complète. Nous pouvons noter une réduction drastique des temps de calcul, avec un ratio d'environ 15 pour 8 clusters, ce qui correspond à la solution convergée de la figure 3.8.

k	Nombre total de problèmes de VERs calculés	Temps de calcul final (heures)
5	234	3.85 h
6	291	4.87 h
8	481	8.02 h
9	540	9.01 h
10	611	10 h
FE^2	7426	123 h

TABLEAU 3.1 Nombre total de problèmes de VERs non linéaires et temps de calcul en fonction du nombre de clusters pour les solutions k-means FE^2 et FE^2 .

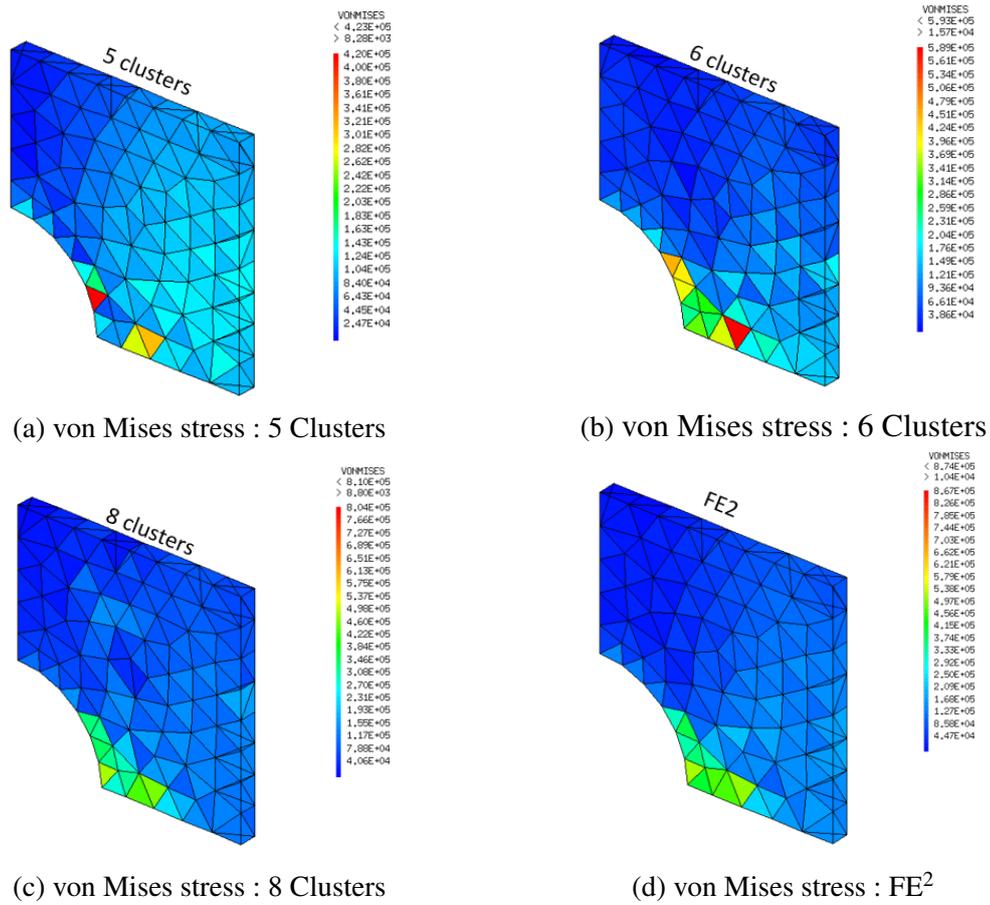


FIGURE 3.10 Contrainte de von Mises dans la structure macroscopique pour le nombre de clusters $k = 5, 6, 8$; solutions k-means FE^2 (a), (b) et (c), et solution de référence FE^2 (d).

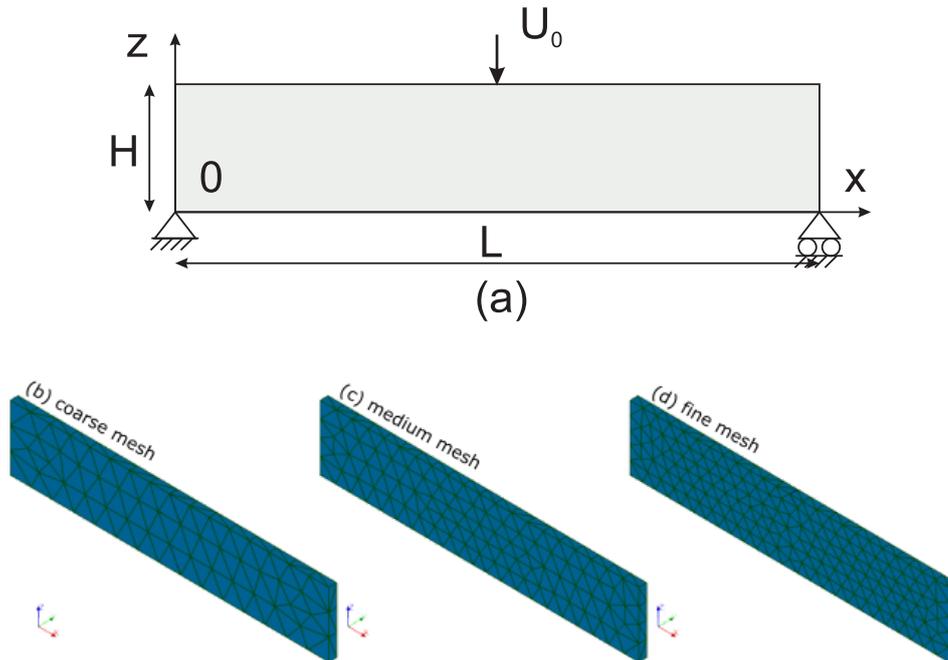


FIGURE 3.11 Poutre en flexion 3 points (a) géométrie et conditions aux limites ; (b) maillage grossier ; (c) maillage moyen ; (d) maillage fin.

3.5.2.2 Exemple 2 : Poutre en flexion 3 points

Dans cet exemple, nous montrons une caractéristique supplémentaire de la méthode : la faible dépendance du nombre de clusters nécessaire à la convergence par rapport à la taille de la maille macroscopique. Pour cela, nous considérons une poutre homogène de dimensions $200 \times 40 \times 2 \text{ mm}^3$ en flexion 3 points, comme représenté dans la figure 3.11(a). En ($x = 200$) mm, tous les degrés de liberté sont bloqués, alors que en ($x = 0$) mm les déplacements z et y sont bloqués. Un déplacement dans la direction z – est imposé au milieu de la poutre. Pour tester l’influence de la densité du maillage macroscopique sur le nombre de clusters obtenus, 3 maillages macroscopiques ont été testés, comprenant respectivement 262, 431 et 786 éléments tétraédriques (voir la figure 3.11). Les dimensions du VER sont de $1 \times 1 \times 1 \text{ mm}^3$. Une inclusion est centrée dans le VER cubique et a un rayon $r = 0,14 \text{ mm}$. Les propriétés mécaniques de l’inclusion et de la matrice sont les mêmes que dans l’exemple précédent.

La méthode k-means FE² est appliquée pour les différents maillages et pour différents nombres de clusters. La convergence des solutions par rapport au nombre de clusters pour différents maillages macroscopiques est présentée dans la figure 3.12, où la contrainte

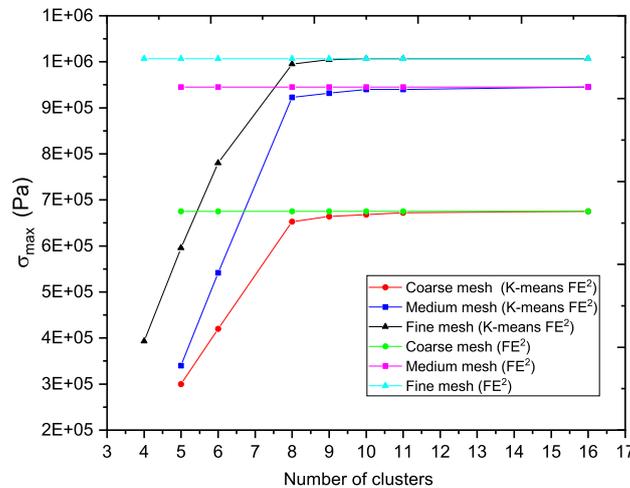


FIGURE 3.12 Convergence par rapport à la contrainte maximale de von Mises des solutions k-means FE^2 en fonction du nombre de clusters pour différents maillages macroscopique.

maximale de von Mises est représentée à l'étape finale de chargement de la simulation. Pour les maillages 1, 2 et 3, nous avons vérifié que les solutions k-means FE^2 convergées sont en bon accord avec la solution FE^2 de référence. Une autre observation est que le nombre total de clusters nécessaires pour converger vers la solution de référence n'augmente pas de manière significative avec la taille du maillage macro. Ceci constitue un autre avantage important de la présente méthode, même si cela dépend évidemment de la régularité du champ de déformation macroscopique. Par ailleurs, il convient de souligner que dans les applications du k-means FE^2 impliquant un endommagement local, une régularisation numérique doit être incluse à l'échelle macroscopique pour garantir la convergence par rapport au maillage macro. Pour des raisons de simplicité, nous n'avons pas mis en œuvre un tel processus ici. Des extensions avec des techniques telles que le modèle d'endommagement non local [317], et modèle à gradient d'endommagement [241], pourraient être envisagées dans de futures études. Comme il n'y a pas de régularisation macro ici, les 3 différents maillages étudiés ci-dessus sont vus comme 3 cas séparés et nous n'avons pas l'intention de montrer une convergence par rapport au maillage macro dans cet exemple.

Les figures 3.13(a), (b) et (c) montrent la courbe force-déplacement de la poutre en flexion 3 points pour les 3 maillages et les différents nombres de clusters, et la figure 3.13(d) montre la courbe force-déplacement des 3 structures à la convergence ($k=8$). D'après ces résultats, la convergence du modèle est atteinte pour 8 clusters pour les 3 maillages.

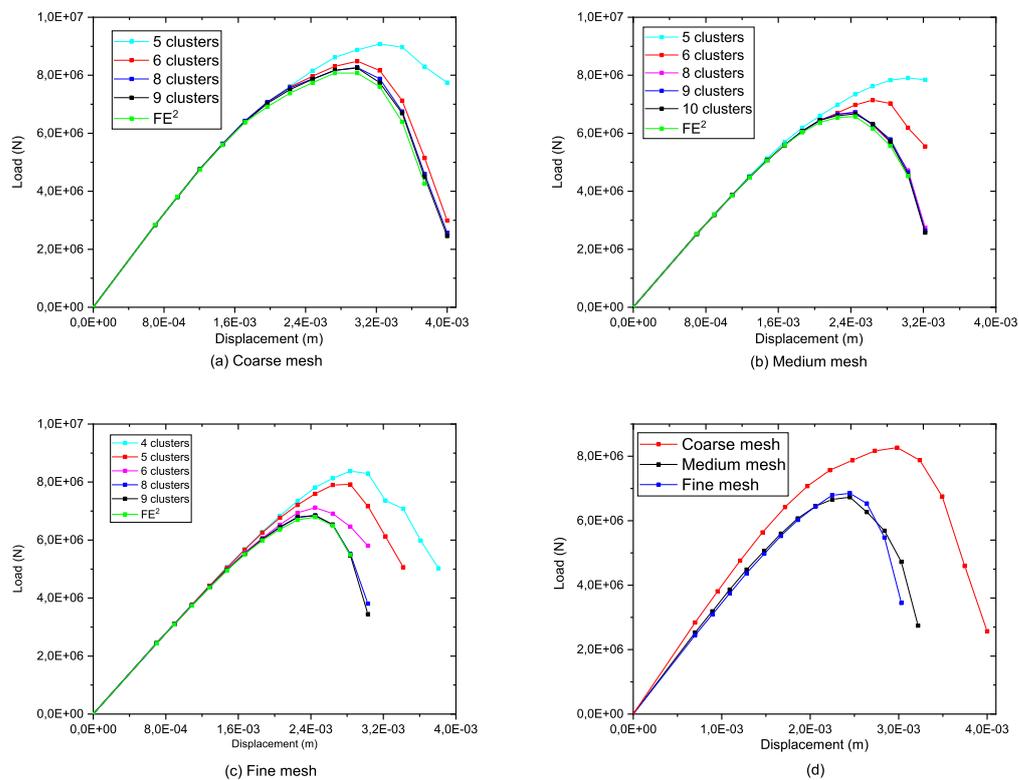


FIGURE 3.13 Courbes force-déplacement des 3 maillages avec différents nombres de clusters et la solution de référence FE^2 (a)-(c); (d) Comparaison des courbes pour les trois maillages à la convergence par rapport au nombre de clusters.

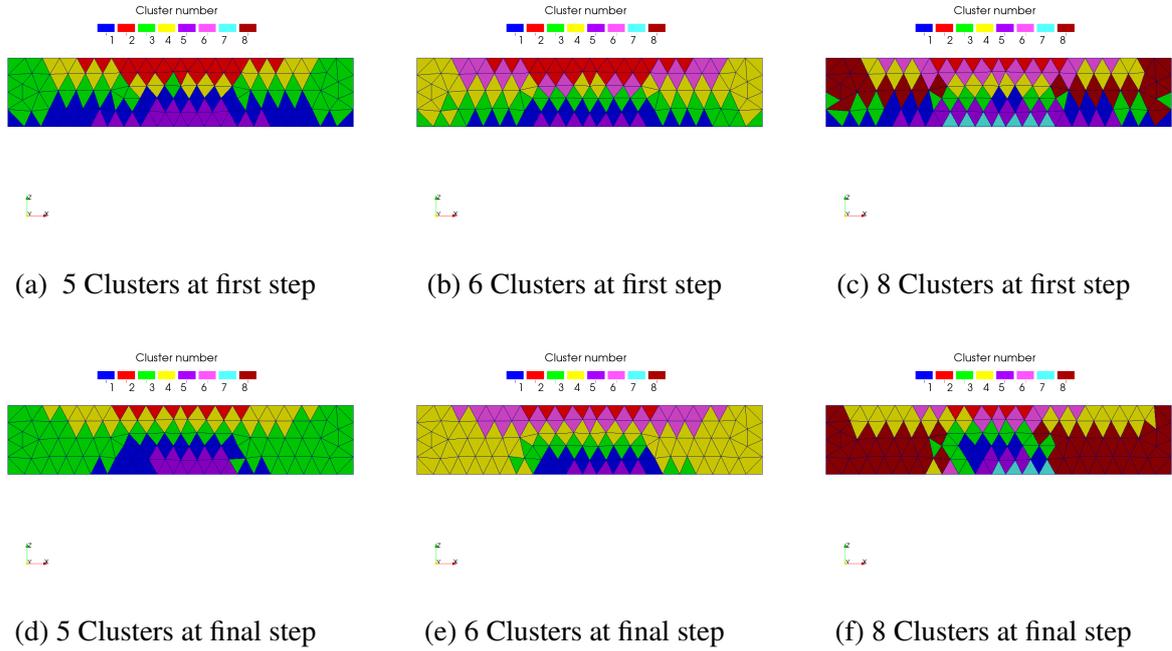


FIGURE 3.14 Position des clusters au premier pas de chargement (a) (b) (c), et au dernier pas de chargement (d) (e) (f) dans la structure macroscopique (maillage moyen) pour $k = 5, 6, 8$.

Dans la figure 3.14, nous illustrons l'évolution des clusters pour la densité du maillage moyenne lorsque 5, 6 et 8 clusters sont considérés, et pour les étapes de chargement initiale et finale. Comme mentionné dans la section 3.5.1, la position des clusters a changé dans la structure macroscopique entre l'étape initiale et finale, par conséquent le nombre de problèmes de VER non linéaires a évolué.

Dans la figure 3.15, nous comparons les champs d'endommagement macroscopiques sur le maillage fin pour différents nombres de clusters et la solution de référence FE². Afin de mieux visualiser la fissure, un pseudo champ d'endommagement macroscopiques D est défini comme $D = 1 - \sqrt{\frac{\bar{C}_{1111}(t)}{C_{1111}^0}}$, où t désigne le pseudo temps (évolution du chargement). Nous pouvons voir une fissure s'initier au milieu de la poutre et se propager du bas vers le haut. La forme de la zone endommagée dépend du nombre de clusters K , et converge vers la solution de référence (FE²) lorsque $K = 9$.

Enfin, nous comparons les temps de calcul dans le tableau 3.2, en fonction du nombre de calculs de VERs et du temps total. Les résultats montrent que le nombre de VERs et donc les temps de calcul sont directement impactés par la densité de maillage en FE², alors qu'elle affecte de manière mineure les temps de calcul pour la méthode k-means FE². Les résultats montrent qu'en gardant 8 clusters (correspondant à une solution convergée), un ratio

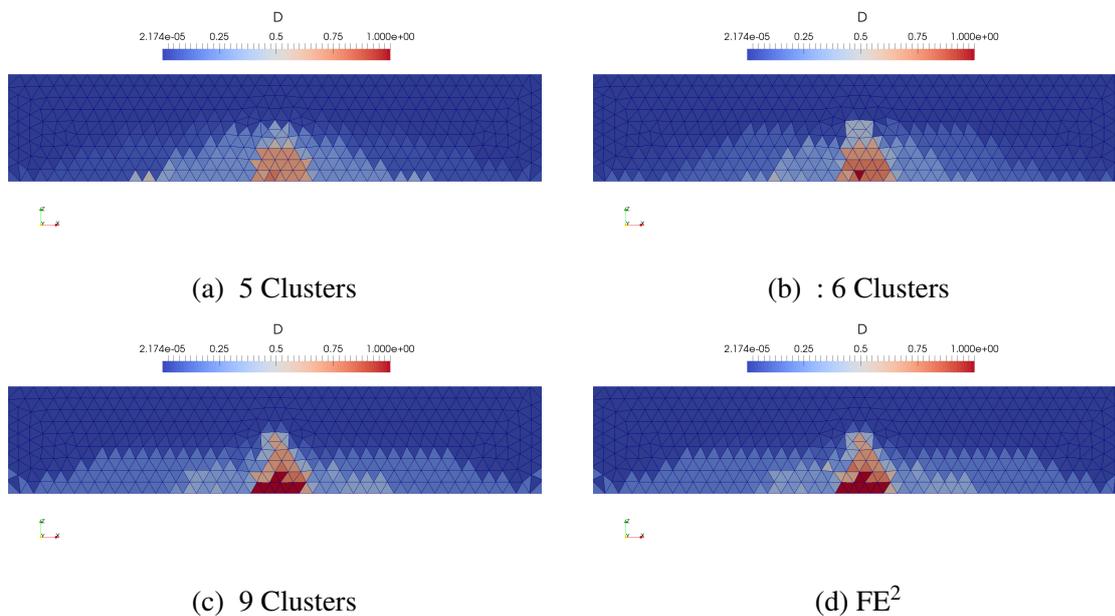


FIGURE 3.15 Endommagement macroscopique $D = 1 - \sqrt{\bar{C}_{1111}/\bar{C}_{1111}^0}$ pour (a) $K = 5$; (b) $K = 6$, et (c) $K = 9$ clusters; (d) solution de référence FE^2 .

d'accélération de presque 30 peut être atteint avec une précision similaire à celle du calcul FE^2 direct. Ainsi, la présente technique permet de résoudre des problèmes avec des maillages qui sont trop coûteux avec la méthode FE^2 directe. Dans le présent travail, nous avons choisi l'endommagement comme comportement non linéaire local, mais tout autre comportement local arbitraire peut être considéré, comme l'élastoplasticité ou la viscoplasticité.

Comme dernière remarque, si aucune solution de référence FE^2 n'est disponible, les faibles coûts de calcul de la méthode k-means FE^2 permettent de l'utiliser pour vérifier la convergence par rapport au nombre de clusters. Dans ce cas, le coût total de calcul doit être calculé comme la somme des temps liés à plusieurs analyses k-means successives, avec un nombre croissant de clusters k . Par exemple, dans le cas présent, en considérant les 3 cas successifs $k = 5$, $k = 6$, $k = 8$, les gains sont encore de 5.4, 7.1 et 10.8 pour les maillages 1, 2 et 3, respectivement, soit encore un ordre de grandeur par rapport à un calcul FE^2 direct.

Nombre de clusters	Maillage grossier		Maillage moyen		Maillage fin	
	Nombre total de problèmes VER calculés	Temps de calcul final (heures)	Nombre total de problèmes VER calculés	Temps de calcul final (heures)	Nombre total de problèmes VER calculés	Temps de calcul final (heures)
5	100	2.6 h	144	3.4 h	168	3.8 h
6	142	3.67 h	183	4 h	250	5.16 h
8	218	4.02 h	279	5.65 h	343	6.71 h
9	254	5 h	340	6.6 h	438	8 h
FE ²	3406	56 h	5603	93.38 h	9954	215 h

TABLEAU 3.2 Comparaison des coûts de calcul pour les méthodes k-means FE² et FE².

3.6 Conclusion

Dans ce travail, nous avons présenté une nouvelle méthode numérique multi-échelle appelée k-means FE² pour résoudre des problèmes multi-échelle non linéaires avec des variables internes et des comportements dépendant de l’histoire du chargement. Contrairement aux méthodes d’optimisation de calculs multi-échelles où un modèle de substitution est construit pour décrire le comportement effectif non linéaire à l’échelle microscopique, nous réduisons ici le problème à l’échelle macroscopique en construisant des clusters de points de Gauss dans la structure qui sont supposés être dans un état mécanique proche. Une technique de clustering de type k-means est utilisée pour regrouper les points de Gauss en fonction de leur état de déformation et des ensembles de variables internes. Ensuite, pour tous les points de Gauss d’un cluster, un seul problème micro non linéaire est résolu, et son comportement en terme de propriétés mécaniques effectives est transféré à tous les points du cluster. L’opération est répétée jusqu’à ce que la convergence soit atteinte à la fois aux échelles macro et micro. La méthode présente plusieurs caractéristiques avantageuses. Premièrement, sa solution est convergente par rapport au nombre de clusters. Ceci est attendu puisque dans la limite d’un cluster pour un seul élément du maillage macro, nous retrouvons la solution directe FE². Nous avons montré dans les différents exemples numériques que même pour un faible nombre de clusters, une solution très précise peut être obtenue par rapport à la solution FE² complète prise comme référence. De plus, nous avons montré que le nombre total de clusters, qui est directement lié au temps de calcul, ne dépend que faiblement du raffinement du maillage dans la structure macro. En fait, il ne dépend que de la régularité des champs

au niveau macro. Nous avons obtenu des accélérations de temps de calcul par rapport à la solution FE² jusqu'à un facteur 50 dans des applications typiques impliquant une fissuration locale dans un élément de volume représentatif. Il convient de noter que des comportements non linéaires arbitraires peuvent être considérés au niveau micro, y compris avec variables internes et comportements dépendant de l'histoire de chargement. En revanche, dans les méthodes de substitution, le traitement des comportements locaux dépendant de l'histoire du chargement est délicat. Enfin, la convergence de la méthode par rapport au nombre de clusters permet de déterminer le nombre nécessaire de clusters sans aucune connaissance de la solution finale en augmentant progressivement le nombre de clusters et en vérifiant la convergence.

Nous avons finalement montré ici que cette méthode permet de résoudre des problèmes non linéaires hétérogènes de taille industrielle qui ne seraient pas accessibles par les techniques disponibles, de par la réduction drastique des temps de calcul. Nous appliquerons cette technique dans le chapitre suivant pour étudier la dégradation d'un colis de déchets cimentés susceptible de se fissurer du fait de l'expansion d'inclusions métalliques.

Chapitre 4

Modélisation de la fissuration de la matrice due à la corrosion d'inclusions métalliques par la méthode de champ de phase

4.1 Introduction

La fissuration de la matrice cimentaire induite par la corrosion des phases métalliques influence fortement la durabilité et la tenue des colis cimentés. La réaction de corrosion est déclenchée au très jeune âge ainsi que tout au long de la vie du colis lorsque l'eau libre présente dans les pores du ciment entre en contact avec les phases métalliques. Les produits de corrosion expansifs s'accumulent autour de l'inclusion corrodée, génèrent une pression sur la matrice cimentaire environnante et provoquent l'apparition et la propagation de fissures. Ce phénomène constitue la principale conséquence de la corrosion de déchets métalliques dans les colis cimentés.

De nombreux travaux de recherche ont été consacrés à l'étude de la fissuration du béton causée par la corrosion de phases métalliques, généralement des armatures en acier, en utilisant des méthodes expérimentales, analytiques et numériques, voir la section 2.5. Le comportement mécanique des matrices d'enrobage, comme par exemple les propriétés mécaniques macroscopiques et le modèle de fissuration, est fortement lié à la microstructure [98]. Plusieurs travaux de recherche ont considéré la présence d'hétérogénéités dans les modèles de fissuration [99, 97, 68, 345].

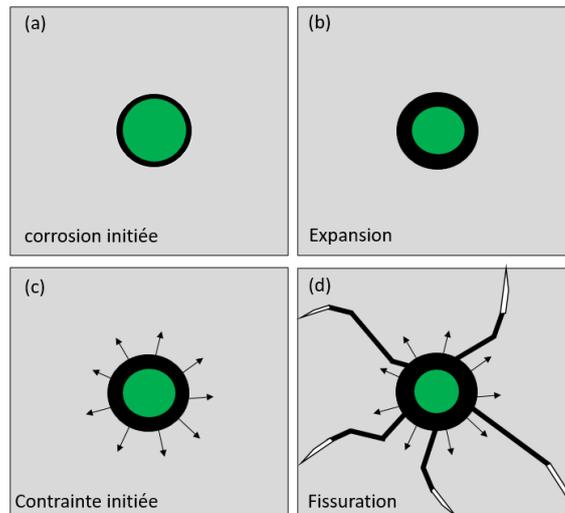


FIGURE 4.1 Schéma de corrosion d'uranium dans la matrice d'enrobage

Dans cette étude, le modèle d'endommagement par champ de phase est utilisé à échelle microscopique pour étudier les effets de l'expansion due à la formation des produits de corrosion, sur la fissuration des volumes élémentaires représentatifs. L'objectif de cette étude est donc d'explorer le mécanisme de fissuration de la matrice cimentaire à l'échelle de la microstructure. Plusieurs effets sont considérés : (a) la taille du VER, (b) les conditions aux limites, (c) la fraction volumiques des hétérogénéités, et (d) le maillage. Dans les simulations présentées, le VER est supposé être un composite triphasé composé de graphite, d'une matrice cimentaire et d'uranium métallique.

4.2 Expansion due à la corrosion des phases métalliques : hypothèses

Une représentation schématique du processus de fissuration de la matrice cimentaire due à la corrosion des inclusions métalliques est présentée dans la figure 4.1. Une fois que la solution porale entre en contact avec l'inclusion d'uranium, la corrosion est initiée, voir la figure 4.1(a). Au fur et à mesure que la corrosion progresse, les produits de corrosion s'accumulent à l'interface matrice/uranium et génèrent une pression expansive sur le matériau environnant, comme le montre la figure 4.1(c). La pression résultant de l'expansion induit généralement des contraintes de traction dans la matrice cimentaire environnante. Ces contraintes de traction augmentent avec l'avancement de la réaction de corrosion, et peuvent provoquer une fissuration de la matrice, comme le montre la figure 4.1(d) [370]. Par conséquent, pour étudier le comportement de fissuration de la matrice d'enrobage dû

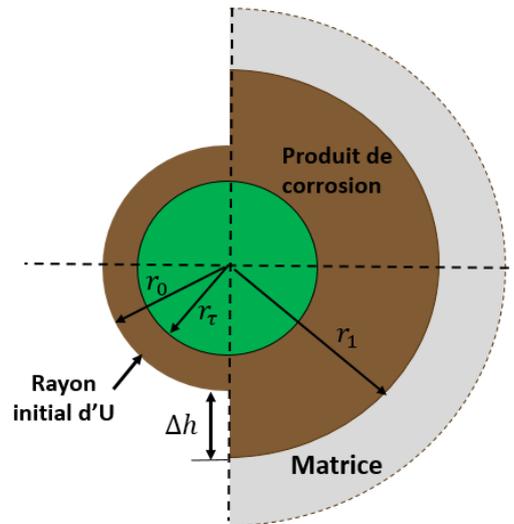


FIGURE 4.2 Processus de déformation dû à l'expansion induite par la corrosion d'uranium

à l'expansion induite par la corrosion, il convient d'analyser la relation quantitative entre le taux de corrosion d'une inclusion d'uranium métal et l'expansion interne générée par la corrosion.

La déformation du matériau environnant due à l'expansion de l'inclusion métallique induite par la corrosion peut être décrite comme présenté dans la figure 4.2, où r_0 est le rayon initial de l'inclusion ; r_τ est le rayon résiduel de l'inclusion après corrosion ; r_1 est le rayon des produits de corrosion ; Δh est l'épaisseur de la couche de produit de corrosion.

En général, la fissuration de la matrice d'enrobage due à la corrosion est affectée par de nombreux facteurs et il s'agit d'un processus à caractère aléatoire. Dans notre étude, les trois hypothèses suivantes ont été retenues pour simplifier le comportement mécanique, notamment : (1) la corrosion de l'inclusion d'uranium est supposée uniforme dans l'espace et l'épaisseur des produits de corrosion autour de l'inclusion est identique en raison des faibles fractions volumiques et de la forte séparation d'échelle entre les phases expansives et le colis, (2) les contraintes et les déformations générées dans la matrice cimentaire environnante sont induites uniquement par la corrosion de l'inclusion métallique, et (3) l'expansion radiale due à la corrosion est générée immédiatement lorsque l'inclusion métallique commence à se corroder, sans tenir compte de la pénétration des produits de corrosion dans les pores capillaires existant dans l'interface matrice-uranium.

Le taux de corrosion τ peut être défini comme le taux de perte de masse de la section d'inclusion métallique, c'est-à-dire :

$$\tau = \frac{M_c}{M_i} = 1 - \left(\frac{r_\tau}{r_0} \right)^2 \quad (4.1)$$

dans laquelle M_c signifie la masse d'uranium corrodé et M_i désigne sa masse initiale. À partir de l'équation (4.1), la relation quantitative entre r_τ , r_1 et le taux de corrosion τ peut être facilement déduite sous la forme suivante

$$r_\tau = r_0 \sqrt{1 - \tau} \quad (4.2)$$

$$r_1 = r_0 \sqrt{1 + (n - 1)\tau} \quad (4.3)$$

où n signifie le rapport entre le volume des produits de corrosion expansifs et le volume d'uranium consommé dans le processus de corrosion, c'est-à-dire le rapport d'expansion volumique des produits de corrosion. La réaction de corrosion entraîne la transformation d'uranium métallique en produits de corrosion, voir les réactions (1.1) et (1.2), en raison du processus d'oxydation, ce qui entraîne une augmentation de volume qui, selon le niveau d'oxydation, peut atteindre environ 4 fois le volume initial [161]. Cette augmentation de volume est considérée comme la cause principale de l'expansion de l'inclusion et finalement de la fissuration de la matrice d'enrobage.

Les études de Wang et al. [400] indiquent que l'influence des propriétés matérielles des produits de corrosion sur le taux de corrosion critique¹ est négligeable, et les produits de corrosion peuvent être considérés comme rigides. Les propriétés mécaniques des phases métalliques sont beaucoup plus importantes que celles de la matrice, on peut donc supposer que l'inclusion d'uranium a un comportement élastique linéaire. Afin de décrire à l'échelle macroscopique le développement de la couche de produit de corrosion par le biais du coefficient d'expansion d'uranium β_u , une analogie avec la thermomécanique a été effectuée [25]. L'idée principale est de simuler la croissance de la couche de produit de corrosion en appliquant une déformation libre ε^* , comme présenté dans Benaïmeche et al. [37]. On peut écrire, avec l'hypothèse que les inclusions soumises à la corrosion sont sphériques :

$$\varepsilon^* = \frac{\Delta h}{r_0} = \beta_u \cdot \Delta h \quad (4.4)$$

où $\beta_u (m^{-1})$ est le coefficient d'interaction de l'inclusion d'uranium, Δh est l'augmentation du rayon due à la couche de produit de corrosion, r_0 est le rayon initial de l'inclusion métallique,

1. Taux de corrosion auquel la fissure commence à se propager

voir la figure 4.2, et ε^* est la déformation libre locale associée à la croissance de la couche de produit de corrosion.

La propagation d'endommagement est ici simulée indépendamment du temps (c'est-à-dire en considérant le problème comme quasi-statique) en raison des temps très longs de propagation, en plus du fait que les phénomènes de retrait et de fluage de la matrice cimentaire n'ont pas été considérés. Cependant, les résultats peuvent être post-traités pour les exprimer en termes de temps sur la base d'une certaine hypothèse d'évolution de l'épaisseur de la couche de produit corrosion. Afin d'établir une relation précise entre ε^* et le temps, le taux de corrosion dans des conditions réelles doit être connu.

4.3 Modèle à l'échelle microscopique

Les performances mécaniques globales du colis de déchets cimentés, impliquant les propriétés mécaniques macroscopiques et les modèles de fissuration, sont fortement associées à la microstructure du colis. Dans cette étude, les phénomènes de rupture sont étudiés à l'aide d'approches numériques, dans lesquelles l'hétérogénéité est explicitement décrite. À l'échelle microscopique, trois phases différentes peuvent être distinguées : (1) la matrice d'enrobage à base de ciment de laitier-activé, (2) des inclusions de graphite sous forme inerte, et (3) des inclusions d'uranium métallique pouvant être corrodées. Dans ce chapitre, nous supposons : (a) une matrice cimentaire durcie (pas d'évolution du module de Young au jeune âge), (b) une forme sphérique des inclusions d'uranium et de graphite, ainsi qu'une corrosion uniforme autour de l'inclusion d'uranium, et (c) une liaison parfaite entre les différentes phases et la matrice cimentaire. Nous supposons un comportement fragile dans la matrice cimentaire et la possible initiation et croissance de fissures dues à l'expansion d'inclusions métalliques, et un comportement élastique linéaire dans les autres phases. Pour modéliser la fissuration de la matrice, la méthode de champ de phase est utilisée ici (voir la section 3.2). Les principaux paramètres mécaniques des trois phases utilisés dans cette simulation sont listés dans le tableau 4.1.

	Module d'Young	Coefficient de Poisson
Matrice CLAA	20 GPa	0.2
Uranium	205 GPa	0.19
Produit de corrosion	190 GPa	0.191
Graphite	15 GPa	0.25

TABLEAU 4.1 Paramètres élastiques des différentes phases

La microstructure de taille ($100 \times 100mm$) et son maillage sont générés à l'aide du script python Combs [49] fonctionnant dans le code de CAO Salome [3], voir par exemple [37, 24] et ses références. Les inclusions ont été placées dans la matrice une par une, à des positions déterminées aléatoirement, de manière à éviter tout chevauchement avec les particules déjà placées. En raison du coût élevé des calculs, seules des simulations 2D ont été réalisées dans cette étude. La taille caractéristique des éléments du maillage varie entre $h = 0.15mm$ et $h = 0.4mm$, et la longueur de régularisation est fixée à $\ell = 1mm$. Il a été montré dans Miehe et al. [253] qu'étant donné ℓ , le critère $h < \ell/2$ doit être satisfait. L'énergie de fissuration a été choisie à $g_c = 33N/m$ à partir des valeurs expérimentales fournies dans [272] .

La dégradation des VERs en fonction de l'avancement de la réaction de corrosion est représentée par la réduction des modules du tenseur de rigidité effectif en fonction du taux de corrosion des inclusions d'uranium. En condition de déformation plane en 2D, le tenseur de rigidité effectif $\bar{\mathbb{C}}^{eff}$ des microstructures endommagées peut être évalué numériquement par perturbation en utilisant :

$$\left(\bar{\mathbb{C}}^{eff}\right)_{ijkl}(\bar{\boldsymbol{\epsilon}}) = \frac{\partial \bar{\sigma}_{ij}}{\partial \bar{\epsilon}_{kl}}(\bar{\boldsymbol{\epsilon}}) \simeq \frac{\bar{\sigma}_{ij}(\bar{\boldsymbol{\epsilon}} + \boldsymbol{\delta}^{(kl)}) - \bar{\sigma}_{ij}(\bar{\boldsymbol{\epsilon}})}{\alpha} \quad (4.5)$$

avec

$$\boldsymbol{\delta}^{(11)} = \begin{bmatrix} \alpha & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\delta}^{(22)} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\delta}^{(12)} = \begin{bmatrix} 0 & \alpha & 0 \\ \alpha & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (4.6)$$

où α est un petit paramètre tel que $\alpha \ll |\bar{\boldsymbol{\epsilon}}|$. Cette procédure est implémentée dans le code du calcul afin de suivre le comportement de fissuration et la dégradation des propriétés mécaniques en fonction du taux de corrosion.

Dans les applications suivantes, plusieurs microstructure sont considérées, voir la figure 4.3. Dans les figures (a), (b) et (c) une seule inclusion d'uranium au centre de rayon initial $r = 0.4$ mm, et des inclusions de graphite de fraction volumique 0%, 20%, et 40% sont considérées, respectivement. Ces microstructures sont discrétisées en éléments finis (éléments triangulaires à trois nœuds), voir la figure 4.3(d).

Dans ce travail, nous étudions différents aspects liés au conditionnement des déchets, notamment : (1) la définition de la taille du VER, (2) l'effet des conditions aux limites, (3) l'effet de la fraction volumique du graphite et d'uranium, (4) l'effet de l'énergie de fissuration g_c , et finalement (5) l'effet de la densité du maillage.

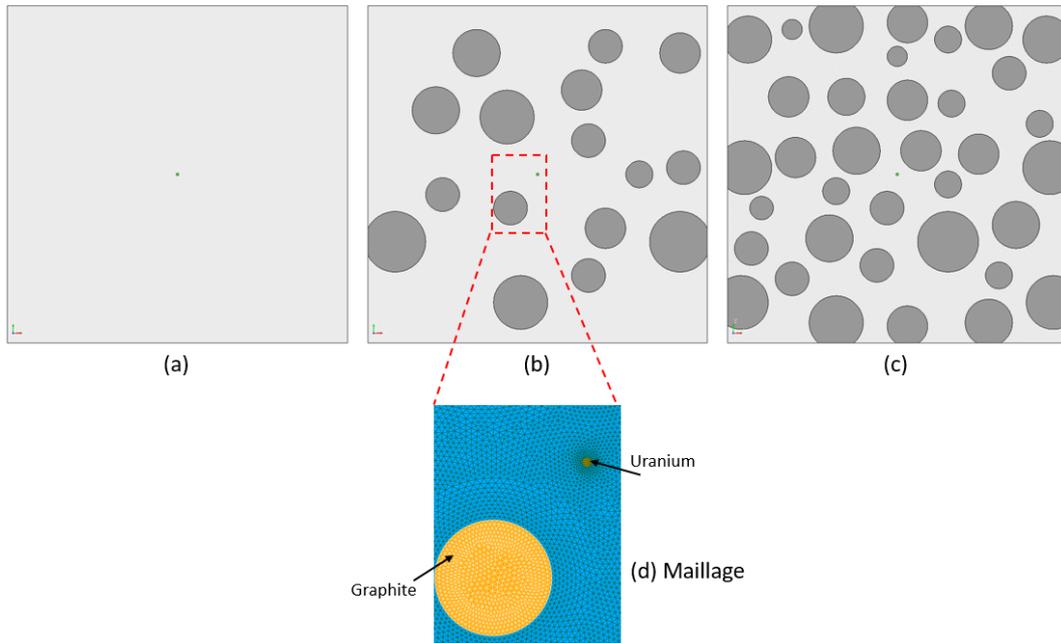


FIGURE 4.3 Trois configurations de microstructure (a), (b) et (c) avec différentes fractions volumiques de graphite 0%, 20%, et 40% respectivement, avec une inclusion d'uranium au centre ; (d) zoom sur une partie du maillage.

4.4 Résultats et discussion

4.4.1 Effet des conditions aux limites

Tout comme les propriétés mécaniques des matériaux, la propagation de l'endommagement n'est pas seulement pilotée par l'amplitude de l'expansion radiale, mais aussi par les conditions aux limites. Dans cette section, une microstructure contenant une inclusion d'uranium de rayon $r = 0.4$ mm et des inclusions de graphite avec une fraction volumique de 0,005% et 40%, respectivement, a été générée, voir la figure 4.3(c), et la fissuration de la matrice d'enrobage due à l'expansion induite par la corrosion d'uranium est étudiée pour différentes conditions aux limites. On envisage dans la suite deux types de conditions aux limites :

(1) Conditions uniformes en déformations KUBC²

Le champ de déplacement \mathbf{u} est imposé en tout point \mathbf{x} du contour $\partial\Omega$ du VER tel que :

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} \cdot \mathbf{x} \quad \forall \mathbf{x} \in \partial\Omega \quad (4.7)$$

2. Kinematically Uniform Boundary Conditions.

où $\bar{\boldsymbol{\epsilon}}$ est le tenseur de déformation macroscopique.

(2) Conditions uniformes en contraintes SUBC³

Le vecteur de contrainte en tout point \mathbf{x} du contour $\partial\Omega$ du VER est défini par :

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = \bar{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{n} \quad \forall \mathbf{x} \in \partial\Omega \quad (4.8)$$

où $\bar{\boldsymbol{\sigma}}$ est le tenseur de contrainte macroscopique.

En adoptant ces deux conditions aux limites, quatre scénarios ont été étudiés :

- A) Déformations bloquées (CL1) : conditions aux limites KUBC avec $\bar{\boldsymbol{\epsilon}} = 0$.
- B) Déformations libres (CL2) : conditions aux limites SUBC avec $\bar{\boldsymbol{\sigma}} = 0$.
- C) Déformations imposées en compression (CL3) : conditions aux limites KUBC avec $\bar{\boldsymbol{\epsilon}}_{xx} = \bar{\boldsymbol{\epsilon}}_{yy} = -3 \cdot 10^{-5}$.
- D) Déformations imposées en traction (CL4) : conditions aux limites KUBC avec $\bar{\boldsymbol{\epsilon}}_{xx} = \bar{\boldsymbol{\epsilon}}_{yy} = 3 \cdot 10^{-6}$.

La figure 4.4 présente les faciès de fissuration de la microstructure (Fig 4.3(c)) pour différentes conditions aux limites imposées, et pour les taux de corrosion $\tau = 3.4\%$, $\tau = 6\%$, et $\tau = 13\%$. Sous les conditions aux limites CL1 et CL3, la propagation de l'endommagement dans la matrice d'enrobage avec l'avancement de la réaction de corrosion est limitée. La raison principale est que l'état de contrainte dans le domaine est purement compressif. Des fissures autour de l'inclusion d'uranium ont été observées. Dans le cas des conditions aux limites CL2, les fissures commencent à se propager (dans les deux directions) dans la matrice cimentaire pour un taux de corrosion d'uranium de 3%. Une fracture fragile est observée au-delà d'un taux de corrosion de 10%. Dans le cas CL4, les fissures commencent à se propager à un taux de corrosion de 6%, et une propagation lente de la fracture est observée.

La figure 4.5 montre la diminution des modules effectifs \bar{C}_{1111}^{eff} et \bar{C}_{2222}^{eff} en fonction de taux de corrosion pour différentes conditions aux limites. Comme décrit précédemment, la propagation de l'endommagement est fortement impactée par les conditions aux limites imposées. Les modules effectifs sont quasiment constants dans les cas CL1 et CL3, contrairement aux cas CL2, et CL4. Une diminution importante des modules effectifs après 5% de taux de corrosion est observée dans le cas de déformations libres. Notons que la déformation d'expansion de l'inclusion métallique d'uranium sort du cadre des petites déformations pour

3. Statically Uniform Boundary Conditions.

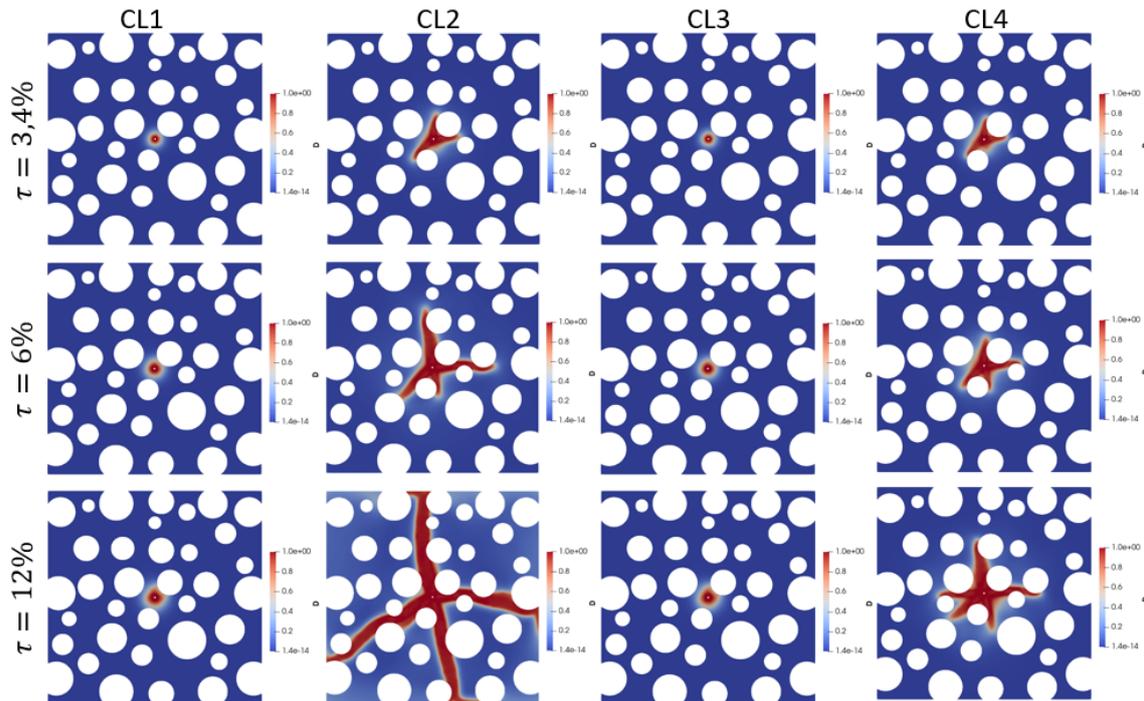


FIGURE 4.4 Schémas de rupture de la microstructure 4.3(c) pour différentes conditions aux limites.

des taux de corrosion supérieurs à 2%. Le calcul sera étendu aux grandes déformations dans la partie 4.5.

4.4.2 Effet de la fraction volumique de graphite et d'uranium

Dans cette section, l'effet de l'incorporation du graphite à différentes fractions volumiques est étudié. Pour cela, deux fractions volumiques de graphite dans la microstructure ont été considérées (40%, et 20%), voir figures 4.6(a)(b) respectivement. Pour chaque fraction volumique, cinq réalisations de distribution différentes d'inclusion de graphite ont été effectuées. Dans le cas de la microstructure sans graphite, le module d'Young de la matrice cimentaire est perturbé par un champ scalaire aléatoire gaussien stationnaire ($E_m = 20 \pm 0.5\text{GPa}$), afin d'éviter les problèmes de non-convergence liés à la symétrie, et de faire localiser la fissure, voir la figure 4.7. Des conditions aux limites en déformations libres (CL2) sont imposées.

La figure 4.8 montre les faciès de fissuration dans la microstructure 4.3(a) à des taux de corrosion $\tau = 2\%$, $\tau = 6\%$, et $\tau = 7\%$, et pour quatre réalisations de champ de module de Young R_1 , R_2 , R_3 , et R_4 . L'endommagement commence à se propager dans la matrice après 3% de taux de corrosion. Une rupture quasi-fragile est observée à 7% de taux de corrosion

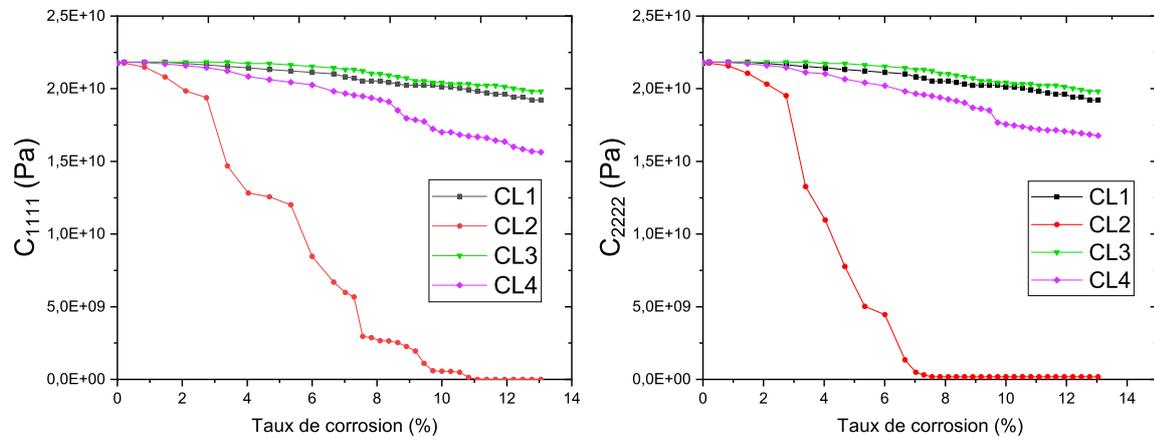
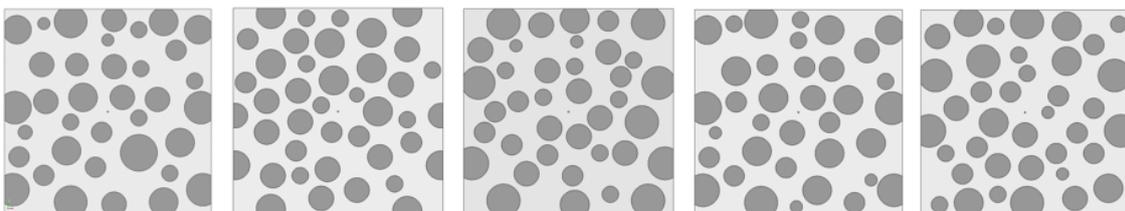


FIGURE 4.5 Modules effectifs $\overline{C}_{1111}^{eff}$ et $\overline{C}_{2222}^{eff}$ en fonction du taux de corrosion pour différentes conditions aux limites.

(a) 40% graphite



(b) 20% graphite

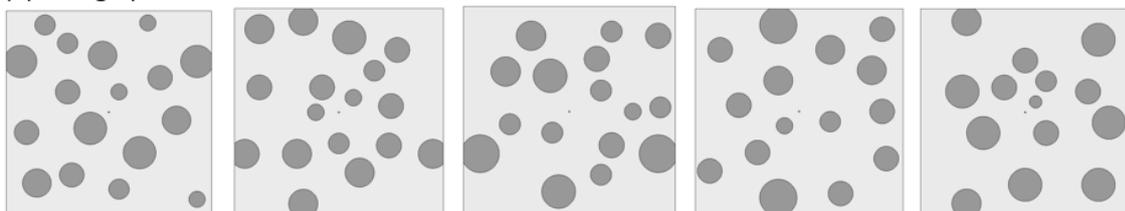


FIGURE 4.6 Différentes réalisations de microstructures pour 20% et 40% de fraction volumique de graphite.

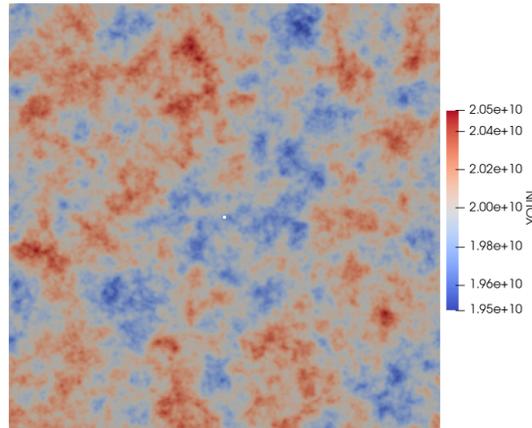


FIGURE 4.7 Champ perturbé de module d'Young de la matrice cimentaire .

pour les quatre réalisations. Nous pouvons voir que la propagation de l'endommagement change très peu pour les différentes réalisations ; pour les réalisations R1, R2, et R4 la fissure est verticale, alors que dans la R3, la fissure est horizontale avec le même comportement. En revanche, lorsque l'énergie de fissuration g_c est perturbée par un champ scalaire aléatoire gaussien stationnaire, aucun changement considérable n'a été observé.

La figure 4.9 montre les faciès de fissuration dans les microstructures de la figure 4.6(b) à des taux de corrosion $\tau = 2\%$, $\tau = 6\%$, et $\tau = 10\%$, et pour différentes réalisations. L'endommagement est initié à un taux de corrosion de 2% et commence à se propager à $\tau = 4\%$. On peut voir que la propagation de l'endommagement est impactée par l'incorporation de graphite dans la matrice cimentaire, et que le trajet de la fissure dépend de la position des inclusions de graphite et a tendance à se propager dans les zones où il y a moins de graphite. La rupture totale des microstructures de la figure 4.6(b) est obtenue à un taux de corrosion de 10%, contrairement à la microstructure de la figure 4.8 obtenue à un taux de corrosion de 7%.

La figure 4.10 montre l'endommagement de la matrice cimentaire avec 40% de graphite à des taux de corrosion $\tau = 2\%$, $\tau = 6\%$, et $\tau = 10\%$, et pour différentes réalisations (voir figure 4.6a). L'endommagement est initié à un taux de corrosion de 2% et commence à se propager à un taux de corrosion de 4% jusqu'à la rupture totale à environ $\tau = 10\%$. Nous pouvons voir que la propagation de l'endommagement est impactée par l'augmentation de la fraction volumique de graphite, et que la trajectoire de la fissure dépend de la position des inclusions de graphite autour de l'inclusion d'uranium.

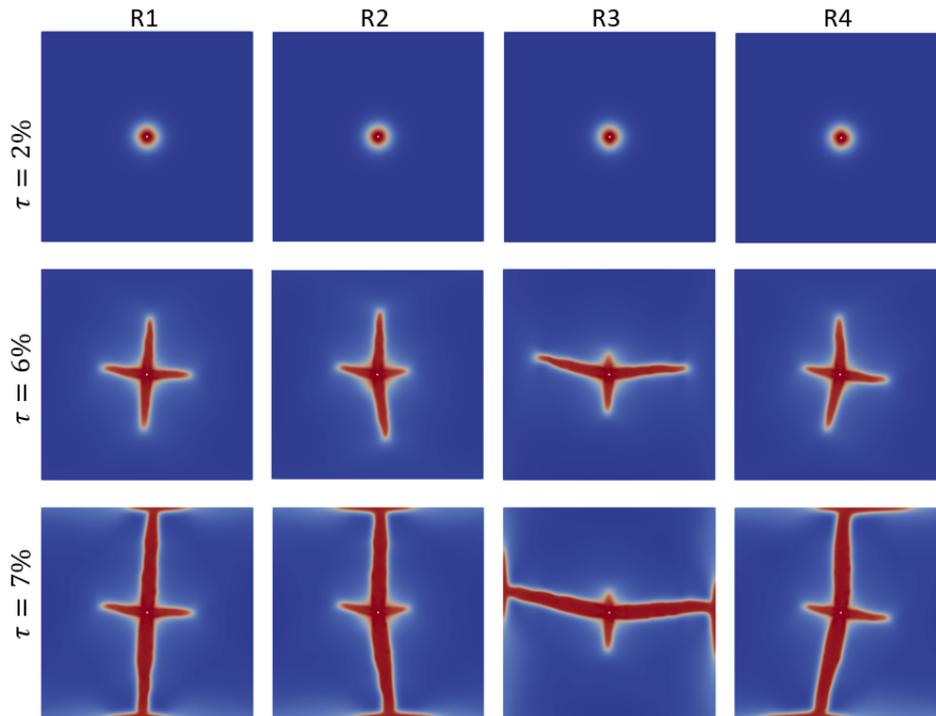


FIGURE 4.8 Schémas de rupture de la microstructure 4.7 pour quatre réalisations de champ de modules de Young R_1 , R_2 , R_3 et R_4 à des taux de corrosion $\tau = 2\%$, $\tau = 6\%$, et $\tau = 7\%$.

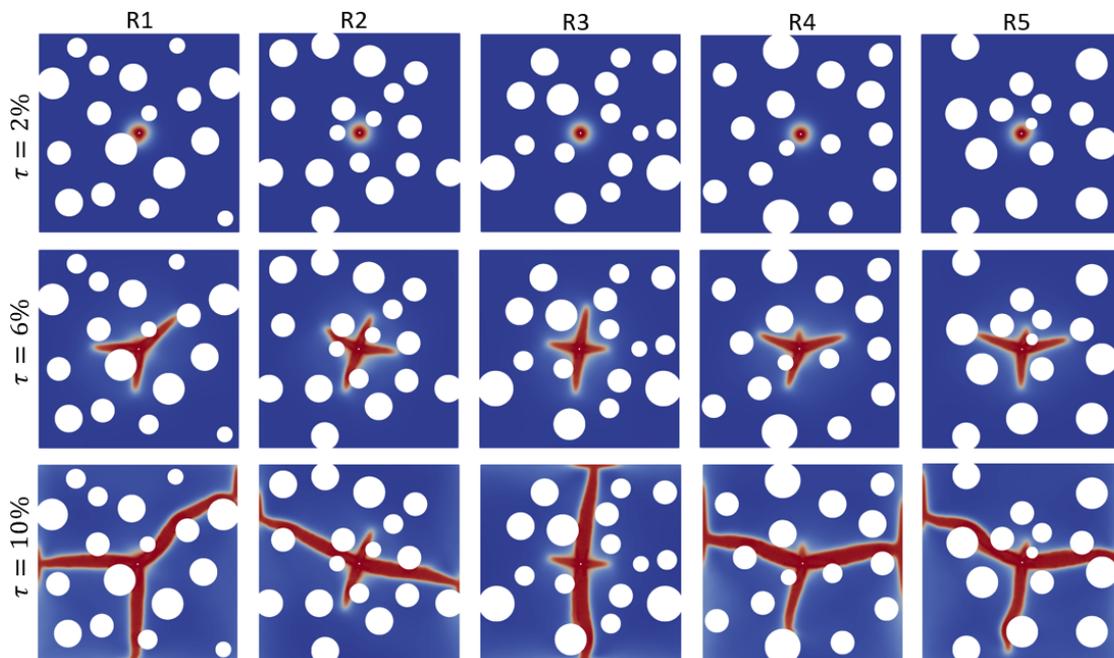


FIGURE 4.9 Schémas de rupture des microstructures de la figure 4.6(b) à des taux de corrosion $\tau = 2\%$, $\tau = 6\%$, et $\tau = 10\%$.

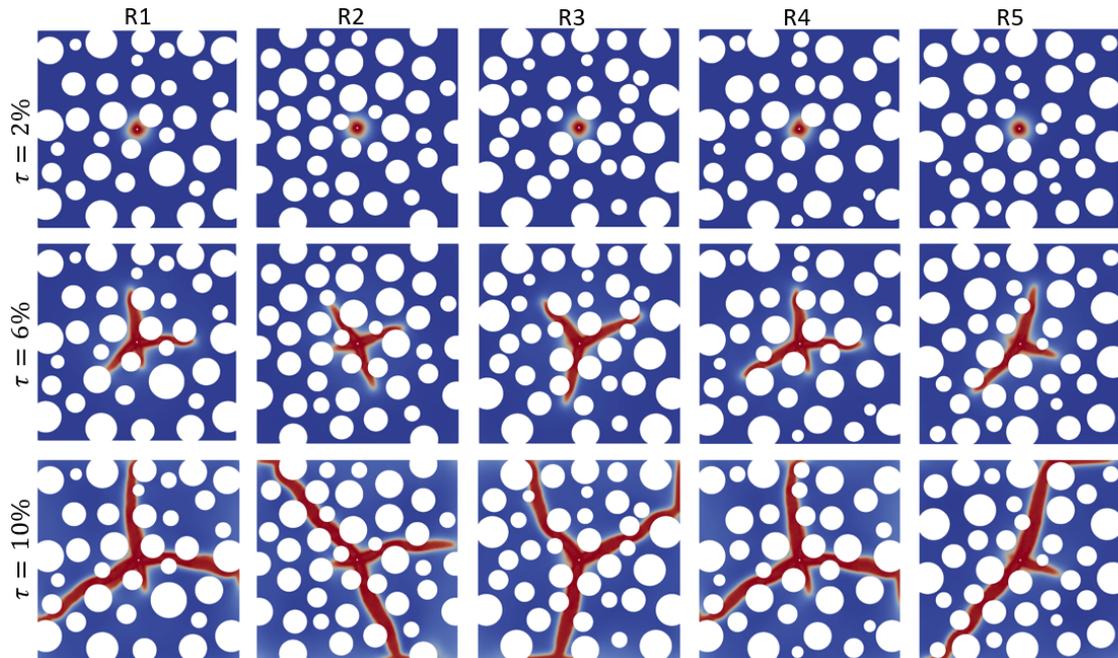


FIGURE 4.10 Schémas de rupture des microstructures de la figure 4.6(a) à des taux de corrosion $\tau = 2\%$, $\tau = 6\%$, et $\tau = 10\%$.

La figure 4.11(a)(b) montre la courbe moyenne et la bande de l'écart-type moyen (de cinq réalisations) de la diminution des modules effectifs \bar{C}_{1111}^{eff} et \bar{C}_{2222}^{eff} en fonction du taux de corrosion pour différentes fractions volumiques. Les modules effectifs diminuent en fonction de l'avancement de la réaction de corrosion, jusqu'à la rupture totale à un taux de corrosion de 9%. Un effet positif de la fraction volumique d'inclusions de graphite sur la propagation des fissures due à l'expansion de l'uranium est observé, de sorte qu'à partir de $\tau = 5\%$ la diminution des modules effectifs est atténuée par la présence d'inclusions de graphite.

Afin d'étudier l'effet de la fraction volumique d'uranium sur le comportement du colis de déchets cimentés, deux fractions volumiques d'uranium ont été testées : 0.005% et 0.1%. La figure 4.11(c)(d) montre les courbes moyennes (5 réalisations chacune) de la diminution des modules effectifs \bar{C}_{1111}^{eff} et \bar{C}_{2222}^{eff} en fonction du taux de corrosion pour différentes fractions volumiques du graphite et d'uranium. Comme attendu, la fraction volumique d'uranium affecte l'endommagement de la matrice cimentaire. La diminution des modules effectifs est très rapide dans le cas de 0.1% de fraction volumique d'uranium, et la rupture totale est obtenue à 1.5% de taux de corrosion, contrairement au cas de 0.005% de fraction volumique où la rupture est à 10% de taux de corrosion de l'inclusion d'uranium.

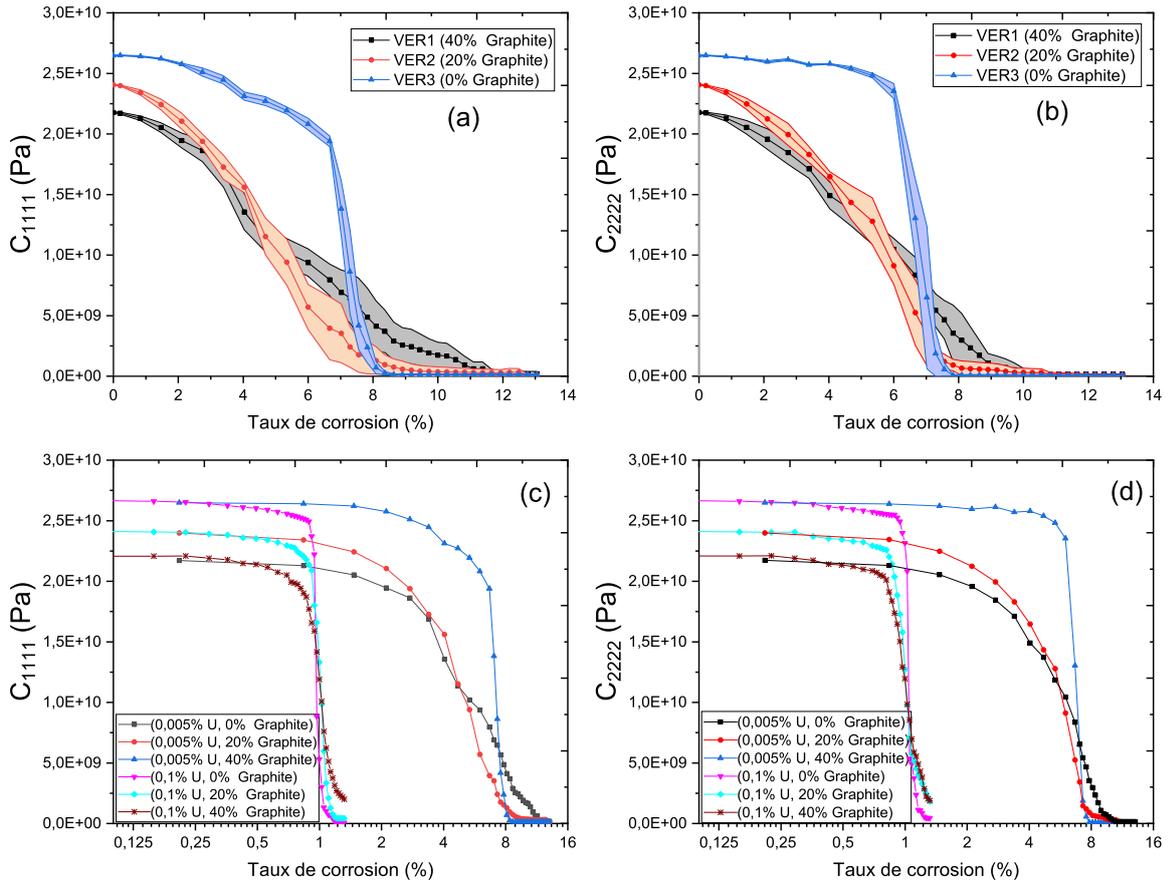


FIGURE 4.11 Modules effectifs $\overline{C}_{1111}^{eff}$ et $\overline{C}_{2222}^{eff}$ en fonction du taux de corrosion pour cinq réalisations : (a)(b) effet de l'incorporation du graphite dans les microstructures de la figure 4.6; (c)(d) effet de l'incorporation du graphite pour deux fractions volumiques d'uranium 0.005% et 0.1%.

4.4.3 Définition de la taille des VERs

Au cours des deux dernières décennies, différentes méthodes ont été employées par la communauté scientifique pour déterminer la taille des VERs, comme par exemple des approches analytiques [96, 351] et des méthodes statistiques-numériques [177, 178, 314, 361, 133, 371]. Ces dernières combinent des simulations numériques (éléments finis) avec un traitement statistique (réalisations multiples pour la génération d'échantillons et analyse statistique des résultats). La méthodologie de Kanit et al. [177], construite dans le cadre géostatistique [249], permet d'établir un lien entre la taille du VER, le nombre de réalisations et la précision de l'estimation. Cependant, cette stratégie peut être coûteuse en calcul - en particulier dans le cas de comportements non linéaires, ce qui réduit potentiellement son intérêt pour les applications industrielles. Pelissou et al. [314] ont introduit une nouvelle approche pour la détermination des VERs pour un composite à matrice métallique avec des inclusions fragiles alignées distribuées de manière aléatoire. A notre connaissance, rares sont les études dans la littérature qui traitent de la définition de la taille VER dans le contexte de la méthode de champ de phase.

Rayon (mm)	Fraction volumique de graphite		
	Config1	Config2	Config3
3	10%	-	-
4	15%	-	-
6	15%	-	-
8	-	10%	-
9	-	15%	-
10	-	15%	-
14	-	-	40%

TABLEAU 4.2 Fraction volumique de graphite

Dans cette section, une approche statistique-numérique est proposée pour déterminer la taille du VER pour des structures de déchets hétérogènes soumis à l'expansion due à la corrosion. Pour cela, deux réalisations de simulation numérique ont été effectuées. La figure 4.12 montre les trois configurations considérées, avec différentes tailles d'échantillon, notamment 100mm, 200mm, et 300mm avec 40% de fraction volumique de graphite. Il faut souligner que deux réalisations est un petit nombre pour une analyse statistique. Cependant, notre objectif n'était pas d'effectuer une analyse statistique complète, mais de fournir une étude statistique pour confirmer les résultats. Dans le but d'étudier l'effet de la taille des inclusions de graphite sur la taille du VER et la propagation de l'endommagement, différentes

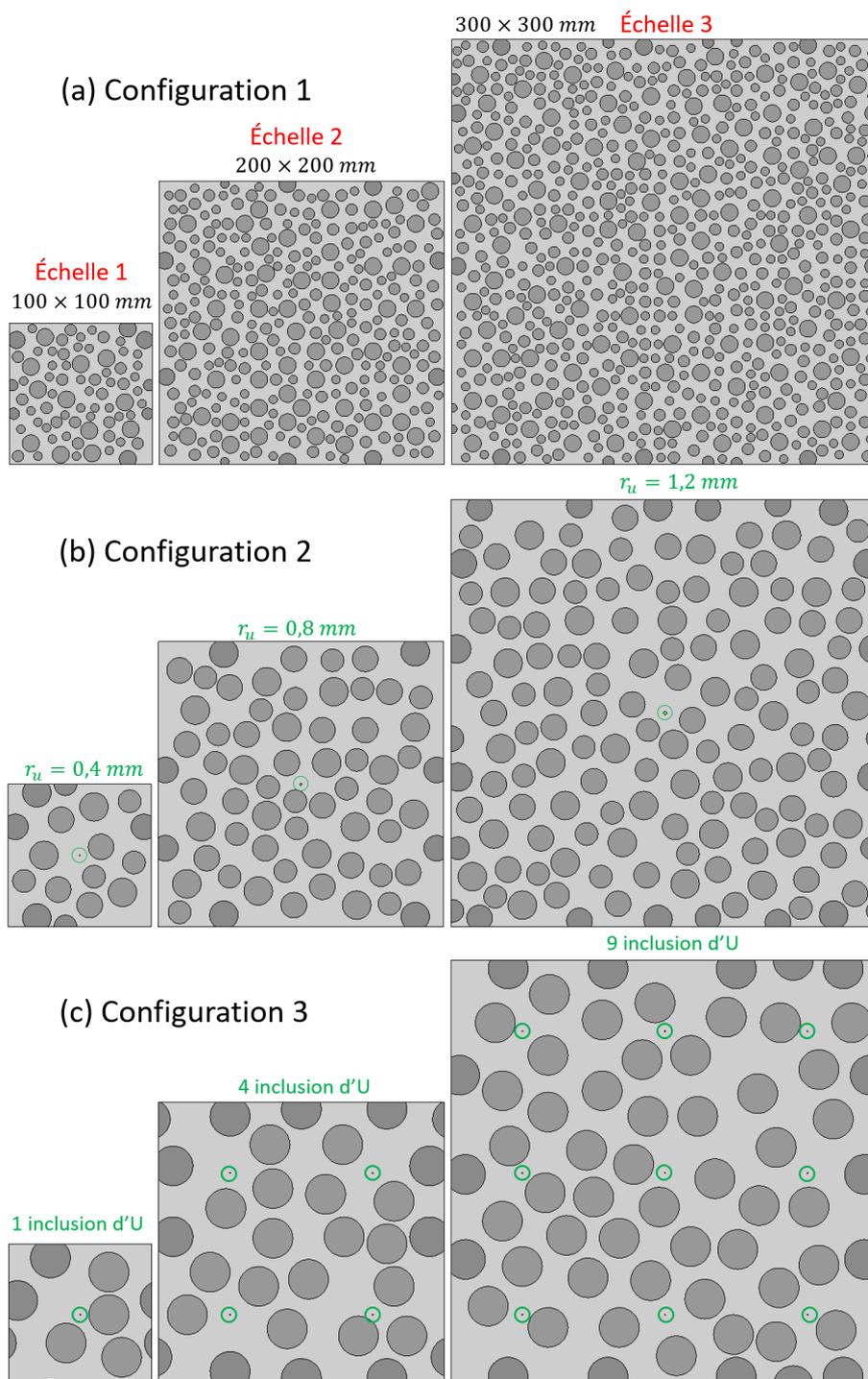


FIGURE 4.12 Trois configurations de microstructures : (a), (b) et (c) pour des inclusions de graphite de petites, moyennes, et grandes tailles à différentes échelles, respectivement. (b) approche 2 (une inclusion d'uranium au centre). (c) approche 1 (cellules unitaires).

granulométries des inclusions du graphite ont été considérées, voir le tableau 4.2. Des conditions aux limites en déformations libres (CL2) sont imposées.

Compte tenu de cette granulométrie, la taille initiale du VER pour commencer l'analyse est choisie à 100mm. Pour chaque configuration, nous considérons deux approches concernant la position de l'inclusion d'uranium, en gardant toujours la même fraction volumique de 0.005%. L'approche (1) basée sur l'utilisation de cellules unitaires consiste à multiplier le VER de l'échelle 1 par quatre et par neuf pour obtenir le VER des échelles 2 et 3, respectivement, avec la même taille d'inclusion d'uranium mais des distributions d'inclusions de graphite différentes (voir la figure 4.12(c)). Dans l'approche (2), une inclusion d'uranium est placée au centre du VER des échelles 1, 2 et 3 en gardant la même fraction volumique avec des distributions d'inclusions de graphite différentes, voir figure 4.12(b).

La méthode pour déterminer la taille des VERs est la suivante. Tout d'abord, différentes distributions de même échelle, et de fraction volumique d'inclusions similaire, sont générées. Ensuite, les échantillons sont soumis à l'expansion des inclusions d'uranium et le comportement moyen de toutes les réalisations de même échelle en fonction du taux de corrosion est extrait. Si aucun changement notable n'est observé, tout en augmentant l'échelle de calcul, la taille de l'échantillon à l'échelle précédente est considérée correspondre à celle du VER. Nous avons considéré deux réalisations pour chaque configuration et chaque taille d'échantillon. En augmentant le nombre de réalisations, on converge vers une taille de VER plus précise.

La figure 4.13 montre les faciès de fissuration de la première réalisation dans les configurations (a), (b) et (c) avec l'approche (2) à des taux de corrosion $\tau = 3\%$ et $\tau = 10\%$. A l'échelle 2 et 3, l'endommagement est initié à un taux de corrosion de 2% et commence à se propager à 3% de taux de corrosion jusqu'à la rupture totale à environ $\tau = 10\%$ pour les trois configurations. Il est évident que les échantillons de différentes tailles se comportent comme des matériaux différents. On peut voir que la taille des inclusions de graphite a un impact sur la trajectoire des fissures, et que celles-ci sont plus larges dans la deuxième et troisième configuration. Des schémas de fissuration similaires ont été obtenus à l'échelle 2 et 3 dans chaque configuration. D'après la figure 4.13, on peut conclure que la taille du volume élémentaire représentatif peut être considérée à 200 mm.

La figure 4.14 présente la courbe moyenne (pour l'approche 2) de la diminution des modules effectifs \bar{C}_{1111}^{eff} et \bar{C}_{2222}^{eff} en fonction du taux de corrosion pour les trois configurations. On peut constater que les échantillons de tailles différentes se comportent différemment, par exemple, plus l'échantillon est grand, plus il est fragile. Par ailleurs, ces résultats montrent qu'en augmentant la taille de l'échantillon, les courbes moyennes de diminution des modules

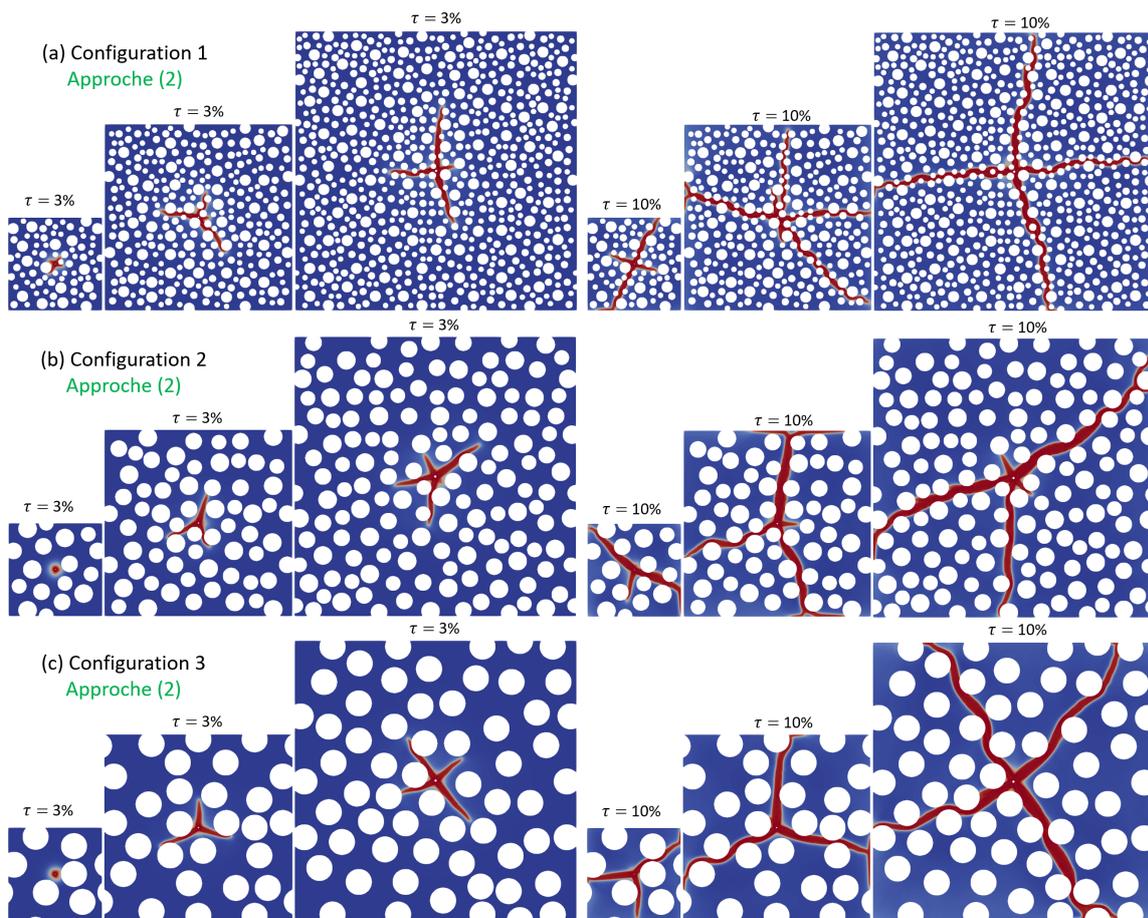


FIGURE 4.13 Schémas de fissuration dans les trois configurations de la figure 4.12(a)(b)(c) : approche 2 (une inclusion au centre).

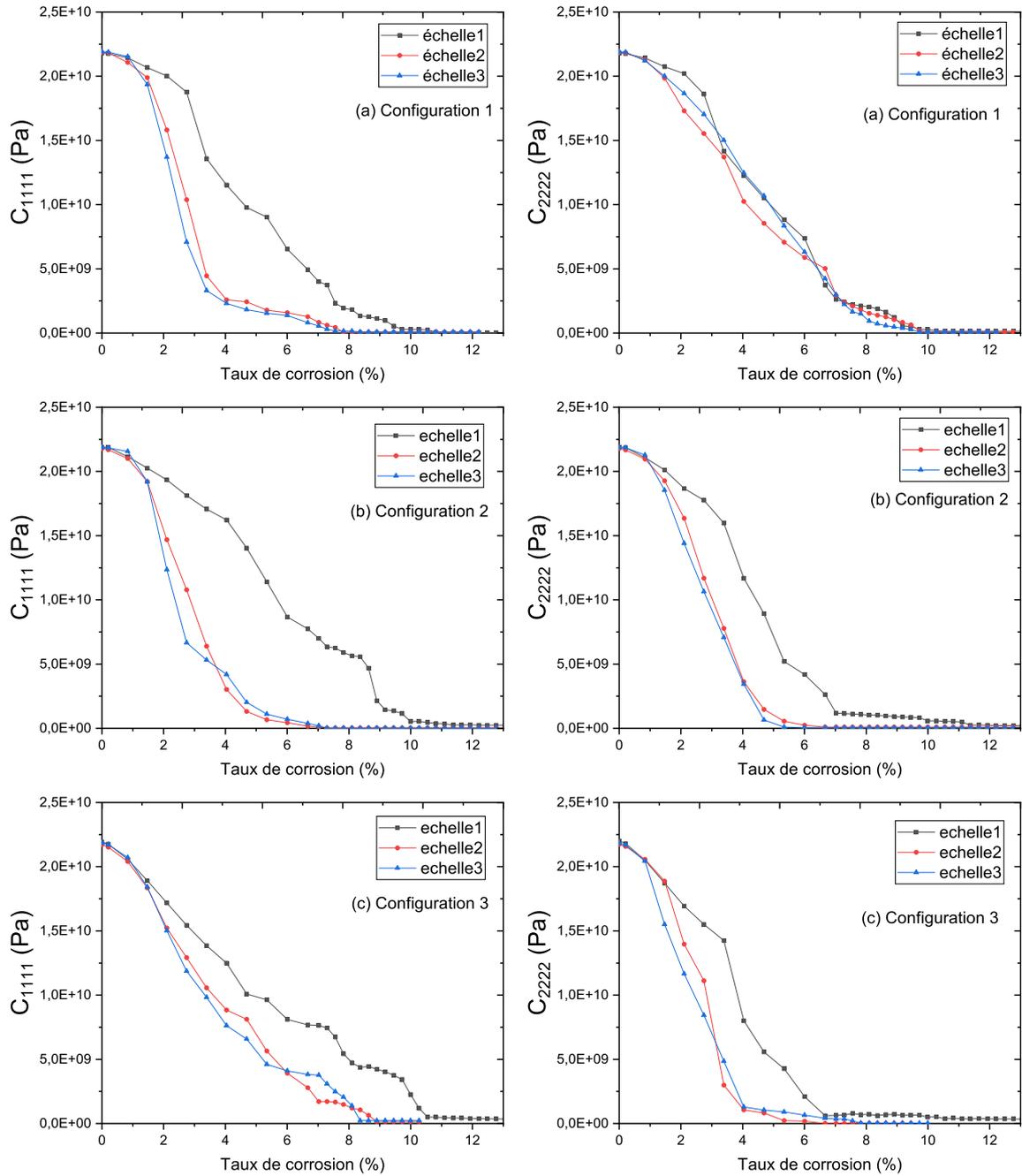


FIGURE 4.14 Modules effectifs moyens \bar{C}_{1111}^{eff} et \bar{C}_{2222}^{eff} en fonction du taux de corrosion pour les trois configurations : Approche 2.

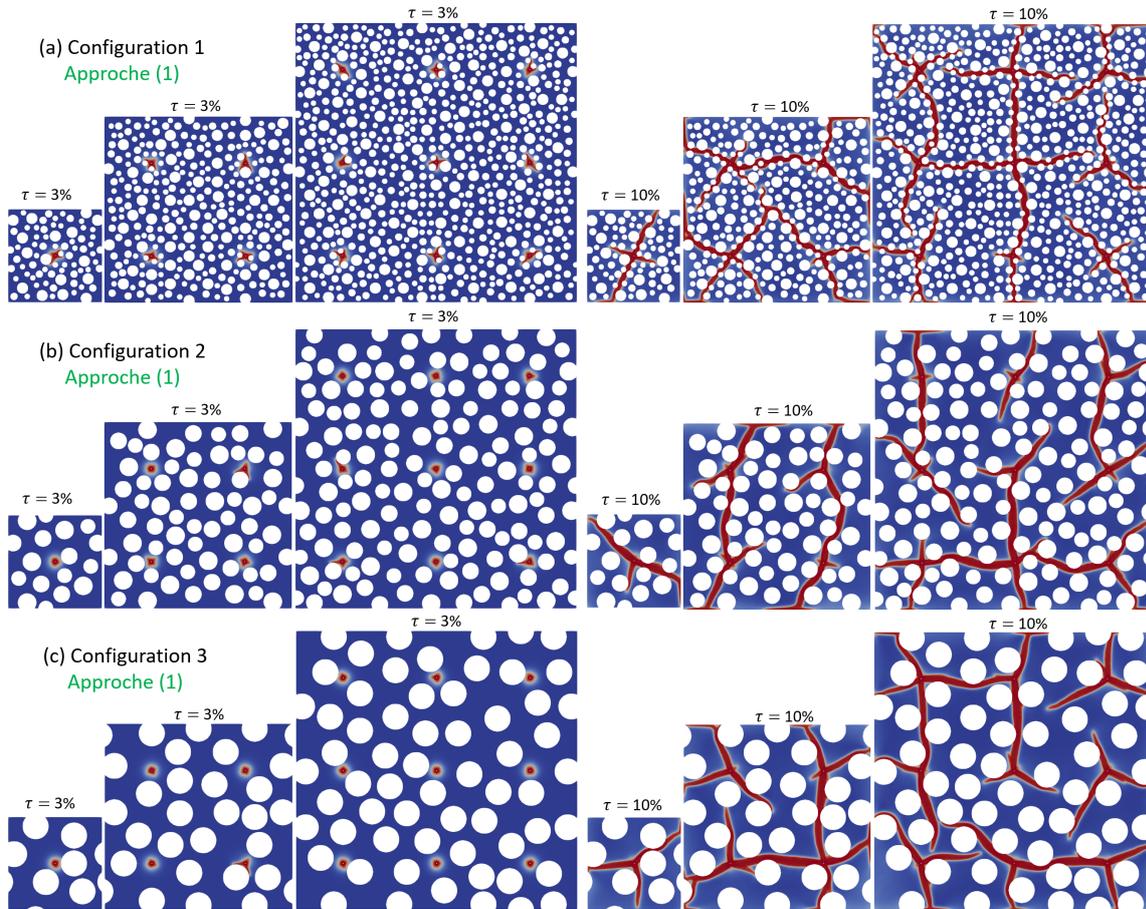


FIGURE 4.15 Schémas de fissuration dans les trois configuration de la figure 4.12(a)(b)(c) : approche 1 (cellules unitaires).

effectifs des différentes réalisations sont plus proches les unes des autres. On peut constater que les diminutions des modules effectifs à l'échelle 2 et 3 en fonction du taux de corrosion sont proches dans les 3 configurations, ainsi on peut conclure que la taille du volume élémentaire représentatif peut être raisonnablement considérée à 200 mm.

La figure 4.15 montre les faciès de fissuration de la première réalisation dans les configurations (a), (b) et (c) avec l'approche 1 à des taux de corrosion $\tau = 3\%$ et $\tau = 10\%$. A l'échelle 1, 2 et 3, l'endommagement est initié à un taux de corrosion de 3% et commence à se propager pour 4% de taux de corrosion jusqu'à la rupture totale à environ $\tau = 10\%$ pour les trois configurations. Les trois tailles d'échantillons montrent des schémas de rupture similaires pour les trois configurations. Des fissures plus larges ont été observées dans la configuration 3, et elles ont tendance à se propager dans la direction de l'inclusion d'uranium la plus proche dans les trois configurations.

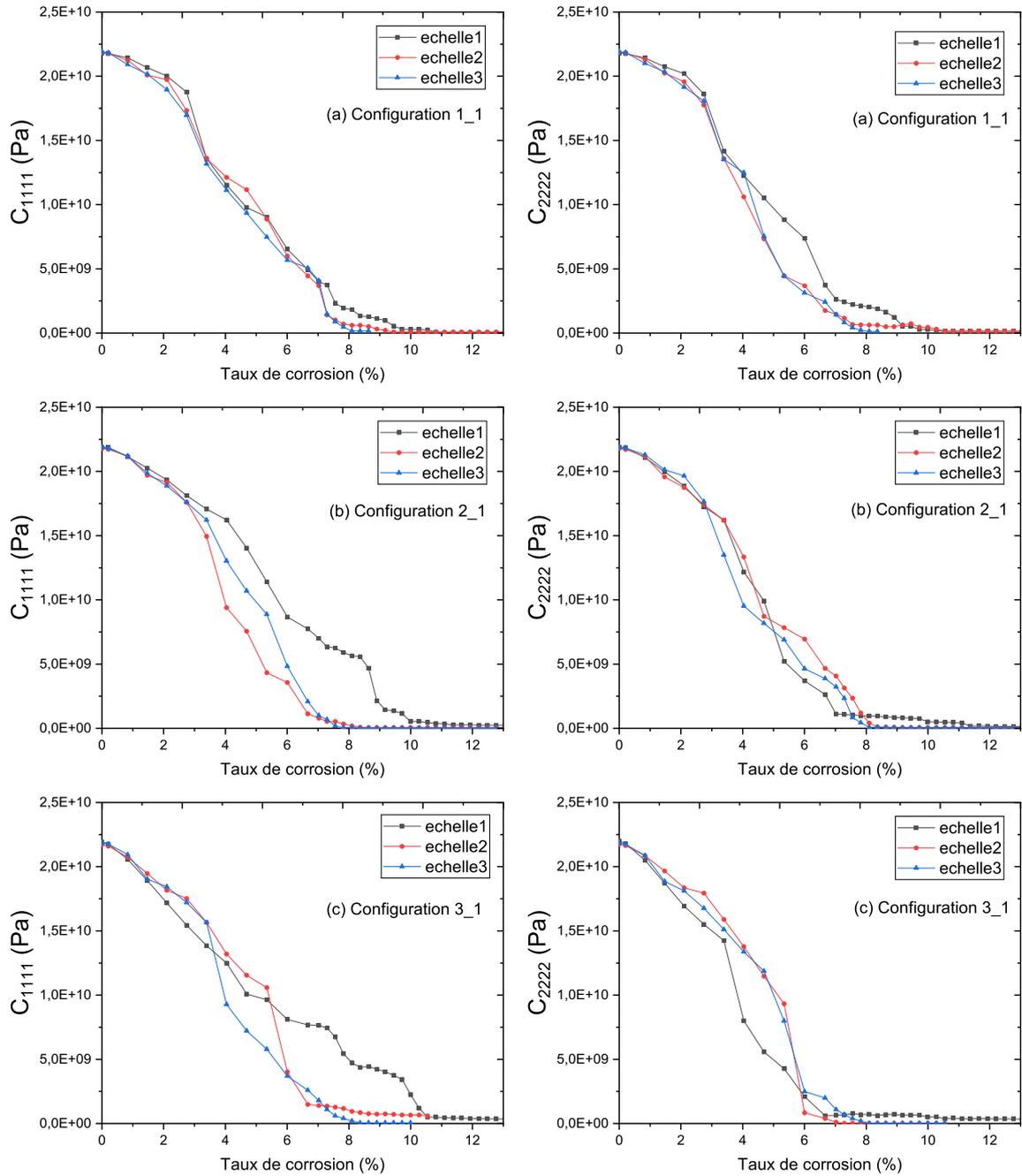


FIGURE 4.16 Modules effectifs moyens \bar{C}_{1111}^{eff} et \bar{C}_{2222}^{eff} en fonction du taux de corrosion pour les trois configurations : Approche 1.

La figure 4.16 présente la courbe moyenne (avec l'approche 1) de la diminution des modules effectifs $\overline{C}_{1111}^{eff}$ et $\overline{C}_{2222}^{eff}$ en fonction du taux de corrosion pour les trois configurations. La figure 4.16(a) montre que les courbes moyennes des modules effectifs à l'échelle 2 et 3 sont proches dans la première configuration. Dans la deuxième et la troisième configuration, une réponse légèrement différente est obtenue à l'échelle 1, 2 et 3. Ceci peut être expliqué par le faible nombre de réalisations effectué. En augmentant le nombre de réalisations, les courbes moyennes de diminution des modules effectifs convergent vers une taille de VER plus précise. On peut conclure que la taille du volume élémentaire représentatif peut être considérée proche de 200 mm dans les trois configurations.

4.4.4 Effet de l'énergie de fissuration g_c

La méthode de champ de phase repose sur la théorie variationnelle de l'évolution quasi-statique des fissures, où la solution du problème de la rupture est obtenue par la minimisation d'une fonction d'énergie constituée d'un terme élastique associé à l'énergie de déformation du matériau sain et d'une contribution de surface liée à l'énergie de rupture. L'énergie de rupture représente la quantité d'énergie nécessaire pour générer des fissures par unité de surface de fissure. Dans cette section, l'effet de l'énergie de fissuration g_c sur le comportement d'endommagement de la microstructure de la figure 4.3(c) est étudié. Pour cela, plusieurs valeurs de g_c ont été testées, notamment : $g_{c1} = 30N/m$, $g_{c2} = 33N/m$, $g_{c3} = 37N/m$, et $g_{c4} = 40N/m$. Des conditions aux limites en déformations libres (CL2) sont imposées.

La figure 4.17(a-b) montre la diminution des modules effectifs $\overline{C}_{1111}^{eff}$ et $\overline{C}_{2222}^{eff}$ en fonction du taux de corrosion et la figure 4.17(c) le faciès de fissuration à $\tau = 5\%$ pour différentes valeurs de g_c . Comme attendu, la valeur de g_c affecte le comportement de fissuration de la matrice de sorte que la rupture totale est obtenue à 5%, 6%, 6.9% et 7.5% de taux de corrosion pour g_{c1} , g_{c2} , g_{c3} et g_{c4} , respectivement. Notons qu'à la rupture totale, les faciès de fissuration ne changent pas de façon significative pour les différentes valeurs de g_c .

4.4.5 Effet de la densité du maillage

Ce qui rend le modèle de champ de phase particulièrement attractif, c'est sa capacité à simuler de manière efficace des processus de rupture complexes, y compris l'initiation, la propagation, la coalescence et la ramification des fissures, dans des situations générales et pour des géométries 3D. Tous les modèles de champ de phase introduisent un paramètre de régularisation, qui est lié à l'approximation diffuse de la fissure discontinue. Ce paramètre a la dimension d'une longueur et peut être interprété comme la largeur de la fissure régularisée [253]. Dans une formulation par éléments finis, la taille des éléments doit être suffisamment

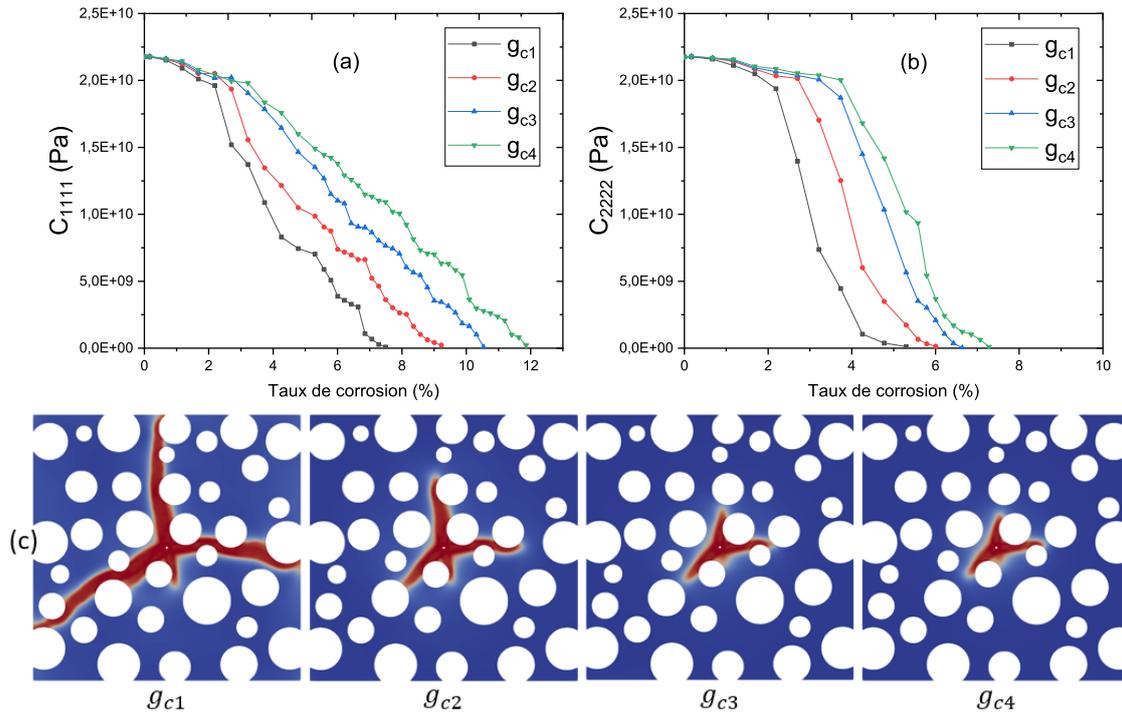


FIGURE 4.17 (a)(b) Modules effectifs \bar{C}_{1111}^{eff} et \bar{C}_{2222}^{eff} en fonction du taux de corrosion pour différentes valeurs de g_c , (c) faciès de fissuration à $\tau = 5\%$.

petite pour représenter les gradients d'endommagement induits par le paramètre de régularisation. Cela conduit généralement à la nécessité de maillages très fins, et donc à des coûts de calcul colossaux dans un calcul multi-échelles à base d'éléments finis (voir la section 2.6). Notons que plusieurs stratégies de raffinement local adaptatif du maillage ont été proposées dans la littérature afin de réduire le coût de calcul [321, 11, 406, 183].

Maillage	h_{min} (mm)	h_{max} (mm)	Nombre d'éléments
M1	0.15	0.4	139 154
M2	0.15	0.5	87 452
M3	0.15	0.6	60 932
M4	0.15	0.9	27 654
M5	0.15	2.0	12 578

TABLEAU 4.3 Taille d'élément des différents maillages

Dans cette section, la sensibilité des solutions de champ de phase au raffinement du maillage est analysée dans le contexte applicatif de l'expansion interne due à la corrosion des phases métalliques. Pour cela, nous effectuons deux types d'analyse, en considérant

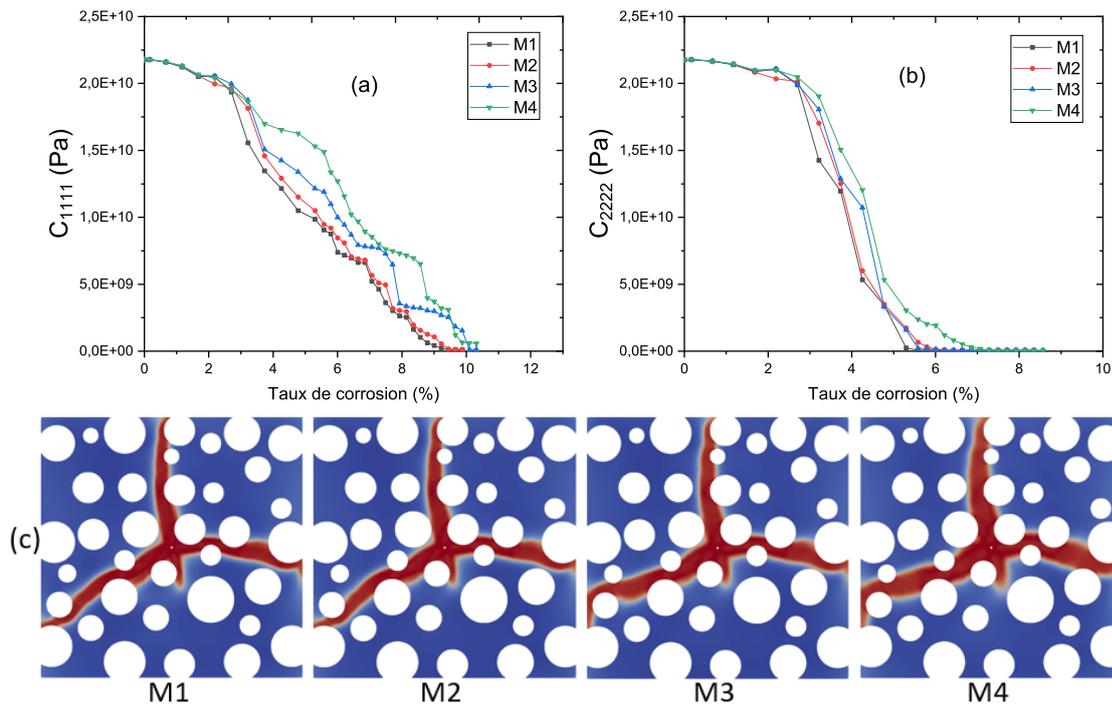


FIGURE 4.18 (a)(b) Modules effectifs \bar{C}_{1111}^{eff} et \bar{C}_{2222}^{eff} en fonction du taux de corrosion pour différents maillage, (c) faciès de fissuration à $\tau = 8\%$.

la microstructure 4.3(c) : (I) longueur de régularisation fixe et tailles d'éléments variées M1-M4, voir le tableau 4.3, et (II) longueurs de régularisation variées $\ell = 2, 3, 4, 5$ mm pour le maillage M5. Des conditions aux limites en déformations libres (CL2) sont imposées.

Longueur de régularisation fixe et tailles d'éléments variées La figure 4.18(a)(b) montre la diminution des modules effectifs \bar{C}_{1111}^{eff} et \bar{C}_{2222}^{eff} en fonction du taux de corrosion et (c) les faciès de fissuration à $\tau = 8\%$ pour les différents maillages M1-M4. Les résultats sont faiblement sensibles au maillage, et convergent pour le maillage M2. Par ailleurs, nous observons de larges fissures dans le maillage M4. Plusieurs travaux de recherche ont indiqué que les modèles de champ de phase fournissent des résultats insensibles au maillage pour des maillages suffisamment fins (et uniforme), voir par exemple [409, 258].

Longueurs de régularisation variées pour le maillage M5 La figure 4.19 montre la diminution des modules effectifs \bar{C}_{1111}^{eff} et \bar{C}_{2222}^{eff} en fonction du taux de corrosion et les faciès de fissuration du maillage M5 pour différentes longueurs de régularisation ℓ . Comme le montre cette figure, les résultats sont sensibles au paramètre ℓ : lorsque ℓ augmente, on obtient un comportement plus fragile. De plus, la longueur de régularisation a un impact sur

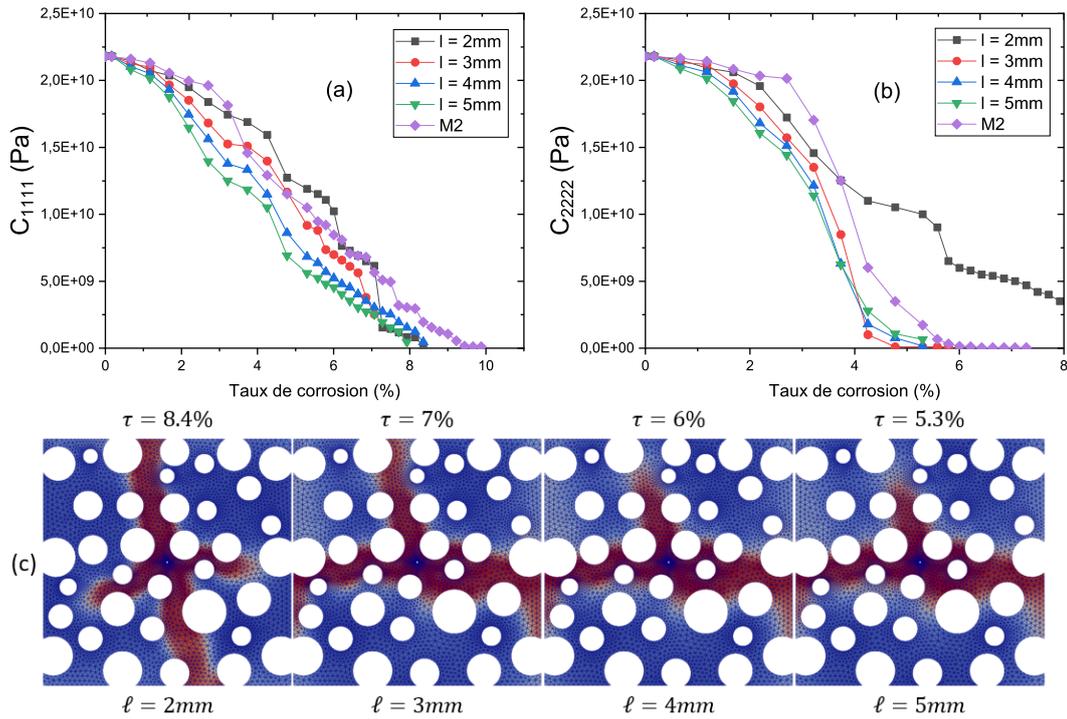


FIGURE 4.19 (a)(b) Modules effectifs \bar{C}_{1111}^{eff} et \bar{C}_{2222}^{eff} en fonction du taux de corrosion pour différentes valeurs de l , (c) faciès de fissuration.

la trajectoire des fissures. A partir des courbes 4.19(a)(b), l'erreur de calcul par rapport à la solution de référence du maillage M2 peut être évaluée.

D'après les figures 4.18(c) et 4.19(c), on peut constater que la propagation des fissures par la méthode du champ de phase est très sensible à la taille des éléments du maillage. Dans une simulation 3D, le maillage d'un VER est composé de plus de 20 millions d'éléments tétraédriques pour $h_{min} = 0.15mm$ et $h_{max} = 0.5mm$, et de 2.3 millions pour $h_{min} = 0.15mm$ et $h_{max} = 2mm$; ce qui rend impossible le calcul dans un cadre multi-échelle non linéaire. En perspective, une stratégie adaptative de raffinement local du maillage doit être développée afin de réduire le coût de calcul.

4.5 Modélisation des grandes déformations liées à la corrosion des inclusions métalliques

L'expansion de la couche de produits de corrosion formée entraîne des microfissures dans la matrice cimentaire. Sous l'hypothèse qu'il y a suffisamment d'eau disponible dans les pores de la matrice cimentaire, la réaction peut s'auto-propager [301, 12] et le volume des

phases formées peut atteindre quatre fois le volume initial de l'inclusion d'uranium. Comme mentionné dans la partie précédente 4.4.1, l'étude de l'expansion de l'inclusion métallique d'uranium sort du cadre des petites perturbations en théorie pour des taux de corrosion supérieurs à 2%, il est donc nécessaire d'étendre le calcul aux grandes déformations.

En mécanique des milieux continus, la théorie des déformations finies, également appelée théorie des grandes déformations, traite du cas des déformations pour lesquelles les déformations et/ou les rotations sont suffisamment importantes pour invalider les hypothèses de la théorie des déformations infinitésimales. Dans ce cas, les configurations non déformées et déformées du milieu sont sensiblement différentes, ce qui nécessite une distinction claire entre elles. Plusieurs travaux de recherche ont été dédiés à l'extension de la méthode du champ de phase aux déformations finies dans la littérature [255, 252, 10, 59, 5].

Dans cette partie, nous rappelons les notions de base de la théorie de grandes déformations et traitons l'extension du modèle de champ de phase aux grandes déformations.

4.5.1 Cinématique des déformations finies et modélisation mécanique

L'évolution de la géométrie d'un corps d'une configuration de référence Ω_0 à une configuration actuelle Ω_t se traduit par l'existence d'une transformation $\phi(\mathbf{X}, t)$ qui associe à chaque position initiale \mathbf{X} sa nouvelle position \mathbf{x} à l'instant t

$$\mathbf{x} = \phi(\mathbf{X}, t) \quad (4.9)$$

Le champ de déplacement \mathbf{u} est défini par la différence entre la position actuelle du point et sa position initiale :

$$\mathbf{u}(\mathbf{X}, t) = \mathbf{x} - \mathbf{X} \quad (4.10)$$

Les théories de premier gradient, les plus usuelles en mécanique, supposent que seul le gradient de la transformation \mathbf{F} caractérise la sollicitation locale d'un point matériel :

$$\mathbf{F}_{ij} = \frac{\partial \mathbf{x}_i}{\partial \mathbf{X}_j} = \delta_{ij} + \frac{\partial \mathbf{u}_i}{\partial \mathbf{X}_j} = \mathbf{I} + \text{Grad} \mathbf{u} \quad (4.11)$$

Supposons qu'une transformation, notée \mathbf{F} , puisse se faire en deux étapes (transformation élastique puis une transformation anélastique par exemple), voir la figure 4.20 : la première transformation, notée \mathbf{F}_1 , permet de passer de la géométrie initiale à une géométrie intermédiaire ; la seconde transformation, notée \mathbf{F}_2 , permet de passer de cette géométrie intermédiaire à la géométrie finale. La relation qui permet de relier les gradients de la transformation mesurée sur chacune des géométries est définie par

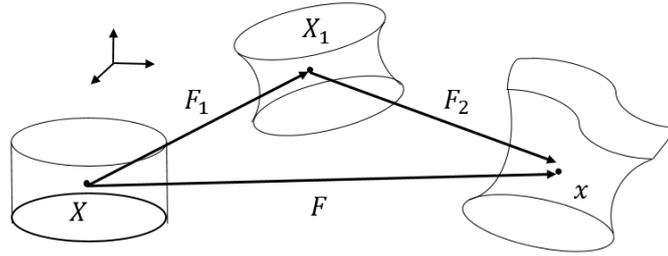


FIGURE 4.20 Décomposition multiplicative

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_2 \cdot \mathbf{F}_1 \neq \mathbf{F}_1 \cdot \mathbf{F}_2 \quad (4.12)$$

Dans le cadre de déformations finies, le tenseur de déformations peut s'exprimer sous différentes formes ; le tenseur de déformation de Cauchy-Green droit \mathbf{C} est défini par

$$\mathbf{C} = \mathbf{F}^T \cdot \mathbf{F} \quad (4.13)$$

et le tenseur de déformation de Green-Lagrange \mathbf{E} est donné par

$$\mathbf{E} = \frac{1}{2}(\mathbf{C} - \mathbf{I}) \quad (4.14)$$

où \mathbf{I} est le tenseur d'identité du second ordre. Dans le présent travail, nous adoptons le tenseur de déformation logarithmique de Hencky défini par :

$$\boldsymbol{\epsilon}_{log} = \frac{1}{2} \log(\mathbf{C}) \quad (4.15)$$

L'expansion volumique, mesurée par le déterminant du gradient de déformation, est directement liée à la trace du tenseur de déformation de Hencky :

$$J = \det(\mathbf{F}) = \exp(\text{tr}(\boldsymbol{\epsilon}_{log})) \quad (4.16)$$

Vitesses, taux de déformation et de rotation

La vitesse d'un point décrit la variation de sa position entre deux instants infiniment proches. Dans une description eulérienne, la vitesse sera fonction de la position \mathbf{x} du point dans la configuration déformée, alors que dans une description lagrangienne, on considérera la vitesse comme une fonction de la position \mathbf{X} du point dans la configuration de référence. Désignons par \mathbf{L} le taux de gradient de déformation :

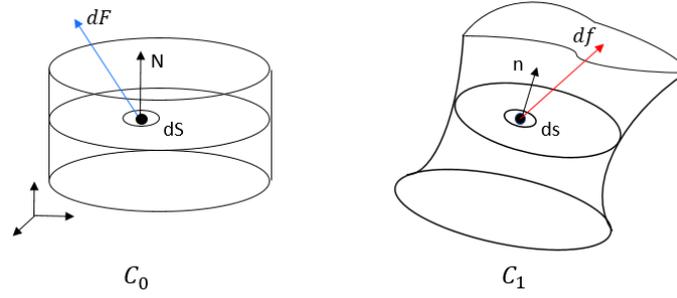


FIGURE 4.21 Vecteur de contrainte dans la configuration de référence/actuelle

$$\mathbf{L} = \dot{\mathbf{F}} \cdot \mathbf{F}^{-1} \quad (4.17)$$

Le tenseur \mathbf{L} est décomposé en une partie symétrique \mathbf{D} (taux de déformation) et une partie antisymétrique \mathbf{w} (taux de rotation)

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2}(\mathbf{L} + \mathbf{L}^T) \quad \mathbf{w} = \frac{1}{2}(\mathbf{L} - \mathbf{L}^T) \quad (4.18)$$

Équilibre mécanique, contrainte de Cauchy

Le tenseur de contrainte de Cauchy $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t)$ est la contrainte associant à une surface unitaire ds de la configuration actuelle la force df agissant sur cette surface, voir la figure 4.21 :

$$df(\mathbf{x}, t) = \boldsymbol{\sigma} \cdot ds \quad (4.19)$$

En l'absence de forces volumiques, l'équilibre mécanique de la structure s'écrit, en chaque point de la géométrie déformée :

$$\text{div} \boldsymbol{\sigma} = 0 \quad (4.20)$$

où l'opérateur divergence se calcule sur la géométrie actuelle.

Premier tenseur des contraintes de Piola-Kirchhoff (description mixte)

Le premier tenseur des contraintes de Piola-Kirchhoff $\boldsymbol{\Pi}(X, t)$ est la contrainte associant à une surface unitaire dS de la configuration de référence la force df dans la configuration actuelle :

$$df(\mathbf{X}, t) = \mathbf{\Pi} \cdot \mathbf{N} dS \quad (4.21)$$

où \mathbf{N} désigne la normale à dS . En l'absence de forces volumiques, l'équilibre mécanique de la structure s'écrit, en chaque point de la géométrie non-déformée :

$$\text{div} \mathbf{\Pi} = 0 \quad (4.22)$$

où l'opérateur divergence se calcule sur la géométrie de référence.

Second tenseur des contraintes de Piola-Kirchhoff

Le second tenseur des contraintes de Piola-Kirchhoff $\mathbf{S}(X, t)$ (PK2) est la contrainte associant à une surface unitaire dS de la configuration de référence la force $d\mathbf{F}$ agissant sur cette surface :

$$d\mathbf{F}(\mathbf{X}, t) = \mathbf{S} \cdot \mathbf{N} dS \quad (4.23)$$

En l'absence de forces volumiques, l'équilibre mécanique de la structure s'écrit, en chaque point de la géométrie non-déformée :

$$\text{div} \mathbf{S} = 0 \quad (4.24)$$

où l'opérateur divergence se calcule sur la géométrie de référence.

Remarque : En petites déformations tous les tenseurs de contraintes sont équivalents, et $\boldsymbol{\sigma}$ et \mathbf{S} sont symétriques.

Contraintes définies par dualité

Une idée extrêmement puissante, proposée par Miehe et al. [251], est de relier à un taux de déformation une contrainte par dualité énergétique. Plus précisément, soit $\boldsymbol{\epsilon}_{GL}$ un tenseur de déformation de Green-Lagrange, sa contrainte duale sera la deuxième contrainte de Piola-Kirchhoff \mathbf{S} telle que

$$W_{int} = \mathbf{S} : \boldsymbol{\epsilon}_{GL} \quad (4.25)$$

où W_{int} est la densité de puissance interne dans la configuration de référence. L'idée principale de l'approche de Miehe et al. [251] était de définir un nouveau tenseur de contrainte \mathbf{T}

comme le conjugué du taux du tenseur de déformation de Hencky. Le tenseur \mathbf{T} satisfait donc l'équation suivante :

$$W_{int} = \frac{1}{J} \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D} = \boldsymbol{\tau} : \mathbf{D} = \mathbf{T} : \dot{\boldsymbol{\epsilon}}_{log} = \boldsymbol{\Pi} : \dot{\mathbf{F}} = \mathbf{S} : \dot{\boldsymbol{\epsilon}}_{GL} = \frac{1}{2} \mathbf{S} : \dot{\mathbf{C}} \quad (4.26)$$

où $\boldsymbol{\tau}$ est la contrainte de Kirchhoff, \mathbf{D} le taux de déformation. Un lien explicite entre \mathbf{T} et les contraintes de Piola-Kirchhoff $\boldsymbol{\Pi}$ et \mathbf{S} peut être dérivé de l'équation (4.26) :

$$\mathbf{P} = \mathbf{T} \cdot \frac{\partial \boldsymbol{\epsilon}_{log}}{\partial \mathbf{F}} \quad \text{et} \quad \mathbf{S} = 2\mathbf{T} \cdot \frac{\partial \boldsymbol{\epsilon}_{log}}{\partial \mathbf{C}} \quad (4.27)$$

Une fois que $\boldsymbol{\Pi}$ ou \mathbf{S} est connu, on peut également calculer le tenseur des contraintes de Kirchhoff $\boldsymbol{\tau}$ ou le tenseur des contraintes de Cauchy $\boldsymbol{\sigma}$ en utilisant les relations classiques :

$$\boldsymbol{\tau} = \mathbf{P} \cdot \mathbf{F} \quad \text{et} \quad \boldsymbol{\tau} = J \boldsymbol{\sigma} \quad (4.28)$$

4.5.2 Lois de comportements en grandes déformations dans Cast3M / Mfront

La définition du tenseur de déformation logarithmique $\boldsymbol{\epsilon}_{log}$ et de son tenseur dual de contrainte \mathbf{T} permet de réutiliser le formalisme utilisé pour construire les équations constitutives dans le cadre de la théorie de la déformation infinitésimale. Il est à noter que nous ne voulons pas dire qu'une équation constitutive définie sous les hypothèses de la théorie de la déformation infinitésimale peut être étendue à la déformation finie sans être redéfinie dans ce nouveau cadre. Ce que nous voulons dire, c'est que le cadre de la déformation logarithmique nous permet d'écrire des équations constitutives qui sont capables de décrire de très grandes déformations en utilisant le même formalisme que dans la théorie de la déformation infinitésimale.

La seule chose à faire est de remplacer le tenseur des déformations infinitésimales par le tenseur des déformations logarithmiques $\boldsymbol{\epsilon}_{log}$ dans l'expression des équations constitutives et d'interpréter le tenseur des contraintes comme le dual de la déformation logarithmique.

Ce cadre présente des particularités très intéressantes :

- Objectivité : Les comportements construits avec ce cadre sont invariants en cas de rotation superposée d'un corps rigide en raison de sa formulation lagrangienne (par exemple, les tenseurs de contrainte de Hencky sont invariants par rapport à la rotation superposée d'un corps rigide, voir [358] pour plus de détails).

- Consistance thermodynamique : si nous réutilisons le formalisme d'un comportement thermodynamiquement cohérent, le comportement résultant sera également thermodynamiquement cohérent, comme l'ont démontré Miehe et al. [251].
- Aucune limitation sur le type de comportement. On peut donc traiter l'orthotropie initiale ou induite, la plasticité et la viscoplasticité, le gonflement, l'expansion thermique, etc. en utilisant le même formalisme que dans la théorie des déformations infinitésimales.

La procédure proposée a été implémentée dans le générateur de code open-source MFront développé au sein de la plateforme PLEIADES [1] pour traiter les comportements mécaniques, elle est résumée en trois points :

1. Calculer les déformations logarithmiques $\boldsymbol{\varepsilon}_{log}|_t$ et $\boldsymbol{\varepsilon}_{log}|_{t+\Delta t}$ au début du pas de temps et à la fin du pas de temps respectivement, en utilisant l'équation (4.15).
2. Appeler n'importe quelle loi de comportement écrite dans le cadre de la théorie de la déformation infinitésimale.
3. Interpréter la contrainte résultante comme le dual de la déformation logarithmique à la fin du pas de temps $\mathbf{T}|_{t+\Delta t}$. Utiliser les équations (4.27) et (4.28) pour transformer $\mathbf{T}|_{t+\Delta t}$ en tenseur de contrainte attendu pour résoudre l'équilibre (premier tenseur de contrainte de Piola- Kirchhoff dans ce cas).

Pour les comportements mécaniques, MFront introduit des interfaces pour divers solveurs d'éléments finis notamment Cast3M.

4.5.3 Formulation du champ de phase pour les déformations finies

Considérons le corps Ω soumis à des conditions aux limites mixtes (voir la figure 2.14 dans le chapitre 2)

$$\boldsymbol{\Pi} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{F}^* \quad \text{sur} \quad \partial\Omega^F \quad (4.29)$$

et

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}^* \quad \text{sur} \quad \partial\Omega^u \quad (4.30)$$

où $\boldsymbol{\Pi}$ est le premier tenseur de contrainte de Piola- Kirchhoff, et \mathbf{n} est le vecteur unitaire orienté vers l'extérieur sur $\partial\Omega^F$ dans la configuration de référence. L'énergie totale du système est alors donnée par :

$$E = \int_{\Omega} (g(d) + k)\Psi(\boldsymbol{\epsilon}_{log}, d) d\Omega + g_c \int_{\Omega} \gamma(d, \nabla d) d\Omega - \int_{\partial\Omega_F} \mathbf{F}^* \cdot \mathbf{u} d\Gamma \quad (4.31)$$

La fonction γ prend la forme donnée dans l'équation 2.39. Des modèles couplant les déformations finies avec les dilatations thermiques peuvent être trouvés dans [107]. Ici, nous poursuivons une approche similaire, par analogie avec la thermoélasticité, en substituant les coefficients de dilatation thermiques par les coefficients d'expansion. Le gradient de déformation total est ainsi défini par la décomposition multiplicative :

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^e \cdot \mathbf{F}^{\Delta h} \quad (4.32)$$

où \mathbf{F}^e et $\mathbf{F}^{\Delta h}$ sont associés aux parties élastique et expansive due à la corrosion de la déformation, voir la Figure 4.20. Dans le cas des transformations finies, nous pouvons traduire l'expansion due à la corrosion par un gradient de la transformation $\mathbf{F}^{\Delta h}$:

$$\mathbf{F}^{\Delta h} = (1 + \beta \cdot \Delta h) \mathbf{I} \quad (4.33)$$

on peut écrire :

$$\mathbf{C} = \mathbf{F}^T \cdot \mathbf{F} = \mathbf{F}^{eT} \cdot \mathbf{F}^e \cdot \mathbf{F}^{\Delta h T} \cdot \mathbf{F}^{\Delta h} = \mathbf{C}^e \cdot \mathbf{C}^{\Delta h} \quad (4.34)$$

En prenant le logarithme de l'expression (4.34) pour définir la déformation de Hencky $\boldsymbol{\epsilon}_{log}^{tot}$, nous obtenons :

$$\boldsymbol{\epsilon}_{log}^{tot} = \frac{1}{2} \log(\mathbf{C}) = \frac{1}{2} \log(\mathbf{C}^e) + \frac{1}{2} \log(\mathbf{C}^{\Delta h}) \quad (4.35)$$

ce qui permet de retrouver la partition classique de la déformation :

$$\boldsymbol{\epsilon}_{log}^{tot} = \boldsymbol{\epsilon}_{log}^e + \boldsymbol{\epsilon}_{log}^{\Delta h} \quad (4.36)$$

en définissant la déformation d'expansion par la relation :

$$\boldsymbol{\epsilon}_{log}^{\Delta h} = \frac{1}{2} \log(\mathbf{C}^{\Delta h}) \quad (4.37)$$

$\mathbf{F}^{\Delta h}$ étant proportionnel à l'identité, nous pouvons également écrire $\boldsymbol{\epsilon}_{log}^{\Delta h} = \log(\mathbf{F}^{\Delta h})$. Ainsi, les composantes diagonales (qui sont égales) du tenseur d'expansion due à la corrosion s'écrivent :

$$\left(\boldsymbol{\epsilon}_{log}^{\Delta h} \right)_{kk} = \log(1 + \beta \cdot \Delta h) \quad (4.38)$$

Si la déformation d'expansion est petite, nous retrouvons la déformation d'expansion en transformations infinitésimales. Le tenseur dual des contraintes \mathbf{T} est alors donné par :

$$\mathbf{T}(\boldsymbol{\varepsilon}_{log}^{tot}, \boldsymbol{\varepsilon}_{log}^{\Delta h}, d) = g(d) \left(\left[\lambda \langle tr(\boldsymbol{\varepsilon}_{log}^e) \rangle_+ + 2\mu \boldsymbol{\varepsilon}_{log}^{e+} \right] + \left[\lambda \langle tr(\boldsymbol{\varepsilon}_{log}^e) \rangle_- + 2\mu \boldsymbol{\varepsilon}_{log}^{e-} \right] \right) \quad (4.39)$$

Formulation forte

Le problème de fissuration est défini comme deux problèmes incrémentaux (mécanique et champ de phase) résolus à chaque pas de temps, les formulations fortes associées sont définies comme :

$$\left\{ \begin{array}{l} div \boldsymbol{\Pi} = 0 \quad \text{dans } \Omega \\ \mathbf{T}(\boldsymbol{\varepsilon}_{log}^{tot}, \boldsymbol{\varepsilon}_{log}^{\Delta h}, d) = g(d) \mathbb{C} \left(\boldsymbol{\varepsilon}_{log}^{tot} - \boldsymbol{\varepsilon}_{log}^{\Delta h} \right) \\ \boldsymbol{\varepsilon}_{log}^{\Delta h} = \log(1 + \beta \cdot \Delta h) \mathbf{I} \\ \boldsymbol{\Pi} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{F}^* \quad \text{sur } \partial \Omega^F \\ \mathbf{u} = \mathbf{u}^* \quad \text{sur } \partial \Omega^u \end{array} \right. \quad (4.40)$$

et

$$\left\{ \begin{array}{l} \left(\frac{g_c}{\ell} + 2\mathcal{H} \right) d - g_c \ell \Delta d = 2\mathcal{H} \quad \text{dans } \Omega \\ \nabla d \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{dans } \partial \Omega \\ d = 1 \quad \text{sur } \Gamma \end{array} \right. \quad (4.41)$$

Formulation faible

La forme faible du problème mécanique est donnée par :

$$\int_{\Omega} \mathbf{T}(\boldsymbol{\varepsilon}_{log}^{tot}, \boldsymbol{\varepsilon}_{log}^{\Delta h}, d) : \boldsymbol{\varepsilon}_{log}^{tot}(\delta \mathbf{u}) d\Omega = \int_{\partial \Omega^F} \mathbf{F}^* \cdot \partial \mathbf{u} dS \quad (4.42)$$

et pour le problème de champ de phase par :

$$\int_{\Omega} \left[\left(2[\mathcal{H}] + \frac{g_c}{\ell} \right) d \delta d + g_c \ell \nabla d \cdot \nabla(\delta d) \right] d\Omega = \int_{\Omega} 2[\mathcal{H}] \delta d d\Omega \quad (4.43)$$

4.5.4 Comparaison entre les formulations linéaires et non linéaires

L'objectif de cette partie est de comparer les réponses obtenues avec les formulations de champ de phase linéaire (en petites déformations) et non linéaire (en grandes déformations).

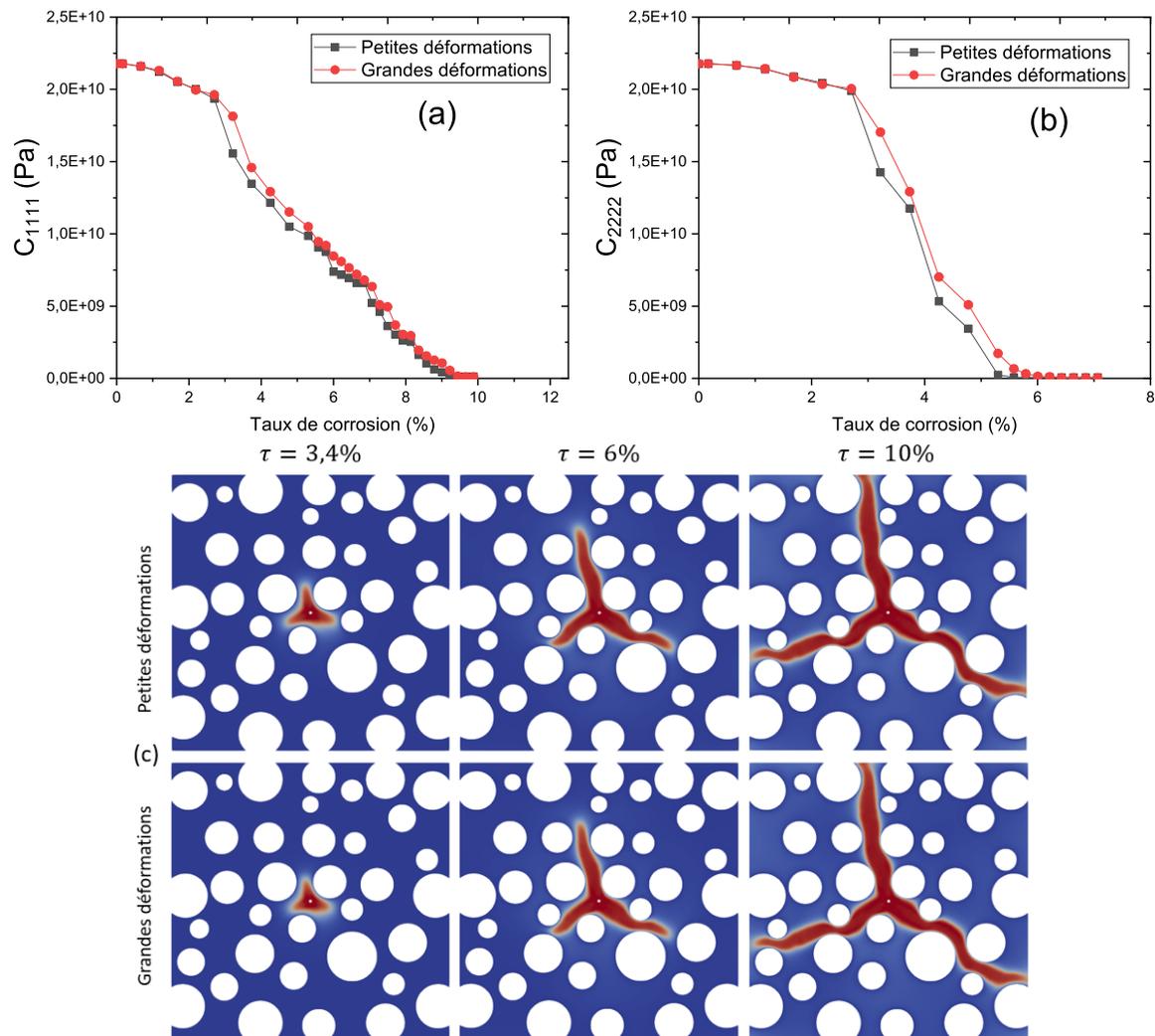


FIGURE 4.22 (a)(b) Modules effectifs \bar{C}_{1111}^{eff} et \bar{C}_{2222}^{eff} en fonction du taux de corrosion pour les deux formulations sous les conditions aux limites CL2, (c) faciès de fissuration à des taux de corrosion $\tau = 3.4\%$, $\tau = 6\%$, et $\tau = 10\%$.

Pour cette étude, nous utilisons la microstructure présentée dans la figure 4.3(c) pour des conditions aux limites CL2 et CL4. La figure 4.22 montre la diminution des modules effectifs \bar{C}_{1111}^{eff} et \bar{C}_{2222}^{eff} en fonction du taux de corrosion et les faciès de fissuration à des taux de corrosion $\tau = 3.4\%$, $\tau = 6\%$, et $\tau = 10\%$ sous les conditions aux limites CL2 pour les deux formulations. Selon ces résultats, nous pouvons noter qu'une légère différence entre le comportement de fissuration de la formulation en petites et grandes déformations est constatée, et des faciès de fissuration similaires à différents taux de corrosion sont obtenus.

La figure 4.23 illustre la diminution des modules effectifs \bar{C}_{1111}^{eff} et \bar{C}_{2222}^{eff} en fonction du taux de corrosion et les faciès de fissuration à des taux de corrosion $\tau = 10\%$, $\tau = 35\%$, $\tau = 58\%$, et $\tau = 88\%$ sous CL4 pour les deux formulations. Il est à noter que hormis une très légère différence de vitesse de propagation de la fissure au delà de $\tau = 20\%$, les différences ne sont pas significatives. La figure 4.23(c) compare les trajets de fissures pour un modèle en petites et grandes déformations. Nous ne notons pas, ici également, de différences significatives sur les trajets de fissures en petites et grandes déformations. La cause peut être la configuration choisie : l'inclusion est de petite taille par rapport à la cellule unitaire et les déformations importantes engendrées par l'expansion de l'inclusion restent locales, tandis que le reste du domaine reste localement en petites déformations. Une étude plus approfondie serait nécessaire pour mieux comprendre cet effet.

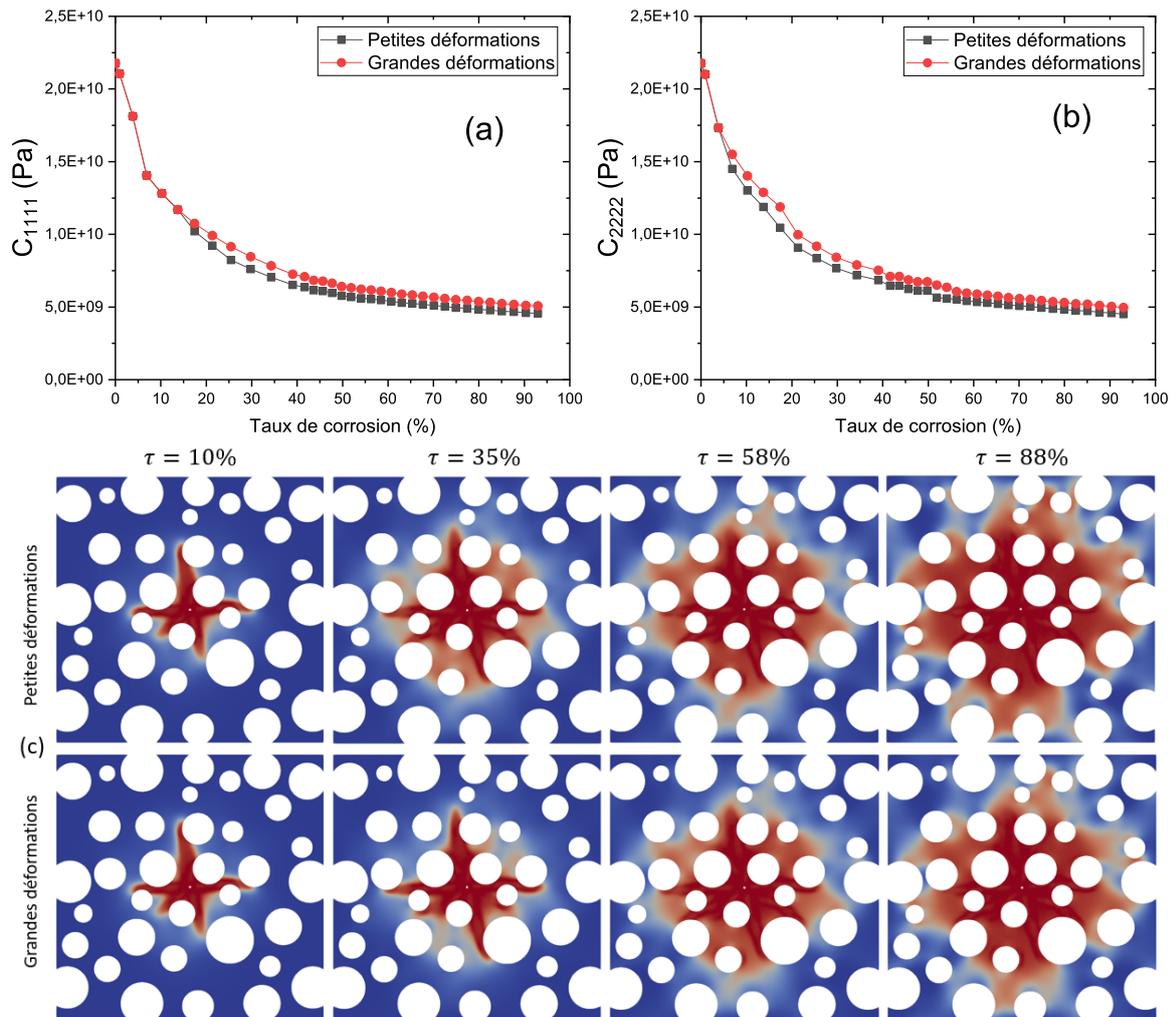


FIGURE 4.23 (a)(b) Modules effectifs \bar{C}_{1111}^{eff} et \bar{C}_{2222}^{eff} en fonction du taux de corrosion pour les deux formulations sous les conditions aux limites CL4, (c) faciès de fissuration à des taux de corrosion $\tau = 10\%$, $\tau = 35\%$, $\tau = 58\%$, et $\tau = 88\%$.

4.6 Conclusion

En tenant compte des hétérogénéités dans le colis (déchets) et en supposant uniforme l'expansion induite par la corrosion de l'inclusion d'uranium, le comportement des microstructures soumises à une fissuration due à l'expansion induite par la corrosion a été étudié en utilisant la méthode de champ de phase (64 calculs de VER ont été effectués). Les résultats de la simulation montrent que la méthode de champ de phase est efficace dans la description de la fissuration dans le cas des gonflement internes. De plus, à partir des résultats de simulation, on peut conclure que :

- Les conditions aux limites (CL) imposées ont un fort effet sur le faciès de fissuration de la microstructure. Dans le cas des conditions aux limites bloquées, la propagation de l'endommagement dans la matrice est restreinte avec l'avancement de la réaction de corrosion. Les mêmes remarques peuvent être faites pour les CLs en compression. Dans le cas des déformations libres, la rupture de la microstructure est obtenue à environ 10% de taux de corrosion. Une propagation des fissures lente a été observée dans le cas des conditions aux limites en déformations imposées.
- La propagation de l'endommagement est impactée par l'incorporation de graphite dans la matrice cimentaire, et le trajet de la fissure dépend de la position des inclusions de graphite et a tendance à se propager dans les zones où il y a moins de graphite.
- Un effet positif de la fraction volumique des inclusions de graphite sur la propagation des fissures due à l'expansion de l'uranium est observé, de sorte qu'à partir de $\tau = 5\%$ la diminution des modules effectifs est atténuée par la présence d'inclusions de graphite.

La définition de la taille du volume élémentaire représentatif (VER) est extrêmement importante en mécanique des matériaux hétérogènes, car celui-ci doit représenter la microstructure du matériau. Cet aspect a été analysé en comparant les résultats obtenus avec différentes tailles d'échantillon. Nous avons conclu que pour les deux approches (cellules unitaires et une seule inclusion au centre) et dans les trois configurations (tailles différentes d'inclusions de graphite), l'échantillon pouvait être considéré comme un VER pour des tailles supérieures à environ $200 \times 200mm$. Il faut noter qu'en augmentant le nombre de réalisations, les résultats convergent vers une taille de VER plus précise. Les résultats montrent que le comportement de fissuration avec la méthode de champ de phase est sensible à la taille des éléments de maillage.

Enfin, nous avons étudié les différences de résultats obtenus en utilisant un modèle en petites et grandes déformations. Pour les configurations étudiées, nous n'avons pas noté de différences significatives ni dans les trajets ni dans les vitesses de propagation des fissures.

Une étude plus approfondie serait nécessaire pour déterminer dans quelles conditions ces résultats restent valables. Ce point est, pour des raisons de temps, laissé en perspective.

$$\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\varepsilon}, d) = g(d)\mathbb{C}(\boldsymbol{\varepsilon}^{tot} - \boldsymbol{\varepsilon}^*) \quad (4.44)$$

Chapitre 5

Application de la méthode k-means FE² à un colis de déchets

5.1 Introduction

Le retraitement des déchets radioactifs comprend toutes les opérations qui modifient les caractéristiques des déchets, telles que le prétraitement, le traitement et le conditionnement. L'immobilisation ou le conditionnement désigne les opérations qui produisent un ensemble de déchets qui peuvent être manipulés, transportés, stockés et éliminés. De nombreuses études ont révélé qu'une partie des colis de déchets radioactifs cimentés se détériorent pendant la phase de stockage [368, 301, 201]. Cette dégradation a été attribuée à la corrosion continue des déchets métalliques encapsulés, qui se produit tout au long de la période de stockage [110, 368, 308, 340], ainsi qu'à la déformation de retrait de la matrice d'enrobage [208, 332, 384]. La corrosion des phases métalliques, notamment le magnésium et l'uranium, s'accompagne d'une expansion volumique, qui est considérée comme responsable de la dégradation observée dans les colis de déchets. La rupture potentielle de parties du colis suscite des inquiétudes considérables au sein de l'industrie nucléaire quant à l'efficacité et à la sécurité à long terme des colis et du milieu environnant. Cela est particulièrement préoccupant car l'uranium et le magnésium se corrodent dans l'eau présente dans les pores de la matrice cimentaire pour libérer de l'hydrogène selon les réactions 1.1 et 1.2.

L'objectif principal de ce chapitre est de simuler le comportement macroscopique d'un colis de déchets cimentés soumis à une expansion due à la corrosion des inclusions métalliques d'uranium à l'échelle microscopique, et à la déformation de retrait de la matrice cimentaire, afin de vérifier son intégrité à long terme.

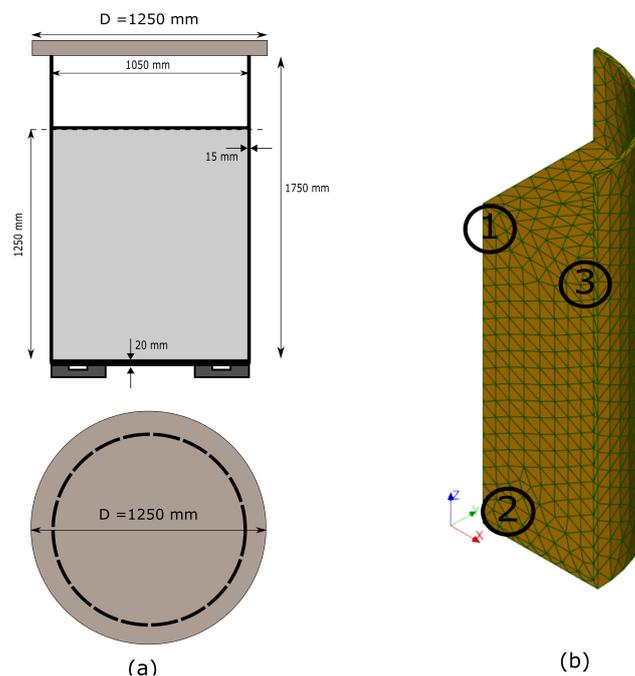


FIGURE 5.1 Démonstrateur de colis de déchet : (a) géométrie et (b) maillage macroscopique.

5.2 Données de base

5.2.1 Descriptif du fût métallique

Le scénario de la reprise et du conditionnement des déchets prévoit l'immobilisation des déchets dans un fût métallique. Les caractéristiques (représentatives des choix industriels) du fût métallique sont données dans le tableau 5.1 :

Caractéristiques dimensionnelles	Fût métallique
Diamètre interne	1050 mm
Hauteur de remplissage	1568 mm
Hauteur externe	1700 mm

TABLEAU 5.1 Caractéristique du fût métallique

Le schéma du fût métallique est présenté dans la Figure 5.1(a). Il est important de noter que ce modèle de colis est en cours de développement et qu'il n'est pas, à ce stade de l'étude, représentatif d'un colis définitif.

5.2.2 Déchets à traiter

Les déchets à traiter sont issus du retraitement des éléments combustibles de la filière UNGG. Ces déchets ont été entreposés dans des silos, ainsi que dans certains des curseurs du SOD (Stockage Organisé des Déchets). Comme mentionné précédemment, les déchets de structure des éléments combustibles sont constitués historiquement de :

- Graphite, sous forme de morceaux de chemises brisées ou de selles.
- Magnésium (ou alliage de magnésium) sous forme de gaines, de centreurs et de queusots.
- Produits de corrosion du magnésium.
- Uranium sous forme de pastilles ou d'éclats de pastilles.
- Fils de selle en acier inoxydable et solidaires des selles de graphite.

Lors de la reprise, deux typologies de déchets seront distinguées, à savoir les gros déchets (GD) et les déchets de faible granulométrie (DFG) de taille inférieure ou égale à 2 mm. D'autres DFG issus des procédés de reprise et traitement des GD et des curseurs du SOD viennent se rajouter à l'inventaire initial, à savoir :

- Du sable de découpe (corindon) provenant des curseurs du SOD.
- Des boues d'oxydes d'uranium.
- Des insolubles provenant de la dissolution carbonique du magnésium.
- Du sable de filtration grossière.
- Des échangeurs minéraux.

Dans le cadre de ce travail, nous considérons deux types de déchets : (1) le graphite sous forme de chemises (cylindres creux de 136 mm de diamètre extérieur, 112 mm de diamètre intérieur et 604 mm de longueur) concassées ; les fractions volumiques après concassage sont illustrées dans le tableau 5.2 ; (2) des inclusions d'uranium métallique de forme polyédrique et de fraction volumique de 0.005%.

Granulométrie des inclusions de graphite	Répartition massique
$x > 50mm$	47.77%
$31 < x < 50mm$	35.42%
$4 < x < 31mm$	15.24%
$1 < x < 4mm$	0.19%
$0.1 < x < 1mm$	0.5%
$x < 0.1mm$	0.88%

TABLEAU 5.2 Fractions volumiques de graphite

En ce qui concerne la matrice de blocage (ciment à base de laitier alcali-activé CLAA), il est à noter que cette formulation a été développée pour le conditionnement des GD à l'aide d'un procédé de cimentation hétérogène pour lequel le coulis était préparé en amont puis introduit par gravitation dans le fût métallique. Ce dernier était ensuite vibré afin d'optimiser le remplissage et réduire ainsi le vide résiduel au sein du bloc de déchets cimentés. Le mode d'introduction dans le fût a entraîné le développement d'une formulation très fluide pour faciliter l'écoulement du coulis au travers des gros déchets. Cette formulation a dû être adaptée pour permettre l'incorporation de DFG lors de la cimentation commune des gros déchets et des DFG. Ainsi, une campagne expérimentale a été préalablement entreprise au CEA de Marcoule dans le but d'identifier une formulation de liant hydraulique minimisant la production d'hydrogène de corrosion des alliages de Mg dans ces milieux alcalins. La composition retenue est un mortier de laitier activé à la soude [67].

5.2.3 Génération des microstructures hétérogènes

Il existe principalement deux méthodes pour générer des microstructures 3D pour la modélisation par éléments finis : (a) en utilisant des algorithmes et outils numériques avancés [24, 279], et (b) en utilisant la microstructure réelle obtenue expérimentalement par tomographie aux rayons X [289, 366, 288]. Dans cette thèse, la première méthode est utilisée. La procédure de génération de microstructures cubiques 3D est détaillée notamment dans [163, 86]. Le script python Combs utilisant les fonctionnalités du code de conception assistée par ordinateur (CAO) Salome [3] est appliqué pour générer les géométries et les maillages des microstructures. Le volume élémentaire représentatif (VER) est défini par les dimensions du cube, la forme et la taille des inclusions, le nombre d'inclusions par famille à insérer (ou sa fraction volumique), la distance minimale entre chaque inclusion, et les conditions aux limites périodiques ou non. Les géométries sont obtenues par un processus de distribution aléatoire des particules dans le cube, des plus grandes tailles aux plus petites. Ensuite, les logiciels de maillage automatique développés par Distene [2] sont utilisés pour mailler la géométrie obtenue, avec des éléments triangulaires pour les éléments de surface (MeshGems-CADSurf) et des éléments tétraédriques pour les volumes (MeshGems-Tetra).

Afin d'obtenir des formes représentatives des déchets de graphite dans les microstructures générées, on propose d'effectuer une opération booléenne de calcul de volume commun entre le manchon et une inclusion polyédrique. Ce type d'inclusions convexes est obtenu de façon très classique par une décomposition de l'espace suivant la procédure de Voronoï.

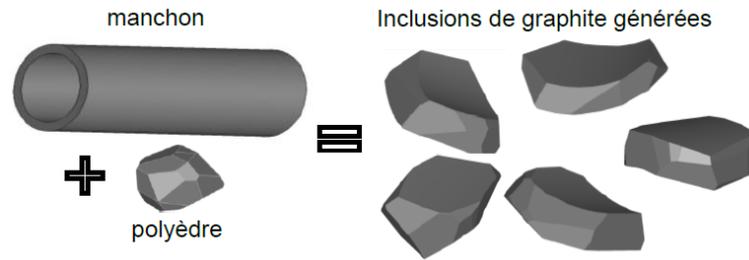


FIGURE 5.2 Exemples d'inclusions de graphite obtenues

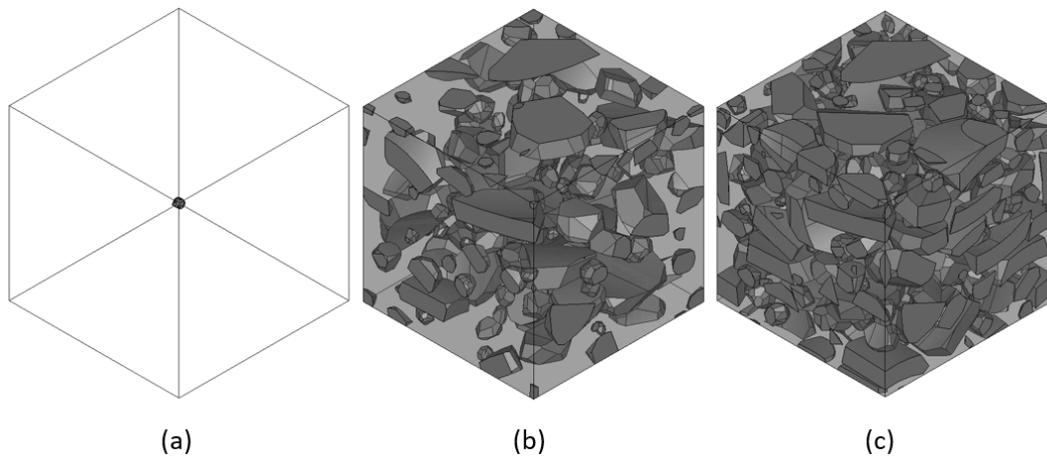


FIGURE 5.3 Microstructures générées : (a) avec une inclusion d'uranium au centre ; (b) avec 20% et (c) 40% de graphite

Le placement des points définissant les centres des particules de Voronoï étant aléatoire, les inclusions ont des formes variées, qui peuvent par ailleurs être modifiées par l'utilisateur.

Le calcul du volume commun entre inclusions polyédriques et manchon est effectué avec Salome en amont de la procédure de placement dans le cube définissant un échantillon représentatif de matériau composite déchets - matrice cimentaire. Avant ce calcul, les dimensions des inclusions polyédriques sont ajustées afin de satisfaire à la répartition granulométrique fournie au tableau 5.2. On obtient alors des inclusions non convexes représentant une fraction de manchon, et présentant des surfaces cylindriques pour les plus gros déchets (voir la Figure 5.2).

Dans les applications suivantes, trois configurations de microstructure sont envisagées. La première microstructure contient une inclusion métallique d'uranium de forme polyédrique au centre du VER et de fraction volumique 0.005% (l'uranium est considéré dans cette étude comme des impuretés de petite taille et de faible fraction volumique), voir la Figure 5.3. Afin d'étudier l'effet de la fraction volumique du graphite sur la réponse du colis,

nous considérons dans les autres configurations une microstructure contenant une inclusion métallique d'uranium de forme polyédrique et des inclusions de graphite, avec une fraction volumique pour ces dernières de 20% et 40%. Les VERs générés sont montrés dans la figure 5.3 (b) et (c) respectivement. En ce qui concerne le maillage des microstructures (a), (b) et (c), ils comprennent un total de 75412, 98706, et 101389 éléments tétraédriques respectivement.

5.3 Comportement différé de la matrice cimentaire

Comme mentionné dans l'introduction, le ciment Portland a été largement utilisé pour l'immobilisation des déchets radioactifs [108, 134, 292, 293]. Cependant, les matrices fabriquées à base de ce liant ne sont pas pertinentes pour tous les types de déchets industriels [392]. Les matrices fabriquées à base de laitier alcali-activé se sont révélées être une bonne alternative pour immobiliser les déchets métalliques [302, 323]. Il est prouvé que les ciments de laitier alcalin constituent une meilleure matrice de solidification que le ciment Portland pour les déchets radioactifs [302, 323, 272].

Les colis de déchets cimentés présentent généralement des dimensions importantes ; les gradients de température et la restriction des déformations différées de la matrice cimentaire, du fait de la présence d'inclusions rigides (les déchets) et des parois du fût contenant l'enrobé peuvent être responsables de l'apparition de fissuration et d'une redistribution des contraintes dans le colis [208, 332, 384, 236]. De ce fait, il est très important d'étudier le comportement différé (retrait et fluage) de la matrice cimentaire. La prédiction des déformations différées dans les structures de déchets cimentés est cruciale pour évaluer leur durabilité et leurs conditions de stockage. Cette section se propose de décrire brièvement les déformations de retrait considérées, afin de bien délimiter le périmètre de cette étude. Les déformations différées de fluage seront abordées dans des études futures.

Les déformations de retrait comprennent la réduction de volume pendant l'hydratation, le retrait thermique, le retrait plastique, le retrait de dessiccation, et le retrait endogène, qui sont les principaux changements de volume mentionnés dans la littérature, voir par exemple [297, 70, 403, 275]. Il a été démontré dans [196, 208] que le mortier à base de ciment de laitier alcali-activé présente un retrait endogène plus élevé que celui à base de ciment Portland ordinaire.

Le retrait thermique est la réduction de volume due à la diminution de la température après la dissipation de la chaleur d'hydratation au moment de la prise, ou juste après [136]. Le retrait endogène se produit sans migration d'humidité, car l'eau est mobilisée à l'intérieur des pores capillaires par combinaison chimique pendant l'hydratation [196]. Le retrait de dessiccation (ou de séchage) est le retrait causé par la migration de l'eau interne depuis

l'intérieur vers l'extérieur du béton durci [144]. Le retrait plastique se produit lorsque l'eau est perdue, soit par évaporation en surface, soit par aspiration par une couche inférieure plus sèche, alors que le béton est à l'état plastique, c'est-à-dire que le temps de prise n'est pas terminé [22]. Un autre type de déformation de retrait, qui se produit en même temps que le retrait de séchage, est le retrait de carbonatation, qui est principalement dû à la diffusion du dioxyde de carbone (CO_2) dans les pores capillaires, et qui réagit par la suite avec la portlandite pour former des carbonates ($CaCO_3$) [344]. Nous supposons que les parois du colis sont étanches; dans ces conditions cette étude se limite aux conditions endogènes où les échanges hydriques entre le colis et le milieu extérieur sont nuls.

5.3.1 Retrait endogène

Le retrait endogène des matériaux à base de ciment est la déformation se produisant à température constante et sans échange hydrique avec le milieu ambiant [196, 208]. Sa force motrice de base est le retrait chimique : au fur et à mesure que l'hydratation se développe, le volume absolu diminue. Le début de cette déformation commence alors avec l'hydratation, dès que le ciment et l'eau sont en contact. Lorsque des matériaux cimentaires entrent en contact avec l'eau, ils réagissent pour former de nouveaux produits d'hydratation. Ces nouveaux produits d'hydratation sont poreux. Différentes tailles de pores sont formées. La formation de pores fins dans la microstructure du béton durci et la consommation d'eau par l'hydratation du ciment sont également des causes du retrait endogène. Ainsi les différents facteurs qui causent le retrait endogène sont [38] :

Retrait chimique : lorsque du ciment ou d'autres adjuvants minéraux sont impliqués dans le processus d'hydratation, le volume absolu des solides qui en résulte est inférieur au volume initial réel des réactifs. Ce progrès dans le développement/l'augmentation du retrait chimique est un phénomène continu associé au mécanisme d'hydratation.

Microstructure : Le développement du squelette de la pâte de ciment durcie qui comprend la prise de la pâte de ciment et la formation d'une matrice hydratée solide, le développement de la porosité et la distribution de la taille des pores, la résistance mécanique influencent le développement du retrait autogène.

Autodessiccation : L'eau initiale présente dans le système cimentaire diminue avec la progression de l'hydratation au fur et à mesure qu'elle est consommée par les réactifs. La réduction de l'eau libre présente dans le système provoque un séchage interne également appelé autodessiccation. Ce séchage interne est synonyme de diminution d'humidité relative

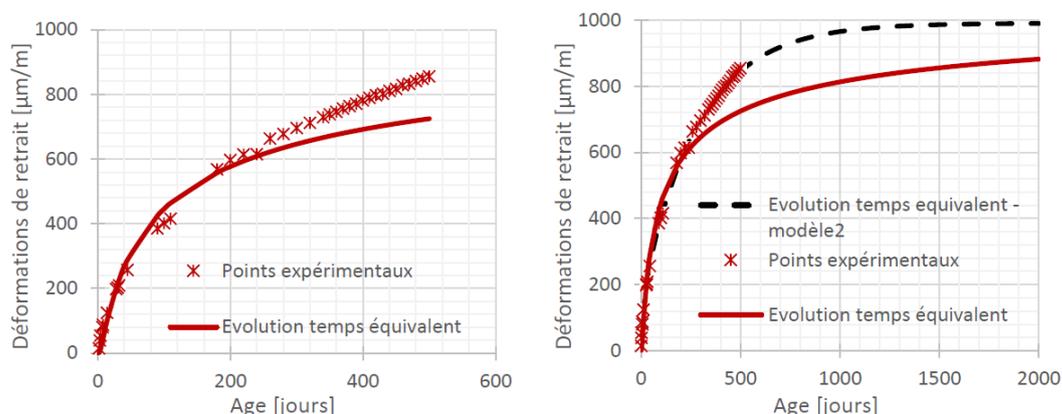


FIGURE 5.4 Mesures de retrait endogène de mortier de laitier alcali-activé et évolutions issues de modèles analytiques [331]

dans le système hydraté formé. Cette baisse d'humidité entraîne des contraintes au niveau du ménisque d'eau formé dans les pores capillaires, ce qui entraîne un retrait.

Les trois phénomènes ci-dessus contribuent ensemble au retrait endogène. Dans [196, 208] le retrait endogène est étudié dans les matériaux à base de ciment de laitiers alcali-activé. La restriction de la déformation de retrait endogène par des inclusions (les déchets dans cette étude) ou des éléments structuraux adjacents peut entraîner la formation de micro et macro-fissures qui affectent la résistance et la durabilité du colis de déchets cimentés [208].

Rifai [331] a étudié le comportement différé de la matrice d'enrobage à base de ciment de laitier alcali-activé utilisée dans le contexte du conditionnement des déchets. Les déformations de retrait endogène montrent une évolution particulière, avec une augmentation qui continue même à long terme. La figure 5.4 montre les résultats expérimentaux de l'évolution dans le temps de la déformation de retrait endogène des mortiers de laitier alcali-activé dans les travaux de Rifai [331], et la prédiction de l'évolution du retrait endogène par des modèles analytiques en temps équivalent (voir [331] pour plus de détails). Le retrait endogène des mortiers mesuré expérimentalement sera utilisé pour évaluer le comportement de la matrice dans le calcul multi-échelle (voir la section 5.4.3). Il convient de noter que la déformation de retrait de la pâte de ciment à base de laitier alcali-activé est plus importante que celle du mortier dans des conditions endogènes. En raison du manque de données expérimentales sur la pâte de ciment utilisée dans le conditionnement, les données expérimentales du retrait endogène des mortiers seront utilisées.

5.4 Application numérique

L'objectif de cette partie est de montrer le potentiel de la méthode k-means FE² pour des applications industrielles, notamment le conditionnement des déchets nucléaire. La structure macroscopique étudiée est représentée dans la figure 5.1(a) où seulement un quart est considéré pour des raisons de symétrie. L'épaisseur de l'enveloppe métallique externe est de 15 mm pour la paroi cylindrique et de 20 mm pour la paroi du fond. A l'échelle microscopique, les volumes élémentaires représentatifs considérés sont illustrés dans la figure 5.3. A l'échelle macroscopique, le colis est soumis à l'expansion effective des inclusions métalliques, qui est calculée à l'aide du coefficient d'interaction effectif $\beta_{eff}^* = 0.182m^{-1}$ (son expression et la méthode d'homogénéisation développée sont détaillés dans [37]). L'expression de la déformation d'expansion effective ε^* est donnée par :

$$\varepsilon^* = \beta_{eff} \Delta h \quad (5.1)$$

où Δh est l'épaisseur de la couche de produit de corrosion. La figure 5.1(b) illustre le maillage d'un quart du colis, avec 8816 éléments tétraédriques. Notons qu'une liaison parfaite entre la matrice d'enrobage et les parois métalliques est considérée. Dans le cadre de nos simulations, Δh a été pris comme paramètre de chargement. Lorsque Δh augmente, les déformations locales près des inclusions dans le VER créent un endommagement qui modifie le comportement macroscopique. Dans ce qui suit, nous étudions l'évolution de la rigidité locale au sein de la structure macroscopique pour des valeurs croissantes de l'épaisseur de la couche de produit de corrosion en utilisant la méthode proposée k-means FE². Notez que les mêmes paramètres mécaniques, hypothèses, et modèles de calcul que dans la section 4.3 ont été utilisés dans ce calcul.

5.4.1 Application 1 : Convergence par rapport au nombre de clusters

Dans cet exemple, la convergence de la méthode k-means FE² par rapport au nombre de clusters dans la structure macroscopique est testée. La microstructure illustrée dans la figure 5.3 (a) est considérée dans les calculs microscopiques. La convergence est vérifiée par deux moyens : (a) par rapport à la contrainte maximale de Von Mises, et (b) par rapport aux modules effectifs dans un élément macroscopique (lorsque les modules effectifs ne changent pas en augmentant le nombre de clusters). Les éléments macroscopiques ①, ②, et ③ sont considérés, voir la figure 5.1(b). Notez que dans cet exemple, seul l'endommagement dû à la corrosion est pris en compte. Pour modéliser la fissuration de la matrice à l'échelle

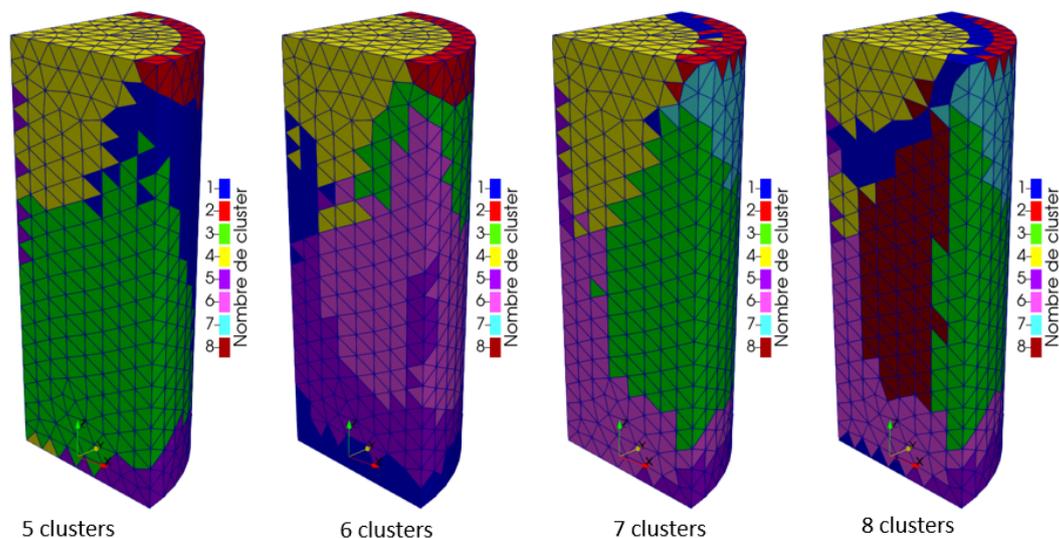


FIGURE 5.5 Position des clusters dans la structure macroscopique pour $k = 5, 6, 7, 8$

microscopique, la méthode de champ de phase est utilisée ici (voir la section 3.2). La longueur de régularisation est fixée à $\ell = 4mm$ (voir la figure 4.19).

La méthode k-means FE^2 est appliquée pour différents nombres de clusters. La figure 5.5 illustre la position des clusters pour $k = 5, 6, 7, 8$ clusters. La figure 5.6 montre les déformations macroscopiques $\bar{\epsilon}_{xx}$, $\bar{\epsilon}_{yy}$, et $\bar{\epsilon}_{zz}$ pour le taux de corrosion $\tau = 100\%$.

Nous utilisons ici la convergence par rapport aux modules effectifs dans les éléments ①, ②, et ③ dans la structure macroscopique (voir la figure 5.1). La figure 5.7 montre la diminution des modules effectifs \bar{C}_{1111}^{eff} , \bar{C}_{2222}^{eff} et \bar{C}_{3333}^{eff} en fonction du taux de corrosion τ des inclusions d'uranium pour différents nombres de clusters. Pour les éléments ①, ②, et ③ la convergence est vérifiée à 8 clusters. À titre de comparaison, une estimation du temps de calcul pour ce problème en utilisant la méthode FE^2 nécessiterait environ 760 heures (45570 calculs de VER), alors que la méthode k-means FE^2 avec 8 clusters ne prend que 16.7 heures (538 calculs de VER) pour des résultats similaires.

5.4.2 Application 2 : Endommagement lié à la corrosion d'uranium, effet de l'incorporation du graphite

Nous nous intéressons dans cette partie à l'étude d'un colis contenant des volumes élémentaires représentatifs hétérogènes avec des inclusions de graphite et d'uranium corrodé. Afin d'étudier l'effet de la fraction volumique des inclusions de graphite sur le comportement du colis, différents VERs ont été générés, voir la figure 5.3. A l'échelle macroscopique, la même structure que dans l'exemple précédent a été reprise avec le même chargement

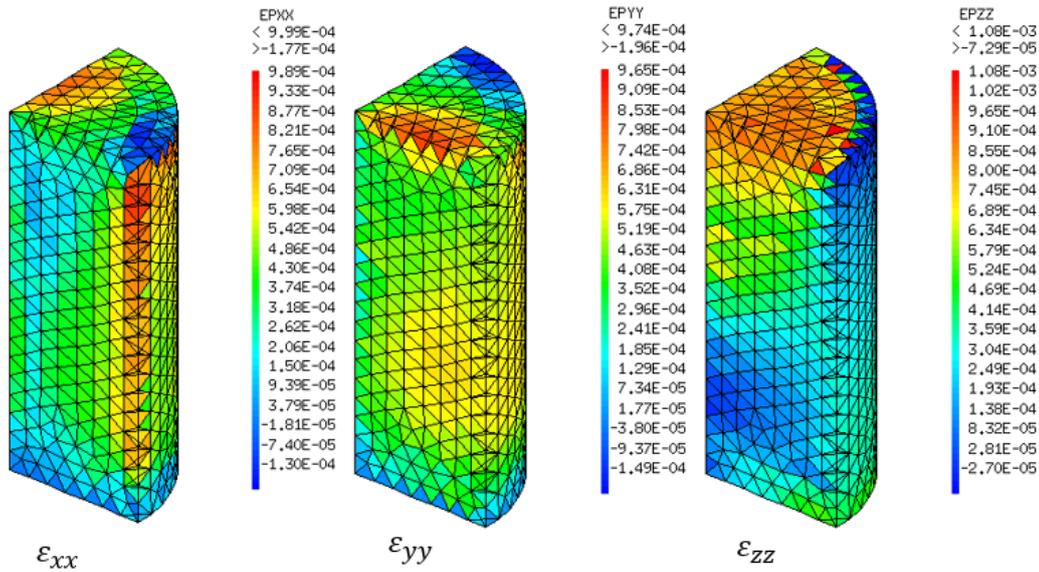


FIGURE 5.6 Déformations macroscopiques $\bar{\epsilon}_{xx}$, $\bar{\epsilon}_{yy}$, et $\bar{\epsilon}_{zz}$ pour le taux de corrosion $\tau = 100\%$

(expansion effective avec $\beta_{eff} = 0.135$, et $0.078m^{-1}$ dans le cas de 20%, et 40% de fraction volumique de graphite respectivement).

La figure 5.8 illustre les modules effectifs \bar{C}_{1111}^{eff} , \bar{C}_{2222}^{eff} et \bar{C}_{3333}^{eff} en fonction du taux de corrosion τ des inclusions d'uranium dans les trois éléments du maillage macroscopique (①, ② et ③) pour différentes fractions volumique de graphite. Il faut noter que les modules effectifs à $\tau = 0\%$ sont les modules effectifs initiaux de la microstructure hétérogène. Nous constatons une diminution des modules effectifs avec l'avancement de la réaction de corrosion dans tous les éléments du colis (nous avons pris le même VER avec la même cinétique de corrosion dans tous les éléments). Par ailleurs, le comportement du matériau devient anisotrope avec l'avancement de la réaction de corrosion (différents modules effectifs dans les trois directions dus aux différentes conditions aux limites macroscopiques imposées). Un effet positif de la fraction volumique d'inclusions de graphite sur la propagation des fissures dues à l'expansion de l'uranium est observé dans tous les éléments. Ainsi une perte de rigidité de 80%, 78%, et 67% est obtenue dans l'élément ① pour 0%, 20%, et 40% de fraction volumique de graphite, respectivement.

La distribution du champ d'endommagement des microstructures 5.3(a), (b) et (c) dans l'élément ① est présentée dans la figure 5.9, dans laquelle on peut observer que, comme prévu, les fissures apparaissent autour de l'inclusion d'uranium, puis elles se propagent à l'intérieur de la microstructure. D'après ces résultats, les différentes microstructures présentent une répartition différente de l'endommagement. Nous constatons également une évolution significative de l'endommagement dans la microstructure (a) par rapport à celle des

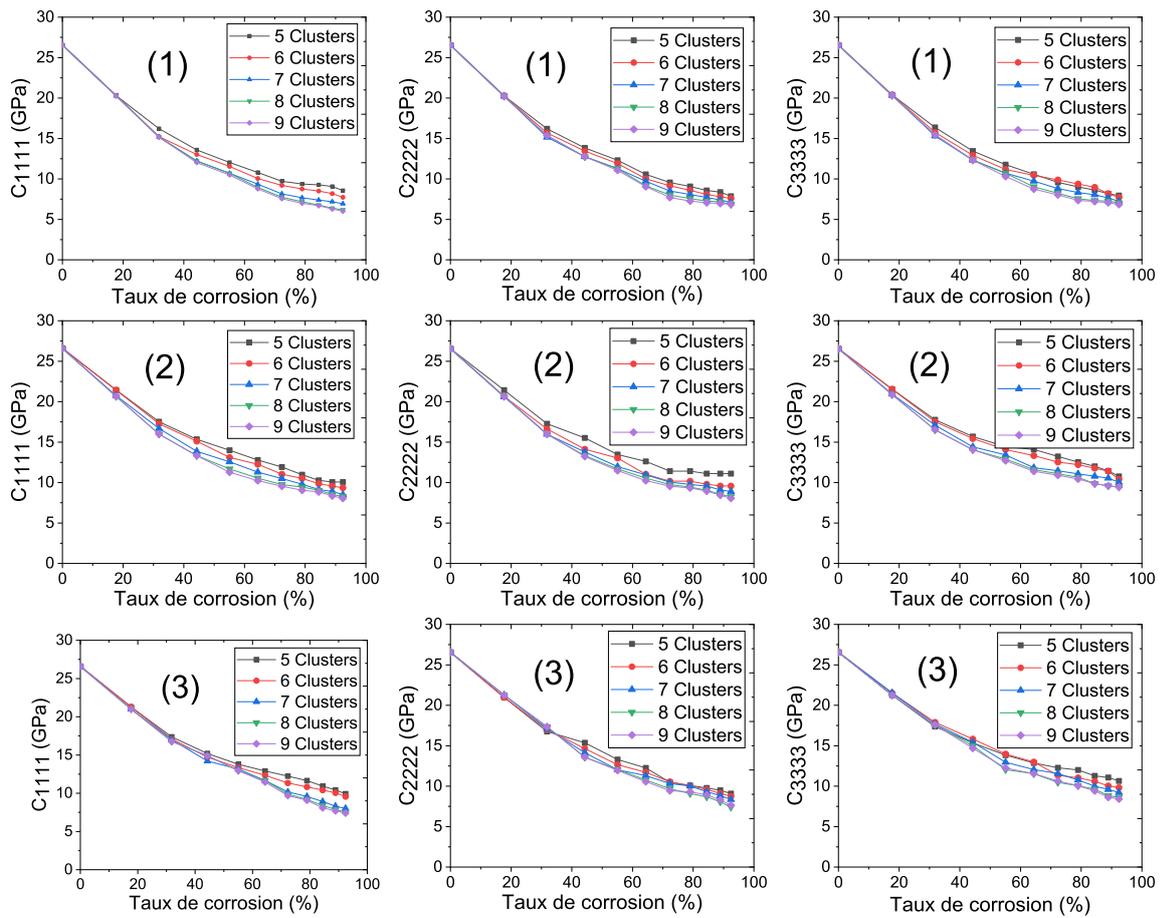


FIGURE 5.7 Modules effectifs \bar{C}_{1111}^{eff} , \bar{C}_{2222}^{eff} et \bar{C}_{3333}^{eff} en fonction du taux de corrosion pour les éléments ①, ②, et ③ dans la structure macroscopique pour différents nombres de clusters.

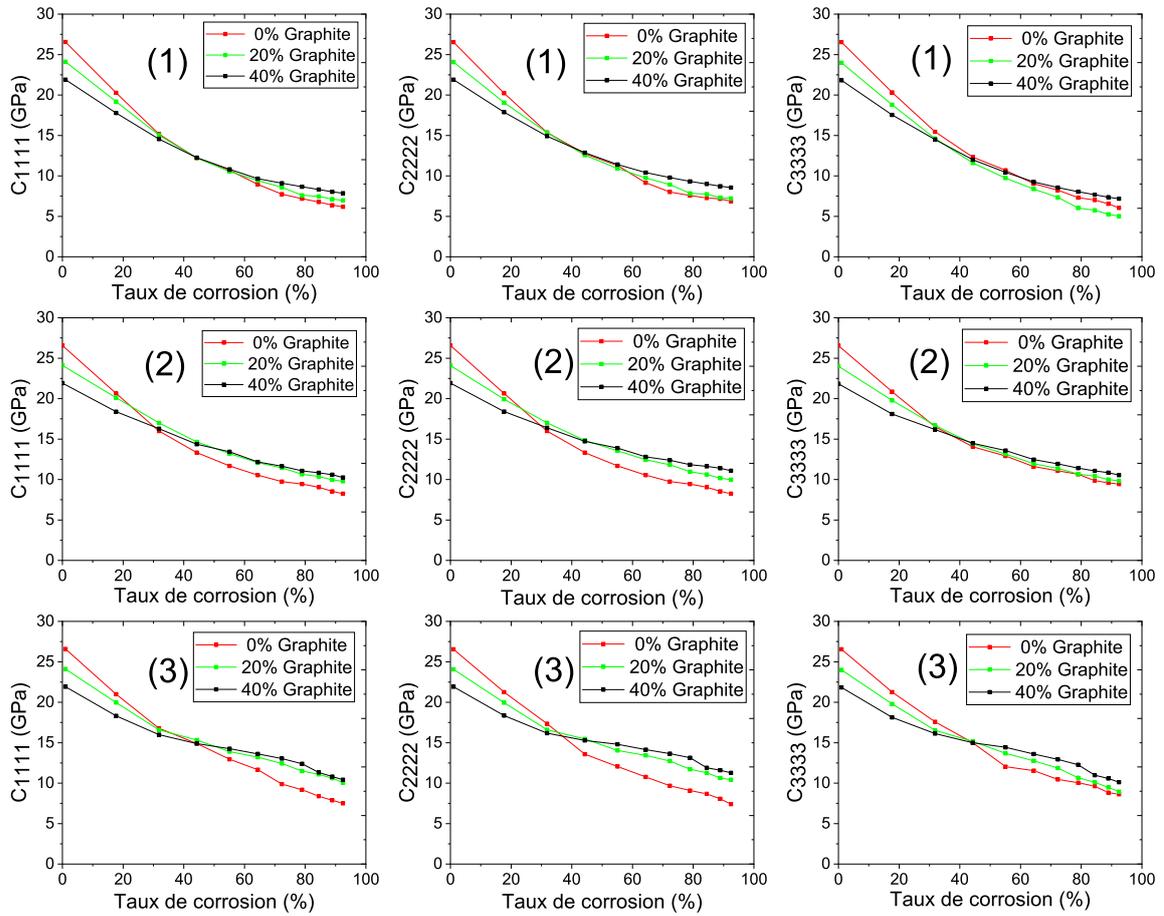


FIGURE 5.8 Modules effectifs \bar{C}_{1111}^{eff} , \bar{C}_{2222}^{eff} et \bar{C}_{3333}^{eff} en fonction du taux de corrosion pour les éléments ①, ② et ③ dans la structure macroscopique : effet de l'incorporation de graphite.

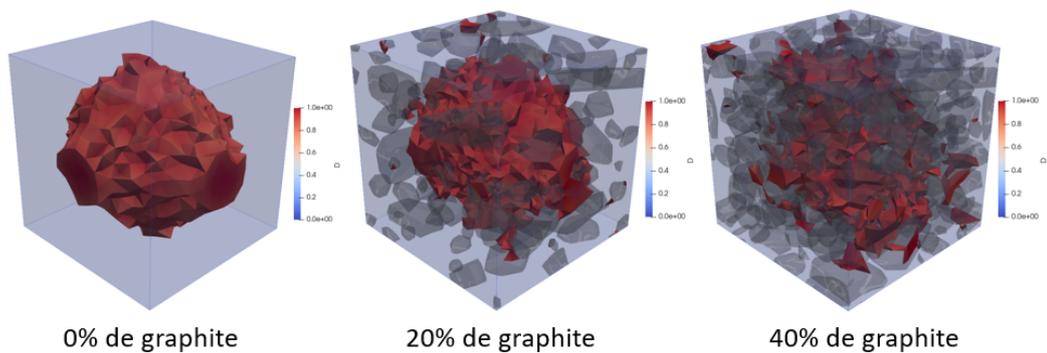


FIGURE 5.9 Champ d'endommagement $0.9 < d < 1$ dans l'élément ① pour différentes fractions volumiques.

microstructures (b) et (c), confirmant l'effet positif de l'incorporation du graphite. Grâce à la méthode k-means FE², nous pouvons à présent effectuer des calculs de colis en tenant compte du comportement mécanique local moyen de la microstructure tout en accédant à toutes les informations locales (contraintes, déformations, endommagement) dans la microstructure.

5.4.3 Application 3 : Endommagement lié au retrait endogène

Le retrait endogène est une propriété importante car il se développe rapidement au jeune âge et peut induire des problèmes de fissuration de la matrice cimentaire [236, 208]. Les fissures, que ce soit à l'échelle macro ou micro, peuvent affecter la durabilité à long terme des colis de déchets cimentés, et leur résistance à la corrosion.

Plusieurs méthodes numériques ont été proposées dans la littérature pour étudier les fissures induites par le retrait. Un modèle basé sur les éléments finis est présenté dans [39] pour prédire la fissuration au jeune âge, où les effets du transfert thermique, de l'hydratation, du retrait endogène/thermique et du fluage sont pris en compte. Le critère d'endommagement de Mazars [244] est adopté dans leur modèle. Il existe très peu de travaux mentionnant les effets de la microstructure, notamment les effets de la taille/forme des agrégats, et de la fraction volumique. Dans l'étude de Grassl et al. [137], la microfissuration induite par le retrait est simulée en utilisant l'approche du Lattice Element Model (voir la section 2.2.2), pour étudier les effets de la taille des agrégats et de leur fraction volumique sur le comportement en fissuration du mortier et du béton. Les effets de la composition du béton, la topologie de la structure, et les conditions aux limites ont été étudiés dans [170]. Nguyen et al. [283, 282] ont étudié l'influence de l'hétérogénéité microstructurale en employant un modèle numérique de champ de phase couplé chimio-thermo-mécanique. Cependant, ces études sont limitées par le fait que le phénomène de fissuration est souvent étudié à l'aide de modèles simplifiés. En outre, rares sont les modèles capables de prédire avec précision le comportement des structures de l'échelle microscopique à l'échelle macroscopique en utilisant une approche numérique multi-échelle efficace.

L'objectif principal de cet exemple numérique est d'illustrer la capacité de l'approche développée k-means FE² à résoudre des problèmes de propagation complexe de fissures dans un matériau hétérogène dans le cas d'un comportement différé (retrait).

Rappelons que les matériaux à base de ciment de laitier alcali-activé présentent au jeune âge un risque important de fissuration, ce qui a un impact majeur sur la durabilité des colis, l'évolution des propriétés mécaniques étant rapide et dépendant largement des processus chimiques et physiques. La modélisation de la rupture au jeune âge de ces matériaux à base de ciment par des approches numériques n'est pas une tâche triviale. Comme déjà mentionné, elle nécessite souvent la résolution d'un problème dit multi-physique du processus

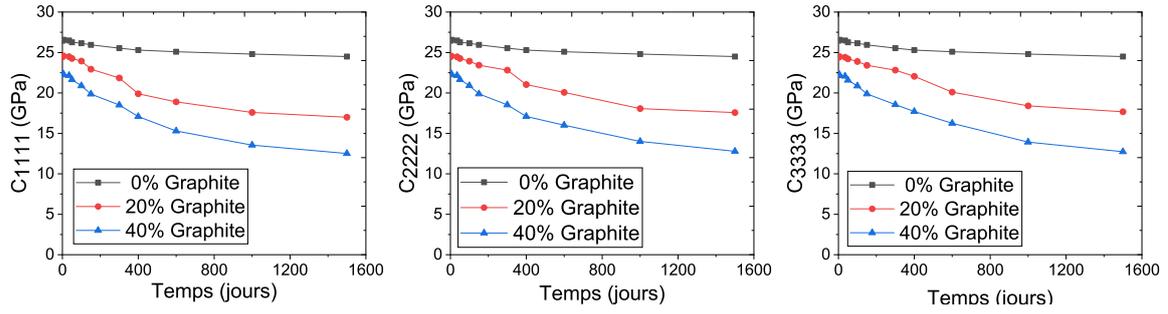


FIGURE 5.10 Modules effectifs $\overline{C}_{1111}^{eff}$, $\overline{C}_{2222}^{eff}$ et $\overline{C}_{3333}^{eff}$ de la structure macroscopique sous l'effet du retrait endogène pour différentes fractions volumiques de graphite.

d'hydratation comprenant de nombreux aspects tels que les effets chimiques, thermiques, mécaniques, environnementaux, de fluage et de retrait. Rappelons que nous étudions dans cet exemple le comportement de fissuration dans le colis en considérant uniquement le retrait endogène ; les autres phénomènes seront évoqués en perspectives.

A l'échelle microscopique, nous supposons un comportement prenant en compte le retrait endogène dans la matrice cimentaire et la possible initiation et croissance de fissures dues à la restriction des déformations de la matrice cimentaire par des inclusions rigides (graphite), et un comportement élastique linéaire dans les autres phases. Pour modéliser la fissuration de la matrice, la méthode de champ de phase est utilisée ici (voir la section 3.2). Différents VERs ont été testés, voir la figure 5.3. La déformation élastique ε^e dans la matrice est exprimée par :

$$\varepsilon^e = \varepsilon^{tot} - \varepsilon^{re} \quad (5.2)$$

avec ε^{re} la déformation de retrait endogène du mortier, voir la figure 5.4. A l'échelle macroscopique, des éléments d'interface ayant de faibles propriétés mécaniques sont placés entre les parois métalliques du fût et la matrice d'enrobage afin de reproduire un possible décollement entre l'enrobé et ces parois métalliques.

La figure 5.10 montre la diminution des modules effectifs $\overline{C}_{1111}^{eff}$, $\overline{C}_{2222}^{eff}$ et $\overline{C}_{3333}^{eff}$ en fonction du temps sous l'effet du retrait endogène de la matrice, pour les différentes fractions volumiques de graphite considérées. Nous pouvons constater que la diminution des modules effectifs est importante notamment dans le cas à 40% de graphite. La propagation des fissures affecte clairement les propriétés mécaniques de l'enrobé, une perte de rigidité de 30% et 44% est obtenue pour 20% et 40% de fraction volumique de graphite, respectivement.

La figure 5.11 illustre l'endommagement dans les microstructures contenant 20% et 40% de graphite. Quelques fissures entre les déchets et la matrice peuvent être observées, la plupart des fissures semblant apparaître à la surface du granulat et se propager vers la

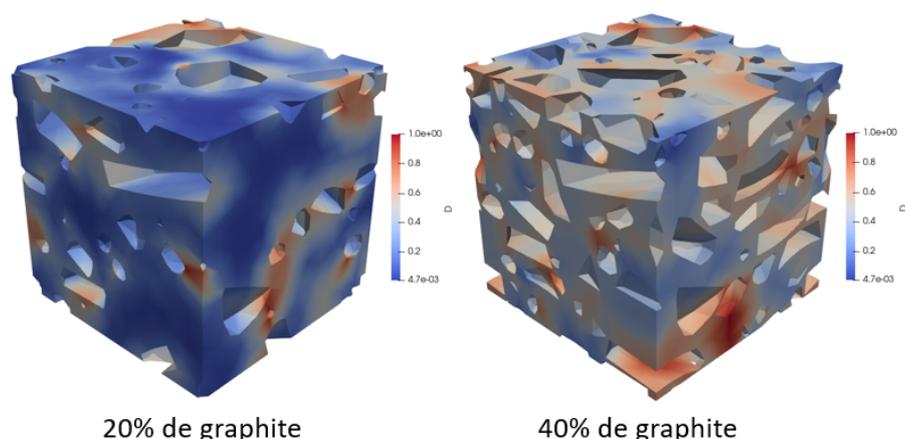


FIGURE 5.11 Champ d'endommagement dans la microstructure dans le cas du retrait endogène pour différentes fractions volumiques.

matrice. La fraction volumique des déchets influence donc la formation des microfissures induites par le retrait endogène restreint par les inclusions. Cependant, la représentation de la liaison entre les déchets et la matrice cimentaire par des interfaces parfaites peut altérer la propagation des fissures, du fait que le possible décollement des déchets n'est pas pris en compte. Dans de futurs travaux, des interfaces imparfaites entre les déchets et la matrice seront considérées, ainsi que la possibilité de décollement.

5.4.4 Application 4 : Endommagement lié au retrait endogène + corrosion

Dans ce dernier exemple, le comportement multi-échelle du colis soumis au retrait de la matrice cimentaire et à la corrosion des inclusions métalliques est étudié. Pour cela, les deux phénomènes étudiés dans les deux dernières applications seront pris en compte. Le retrait endogène et la corrosion dépendent du temps et sont mesurés sur des échantillons qui n'échangent pas d'eau avec leur environnement. Comme discuté dans la partie 2.5, la caractérisation de la corrosion de l'uranium constitue un défi majeur lorsque les déchets sont enrobés dans une matrice cimentaire. La plupart des travaux de recherche dans la littérature traitant de la corrosion de l'uranium sont focalisés sur son comportement dans des environnements non confinés [201, 301, 245, 386, 33]. Les résultats présentés dans [331] montrent un mode d'évolution particulier du retrait endogène pour le mortier de laitier activé. Les déformations commencent avec une cinétique importante au jeune âge. Cette cinétique diminue progressivement avec le ralentissement de la cinétique d'hydratation (jusqu'à environ 1000 jours). En partant de l'hypothèse que la cinétique de corrosion d'uranium dans la matrice

cimentaire est très longue par rapport au retrait endogène de la matrice cimentaire, nous supposons que les déformations de retrait sont découplées du phénomène de corrosion. En d'autres termes, pour simplifier le calcul, nous considérons à l'état initial le matériau ayant subi l'ensemble des déformations endogènes, avant d'imposer le chargement d'expansion dû à la corrosion des inclusions d'uranium.

La figure 5.12 montre la diminution des modules effectifs \bar{C}_{1111}^{eff} , \bar{C}_{2222}^{eff} et \bar{C}_{3333}^{eff} en fonction du taux de corrosion τ des inclusions d'uranium dans les trois éléments de la structure macroscopique ①, ②, et ③, pour différentes fractions volumiques de graphite, en prenant en compte la déformation de retrait endogène de la matrice cimentaire. Une perte de rigidité initiale due à la déformation de retrait endogène de la matrice cimentaire de 7%, 30% et 43% pour la fraction volumique de 0%, 20% et 40%, respectivement, est obtenue. Nous constatons une cinétique de dégradation plus lente dans le cas de la prise en compte des déformations de retrait dans la matrice cimentaire, par rapport au calcul sans retrait endogène de la figure 5.8. Cela peut s'expliquer par le fait que les déformations de retrait sont limitées par les inclusions de graphite jouant le rôle d'obstacles, entraînant le développement de contraintes de traction dans la matrice.

La distribution du champ d'endommagement dans les microstructures 5.3(b) et (c) de l'élément ① est présentée dans la figure 5.13, dans laquelle on peut observer les fissures causées par le retrait de la matrice cimentaire, et les fissures dues à la corrosion de l'inclusion d'uranium se propageant à l'intérieur de la microstructure. D'après ces résultats, les deux microstructures montrent une distribution différente de l'endommagement. On note également une évolution significative de l'endommagement dans la microstructure 5.3(c) par rapport à la microstructure 5.3(b).

Afin de visualiser le champ d'endommagement dans la structure macroscopique (indice de fissuration), un pseudo champ d'endommagement macroscopiques D^* est défini par :

$$D^* = \max_I D_I, \quad D_I = 1 - \sqrt{\frac{\bar{C}_I(d)}{\bar{C}_I^0}} \quad (5.3)$$

où \bar{C}_I^0 désigne la matrice de rigidité effectif initiale, et $\bar{C}_I(d)$ est celle de la microstructure endommagée, avec $I = 1111, 2222, 3333$. Le champ d'endommagement effectif D^* est estimé en prenant le champ maximum dans les trois directions x, y et z. Dans la figure 5.14, nous présentons les champs d'endommagement macroscopiques effectifs pour différentes fractions volumiques de graphite. Nous constatons que le risque de fissuration dans le colis avec 40% de graphite est important par rapport aux fractions volumiques de 0% et 20%. Cependant, la valeur maximale du champ d'endommagement effectif reste inférieure à 1. Enfin, Une perte de rigidité finale de 47%, 71%, et 80% a été obtenue dans le cas de 0%, 20%, et 40%

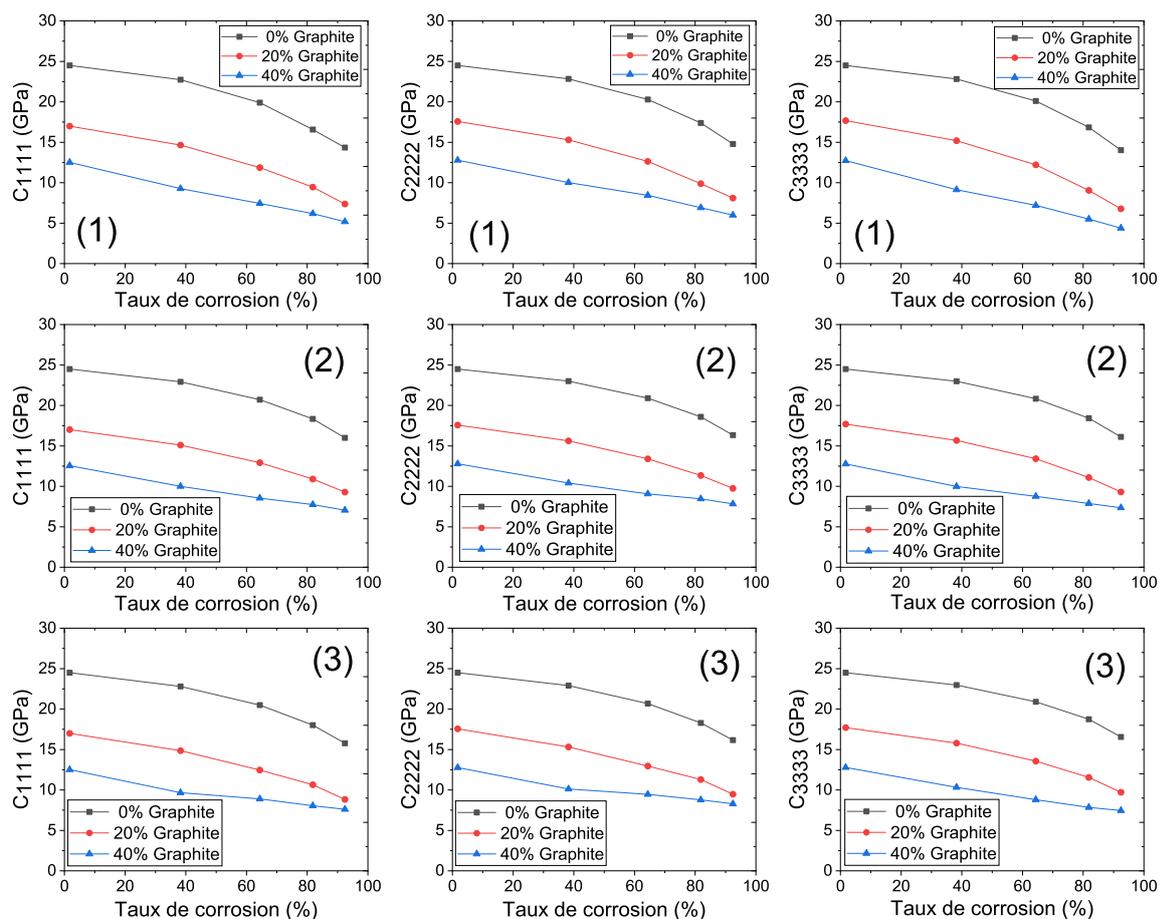


FIGURE 5.12 Modules effectifs \bar{C}_{1111}^{eff} , \bar{C}_{2222}^{eff} et \bar{C}_{3333}^{eff} en fonction du taux de corrosion pour les éléments ①, ②, et ③ dans la structure macroscopique pour différentes fractions volumiques de graphite, dans le cas du retrait endogène et de la corrosion de l'uranium.

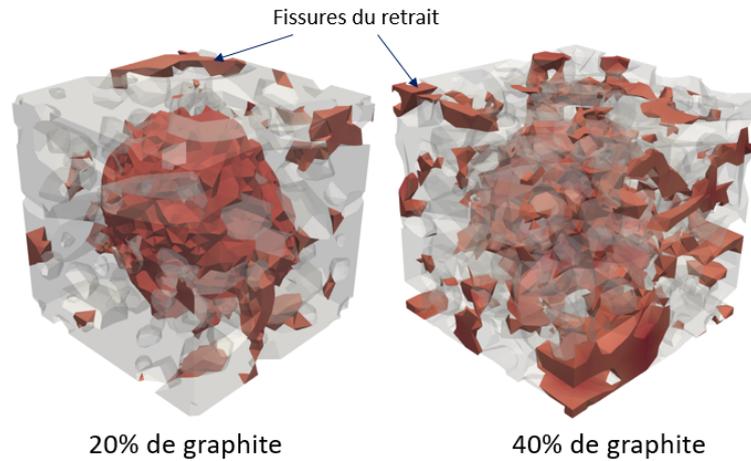


FIGURE 5.13 Champ d'endommagement $0.9 < d < 1$ dans l'élément ① dans le cas du retrait endogène de la matrice cimentaire et de la corrosion d'uranium pour les fractions volumiques de 20% et 40%.

de fraction volumique de graphite en considérant le retrait endogène et la corrosion totale de l'inclusion d'uranium.

5.5 Conclusion

Dans ce chapitre, la méthode k-means FE^2 a été appliquée à un cas d'étude industriel complexe, le conditionnement de déchets radioactifs. Nous avons ainsi d'une part démontré que cette méthode permet la faisabilité de calculs multi échelles non linéaires 3D de complexité et tailles compatibles avec les applications industrielles, et d'autre part nous avons réalisé une étude paramétrique de la réponse du colis subissant les effets d'une expansion interne attribuée à la corrosion d'une inclusion métallique et du retrait endogène de la matrice. Il est important de noter que ce modèle de colis est en cours de développement et qu'il n'est pas, à ce stade de l'étude, représentatif d'un colis définitif.

Deux types de déchets ont été considérés, une phase inerte de graphite, et une phase corrosive d'uranium métallique. Les déformations causées par le retrait endogène de la matrice cimentaire et la corrosion de l'uranium métallique impliquent des mécanismes complexes à l'échelle microscopique, et peuvent être responsables de l'apparition de fissures et de la redistribution de contraintes dans le colis. Dans les différentes applications, la fissuration causée par le retrait et la corrosion à l'échelle microscopique a été étudiée. Trois types de VER ont été générés, avec des fractions volumiques de graphite de 0%, 20% et 40%. Dans la première application, la méthode k-means FE^2 est appliquée à un calcul de colis, en considérant uniquement la déformation de corrosion de l'uranium, afin d'étudier

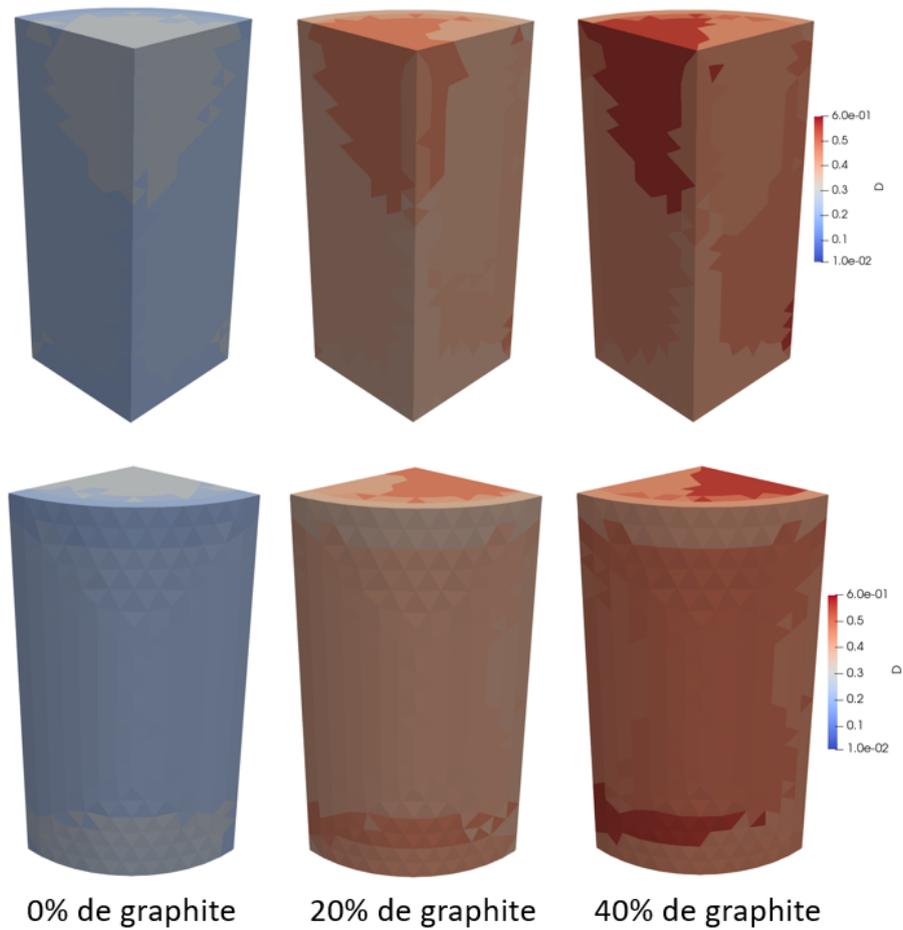


FIGURE 5.14 Champ d'endommagement dans la microstructure dans le cas du retrait endogène de la matrice cimentaire et de la corrosion d'uranium pour différentes fractions volumiques.

la convergence par rapport au nombre de clusters dans la structure macroscopique. La convergence est vérifiée par rapport aux modules effectifs dans un élément, lorsque ceux-ci ne changent quasiment plus en augmentant le nombre de clusters. La convergence est obtenue pour 8 clusters. Un gain significatif en temps de calcul a été obtenu avec cette méthode par rapport à une estimation d'un calcul FE^2 complet : un calcul pour ce problème en utilisant la méthode FE^2 nécessiterait environ 760 heures (45570 calculs de VER), alors que pour $k = 8$ clusters la méthode FE^2 k-means ne prend que 16.7 heures (538 calculs VER) pour des résultats similaires.

Dans la deuxième application, l'effet de l'incorporation de déchets de graphite à différentes fractions volumiques est étudié dans le cas de la corrosion d'uranium. Comme indiqué dans la section 4.4.2, un effet positif de la fraction volumique de graphite sur la propagation des fissures dues à la corrosion de l'uranium dans le colis est constaté. Dans le cas de la corrosion totale de l'inclusion d'uranium $\tau = 100\%$, une perte de rigidité de 80%, 78%, et 67% est obtenue dans l'élément ① pour 0%, 20% et 40% de fraction volumique de graphite, respectivement.

Dans la troisième application, le comportement du colis est étudié dans le cas du retrait endogène de la matrice cimentaire. Il est important de noter que la modélisation de la fissuration causée par les déformations différées des matériaux à base de CLAA nécessite souvent la résolution d'un problème multi-physique comprenant de nombreux aspects tels que les effets chimiques, thermiques, mécaniques, environnementaux, de fluage et de retrait. Dans cette application, une étude de cas simplifiée a été réalisée en considérant uniquement la déformation de retrait endogène. La propagation des fissures affecte les propriétés mécaniques du colis, une perte de rigidité de 30% et 44% est obtenue pour 20% et 40% de fraction volumique de graphite, respectivement. A l'échelle microscopique, des fissures apparaissant à la surface des déchets et se propageant vers la matrice ont été observées. Dans les travaux de Rifai [331], aucune fissure n'a été observée sur des éprouvettes de laitier activé contenant 45% de fraction volumique de graphite. Dans de futures études, il sera intéressant de prendre en compte les phénomènes d'hydratation, de séchage, d'évolution des propriétés mécaniques, de retrait et de fluage et de les coupler avec le modèle de fissuration pour tendre vers un modèle plus représentatif d'un colis cimenté.

Dans la quatrième application, le comportement du colis est étudié en prenant en compte la déformation de retrait de la matrice cimentaire et la corrosion de l'uranium. Compte tenu des échelles de temps très différentes, nous avons supposé que les phénomènes de retrait et de corrosion sont découplés, et que l'état initial du calcul de corrosion est le matériau ayant subi toutes les déformations endogènes. L'endommagement du colis est représenté par un champ effectif calculé à partir des modules de rigidité effectifs des microstructures. La valeur

maximale du champ d'endommagement effectif reste inférieur à 1. Une perte de rigidité finale de 47% dans le cas sans inclusions de graphite a été obtenue. En revanche, une perte de 71% et 80% a été obtenue dans le cas de 20% et 40% de fraction volumique de graphite, respectivement.

En utilisant la méthode k-means FE², nous pouvons maintenant effectuer des calculs de colis en prenant en compte le comportement mécanique local moyen de la microstructure tout en accédant à toutes les informations locales (contraintes, déformations, endommagement) dans la microstructure.

Chapitre 6

Conclusion générale et perspectives

6.1 Conclusion générale

Dans ce travail de thèse, le comportement macroscopique d'un colis de déchets soumis à la corrosion des inclusions métalliques à l'échelle microscopique, et l'impact du gonflement des produits de corrosion sur la matrice cimentaire ont été étudiés afin de permettre à l'industriel de définir des colis capables de faire face à cette problématique. Des contributions aux méthodes numériques multi-échelles non-linéaires pour la modélisation des structures hétérogènes anélastiques avec variables internes ont été proposées, en combinant des outils de type intelligence artificielle (k-means clustering) avec des techniques multi échelles non linéaires par éléments finis (FE^2) et la méthode champ de phase pour la simulation de la fissuration quasi-fragile.

Dans le chapitre 2, nous avons établi un état de l'art des différents modèles numériques existants dans la littérature pour le traitement du problème de l'endommagement et de la fissuration dans les matériaux quasi-fragile, et dans un cadre multi échelle. Il a été établi que la méthode de champ de phase, se basant sur un modèle d'endommagement régularisé à gradient, est un outil très bien adapté à nos études de fissuration à l'échelle microscopique, en raison de sa robustesse pour traiter des problèmes impliquant l'initiation, la propagation et la coalescence de fissures complexes intervenant dans les milieux hétérogènes.

Dans le chapitre 3, une nouvelle méthode multi échelle k-means FE^2 , inspirée de la méthode FE^2 , a été proposée afin de réduire considérablement les temps de calcul dans les simulations non linéaires multi échelles tout en gardant sa généralité et sa capacité à traiter des problèmes avec variables internes, et des comportements dépendant de l'histoire du chargement. Cette méthode est basée sur la réduction du problème à l'échelle macroscopique, en construisant des clusters de points de Gauss qui sont estimés être dans des états mécaniques proches. Un algorithme importé des "data sciences" nommé "k-means clustering" est utilisé

pour sélectionner les points de Gauss en fonction de leur état de déformation. Dans le cas d'un comportement non linéaire avec des variables internes à l'échelle microscopique, la position et la taille des clusters peut changer entre deux itérations du schéma macroscopique de Newton. Les points de Gauss qui n'appartiennent pas au même cluster d'une étape de chargement à l'autre sont affectés à un nouveau sous-cluster. Chaque sous-cluster est associé à un seul calcul de VER. Les nouveaux sous-clusters générés ont donc la même histoire de déformation lors de leur création, mais sont soumis ultérieurement à des histoires de déformation différentes. Ensuite, pour tous les points de Gauss d'un sous-cluster, un seul problème microscopique non linéaire est résolu, et sa réponse est transférée à tous les points d'intégration du sous-cluster en termes de propriétés mécaniques. La méthode k-means FE² développée est applicable à des comportements locaux arbitraires dépendant de l'histoire du chargement (endommagement, plasticité, etc.). La convergence de cette méthode est vérifiée vis-à-vis du nombre de clusters macroscopiques, et validée par rapport à la solution de référence FE². Les résultats numériques dans ce travail montrent la faible dépendance du nombre de clusters par rapport au maillage macroscopique. Nous avons obtenu des accélérations de temps de calcul par rapport à la solution FE² jusqu'à un facteur 50 dans des applications typiques impliquant une fissuration locale dans un VER.

Dans le chapitre 4, nous avons mené une étude numérique en 2D pour analyser la fissuration due à l'expansion de produits de corrosion dans des microstructures modèles, en vue d'évaluer l'influence des paramètres du système sur cette fissuration. La méthode de champ de phase a été utilisée à l'échelle microscopique pour simuler l'initiation et la propagation des microfissures liées à l'expansion. Le mécanisme de fissuration de la matrice cimentaire a été étudié en considérant l'effet de la taille du VER, des conditions aux limites, de la fraction volumique des hétérogénéités, de l'énergie de fissuration, et du maillage. Les résultats numériques ont montré que le comportement vis-à-vis de la fissuration est influencé par les conditions aux limites imposées sur la microstructure, de sorte que la propagation de l'endommagement est plus lente lorsque des conditions aux limites en déformations de compression sont imposées. Dans le cas des microstructures hétérogènes, un effet positif de l'incorporation des inclusions de graphite sur la propagation des fissures dues à l'expansion des produits de corrosion est observé, de sorte que la diminution des modules effectifs est atténuée par la présence de ces inclusions. Une approche numérique statistique a été proposée afin de déterminer la taille du VER pour des microstructures hétérogènes aléatoires soumises à l'expansion interne avec un comportement quasi-fragile, en comparant les résultats obtenus avec différentes tailles d'échantillon. Les résultats ont montré que l'échantillon pouvait être considéré comme un VER pour des rapports (taille d'échantillon/taille maximale d'hétérogé-

néité) supérieurs à environ 16.6, 10, et 7.14 dans les configurations 1, 2 et 3 respectivement (différentes tailles d'inclusions de graphite dans chaque configuration, voir la figure 4.12). Dans un deuxième temps, nous avons évalué l'influence des grandes déformations sur les résultats. Pour cela, nous avons présenté une formulation de champ de phase en grandes déformations avec prise en compte d'expansions locales. Les comparaisons avec une formulation en petites déformations n'ont pas montré de différences significatives ni sur les trajets ni sur les cinétiques de propagation des fissures. La cause peut être la configuration choisie : l'inclusion est de très petite taille par rapport à la cellule unitaire et les déformations importantes engendrées par l'expansion de l'inclusion restent localisées, tandis que la majeure partie du domaine demeure localement en petites déformations.

Enfin, au chapitre 5, la méthodologie proposée et développée dans cette thèse, la méthode k-means FE², a été appliquée à un calcul industriel complexe de conditionnement de déchets radioactifs, avec un comportement local quasi-fragile. Typiquement, cet exemple ne pouvait pas être traité avec la méthode FE² classique, en raison des temps de calculs associés prohibitifs. Cet exemple a ainsi montré la faisabilité des calculs industriels non linéaires multi échelles avec la technique proposée. D'un point de vue numérique, afin d'obtenir une solution fiable, nous avons mené plusieurs calculs pour des nombres de clusters croissants jusqu'à convergence des résultats, ayant montré dans le chapitre 3 que la méthode k-means FE² convergeait vers la solution FE² avec l'augmentation du nombre de clusters. Il est ainsi possible de contrôler la qualité de la solution sans nécessairement mener un calcul complet FE², ce qui permet des réductions drastiques de temps de calculs et ouvre la voie à des études multi échelles non linéaires appliquées à des cas industriels. La convergence de la méthode est vérifiée par rapport aux modules effectifs dans un élément macroscopique (lorsque les modules effectifs ne changent pas en augmentant le nombre de clusters); 8 clusters sont suffisants ici pour atteindre la convergence par rapport au critère choisi. Une étude de cas simplifiée a été réalisée en considérant les effets d'une déformation de retrait endogène, sans couplage avec d'autres phénomènes survenant au jeune âge tels que l'hydratation, le séchage, l'évolution des propriétés mécaniques, le retrait et le fluage. Une perte de rigidité finale de 47%, 71% et 80% a été obtenue dans le cas de 0%, 20% et 40% de fraction volumique de graphite en considérant le retrait endogène et la corrosion totale de l'inclusion d'uranium. Notez qu'aucune fissure sur l'ensemble des colis produit par Orano n'a été observée après un an de production. Dans le but d'obtenir un modèle plus représentatif d'un colis cimenté, le modèle de fissuration sera couplé aux phénomènes décrits ci-dessus affectant significativement le comportement au jeune âge. En utilisant la méthode k-means FE², nous pouvons de ce fait effectuer des calculs pour simuler des configurations de colis complexes

en prenant en compte le comportement mécanique local non-linéaire de la microstructure, tout en accédant à toutes les informations locales.

6.2 Perspectives

Le travail mené au cours de cette thèse offre de nombreuses perspectives, qui sont résumées ci-dessous.

- De façon générale, la méthode k-means FE² ouvre la voie à des simulations multi échelles non linéaires avec des temps de calculs raisonnables qui n'étaient pas envisageables jusqu'à maintenant pour des applications 3D industrielles impliquant des évolutions de microstructures avec variables internes. La méthode n'étant pas restreinte à un type de comportement, des applications impliquant des microstructures avec comportements élastoplastiques, viscoplastiques, viscoélastiques non linéaires couplés avec endommagement d'interfaces pourraient être envisagés. Enfin, des applications de cette méthode à des problèmes sans variables internes induiraient des réductions encore plus drastiques des temps de calculs, en raison de la coïncidence dans ce cas entre les clusters et les sous-clusters.
- La méthode k-means FE² pourrait encore largement être optimisée en réalisant les calculs locaux sur les VERs de manière parallèle, ou en utilisant des modèles réduits, points qui n'ont pas été abordés dans la thèse pour des raisons de temps. Une mise en oeuvre parallèle est compatible avec l'étude de convergence par rapport au nombre de clusters. Des méthodes réputées plus efficaces que les éléments finis comme les FFT [85, 267, 71, 58] pourraient par ailleurs être appliquées pour résoudre les problèmes sur les VERs.
- Il convient de souligner que dans les applications de k-means FE² impliquant un endommagement local, une régularisation numérique doit être appliquée à l'échelle macroscopique pour garantir la convergence par rapport au maillage, point que nous n'avons pas abordé dans cette thèse pour des raisons de temps. Des extensions avec des techniques telles que l'endommagement non local [317], ou les modèles à gradient d'endommagement [241], pourraient être envisagées dans de futures études pour les applications impliquant de la fissuration locale.
- Comme pour tout matériau cimentaire, les matériaux à base de ciment au laitier alcali-activé peuvent présenter un risque de fissuration au jeune âge, ce qui peut avoir un impact important sur la durabilité des structures [236, 208]. En effet, le développement au jeune âge de l'état de contrainte interne est très complexe en

raison de la combinaison de plusieurs phénomènes tels que l'hydratation, le séchage, l'évolution des propriétés mécaniques, le retrait et le fluage [283, 282]. Dans de futures études, il sera intéressant de prendre en compte ces phénomènes et de les coupler avec le modèle de fissuration pour tendre vers un modèle plus représentatif d'un colis cimenté.

- Dans le cas du retrait endogène, des fissures apparaissent d'abord aux interfaces déchets/matrice puis se propagent dans la matrice cimentaire [208, 137]. L'endommagement aux interfaces et la possibilité de décollement des déchets de graphite par rapport à la matrice pourraient constituer un autre point de développement de ce type d'étude.
- Enfin, il serait possible dans le cadre de la méthode k-means FE^2 d'utiliser des microstructures différentes dans le colis pour prendre en compte une orientation préférentielle des fragments de graphite ou une variation de leur fraction volumique par le biais de VEs différents dans différentes zones de la structure macroscopique.

Bibliographie

- [1] (2012). Mfront, <http://tfel.sourceforge.net/>.
- [2] (2021). Distene mesh, <http://www.meshgems.com>.
- [3] (2021). Salome software, <https://www.salome-platform.org/>.
- [4] Alessi, R., Marigo, J.-J., and Vidoli, S. (2015). Gradient damage models coupled with plasticity : variational formulation and main properties. *Mechanics of Materials*, 80 :351–367.
- [5] Ambati, M. and De Lorenzis, L. (2016). Phase-field modeling of brittle and ductile fracture in shells with isogeometric nurbs-based solid-shell elements. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 312 :351–373.
- [6] Ambati, M., Gerasimov, T., and De Lorenzis, L. (2015a). Phase-field modeling of ductile fracture. *Computational Mechanics*, 55(5) :1017–1040.
- [7] Ambati, M., Gerasimov, T., and De Lorenzis, L. (2015b). A review on phase-field models of brittle fracture and a new fast hybrid formulation. *Computational Mechanics*, 55(2) :383–405.
- [8] Amor, H., Marigo, J.-J., and Maurini, C. (2009). Regularized formulation of the variational brittle fracture with unilateral contact : Numerical experiments. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 57(8) :1209–1229.
- [9] Aranson, I., Kalatsky, V., and Vinokur, V. (2000). Continuum field description of crack propagation. *Physical review letters*, 85(1) :118.
- [10] Areias, P., Rabczuk, T., and Msek, M. (2016). Phase-field analysis of finite-strain plates and shells including element subdivision. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 312 :322–350.
- [11] Areias, P., Reinoso, J., Camanho, P., De Sá, J. C., and Rabczuk, T. (2018). Effective 2d and 3d crack propagation with local mesh refinement and the screened poisson equation. *Engineering Fracture Mechanics*, 189 :339–360.
- [12] Arkush, R., Venkert, A., Aizenshtein, M., Zalkind, S., Moreno, D., Brill, M., Mintz, M., and Shamir, N. (1996). Site related nucleation and growth of hydrides on uranium surfaces. *Journal of alloys and compounds*, 244(1-2) :197–205.

- [13] Armero, F. and Garikipati, K. (1995). Recent advances in the analysis and numerical simulation of strain localization in inelastic solids. *Computational Plasticity Fundamentals and Applications. I*, pages 547–561.
- [14] Armero, F. and Garikipati, K. (1996). An analysis of strong discontinuities in multiplicative finite strain plasticity and their relation with the numerical simulation of strain localization in solids. *International Journal of Solids and Structures*, 33(20-22) :2863–2885.
- [15] Asada, T. and Ohno, N. (2007). Fully implicit formulation of elastoplastic homogenization problem for two-scale analysis. *International Journal of Solids and Structures*, 44(22-23) :7261–7275.
- [16] Atiş, C. D., Bilim, C., Çelik, Ö., and Karahan, O. (2009). Influence of activator on the strength and drying shrinkage of alkali-activated slag mortar. *Construction and building materials*, 23(1) :548–555.
- [17] Atluri, S. N. and Zhu, T. (1998). A new meshless local petrov-galerkin (mlpg) approach in computational mechanics. *Computational mechanics*, 22(2) :117–127.
- [18] Attipou, K., Nezamabadi, S., Zahrouni, H., et al. (2013). A multiscale approach for the vibration analysis of heterogeneous materials : Application to passive damping. *Journal of sound and vibration*, 332(4) :725–739.
- [19] Awoyera, P. and Adesina, A. (2019). A critical review on application of alkali activated slag as a sustainable composite binder. *Case Studies in Construction Materials*, 11 :e00268.
- [20] Azevedo, N. M., Lemos, J., and de Almeida, J. R. (2008). Influence of aggregate deformation and contact behaviour on discrete particle modelling of fracture of concrete. *Engineering Fracture Mechanics*, 75(6) :1569–1586.
- [21] bai2011potential, Y., Collier, N., Milestone, N., and Yang, C. (2011). The potential for using slags activated with near neutral salts as immobilisation matrices for nuclear wastes containing reactive metals. *Journal of Nuclear Materials*, 413(3) :183–192.
- [22] Banthia, N. and Gupta, R. (2006). Influence of polypropylene fiber geometry on plastic shrinkage cracking in concrete. *Cement and concrete Research*, 36(7) :1263–1267.
- [23] Barenblatt, G. I. (1962). The mathematical theory of equilibrium cracks in brittle fracture. In *Advances in applied mechanics*, volume 7, pages 55–129. Elsevier.
- [24] Bary, B., Bourcier, C., and Helfer, T. (2017). Analytical and 3d numerical analysis of the thermoviscoelastic behavior of concrete-like materials including interfaces. *Advances in Engineering Software*, 112 :16–30.
- [25] Bary, B., Leterrier, N., Deville, E., and Le Bescop, P. (2014). Coupled chemo-transport-mechanical modelling and numerical simulation of external sulfate attack in mortar. *Cement and Concrete Composites*, 49 :70–83.

- [26] Bashir, R., Xue, H., Zhang, J., Guo, R., Hayat, N., Li, G., and Bi, Y. (2020). Effect of xfm mesh density (mesh size) on stress intensity factors (k), strain gradient ($d\epsilon/dr$) and stress corrosion cracking (scc) growth rate. In *Structures*, volume 25, pages 593–602. Elsevier.
- [27] Bažant, Z. P. (1979). Physical model for steel corrosion in concrete sea structures—theory. *Journal of the Structural Division*, 105(6) :1137–1153.
- [28] Bažant, Z. P. and Belytschko, T. B. (1985). Wave propagation in a strain-softening bar : exact solution. *Journal of Engineering Mechanics*, 111(3) :381–389.
- [29] Bažant, Z. P. and Jirásek, M. (2002). Nonlocal integral formulations of plasticity and damage : survey of progress. *Journal of engineering mechanics*, 128(11) :1119–1149.
- [30] Bažant, Z. P., Le, J.-L., and Hoover, C. G. (2010). Nonlocal boundary layer (nbl) model : overcoming boundary condition problems in strength statistics and fracture analysis of quasibrittle materials. In *Proceedings of the 7th International Conference on Fracture Mechanics of Concrete and Concrete Structures*, pages 135–143.
- [31] Bažant, Z. P. and Oh, B. H. (1983). Crack band theory for fracture of concrete. *Matériaux et construction*, 16(3) :155–177.
- [32] Bazant, Z. P. and Pijaudier-Cabot, G. (1988). Nonlocal continuum damage, localization instability and convergence.
- [33] Bazley, S., Petherbridge, J., and Glascott, J. (2012). The influence of hydrogen pressure and reaction temperature on the initiation of uranium hydride sites. *Solid State Ionics*, 211 :1–4.
- [34] Belytschko, T. and Black, T. (1999). Elastic crack growth in finite elements with minimal remeshing. *International journal for numerical methods in engineering*, 45(5) :601–620.
- [35] Belytschko, T., Liu, W. K., Moran, B., and Elkhodary, K. (2013). *Nonlinear finite elements for continua and structures*. John wiley & sons.
- [36] Belytschko, T., Moës, N., Usui, S., and Parimi, C. (2001). Arbitrary discontinuities in finite elements. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 50(4) :993–1013.
- [37] Benaïmeche, M. A. and Bary, B. (2020). Analytical and numerical prediction of mechanical properties of heterogeneous materials with expansive inclusions : Application to waste cementation. *International Journal of Mechanical Sciences*, 169 :105318.
- [38] Benboudjema, F. (2002). *Modélisation des déformations différées du béton sous sollicitations biaxiales. Application aux enceintes de confinement de bâtiments réacteurs des centrales nucléaires*. PhD thesis, Université de Marne la Vallée.
- [39] Benboudjema, F. and Torrenti, J.-M. (2008). Early-age behaviour of concrete nuclear containments. *Nuclear engineering and design*, 238(10) :2495–2506.

- [40] Berger, S. and Fryda, H. (2012). Calcium aluminate cements for nuclear wastes conditioning : literature review and new approaches.
- [41] Bernard, P.-E., Moës, N., and Chevaugeon, N. (2012). Damage growth modeling using the thick level set (tls) approach : Efficient discretization for quasi-static loadings. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 233 :11–27.
- [42] Bhargava, K., Ghosh, A., Mori, Y., and Ramanujam, S. (2006). Model for cover cracking due to rebar corrosion in rc structures. *Engineering Structures*, 28(8) :1093–1109.
- [43] Bleyer, J. and Alessi, R. (2018). Phase-field modeling of anisotropic brittle fracture including several damage mechanisms. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 336 :213–236.
- [44] Borden, M. J., Hughes, T. J., Landis, C. M., Anvari, A., and Lee, I. J. (2016). A phase-field formulation for fracture in ductile materials : Finite deformation balance law derivation, plastic degradation, and stress triaxiality effects. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 312 :130–166.
- [45] Borden, M. J., Hughes, T. J., Landis, C. M., and Verhoosel, C. V. (2014). A higher-order phase-field model for brittle fracture : Formulation and analysis within the isogeometric analysis framework. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 273 :100–118.
- [46] Borden, M. J., Verhoosel, C. V., Scott, M. A., Hughes, T. J., and Landis, C. M. (2012). A phase-field description of dynamic brittle fracture. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 217 :77–95.
- [47] Boso, D. P., Lefik, M., and Schrefler, B. A. (2005). A multilevel homogenised model for superconducting strand thermomechanics. *Cryogenics*, 45(4) :259–271.
- [48] Bouhala, L., Makradi, A., Belouettar, S., Kiefer-Kamal, H., and Frères, P. (2013). Modelling of failure in long fibres reinforced composites by x-fem and cohesive zone model. *Composites Part B : Engineering*, 55 :352–361.
- [49] Bourcier, C., Dridi, W., Chomat, L., Laucoin, E., Bary, B., and Adam, E. (2014). Combs : open source python library for rve generation. application to microscale diffusion simulations in cementitious materials. In *SNA+ MC 2013-Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications+ Monte Carlo*, page 02107. EDP Sciences.
- [50] Bourdin, B., Francfort, G. A., and Marigo, J.-J. (2000). Numerical experiments in revisited brittle fracture. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 48(4) :797–826.
- [51] Bourdin, B., Larsen, C. J., and Richardson, C. L. (2011). A time-discrete model for dynamic fracture based on crack regularization. *International journal of fracture*, 168(2) :133–143.
- [52] Brara, A., Camborde, F., Klepaczko, J., and Mariotti, C. (2001). Experimental and numerical study of concrete at high strain rates in tension. *Mechanics of materials*, 33(1) :33–45.
- [53] Budiansky, B. (1983). Micromechanics. *Computers & Structures*, 16(1-4) :3–12.

- [54] Budyn, E., Zi, G., Moës, N., and Belytschko, T. (2004). A method for multiple crack growth in brittle materials without remeshing. *International journal for numerical methods in engineering*, 61(10) :1741–1770.
- [55] Buxton, G. A., Care, C. M., and Cleaver, D. J. (2001). A lattice spring model of heterogeneous materials with plasticity. *Modelling and simulation in materials science and engineering*, 9(6) :485.
- [56] Camacho, G. T. and Ortiz, M. (1996). Computational modelling of impact damage in brittle materials. *International Journal of solids and structures*, 33(20-22) :2899–2938.
- [57] Camborde, F., Mariotti, C., and Donzé, F. (2000). Numerical study of rock and concrete behaviour by discrete element modelling. *Computers and geotechnics*, 27(4) :225–247.
- [58] Cao, Y., Shen, W., Shao, J.-F., and Wang, W. (2020). A novel fft-based phase field model for damage and cracking behavior of heterogeneous materials. *International Journal of Plasticity*, 133 :102786.
- [59] Carollo, V., Reinoso, J., and Paggi, M. (2017). A 3d finite strain model for intralayer and interlayer crack simulation coupling the phase field approach and cohesive zone model. *Composite Structures*, 182 :636–651.
- [60] Carpinteri, A. (1989). Post-peak and post-bifurcation analysis of cohesive crack propagation. *Engineering Fracture Mechanics*, 32(2) :265–278.
- [61] Cartwright, C., Rajabipour, F., and Radlińska, A. (2015). Shrinkage characteristics of alkali-activated slag cements. *Journal of materials in civil engineering*, 27(7) :B4014007.
- [62] Cau-dit Coumes, C. (2013). Alternative binders to ordinary portland cement for radwaste solidification and stabilization. *Cement-based materials for nuclear waste storage*, pages 171–191.
- [63] Cazes, F. and Moës, N. (2015). Comparison of a phase-field model and of a thick level set model for brittle and quasi-brittle fracture. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 103(2) :114–143.
- [64] Celes, W., Paulino, G. H., and Espinha, R. (2005a). A compact adjacency-based topological data structure for finite element mesh representation. *International journal for numerical methods in engineering*, 64(11) :1529–1556.
- [65] Celes, W., Paulino, G. H., and Espinha, R. (2005b). Efficient handling of implicit entities in reduced mesh representations.
- [66] Chambolle, A., Francfort, G. A., and Marigo, J.-J. (2009). When and how do cracks propagate? *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 57(9) :1614–1622.
- [67] Chartier, D., Muzeau, B., Stefan, L., Sanchez-Canet, J., and Monguillon, C. (2017). Magnesium alloys and graphite wastes encapsulated in cementitious materials : Reduction of galvanic corrosion using alkali hydroxide activated blast furnace slag. *Journal of hazardous materials*, 326 :197–210.

- [68] Chen, A., Pan, Z., and Ma, R. (2017). Mesoscopic simulation of steel rebar corrosion process in concrete and its damage to concrete cover. *Structure and Infrastructure Engineering*, 13(4) :478–493.
- [69] Chen, H., Lin, E., Jiao, Y., and Liu, Y. (2014). A generalized 2d non-local lattice spring model for fracture simulation. *Computational Mechanics*, 54(6) :1541–1558.
- [70] Chen, W., Li, B., Wang, J., and Thom, N. (2021). Effects of alkali dosage and silicate modulus on autogenous shrinkage of alkali-activated slag cement paste. *Cement and Concrete Research*, 141 :106322.
- [71] Chen, Y., Vasiukov, D., Gélébart, L., and Park, C. H. (2019). A fft solver for variational phase-field modeling of brittle fracture. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 349 :167–190.
- [72] Chiaruttini, V., Riolo, V., and Feyel, F. (2013). Advanced remeshing techniques for complex 3d crack propagation. *Icf13*, pages 547–555.
- [73] Cho, J., Ioku, K., and Goto, S. (1999). Effect of pbii and crvi ions on the hydration of slag alkaline cement and the immobilization of these heavy metal ions. *Advances in cement research*, 11(3) :111–118.
- [74] Cho, N. a., Martin, C., and Segó, D. (2007). A clumped particle model for rock. *International journal of rock mechanics and mining sciences*, 44(7) :997–1010.
- [75] Coenen, E., Kouznetsova, V., Bosco, E., and Geers, M. (2012). A multi-scale approach to bridge microscale damage and macroscale failure : a nested computational homogenization-localization framework. *International journal of fracture*, 178(1) :157–178.
- [76] Collins, F. and Sanjayan, J. G. (2000). Effect of pore size distribution on drying shrinking of alkali-activated slag concrete. *Cement and Concrete Research*, 30(9) :1401–1406.
- [77] Cong, Y., Nezamabadi, S., Zahrouni, H., and Yvonnet, J. (2015). Multiscale computational homogenization of heterogeneous shells at small strains with extensions to finite displacements and buckling. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 104(4) :235–259.
- [78] Cox, B. N., Bale, H. A., Begley, M., Blacklock, M., Do, B.-C., Fast, T., Naderi, M., Novak, M., Rajan, V. P., Rinaldi, R. G., et al. (2014). Stochastic virtual tests for high-temperature ceramic matrix composites. *Annual Review of Materials Research*, 44 :479–529.
- [79] Cundall, P. A. and Strack, O. D. (1979). A discrete numerical model for granular assemblies. *geotechnique*, 29(1) :47–65.
- [80] Dascalu, C., Bilbie, G., and Agiasofitou, E. (2008). Damage and size effects in elastic solids : a homogenization approach. *International Journal of Solids and Structures*, 45(2) :409–430.

- [81] Daux, C., Moës, N., Dolbow, J., Sukumar, N., and Belytschko, T. (2000). Arbitrary branched and intersecting cracks with the extended finite element method. *International journal for numerical methods in engineering*, 48(12) :1741–1760.
- [82] De Borst, R. (1991). Simulation of strain localization : a reappraisal of the cosserat continuum. *Engineering computations*.
- [83] De Borst, R. and Mühlhaus, H.-B. (1992). Gradient-dependent plasticity : formulation and algorithmic aspects. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 35(3) :521–539.
- [84] de Borst, R., Pamin, J., and Geers, M. G. (1999). On coupled gradient-dependent plasticity and damage theories with a view to localization analysis. *European Journal of Mechanics-A/Solids*, 18(6) :939–962.
- [85] De Geus, T., Vondřejc, J., Zeman, J., Peerlings, R., and Geers, M. (2017). Finite strain fft-based non-linear solvers made simple. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 318 :412–430.
- [86] De Larrard, T., Bary, B., Adam, E., and Kloss, F. (2013). Influence of aggregate shapes on drying and carbonation phenomena in 3d concrete numerical samples. *Computational Materials Science*, 72 :1–14.
- [87] Deja, J. and Malolepszy, J. (1994). Effect of cementitious material on the corrosion of steel development in the environment of high chloride content. In *Proceedings of the International Conference on Corrosion and Corrosion of Steel in Concrete, Sheffield*, volume 2, pages 684–697. Sheffield Academic Press Ltd Sheffield, UK.
- [88] Delegard, C. H., Schmidt, A. J., Sell, R. L., Sinkov, S. I., Bryan, S. A., Gano, S., and Thornton, B. M. (2004). Gas generation testing of uranium metal in simulated k basin sludge and in grouted sludge waste forms. Technical report, Pacific Northwest National Lab., Richland, WA (US).
- [89] Desmorat, R. and Gatuingt, F. (2007). Introduction of an internal time in nonlocal integral theories.
- [90] Doan, D. H., Bui, T. Q., Duc, N. D., and Fushinobu, K. (2016). Hybrid phase field simulation of dynamic crack propagation in functionally graded glass-filled epoxy. *Composites Part B : Engineering*, 99 :266–276.
- [91] Dogan, F., Hadavinia, H., Donchev, T., and Bhonge, P. S. (2012). Delamination of impacted composite structures by cohesive zone interface elements and tiebreak contact. *Central European Journal of Engineering*, 2(4) :612–626.
- [92] Doghri, I. and Ouair, A. (2003). Homogenization of two-phase elasto-plastic composite materials and structures : Study of tangent operators, cyclic plasticity and numerical algorithms. *International Journal of Solids and structures*, 40(7) :1681–1712.
- [93] Donze, F., Bouchez, J., and Magnier, S. (1997). Modeling fractures in rock blasting. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, 34(8) :1153–1163.

- [94] Donzé, F., Mora, P., and Magnier, S.-A. (1994). Numerical simulation of faults and shear zones. *Geophysical Journal International*, 116(1) :46–52.
- [95] Drakopoulos, M., Connolley, T., Reinhard, C., Atwood, R., Magdysyuk, O., Vo, N., Hart, M., Connor, L., Humphreys, B., Howell, G., et al. (2015). I12 : the joint engineering, environment and processing (jeep) beamline at diamond light source. *Journal of synchrotron radiation*, 22(3) :828–838.
- [96] Drugan, W. J. and Willis, J. R. (1996). A micromechanics-based nonlocal constitutive equation and estimates of representative volume element size for elastic composites. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 44(4) :497–524.
- [97] Du, X. and Jin, L. (2014). Meso-scale numerical investigation on cracking of cover concrete induced by corrosion of reinforcing steel. *Engineering Failure Analysis*, 39 :21–33.
- [98] Du, X., Jin, L., and Ma, G. (2013). Meso-element equivalent method for the simulation of macro mechanical properties of concrete. *International Journal of Damage Mechanics*, 22(5) :617–642.
- [99] Du, X., Jin, L., and Zhang, R. (2014). Modeling the cracking of cover concrete due to non-uniform corrosion of reinforcement. *Corrosion Science*, 89 :189–202.
- [100] Du, Y., Chan, A., and Clark, L. (2006). Finite element analysis of the effects of radial expansion of corroded reinforcement. *Computers & structures*, 84(13-14) :917–929.
- [101] Duarte, C. A. and Oden, J. T. (1996). An hp adaptive method using clouds. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 139(1-4) :237–262.
- [102] Duda, R. O., Hart, P. E., and Stork, D. G. (1973). *Pattern classification and scene analysis*, volume 3. Wiley New York.
- [103] Dugdale, D. S. (1960). Yielding of steel sheets containing slits. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 8(2) :100–104.
- [104] Dvorkin, E. N., Cuitiño, A. M., and Gioia, G. (1990). Finite elements with displacement interpolated embedded localization lines insensitive to mesh size and distortions. *International journal for numerical methods in engineering*, 30(3) :541–564.
- [105] Ehlers, W. and Luo, C. (2017). A phase-field approach embedded in the theory of porous media for the description of dynamic hydraulic fracturing. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 315 :348–368.
- [106] El Halabi, F., González, D., Chico, A., and Doblaré, M. (2013). Fe2 multiscale in linear elasticity based on parametrized microscale models using proper generalized decomposition. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 257 :183–202.
- [107] Erbts, P. and Düster, A. (2012). Accelerated staggered coupling schemes for problems of thermoelasticity at finite strains. *Computers & Mathematics with Applications*, 64(8) :2408–2430.

- [108] Eskander, S., Aziz, S. A., El-Didamony, H., and Sayed, M. (2011). Immobilization of low and intermediate level of organic radioactive wastes in cement matrices. *Journal of hazardous materials*, 190(1-3) :969–979.
- [109] Etse, G. and Willam, K. (1999). Failure analysis of elastoviscoplastic material models. *Journal of engineering mechanics*, 125(1) :60–69.
- [110] Fairhall, G. and Palmer, J. (1992). The encapsulation of magnox swarf in cement in the united kingdom. *Cement and concrete research*, 22(2-3) :293–298.
- [111] Faivre, M., Paul, B., Golfier, F., Giot, R., Massin, P., and Colombo, D. (2016). 2d coupled hm-xfem modeling with cohesive zone model and applications to fluid-driven fracture network. *Engineering Fracture Mechanics*, 159 :115–143.
- [112] Fang, G., Wang, B., and Liang, J. (2019). A coupled fe-fft multiscale method for progressive damage analysis of 3d braided composite beam under bending load. *Composites Science and Technology*, 181 :107691.
- [113] Farrell, P. and Maurini, C. (2017). Linear and nonlinear solvers for variational phase-field models of brittle fracture. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 109(5) :648–667.
- [114] Fayyad, U. M., Piatetsky-Shapiro, G., Smyth, P., and Uthurusamy, R. (1996). Advances in knowledge discovery and data mining. American Association for Artificial Intelligence.
- [115] Feyel, F. (1999). Multiscale fe2 elastoviscoplastic analysis of composite structures. *Computational Materials Science*, 16(1-4) :344–354.
- [116] Feyel, F. (2003). A multilevel finite element method (fe2) to describe the response of highly non-linear structures using generalized continua. *Computer Methods in applied Mechanics and engineering*, 192(28-30) :3233–3244.
- [117] Feyel, F. and Chaboche, J.-L. (2000). Fe2 multiscale approach for modelling the elastoviscoplastic behaviour of long fibre sic/ti composite materials. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 183(3-4) :309–330.
- [118] Fish, J., Shek, K., Pandheeradi, M., and Shephard, M. S. (1997a). Computational plasticity for composite structures based on mathematical homogenization : Theory and practice. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 148(1-2) :53–73.
- [119] Fish, J., Suvorov, A., and Belsky, V. (1997b). Hierarchical composite grid method for global-local analysis of laminated composite shells. *Applied Numerical Mathematics*, 23(2) :241–258.
- [120] Fleck, N. and Hutchinson, J. (1993). A phenomenological theory for strain gradient effects in plasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 41(12) :1825–1857.
- [121] Francfort, G. A. and Marigo, J.-J. (1998). Revisiting brittle fracture as an energy minimization problem. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 46(8) :1319–1342.
- [122] Freddi, F. and Royer-Carfagni, G. (2010). Regularized variational theories of fracture : a unified approach. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 58(8) :1154–1174.

- [123] Frédéric, D. and Magnier, S.-A. (1995). Formulation of a 3-d numerical model of brittle behaviour. *Geophysical Journal International*, 122(3) :790–802.
- [124] Fritzen, F., Hodapp, M., and Leuschner, M. (2014). Gpu accelerated computational homogenization based on a variational approach in a reduced basis framework. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 278 :186–217.
- [125] Fritzen, F. and Kunc, O. (2018). Two-stage data-driven homogenization for nonlinear solids using a reduced order model. *European Journal of Mechanics-A/Solids*, 69 :201–220.
- [126] Galy, N. (2016). *Comportement du 14C dans le graphite nucléaire : effets de l'irradiation et décontamination par vaporéformage*. PhD thesis, Lyon.
- [127] Gao, X., Koval, G., and Chazallon, C. (2019). A discrete element model for damage and fatigue crack growth of quasi-brittle materials. *Advances in Materials Science and Engineering*, 2019.
- [128] Gdoutos, E. E. (2020). *Fracture mechanics : an introduction*, volume 263. Springer Nature.
- [129] Gersho, A. and Gray, R. M. (2012). *Vector quantization and signal compression*, volume 159. Springer Science & Business Media.
- [130] Ghavamian, F. and Simone, A. (2019). Accelerating multiscale finite element simulations of history-dependent materials using a recurrent neural network. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 357 :112594.
- [131] Ghosh, S., Bai, J., and Paquet, D. (2009). Homogenization-based continuum plasticity-damage model for ductile failure of materials containing heterogeneities. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 57(7) :1017–1044.
- [132] Giry, C., Dufour, F., and Mazars, J. (2011). Stress-based nonlocal damage model. *International Journal of Solids and Structures*, 48(25-26) :3431–3443.
- [133] Gitman, I., Askes, H., and Sluys, L. (2007). Representative volume : Existence and size determination. *Engineering fracture mechanics*, 74(16) :2518–2534.
- [134] Glasser, F. (2011). Application of inorganic cements to the conditioning and immobilisation of radioactive wastes. In *Handbook of advanced radioactive waste conditioning technologies*, pages 67–135. Elsevier.
- [135] Govender, N., Wilke, D. N., and Kok, S. (2015). Collision detection of convex polyhedra on the nvidia gpu architecture for the discrete element method. *Applied Mathematics and Computation*, 267 :810–829.
- [136] Granger, L. (1995). *Comportement différé du béton dans les enceintes de centrales nucléaires : analyse et modélisation*. PhD thesis, Ecole Nationale des ponts et Chaussées.
- [137] Grassl, P., Wong, H. S., and Buenfeld, N. R. (2010). Influence of aggregate size and volume fraction on shrinkage induced micro-cracking of concrete and mortar. *Cement and concrete research*, 40(1) :85–93.

- [138] Gravouil, A., Moës, N., and Belytschko, T. (2002). Non-planar 3d crack growth by the extended finite element and level sets—part ii : Level set update. *International journal for numerical methods in engineering*, 53(11) :2569–2586.
- [139] Griffith, A. A. (1921). Vi. the phenomena of rupture and flow in solids. *Philosophical transactions of the royal society of london. Series A, containing papers of a mathematical or physical character*, 221(582-593) :163–198.
- [140] Gruttmann, F. and Wagner, W. (2013). A coupled two-scale shell model with applications to layered structures. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 94(13) :1233–1254.
- [141] Hakim, V. and Karma, A. (2009). Laws of crack motion and phase-field models of fracture. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 57(2) :342–368.
- [142] Han, X., Xu, C., Xie, W., and Meng, S. (2019). Multiscale computational homogenization of woven composites from microscale to mesoscale using data-driven self-consistent clustering analysis. *Composite Structures*, 220 :760–768.
- [143] Hansbo, A. and Hansbo, P. (2004). A finite element method for the simulation of strong and weak discontinuities in solid mechanics. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 193(33-35) :3523–3540.
- [144] Hansen, W. (1987). Drying shrinkage mechanisms in portland cement paste. *Journal of the American Ceramic society*, 70(5) :323–328.
- [145] Hartigan, J. A. and Wong, M. A. (1979a). Ak-means clustering algorithm. *Journal of the Royal Statistical Society : Series C (Applied Statistics)*, 28(1) :100–108.
- [146] Hartigan, J. A. and Wong, M. A. (1979b). Algorithm as 136 : A k-means clustering algorithm. *Journal of the royal statistical society. series c (applied statistics)*, 28(1) :100–108.
- [147] Hayes, M. and Godfrey, I. (2007). Development of the use of alternative cements for the treatment of intermediate level waste. In *Proc. Conf. WM*, volume 7.
- [148] He, C., Ge, J., Zhang, B., Gao, J., Zhong, S., Liu, W. K., and Fang, D. (2020). A hierarchical multiscale model for the elastic-plastic damage behavior of 3d braided composites at high temperature. *Composites Science and Technology*, 196 :108230.
- [149] He, Q.-C. and Shao, Q. (2019). Closed-form coordinate-free decompositions of the two-dimensional strain and stress for modeling tension–compression dissymmetry. *Journal of Applied Mechanics*, 86(3).
- [150] Helfen, C. and Diebels, S. (2012). Numerical multiscale modelling of sandwich plates. *Technische Mechanik-European Journal of Engineering Mechanics*, 32(2-5) :251–264.
- [151] Helfer, T., Bary, B., Dang, T. T., Fandeur, O., and Michel, B. (2017). Modélisation par champ de phase des matériaux fragiles : aspects numériques et applications au combustible nucléaire oxyde. In *13e colloque national en calcul des structures*.

- [152] Henry, H. and Levine, H. (2004). Dynamic instabilities of fracture under biaxial strain using a phase field model. *Physical review letters*, 93(10) :105504.
- [153] Hentz, S., Daudeville, L., and Donzé, F. V. (2004a). Identification and validation of a discrete element model for concrete. *Journal of engineering mechanics*, 130(6) :709–719.
- [154] Hentz, S., Donzé, F., and Daudeville, L. (2005). Discrete element modelling of a reinforced concrete structure submitted to a rock impact. *Italian Geotechnical Journal*, 4 :83–94.
- [155] Hentz, S., Donzé, F. V., and Daudeville, L. (2004b). Discrete element modelling of concrete submitted to dynamic loading at high strain rates. *Computers & structures*, 82(29-30) :2509–2524.
- [156] Hernández, J., Oliver, J., Huespe, A. E., Caicedo, M., and Cante, J. (2014). High-performance model reduction techniques in computational multiscale homogenization. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 276 :149–189.
- [157] Herwig, T. and Wagner, W. (2018). On a robust fe2 model for delamination analysis in composite structures. *Composite Structures*, 201 :597–607.
- [158] Hill, R. (1962). Acceleration waves in solids. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 10(1) :1–16.
- [159] Hill, R. (1965). A self-consistent mechanics of composite materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 13(4) :213–222.
- [160] Hillerborg, A., Modéer, M., and Petersson, P.-E. (1976). Analysis of crack formation and crack growth in concrete by means of fracture mechanics and finite elements. *Cement and concrete research*, 6(6) :773–781.
- [161] Hoch, A., Smart, N., and Reddy, B. (2010). A survey of reactive metal corrosion data for use in the smogg gas generation model. *Serco Ltd, Harwell, UK*.
- [162] Holl, M., Rogge, T., Loehnert, S., Wriggers, P., and Rolfes, R. (2014). 3d multiscale crack propagation using the xfem applied to a gas turbine blade. *Computational mechanics*, 53(1) :173–188.
- [163] Honorio, T., Bary, B., and Benboudjema, F. (2016). Multiscale estimation of ageing viscoelastic properties of cement-based materials : A combined analytical and numerical approach to estimate the behaviour at early age. *Cement and Concrete Research*, 85 :137–155.
- [164] Huang, H., Lecampion, B., and Detournay, E. (2013). Discrete element modeling of tool-rock interaction i : rock cutting. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 37(13) :1913–1929.
- [165] Huynh, D. and Belytschko, T. (2009). The extended finite element method for fracture in composite materials. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 77(2) :214–239.

- [166] Ince, R., Arslan, A., and Karihaloo, B. (2003). Lattice modelling of size effect in concrete strength. *Engineering Fracture Mechanics*, 70(16) :2307–2320.
- [167] Irwin, G. (1960). Fracture mode transition for a crack traversing a plate.
- [168] Irwin, G. R. (1957). Analysis of stresses and strains near the end of a crack traversing a plate.
- [169] Jang, B. S. and Oh, B. H. (2010). Effects of non-uniform corrosion on the cracking and service life of reinforced concrete structures. *Cement and Concrete Research*, 40(9) :1441–1450.
- [170] Jendele, L., Šmilauer, V., and Červenka, J. (2014). Multiscale hydro-thermo-mechanical model for early-age and mature concrete structures. *Advances in Engineering Software*, 72 :134–146.
- [171] Jiang, W., Wu, X., and Roy, D. (1992). Alkali-activated fly ash-slag cement based nuclear waste forms. *MRS Online Proceedings Library*, 294(1) :255–260.
- [172] Jin, Z.-H., Paulino, G. H., and Dodds Jr, R. H. (2003). Cohesive fracture modeling of elastic–plastic crack growth in functionally graded materials. *Engineering Fracture Mechanics*, 70(14) :1885–1912.
- [173] Jirásek, M. (2007a). Mathematical analysis of strain localization. *Revue européenne de génie civil*, 11(7-8) :977–991.
- [174] Jirásek, M. (2007b). Nonlocal damage mechanics. *Revue européenne de génie civil*, 11(7-8) :993–1021.
- [175] Jirásek, M. and Bazant, Z. P. (2001). *Inelastic analysis of structures*. John Wiley & Sons.
- [176] Kachanov, L. M. (1958). Time of the rupture process under creep conditions. *International journal of fracture*, 8(1) :26–31.
- [177] Kanit, T., Forest, S., Galliet, I., Mounoury, V., and Jeulin, D. (2003). Determination of the size of the representative volume element for random composites : statistical and numerical approach. *International Journal of solids and structures*, 40(13-14) :3647–3679.
- [178] Kanit, T., N’Guyen, F., Forest, S., Jeulin, D., Reed, M., and Singleton, S. (2006). Apparent and effective physical properties of heterogeneous materials : Representativity of samples of two materials from food industry. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 195(33-36) :3960–3982.
- [179] Karamnejad, A., Nguyen, V. P., and Sluys, L. J. (2013). A multi-scale rate dependent crack model for quasi-brittle heterogeneous materials. *Engineering Fracture Mechanics*, 104 :96–113.
- [180] Karamnejad, A. and Sluys, L. J. (2014). A dispersive multi-scale crack model for quasi-brittle heterogeneous materials under impact loading. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 278 :423–444.

- [181] Karihaloo, B. L., Shao, P., and Xiao, Q. (2003). Lattice modelling of the failure of particle composites. *Engineering Fracture Mechanics*, 70(17) :2385–2406.
- [182] Karma, A., Kessler, D. A., and Levine, H. (2001). Phase-field model of mode iii dynamic fracture. *Physical Review Letters*, 87(4) :045501.
- [183] Kästner, M., Hennig, P., Linse, T., and Ulbricht, V. (2016). Phase-field modelling of damage and fracture—convergence and local mesh refinement. In *Advanced methods of continuum mechanics for materials and structures*, pages 307–324. Springer.
- [184] Kaunda, R. (2014). New artificial neural networks for true triaxial stress state analysis and demonstration of intermediate principal stress effects on intact rock strength. *Journal of Rock Mechanics and Geotechnical Engineering*, 6(4) :338–347.
- [185] Keller, K., Weihe, S., Siegmund, T., and Kröplin, B. (1999). Generalized cohesive zone model : incorporating triaxiality dependent failure mechanisms. *Computational Materials Science*, 16(1-4) :267–274.
- [186] Khazaei, C., Hazzard, J., and Chalaturnyk, R. (2015). Damage quantification of intact rocks using acoustic emission energies recorded during uniaxial compression test and discrete element modeling. *Computers and Geotechnics*, 67 :94–102.
- [187] Kohlhaas, B. and Klinkel, S. (2015). An fe2 model for the analysis of shape memory alloy fiber-composites. *Computational Mechanics*, 55(2) :421–437.
- [188] Komljenović, M., Tanasijević, G., Džunuzović, N., and Provis, J. (2020). Immobilization of cesium with alkali-activated blast furnace slag. *Journal of hazardous materials*, 388 :121765.
- [189] Kosteski, L., D’Ambra, R. B., and Iturrioz, I. (2012). Crack propagation in elastic solids using the truss-like discrete element method. *International journal of fracture*, 174(2) :139–161.
- [190] Kouznetsova, V., Geers, M. G., and Brekelmans, W. (2004). Multi-scale second-order computational homogenization of multi-phase materials : a nested finite element solution strategy. *Computer methods in applied Mechanics and Engineering*, 193(48-51) :5525–5550.
- [191] Krayani, A., Pijaudier-Cabot, G., and Dufour, F. (2009). Boundary effect on weight function in nonlocal damage model. *Engineering Fracture Mechanics*, 76(14) :2217–2231.
- [192] Kubair, D. V. and Geubelle, P. H. (2003). Comparative analysis of extrinsic and intrinsic cohesive models of dynamic fracture. *International Journal of Solids and Structures*, 40(15) :3853–3868.
- [193] Kuhn, C. and Müller, R. (2010). A continuum phase field model for fracture. *Engineering Fracture Mechanics*, 77(18) :3625–3634.
- [194] Kuhn, C., Schlüter, A., and Müller, R. (2015). On degradation functions in phase field fracture models. *Computational Materials Science*, 108 :374–384.

- [195] Kulkarni, M., Matouš, K., and Geubelle, P. (2010). Coupled multi-scale cohesive modeling of failure in heterogeneous adhesives. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 84(8) :916–946.
- [196] Kumarappa, D. B., Peethamparan, S., and Ngami, M. (2018). Autogenous shrinkage of alkali activated slag mortars : Basic mechanisms and mitigation methods. *Cement and Concrete Research*, 109 :1–9.
- [197] Lakes, R., Nakamura, S., Behiri, J., and Bonfield, W. (1990). Fracture mechanics of bone with short cracks. *Journal of biomechanics*, 23(10) :967–975.
- [198] Larsen, C. J., Ortner, C., and Süli, E. (2010). Existence of solutions to a regularized model of dynamic fracture. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, 20(07) :1021–1048.
- [199] Larsson, R., Steinmann, P., and Runesson, K. (1999). Finite element embedded localization band for finite strain plasticity based on a regularized strong discontinuity. *Mechanics of Cohesive-frictional Materials : An International Journal on Experiments, Modelling and Computation of Materials and Structures*, 4(2) :171–194.
- [200] Le, B., Yvonnet, J., and He, Q.-C. (2015). Computational homogenization of nonlinear elastic materials using neural networks. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 104(12) :1061–1084.
- [201] Le Guyadec, F., Génin, X., Bayle, J., Dugne, O., Duhart-Barone, A., and Ablitzer, C. (2010). Pyrophoric behaviour of uranium hydride and uranium powders. *Journal of Nuclear Materials*, 396(2-3) :294–302.
- [202] Lee, J. and Fenves, G. L. (1998). Plastic-damage model for cyclic loading of concrete structures. *Journal of engineering mechanics*, 124(8) :892–900.
- [203] Lee, S.-J. and Chang, Y.-S. (2015). Evaluation of primary water stress corrosion cracking growth rates by using the extended finite element method. *Nuclear Engineering and Technology*, 47(7) :895–906.
- [204] Leonel, E. D. and Venturini, W. S. (2011). Multiple random crack propagation using a boundary element formulation. *Engineering Fracture Mechanics*, 78(6) :1077–1090.
- [205] Li, B. and Zhuang, X. (2020). Multiscale computation on feedforward neural network and recurrent neural network. *Frontiers of Structural and Civil Engineering*, 14(6) :1285–1298.
- [206] Li, C.-Q., Xu, W.-J., and Meng, Q.-S. (2015). Multi-sphere approximation of real particles for dem simulation based on a modified greedy heuristic algorithm. *Powder Technology*, 286 :478–487.
- [207] Li, W. and Siegmund, T. (2002). An analysis of crack growth in thin-sheet metal via a cohesive zone model. *Engineering Fracture Mechanics*, 69(18) :2073–2093.
- [208] Li, Z., Lu, T., Chen, Y., Wu, B., and Ye, G. (2021). Prediction of the autogenous shrinkage and microcracking of alkali-activated slag and fly ash concrete. *Cement and Concrete Composites*, 117 :103913.

- [209] Lilliu, G. and van Mier, J. G. (2003). 3d lattice type fracture model for concrete. *Engineering Fracture Mechanics*, 70(7-8) :927–941.
- [210] Lim, K.-W. and Andrade, J. E. (2014). Granular element method for three-dimensional discrete element calculations. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 38(2) :167–188.
- [211] Lin, X. and Ng, T.-T. (1997). A three-dimensional discrete element model using arrays of ellipsoids. *Geotechnique*, 47(2) :319–329.
- [212] Linder, C. (2012). An analysis of the exponential electric displacement saturation model in fracturing piezoelectric ceramics. *Technische mechanik*, 32(1) :53–69.
- [213] Linder, C. and Armero, F. (2007). Finite elements with embedded strong discontinuities for the modeling of failure in solids. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 72(12) :1391–1433.
- [214] Linder, C. and Armero, F. (2009). Finite elements with embedded branching. *Finite Elements in Analysis and Design*, 45(4) :280–293.
- [215] Linder, C. and Miehe, C. (2012). Effect of electric displacement saturation on the hysteretic behavior of ferroelectric ceramics and the initiation and propagation of cracks in piezoelectric ceramics. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 60(5) :882–903.
- [216] Linder, C., Rosato, D., and Miehe, C. (2011). New finite elements with embedded strong discontinuities for the modeling of failure in electromechanical coupled solids. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 200(1-4) :141–161.
- [217] Ling, D., Yang, Q., and Cox, B. (2009). An augmented finite element method for modeling arbitrary discontinuities in composite materials. *International journal of fracture*, 156(1) :53–73.
- [218] Liu, G., Li, Q., Msekh, M. A., and Zuo, Z. (2016a). Abaqus implementation of monolithic and staggered schemes for quasi-static and dynamic fracture phase-field model. *Computational Materials Science*, 121 :35–47.
- [219] Liu, J., Deng, S., Zhang, J., and Liang, N. (2007). Lattice type of fracture model for concrete. *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*, 48(3) :269–284.
- [220] Liu, J., Zhao, Z., Deng, S., and Liang, N. (2008). Modified generalized beam lattice model associated with fracture of reinforced fiber/particle composites. *Theoretical and applied fracture mechanics*, 50(2) :132–141.
- [221] Liu, J., Zhao, Z., Deng, S., and Liang, N. (2009). Numerical investigation of crack growth in concrete subjected to compression by the generalized beam lattice model. *Computational Mechanics*, 43(2) :277–295.
- [222] Liu, W., Schesser, D., Yang, Q., and Ling, D. (2015). A consistency-check based algorithm for element condensation in augmented finite element methods for fracture analysis. *Engineering Fracture Mechanics*, 139 :78–97.

- [223] Liu, W., Yang, Q., Mohammadizadeh, S., and Su, X. (2014). An efficient augmented finite element method for arbitrary cracking and crack interaction in solids. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 99(6) :438–468.
- [224] Liu, W., Yang, Q., Mohammadizadeh, S., Su, X., and Ling, D. (2013). An accurate and efficient augmented finite element method for arbitrary crack interactions. *Journal of Applied Mechanics*, 80(4) :041033.
- [225] Liu, Y. (1996). *Modeling the time-to corrosion cracking of the cover concrete in chloride contaminated reinforced concrete structures*. PhD thesis, Virginia Tech.
- [226] Liu, Y., Zhou, X., You, Z., Yao, S., Gong, F., and Wang, H. (2017). Discrete element modeling of realistic particle shapes in stone-based mixtures through matlab-based imaging process. *Construction and Building Materials*, 143 :169–178.
- [227] Liu, Z., Bessa, M., and Liu, W. K. (2016b). Self-consistent clustering analysis : an efficient multi-scale scheme for inelastic heterogeneous materials. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 306 :319–341.
- [228] Liu, Z., Fleming, M., and Liu, W. K. (2018). Microstructural material database for self-consistent clustering analysis of elastoplastic strain softening materials. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 330 :547–577.
- [229] Lloberas-Valls, O., Rixen, D., Simone, A., and Sluys, L. J. (2011). Domain decomposition techniques for the efficient modeling of brittle heterogeneous materials. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 200(13-16) :1577–1590.
- [230] Logarzo, H. J., Capuano, G., and Rimoli, J. J. (2021). Smart constitutive laws : Inelastic homogenization through machine learning. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 373 :113482.
- [231] Lorentz, E. and Andrieux, S. (1999). A variational formulation for nonlocal damage models. *International journal of plasticity*, 15(2) :119–138.
- [232] Lorentz, E., Cuvilliez, S., and Kazymyrenko, K. (2011). Convergence of a gradient damage model toward a cohesive zone model. *Comptes Rendus Mécanique*, 339(1) :20–26.
- [233] Lorentz, E., Cuvilliez, S., and Kazymyrenko, K. (2012). Modelling large crack propagation : from gradient damage to cohesive zone models. *International journal of fracture*, 178(1) :85–95.
- [234] Loret, B. and Prevost, J. H. (1990). Dynamic strain localization in elasto-(visco-) plastic solids, part 1. general formulation and one-dimensional examples. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 83(3) :247–273.
- [235] Lu, X., Giovanis, D. G., Yvonnet, J., Papadopoulos, V., Detrez, F., and Bai, J. (2019). A data-driven computational homogenization method based on neural networks for the nonlinear anisotropic electrical response of graphene/polymer nanocomposites. *Computational Mechanics*, 64(2) :307–321.
- [236] Lura, P., Jensen, O. M., and Weiss, J. (2009). Cracking in cement paste induced by autogenous shrinkage. *Materials and structures*, 42(8) :1089–1099.

- [237] M.A. Benaimche, J. Yvonnet, B. B. Q.-C. H. (2021). A k-means clustering machine learning-based nonlinear multiscale method for anelastic heterogeneous structures with internal variables. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, submitted.
- [238] Magnier, S. A. and Donzé, F.-V. (1998). Numerical simulations of impacts using a discrete element method. *Mechanics of Cohesive-frictional Materials : An International Journal on Experiments, Modelling and Computation of Materials and Structures*, 3(3) :257–276.
- [239] Malolepszy, J. and Deja, J. (1988). The influence of curing conditions on the mechanical properties of alkali slag binders. *Silicates industriels*, 53(11-12) :179–186.
- [240] Malolepszy, J. and Deja, J. (1994). Immobilization of heavy metal ions by the alkali activated slag cementitious materials. In *Studies in Environmental Science*, volume 60, pages 519–524. Elsevier.
- [241] Marigo, J.-J., Maurini, C., and Pham, K. (2016). An overview of the modelling of fracture by gradient damage models. *Meccanica*, 51(12) :3107–3128.
- [242] Martin, C. L., Bouvard, D., and Delette, G. (2006). Discrete element simulations of the compaction of aggregated ceramic powders. *Journal of the American Ceramic Society*, 89(11) :3379–3387.
- [243] Masuya, H., Kajikawa, Y., and Nakata, Y. (1994). Application of the distinct element method to the analysis of the concrete members under impact. *Nuclear engineering and design*, 150(2-3) :367–377.
- [244] Mazars, J. (1986). A description of micro-and macroscale damage of concrete structures. *Engineering Fracture Mechanics*, 25(5-6) :729–737.
- [245] McEachern, R. J. and Taylor, P. (1998). A review of the oxidation of uranium dioxide at temperatures below 400 c. *Journal of Nuclear Materials*, 254(2-3) :87–121.
- [246] Mechtcherine, V., Gram, A., Krenzer, K., Schwabe, J.-H., Shyshko, S., and Roussel, N. (2014). Simulation of fresh concrete flow using discrete element method (dem) : theory and applications. *Materials and structures*, 47(4) :615–630.
- [247] Meguro, K. and Hakuno, M. (1989). Fracture analyses of concrete structures by the modified distinct element method. *Doboku Gakkai Ronbunshu*, 1989(410) :113–124.
- [248] Melenk, J. M. and Babuška, I. (1996). The partition of unity finite element method : basic theory and applications. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 139(1-4) :289–314.
- [249] Matheron, G. (1971). Theory of regionalized variables and its applications. *Cah. Centre Morrhhol. Math.*, 5 :211.
- [250] Michel, J.-C., Moulinec, H., and Suquet, P. (1999). Effective properties of composite materials with periodic microstructure : a computational approach. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 172(1-4) :109–143.

- [251] Miehe, C., Apel, N., and Lambrecht, M. (2002a). Anisotropic additive plasticity in the logarithmic strain space : modular kinematic formulation and implementation based on incremental minimization principles for standard materials. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 191(47-48) :5383–5425.
- [252] Miehe, C., Hofacker, M., Schänzel, L.-M., and Aldakheel, F. (2015). Phase field modeling of fracture in multi-physics problems. part ii. coupled brittle-to-ductile failure criteria and crack propagation in thermo-elastic–plastic solids. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 294 :486–522.
- [253] Miehe, C., Hofacker, M., and Welschinger, F. (2010a). A phase field model for rate-independent crack propagation : Robust algorithmic implementation based on operator splits. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 199(45-48) :2765–2778.
- [254] Miehe, C. and Mauthe, S. (2016). Phase field modeling of fracture in multi-physics problems. part iii. crack driving forces in hydro-poro-elasticity and hydraulic fracturing of fluid-saturated porous media. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 304 :619–655.
- [255] Miehe, C. and Schänzel, L.-M. (2014). Phase field modeling of fracture in rubbery polymers. part i : Finite elasticity coupled with brittle failure. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 65 :93–113.
- [256] Miehe, C., Schröder, J., and Becker, M. (2002b). Computational homogenization analysis in finite elasticity : material and structural instabilities on the micro-and macro-scales of periodic composites and their interaction. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 191(44) :4971–5005.
- [257] Miehe, C., Schröder, J., and Schotte, J. (1999). Computational homogenization analysis in finite plasticity simulation of texture development in polycrystalline materials. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 171(3-4) :387–418.
- [258] Miehe, C., Welschinger, F., and Hofacker, M. (2010b). Thermodynamically consistent phase-field models of fracture : Variational principles and multi-field fe implementations. *International journal for numerical methods in engineering*, 83(10) :1273–1311.
- [259] Milton, G. W. and Kohn, R. V. (1988). Variational bounds on the effective moduli of anisotropic composites. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 36(6) :597–629.
- [260] Minh Nguyen-Thanh, V., Trong Khiem Nguyen, L., Rabczuk, T., and Zhuang, X. (2020). A surrogate model for computational homogenization of elastostatics at finite strain using high-dimensional model representation-based neural network. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 121(21) :4811–4842.
- [261] Mirzaee, M. J., Alaei, F. J., and Hajsadeghi, M. (2014). Modeling of cracks induced by corrosion of reinforcing bars in marine structures using xfem.
- [262] Moës, N. and Belytschko, T. (2002). Extended finite element method for cohesive crack growth. *Engineering fracture mechanics*, 69(7) :813–833.

- [263] Moës, N., Dolbow, J., and Belytschko, T. (1999). A finite element method for crack growth without remeshing. *International journal for numerical methods in engineering*, 46(1) :131–150.
- [264] Moës, N., Gravouil, A., and Belytschko, T. (2002). Non-planar 3d crack growth by the extended finite element and level sets—part i : Mechanical model. *International journal for numerical methods in engineering*, 53(11) :2549–2568.
- [265] Moës, N., Stolz, C., Bernard, P.-E., and Chevaugeon, N. (2011). A level set based model for damage growth : the thick level set approach. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 86(3) :358–380.
- [266] Mori, T. and Tanaka, K. (1973). Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions. *Acta metallurgica*, 21(5) :571–574.
- [267] Moulinec, H. and Suquet, P. (1998). A numerical method for computing the overall response of nonlinear composites with complex microstructure. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 157(1-2) :69–94.
- [268] Mungule, M. and Raghuprasad, B. (2011). Meso-scale studies in fracture of concrete : A numerical simulation. *Computers & structures*, 89(11-12) :912–920.
- [269] Naderi, M. and Iyyer, N. (2017). 3d modeling of arbitrary cracking in solids using augmented finite element method. *Composite Structures*, 160 :220–231.
- [270] Naderi, M., Jung, J., and Yang, Q. (2016). A three dimensional augmented finite element for modeling arbitrary cracking in solids. *International journal of fracture*, 197(2) :147–168.
- [271] Nagashima, T. and Sawada, M. (2016). Development of a damage propagation analysis system based on level set x fem using the cohesive zone model. *Computers & Structures*, 174 :42–53.
- [272] Nayak, S., Kizilkanat, A., Neithalath, N., and Das, S. (2019). Experimental and numerical investigation of fracture behavior of particle-reinforced alkali-activated slag mortars. *Journal of Materials in Civil Engineering*, 31(5) :04019043.
- [273] Needleman, A. (1988). Material rate dependence and mesh sensitivity in localization problems. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 67(1) :69–85.
- [274] Needleman, A. (1990). An analysis of tensile decohesion along an interface. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 38(3) :289–324.
- [275] Neto, A. A. M., Cincotto, M. A., and Repette, W. (2008). Drying and autogenous shrinkage of pastes and mortars with activated slag cement. *Cement and Concrete Research*, 38(4) :565–574.
- [276] Nezamabadi, S., Potier-Ferry, M., Zahrouni, H., and Yvonnet, J. (2015). Compressive failure of composites : A computational homogenization approach. *Composite Structures*, 127 :60–68.

- [277] Nezamabadi, S., Yvonnet, J., Zahrouni, H., and Potier-Ferry, M. (2009). A multilevel computational strategy for handling microscopic and macroscopic instabilities. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 198(27-29) :2099–2110.
- [278] Nguyen, N. H., Bui, H. H., Nguyen, G. D., and Kodikara, J. (2017a). A cohesive damage-plasticity model for dem and its application for numerical investigation of soft rock fracture properties. *International Journal of Plasticity*, 98 :175–196.
- [279] Nguyen, T., Bary, B., and de Larrard, T. (2015a). Coupled carbonation-rust formation-damage modeling and simulation of steel corrosion in 3d mesoscale reinforced concrete. *Cement and concrete research*, 74 :95–107.
- [280] Nguyen, T. H., Bui, T. Q., and Hirose, S. (2018). Smoothing gradient damage model with evolving anisotropic nonlocal interactions tailored to low-order finite elements. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 328 :498–541.
- [281] Nguyen, T.-T., Réthoré, J., Yvonnet, J., and Baietto, M.-C. (2017b). Multi-phase-field modeling of anisotropic crack propagation for polycrystalline materials. *Computational Mechanics*, 60(2) :289–314.
- [282] Nguyen, T.-T., Waldmann, D., and Bui, T. Q. (2019). Computational chemo-thermo-mechanical coupling phase-field model for complex fracture induced by early-age shrinkage and hydration heat in cement-based materials. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 348 :1–28.
- [283] Nguyen, T.-T., Waldmann, D., and Bui, T. Q. (2020a). Phase field simulation of early-age fracture in cement-based materials. *International Journal of Solids and Structures*, 191 :157–172.
- [284] Nguyen, T. T., Yvonnet, J., Bornert, M., and Chateau, C. (2016a). Initiation and propagation of complex 3d networks of cracks in heterogeneous quasi-brittle materials : Direct comparison between in situ testing-microct experiments and phase field simulations. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 95 :320–350.
- [285] Nguyen, T. T., Yvonnet, J., Bornert, M., Chateau, C., Bilteryst, F., and Steib, E. (2017c). Large-scale simulations of quasi-brittle microcracking in realistic highly heterogeneous microstructures obtained from micro ct imaging. *Extreme mechanics letters*, 17 :50–55.
- [286] Nguyen, T. T., Yvonnet, J., Bornert, M., Chateau, C., Sab, K., Romani, R., and Le Roy, R. (2016b). On the choice of parameters in the phase field method for simulating crack initiation with experimental validation. *International Journal of Fracture*, 197(2) :213–226.
- [287] Nguyen, T.-T., Yvonnet, J., Waldmann, D., and He, Q.-C. (2020b). Implementation of a new strain split to model unilateral contact within the phase field method. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 121(21) :4717–4733.
- [288] Nguyen, T. T., Yvonnet, J., Zhu, Q.-Z., Bornert, M., and Chateau, C. (2015b). A phase field method to simulate crack nucleation and propagation in strongly heterogeneous materials from direct imaging of their microstructure. *Engineering Fracture Mechanics*, 139 :18–39.

- [289] Nguyen, T.-T., Yvonnet, J., Zhu, Q.-Z., Bornert, M., and Chateau, C. (2016c). A phase-field method for computational modeling of interfacial damage interacting with crack propagation in realistic microstructures obtained by microtomography. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 312 :567–595.
- [290] Nguyen, V. P., Stroeve, M., and Sluys, L. J. (2012). An enhanced continuous–discontinuous multiscale method for modeling mode-i cohesive failure in random heterogeneous quasi-brittle materials. *Engineering Fracture Mechanics*, 79 :78–102.
- [291] Nitka, M. and Tejchman, J. (2018). A three-dimensional meso-scale approach to concrete fracture based on combined dem with x-ray μ ct images. *Cement and Concrete Research*, 107 :11–29.
- [292] Ojovan, M. I., Lee, W. E., and Kalmykov, S. N. (2019). *An introduction to nuclear waste immobilisation*. Elsevier.
- [293] Ojovan, M. I., Varlackova, G. A., Golubeva, Z. I., and Burlaka, O. N. (2011). Long-term field and laboratory leaching tests of cemented radioactive wastes. *Journal of hazardous materials*, 187(1-3) :296–302.
- [294] Oliver, J. (1996). Modelling strong discontinuities in solid mechanics via strain softening constitutive equations. part 1 : Fundamentals. *International journal for numerical methods in engineering*, 39(21) :3575–3600.
- [295] Oliver, J. (2000). On the discrete constitutive models induced by strong discontinuity kinematics and continuum constitutive equations. *International journal of solids and structures*, 37(48-50) :7207–7229.
- [296] Oliver, J., Huespe, A. E., and Sánchez, P. J. (2006). A comparative study on finite elements for capturing strong discontinuities : E-fem vs x-fem. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 195(37-40) :4732–4752.
- [297] Omelchuk, V., Ye, G., Runova, R. F., and Rudenko, I. I. (2018). Shrinkage behavior of alkali-activated slag cement pastes. In *Key Engineering Materials*, volume 761, pages 45–48. Trans Tech Publ.
- [298] Onate, E., Zárate, F., Miquel, J., Santasusana, M., Celigueta, M. A., Arrufat, F., Gandikota, R., Valiullin, K., and Ring, L. (2015). A local constitutive model for the discrete element method. application to geomaterials and concrete. *Computational particle mechanics*, 2(2) :139–160.
- [299] Ortiz, M. and Pandolfi, A. (1999). Finite-deformation irreversible cohesive elements for three-dimensional crack-propagation analysis. *International journal for numerical methods in engineering*, 44(9) :1267–1282.
- [300] Otero, F., Martinez, X., Oller, S., and Salomón, O. (2015). An efficient multi-scale method for non-linear analysis of composite structures. *Composite Structures*, 131 :707–719.
- [301] Owen, L. and Scudamore, R. (1966). A microscope study of the initiation of the hydrogen-uranium reaction. *Corrosion Science*, 6(11-12) :461–468.

- [302] Pacheco-Torgal, F., Labrincha, J., Leonelli, C., Palomo, A., and Chindaprasit, P. (2014). *Handbook of alkali-activated cements, mortars and concretes*. Elsevier.
- [303] Pan, T. and Lu, Y. (2012). Stochastic modeling of reinforced concrete cracking due to nonuniform corrosion : Fem-based cross-scale analysis. *Journal of Materials in Civil Engineering*, 24(6) :698–706.
- [304] Pandolfi, A., Krysl, P., and Ortiz, M. (1999). Finite element simulation of ring expansion and fragmentation : the capturing of length and time scales through cohesive models of fracture. *International Journal of Fracture*, 95(1) :279–297.
- [305] Papadopoulos, V. and Tavlaki, M. (2016). The impact of interfacial properties on the macroscopic performance of carbon nanotube composites. a fe2-based multiscale study. *Composite Structures*, 136 :582–592.
- [306] Papoulia, K. D., Sam, C.-H., and Vavasis, S. A. (2003). Time continuity in cohesive finite element modeling. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 58(5) :679–701.
- [307] Paraskevoulakos, C., Hallam, K., Adamska, A., and Scott, T. (2020). Monitoring uranium corrosion in magnox sludge using x-ray computed tomography : A direct analogue to “legacy” fuel storage ponds. *Corrosion Science*, 168 :108551.
- [308] Paraskevoulakos, C., Stitt, C., Hallam, K., Banos, A., Olloqui, M. L., Jones, C., Griffiths, G., Adamska, A., Jowsey, J., and Scott, T. (2019). Monitoring the degradation of nuclear waste packages induced by interior metallic corrosion using synchrotron x-ray tomography. *Construction and Building Materials*, 215 :90–103.
- [309] Park, B. and Min, K.-B. (2015). Bonded-particle discrete element modeling of mechanical behavior of transversely isotropic rock. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, 76 :243–255.
- [310] Pazdaniakou, A. and Adler, P. (2012). Lattice spring models. *Transport in porous media*, 93(2) :243–262.
- [311] Peerlings, R. d., De Borst, R., Brekelmans, W., and Geers, M. (2002). Localisation issues in local and nonlocal continuum approaches to fracture. *European Journal of Mechanics-A/Solids*, 21(2) :175–189.
- [312] Peerlings, R. H., de Borst, R., Brekelmans, W. M., and De Vree, J. (1996). Gradient enhanced damage for quasi-brittle materials. *International Journal for numerical methods in engineering*, 39(19) :3391–3403.
- [313] Peigney, M. (2021). A fourier-based machine learning technique with application in engineering. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 122(3) :866–897.
- [314] Péliou, C., Baccou, J., Monerie, Y., and Perales, F. (2009). Determination of the size of the representative volume element for random quasi-brittle composites. *International Journal of Solids and Structures*, 46(14-15) :2842–2855.

- [315] Peters, J. F., Hopkins, M. A., Kala, R., and Wahl, R. E. (2009). A poly-ellipsoid particle for non-spherical discrete element method. *Engineering Computations*.
- [316] Pham, K., Marigo, J.-J., and Maurini, C. (2011). The issues of the uniqueness and the stability of the homogeneous response in uniaxial tests with gradient damage models. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 59(6) :1163–1190.
- [317] Pijaudier-Cabot, G. and Bažant, Z. P. (1987). Nonlocal damage theory. *Journal of engineering mechanics*, 113(10) :1512–1533.
- [318] Pijaudier-Cabot, G. and Grégoire, D. (2014). A review of non local continuum damage : Modelling of failure ? *Networks & Heterogeneous Media*, 9(4) :575.
- [319] Planas, J. and Elices, M. (1991). Nonlinear fracture of cohesive materials. In *Current trends in concrete fracture research*, pages 139–157. Springer.
- [320] Potyondy, D. O. and Cundall, P. (2004). A bonded-particle model for rock. *International journal of rock mechanics and mining sciences*, 41(8) :1329–1364.
- [321] Pramod, A., Annabattula, R., Ooi, E., Song, C., Natarajan, S., et al. (2019). Adaptive phase-field modeling of brittle fracture using the scaled boundary finite element method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 355 :284–307.
- [322] Prevost, J. H. and Loret, B. (1990). Dynamic strain localization in elasto-(visco-) plastic solids, part 2. plane strain examples. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 83(3) :275–294.
- [323] Provis, J. L. and Van Deventer, J. S. (2013). *Alkali activated materials : state-of-the-art report, RILEM TC 224-AAM*, volume 13. Springer Science & Business Media.
- [324] Rabczuk, T. (2013). Computational methods for fracture in brittle and quasi-brittle solids : state-of-the-art review and future perspectives. *International Scholarly Research Notices*, 2013.
- [325] Raghavan, P. and Ghosh, S. (2005). A continuum damage mechanics model for unidirectional composites undergoing interfacial debonding. *Mechanics of materials*, 37(9) :955–979.
- [326] Rahman, R. O. A., Rakhimov, R. Z., Rakhimova, N. R., and Ojovan, M. I. (2014). *Cementitious materials for nuclear waste immobilization*. John Wiley & Sons.
- [327] Ramière, I. and Helfer, T. (2015). Iterative residual-based vector methods to accelerate fixed point iterations. *Computers & Mathematics with Applications*, 70(9) :2210–2226.
- [328] Regener, B., Kremaszky, C., Werner, E., and Stockinger, M. (2011). Thermo-mechanical fe2 simulation scheme for abaqus. *PAMM*, 11(1) :547–548.
- [329] Rice, J. R. (1968). A path independent integral and the approximate analysis of strain concentration by notches and cracks.
- [330] Richardson, C. L., Hegemann, J., Sifakis, E., Hellrung, J., and Teran, J. M. (2011). An xfem method for modeling geometrically elaborate crack propagation in brittle materials. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 88(10) :1042–1065.

- [331] Rifai, F. (2017). *Immobilisation de déchets magnésiens dans un matériau alcali-activé : étude expérimentale et numérique*. PhD thesis, Université Paris-Saclay.
- [332] Rifai, F., Darquennes, A., Benboudjema, F., Muzeau, B., and Stefan, L. (2017). Thermo-chemo-mechanical behavior of alkali-activated slag materials-focus on early-age. In *2nd International RILEM/COST Conference on Early Age Cracking and Serviceability in Cement-based Materials and Structures-EAC2*. Eac2.
- [333] Rocha, I., Kerfriden, P., and van der Meer, F. (2020). Micromechanics-based surrogate models for the response of composites : A critical comparison between a classical mesoscale constitutive model, hyper-reduction and neural networks. *European Journal of Mechanics-A/Solids*, 82 :103995.
- [334] Rocha, I., Kerfriden, P., and van der Meer, F. (2021). On-the-fly construction of surrogate constitutive models for concurrent multiscale mechanical analysis through probabilistic machine learning. *Journal of Computational Physics : X*, 9 :100083.
- [335] Rothenburg, L. and Bathurst, R. (1993). Influence of particle eccentricity on micromechanical behavior of granular materials. *Mechanics of Materials*, 16(1-2) :141–152.
- [336] Roussette, S., Michel, J.-C., and Suquet, P. (2009). Nonuniform transformation field analysis of elastic–viscoplastic composites. *Composites Science and Technology*, 69(1) :22–27.
- [337] Roux, S. and Guyon, E. (1985). Mechanical percolation : a small beam lattice study. *Journal de Physique Lettres*, 46(21) :999–1004.
- [338] Roy, D. M., Jiang, W., and Silsbee, M. (2000). Chloride diffusion in ordinary, blended, and alkali-activated cement pastes and its relation to other properties. *Cement and Concrete research*, 30(12) :1879–1884.
- [339] Rudnicki, J. W. and Rice, J. (1975). Conditions for the localization of deformation in pressure-sensitive dilatant materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 23(6) :371–394.
- [340] Rundle, R., Baenziger, N., Wilson, A., and McDonald, R. (1948). The structures of the carbides, nitrides and oxides of uranium1. *Journal of the American Chemical Society*, 70(1) :99–105.
- [341] Salazar, A., Sáez, E., and Pardo, G. (2015). Modeling the direct shear test of a coarse sand using the 3d discrete element method with a rolling friction model. *Computers and Geotechnics*, 67 :83–93.
- [342] Santamarina, J. C. and Cho, G.-C. (2004). Soil behaviour : The role of particle shape. In *Advances in geotechnical engineering : The Skempton conference : Proceedings of a three day conference on advances in geotechnical engineering, organised by the Institution of Civil Engineers and held at the Royal Geographical Society, London, UK, on 29–31 March 2004*, pages 604–617. Thomas Telford Publishing.
- [343] Sanz, B., Planas, J., and Sancho, J. M. (2013). An experimental and numerical study of the pattern of cracking of concrete due to steel reinforcement corrosion. *Engineering Fracture Mechanics*, 114 :26–41.

- [344] Šavija, B. and Luković, M. (2016). Carbonation of cement paste : Understanding, challenges, and opportunities. *Construction and Building Materials*, 117 :285–301.
- [345] Šavija, B., Luković, M., Pacheco, J., and Schlangen, E. (2013). Cracking of the concrete cover due to reinforcement corrosion : A two-dimensional lattice model study. *Construction and Building Materials*, 44 :626–638.
- [346] Scheider, I. and Brocks, W. (2003). The effect of the traction separation law on the results of cohesive zone crack propagation analyses. In *Key Engineering Materials*, volume 251, pages 313–318. Trans Tech Publ.
- [347] Schlangen, E. (1995). Experimental and numerical analysis of fracture processes in concrete.
- [348] Schlangen, E. and Garboczi, E. J. (1997). Fracture simulations of concrete using lattice models : computational aspects. *Engineering fracture mechanics*, 57(2-3) :319–332.
- [349] Schlangen, E. and Van Mier, J. (1992). Experimental and numerical analysis of micro-mechanisms of fracture of cement-based composites. *Cement and concrete composites*, 14(2) :105–118.
- [350] Schroeder, J., Labusch, M., and Keip, M.-A. (2016). Algorithmic two-scale transition for magneto-electro-mechanically coupled problems : Fe2-scheme : Localization and homogenization. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 302 :253–280.
- [351] Sebsadji, S. and Chouicha, K. (2012). Determining periodic representative volumes of concrete mixtures based on the fractal analysis. *International Journal of Solids and Structures*, 49(21) :2941–2950.
- [352] Seetharam, S., Laloy, E., Jivkov, A., Yu, L., Phung, Q., Pham, N., Kursten, B., and Druyts, F. (2019). A mesoscale framework for analysis of corrosion induced damage of concrete. *Construction and Building Materials*, 216 :347–361.
- [353] Setiadi, A., Milestone, N., Hill, J., and Hayes, M. (2006). Corrosion of aluminium and magnesium in bfs composite cements. *Advances in Applied Ceramics*, 105(4) :191–196.
- [354] Shi, C. (1996). Strength, pore structure and permeability of alkali-activated slag mortars. *Cement and Concrete Research*, 26(12) :1789–1799.
- [355] Shi, C. and Day, R. L. (1996). Alkali-slag cements for the immobilization of radioactive wastes. In *Stabilization and Solidification of Hazardous, Radioactive, and Mixed Wastes : 3rd Volume*. ASTM International.
- [356] Shi, C., Day, R. L., Wu, X., and Tang, M. (1991). Uptake of metal ions by autoclaved cement pastes. *MRS Online Proceedings Library*, 245(1) :141–149.
- [357] Shi, C., Shen, X., Yan, S., and Wu, X. (1994). Immobilization of radioactive wastes with portland and alkali-slag cement pastes. *Cemento*, 91 :97–97.
- [358] Simo, J. C. and Hughes, T. J. (2006). *Computational inelasticity*, volume 7. Springer Science & Business Media.

- [359] Simone, A., Askes, H., and Sluys, L. J. (2004). Incorrect initiation and propagation of failure in non-local and gradient-enhanced media. *International journal of solids and structures*, 41(2) :351–363.
- [360] Simone, A., Wells, G. N., and Sluys, L. J. (2003). From continuous to discontinuous failure in a gradient-enhanced continuum damage model. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 192(41-42) :4581–4607.
- [361] Skarzynski, L. and Tejchman, J. (2012). Determination of representative volume element in concrete under tensile deformation. *Computers and Concrete*, 9(1) :35–50.
- [362] Smit, R. J., Brekelmans, W. M., and Meijer, H. E. (1998). Prediction of the mechanical behavior of nonlinear heterogeneous systems by multi-level finite element modeling. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 155(1-2) :181–192.
- [363] Song, J.-H., Areias, P. M., and Belytschko, T. (2006). A method for dynamic crack and shear band propagation with phantom nodes. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 67(6) :868–893.
- [364] Song, S., Sohn, D., Jennings, H., and Mason, T. O. (2000). Hydration of alkali-activated ground granulated blast furnace slag. *Journal of materials science*, 35(1) :249–257.
- [365] SROLOVITZ, D. J. and BEALE, P. D. (1988). Computer simulation of failure in an elastic model with randomly distributed defects. *Journal of the American Ceramic Society*, 71(5) :362–369.
- [366] Stamati, O. (2020). *Effet des hétérogénéités sur le comportement mécanique du béton à l'échelle mésoscopique : apports de la micro-tomographie à rayons-x in-situ combinée à une modélisation E-FEM*. PhD thesis, Université Grenoble Alpes.
- [367] Stamati, O., Roubin, E., Andò, E., and Malecot, Y. (2021). Tensile damage mechanisms of concrete using x-ray in situ experiments and mesoscopic modelling.
- [368] Stitt, C., Hart, M., Harker, N., Hallam, K., MacFarlane, J., Banos, A., Paraskevoulakos, C., Butcher, E., Padovani, C., and Scott, T. (2015). Nuclear waste viewed in a new light; a synchrotron study of uranium encapsulated in grout. *Journal of hazardous materials*, 285 :221–227.
- [369] Stitt, C., Paraskevoulakos, C., Banos, A., Harker, N., Hallam, K., Pullin, H., Davenport, A., Street, S., and Scott, T. (2018). In-situ, time resolved monitoring of uranium in bfs : Opc grout. part 2 : Corrosion in water. *Scientific reports*, 8(1) :1–12.
- [370] Stitt, C., Paraskevoulakos, C., Harker, N., Banos, A., Hallam, K., Jones, C., and Scott, T. (2017). Real time, in-situ deuteriding of uranium encapsulated in grout; effects of temperature on the uranium-deuterium reaction. *Corrosion Science*, 127 :270–279.
- [371] Stroeven, M., Askes, H., and Sluys, L. (2004). Numerical determination of representative volumes for granular materials. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 193(30-32) :3221–3238.

- [372] Suchorzewski, J., Tejchman, J., and Nitka, M. (2018). Discrete element method simulations of fracture in concrete under uniaxial compression based on its real internal structure. *International Journal of Damage Mechanics*, 27(4) :578–607.
- [373] Sukumar, N., Moës, N., Moran, B., and Belytschko, T. (2000). Extended finite element method for three-dimensional crack modelling. *International journal for numerical methods in engineering*, 48(11) :1549–1570.
- [374] Sutula, D., Kerfriden, P., van Dam, T., and Bordas, S. P. (2018a). Minimum energy multiple crack propagation. part i : Theory and state of the art review. *Engineering Fracture Mechanics*, 191 :205–224.
- [375] Sutula, D., Kerfriden, P., Van Dam, T., and Bordas, S. P. (2018b). Minimum energy multiple crack propagation. part-ii : Discrete solution with xfem. *Engineering Fracture Mechanics*, 191 :225–256.
- [376] Sutula, D., Kerfriden, P., van Dam, T., and Bordas, S. P. (2018c). Minimum energy multiple crack propagation. part iii : Xfem computer implementation and applications. *Engineering Fracture Mechanics*, 191 :257–276.
- [377] Talling, B. and Brandstetr, J. (1989). Present state and future of alkali-activated slag concretes. *Special Publication*, 114 :1519–1546.
- [378] Tan, Y., Yang, D., and Sheng, Y. (2009). Discrete element method (dem) modeling of fracture and damage in the machining process of polycrystalline sic. *Journal of the European ceramic society*, 29(6) :1029–1037.
- [379] Tang, S., Zhang, L., and Liu, W. K. (2018). From virtual clustering analysis to self-consistent clustering analysis : a mathematical study. *Computational Mechanics*, 62(6) :1443–1460.
- [380] Tanné, E., Li, T., Bourdin, B., Marigo, J.-J., and Maurini, C. (2018). Crack nucleation in variational phase-field models of brittle fracture. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 110 :80–99.
- [381] Tavares, F. A. and Plesha, M. E. (2007). Discrete element method for modelling solid and particulate materials. *International journal for numerical methods in engineering*, 70(4) :379–404.
- [382] Tchalla, A., Belouettar, S., Makradi, A., and Zahrouni, H. (2013). An abaqus toolbox for multiscale finite element computation. *Composites Part B : Engineering*, 52 :323–333.
- [383] Thionnet, A., Bunsell, A. R., Camara, S., and Allen, D. H. (2009). A simplified fe2 model of fibre failure and its consequences applied to the design of composite pressure vessels. *ICCM-17*.
- [384] Thomas, R., Lezama, D., and Peethamparan, S. (2017). On drying shrinkage in alkali-activated concrete : Improving dimensional stability by aging or heat-curing. *Cement and Concrete Research*, 91 :13–23.

- [385] Tikarrouchine, E., Chatzigeorgiou, G., Praud, F., Piotrowski, B., Chemisky, Y., and Meraghni, F. (2018). Three-dimensional fe2 method for the simulation of non-linear, rate-dependent response of composite structures. *Composite Structures*, 193 :165–179.
- [386] Totemeier, T. (2000). Characterization of uranium corrosion products involved in a uranium hydride pyrophoric event. *Journal of nuclear materials*, 278(2-3) :301–311.
- [387] Tran, V., Donzé, F.-V., and Marin, P. (2011). A discrete element model of concrete under high triaxial loading. *Cement and Concrete Composites*, 33(9) :936–948.
- [388] Uddin, F. A., Shigeishi, M., and Ohtsu, M. (2006). Fracture mechanics of corrosion cracking in concrete by acoustic emission. *Meccanica*, 41(4) :425–442.
- [389] Val, D. V., Chernin, L., and Stewart, M. G. (2009). Experimental and numerical investigation of corrosion-induced cover cracking in reinforced concrete structures. *Journal of Structural Engineering*, 135(4) :376–385.
- [390] Van Mier, J., Schlangen, E., Visser, J., and Vervuurt, A. (1993). Experimental and numerical analysis of cracking in concrete and sandstone. In *Topics in Applied Mechanics*, pages 65–72. Springer.
- [391] van Tuijl, R. A., Remmers, J. J., and Geers, M. G. (2020). Multi-dimensional wavelet reduction for the homogenisation of microstructures. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 359 :112652.
- [392] Vandevenne, N., Iacobescu, R. I., Carleer, R., Samyn, P., D’Haen, J., Pontikes, Y., Schreurs, S., and Schroeyers, W. (2018). Alkali-activated materials for radionuclide immobilisation and the effect of precursor composition on cs/sr retention. *Journal of Nuclear Materials*, 510 :575–584.
- [393] Ventura, G., Budyn, E., and Belytschko, T. (2003). Vector level sets for description of propagating cracks in finite elements. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 58(10) :1571–1592.
- [394] Verhoosel, C. V. and de Borst, R. (2013). A phase-field model for cohesive fracture. *International Journal for numerical methods in Engineering*, 96(1) :43–62.
- [395] Verhoosel, C. V., Remmers, J. J., and Gutiérrez, M. A. (2010). A partition of unity-based multiscale approach for modelling fracture in piezoelectric ceramics. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 82(8) :966–994.
- [396] Vervuurt, A., Van Mier, J. G., and Schlangen, E. (1994). Analyses of anchor pull-out in concrete. *Materials and Structures*, 27(5) :251–259.
- [397] Volokh, K. Y. (2004). Comparison between cohesive zone models. *Communications in Numerical Methods in Engineering*, 20(11) :845–856.
- [398] Walpole, L. (1966). On bounds for the overall elastic moduli of inhomogeneous systems—i. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 14(3) :151–162.
- [399] Wang, H. (2015). Numerical modeling of non-planar hydraulic fracture propagation in brittle and ductile rocks using xfem with cohesive zone method. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 135 :127–140.

- [400] Wang, H., Jin, W., and Sun, X. (2008). Fracture model for protective layer cracking of reinforced concrete structure due to rebar corrosion. *Journal of Hydraulic Engineering*, 39(7) :863–869.
- [401] Wang, J., Wang, R., Gao, W., Chen, S., and Wang, C. (2020). Numerical investigation of impact injury of a human head during contact interaction with a windshield glazing considering mechanical failure. *International Journal of Impact Engineering*, 141 :103577.
- [402] Wang, K. and Sun, W. (2018). A multiscale multi-permeability poroplasticity model linked by recursive homogenizations and deep learning. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 334 :337–380.
- [403] Wang, S.-D., Pu, X.-C., Scrivener, K., and Pratt, P. (1995). Alkali-activated slag cement and concrete : a review of properties and problems. *Advances in cement research*, 7(27) :93–102.
- [404] Wang, Y. and Tonon, F. (2011). Discrete element modeling of rock fragmentation upon impact in rock fall analysis. *Rock mechanics and rock engineering*, 44(1) :23–35.
- [405] Wei, C., Wojnar, C. S., and Wu, C. (2021). Hydro-chemo-mechanical phase field formulation for corrosion induced cracking in reinforced concrete. *Cement and Concrete Research*, 144 :106404.
- [406] Wick, T. (2016). Goal functional evaluations for phase-field fracture using pu-based dwr mesh adaptivity. *Computational Mechanics*, 57(6) :1017–1035.
- [407] Wilson, Z. A. and Landis, C. M. (2016). Phase-field modeling of hydraulic fracture. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 96 :264–290.
- [408] Wong, H., Zhao, Y., Karimi, A., Buenfeld, N., and Jin, W. (2010). On the penetration of corrosion products from reinforcing steel into concrete due to chloride-induced corrosion. *Corrosion Science*, 52(7) :2469–2480.
- [409] Wu, J.-Y. (2017). A unified phase-field theory for the mechanics of damage and quasi-brittle failure. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 103 :72–99.
- [410] Wu, J.-Y., Li, F.-B., and Xu, S.-L. (2015). Extended embedded finite elements with continuous displacement jumps for the modeling of localized failure in solids. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 285 :346–378.
- [411] Wu, J.-Y. and Nguyen, V. P. (2018). A length scale insensitive phase-field damage model for brittle fracture. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 119 :20–42.
- [412] Wu, L., Zulueta, K., Major, Z., Arriaga, A., and Noels, L. (2020). Bayesian inference of non-linear multiscale model parameters accelerated by a deep neural network. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 360 :112693.
- [413] Xi, X., Yang, S., and Li, C.-Q. (2018). A non-uniform corrosion model and meso-scale fracture modelling of concrete. *Cement and Concrete Research*, 108 :87–102.
- [414] Xia, L. and Breitkopf, P. (2014). Concurrent topology optimization design of material and structure within fe2 nonlinear multiscale analysis framework. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 278 :524–542.

- [415] Xu, R., Bouby, C., Zahrouni, H., Zineb, T. B., Hu, H., and Potier-Ferry, M. (2018). 3d modeling of shape memory alloy fiber reinforced composites by multiscale finite element method. *Composite Structures*, 200 :408–419.
- [416] Xu, W.-J., Liu, G.-Y., and Yang, H. (2020). Study on the mechanical behavior of sands using 3d discrete element method with realistic particle models. *Acta Geotechnica*, 15 :2813–2828.
- [417] Xu, X.-P. and Needleman, A. (1994). Numerical simulations of fast crack growth in brittle solids. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 42(9) :1397–1434.
- [418] Xuequan, W., Sheng, Y., Xiaodong, S., Mingshu, T., and Liji, Y. (1991). Alkali-activated slag cement based radioactive waste forms. *Cement and concrete research*, 21(1) :16–20.
- [419] Yang, H., Guo, X., Tang, S., and Liu, W. K. (2019). Derivation of heterogeneous material laws via data-driven principal component expansions. *Computational Mechanics*, 64(2) :365–379.
- [420] Ye, H., Cartwright, C., Rajabipour, F., and Radlińska, A. (2014). Effect of drying rate on shrinkage of alkali-activated slag cements.
- [421] Yu, S. and Jin, H. (2020). Modeling of the corrosion-induced crack in concrete contained transverse crack subject to chloride ion penetration. *Construction and Building Materials*, 258 :119645.
- [422] Yuan, Z. and Fish, J. (2008). Toward realization of computational homogenization in practice. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 73(3) :361–380.
- [423] Yvonnet, J., Gonzalez, D., and He, Q.-C. (2009). Numerically explicit potentials for the homogenization of nonlinear elastic heterogeneous materials. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 198(33-36) :2723–2737.
- [424] Yvonnet, J. and He, Q.-C. (2007). The reduced model multiscale method (r3m) for the non-linear homogenization of hyperelastic media at finite strains. *Journal of Computational Physics*, 223(1) :341–368.
- [425] Zang, M., Lei, Z., and Wang, S. (2007). Investigation of impact fracture behavior of automobile laminated glass by 3d discrete element method. *Computational Mechanics*, 41(1) :73–83.
- [426] Zhang, Q., Zhang, X., and Ji, P. (2018). Reducing the anisotropy of a brazilian disc generated in a bonded-particle model. *Acta Mechanica Sinica*, 34(4) :716–727.
- [427] Zhang, X., Sloan, S. W., Vignes, C., and Sheng, D. (2017). A modification of the phase-field model for mixed mode crack propagation in rock-like materials. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 322 :123–136.
- [428] Zhang, X.-P. and Wong, L. N. Y. (2012). Cracking processes in rock-like material containing a single flaw under uniaxial compression : a numerical study based on parallel bonded-particle model approach. *Rock mechanics and rock engineering*, 45(5) :711–737.

- [429] Zhang, Z., Ding, J., Ghassemi, A., and Ge, X. (2015). A hyperelastic-bilinear potential for lattice model with fracture energy conservation. *Engineering Fracture Mechanics*, 142 :220–235.
- [430] Zhang, Z., Paulino, G. H., and Celes, W. (2007). Extrinsic cohesive modelling of dynamic fracture and microbranching instability in brittle materials. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 72(8) :893–923.
- [431] Zhao, G. and Khalili, N. (2012). A lattice spring model for coupled fluid flow and deformation problems in geomechanics. *Rock mechanics and rock engineering*, 45(5) :781–799.
- [432] Zhao, S., Evans, T. M., and Zhou, X. (2018). Shear-induced anisotropy of granular materials with rolling resistance and particle shape effects. *International Journal of Solids and Structures*, 150 :268–281.
- [433] Zhao, S.-F. and Zhao, G.-F. (2012). Implementation of a high order lattice spring model for elasticity. *International Journal of Solids and Structures*, 49(18) :2568–2581.
- [434] Zhao, Y., Yu, J., and Jin, W. (2011). Damage analysis and cracking model of reinforced concrete structures with rebar corrosion. *Corrosion Science*, 53(10) :3388–3397.
- [435] Zhou, F., Molinari, J.-F., and Shioya, T. (2005). A rate-dependent cohesive model for simulating dynamic crack propagation in brittle materials. *Engineering fracture mechanics*, 72(9) :1383–1410.
- [436] Zi, G., Song, J.-H., Budyn, E., Lee, S.-H., and Belytschko, T. (2004). A method for growing multiple cracks without remeshing and its application to fatigue crack growth. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 12(5) :901.