

UNIVERSITÉ DE STRASBOURG  
École Doctorale Mathématiques, Sciences de l'Information et de l'Ingénieur (ED 269)

---

**THÈSE**

présentée devant  
l'Université de Strasbourg  
pour l'obtention du grade de

**DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ DE STRASBOURG**  
DISCIPLINE : MÉCANIQUE, MÉCANIQUE DES MATÉRIAUX

par

**Nicolas BARTH**

---

*Sur la modélisation et la simulation du comportement mécanique  
endommageable de verres borosilicatés sous sollicitation  
thermique*

---

Thèse dirigée par Monsieur le Professeur Yves RÉMOND, Université de Strasbourg, et  
Monsieur le Professeur Saïd AHZI, Université de Strasbourg.

Soutenue publiquement le 15 juillet 2013 devant :

Monsieur le Professeur	Philippe BOISSE ▷ INSA de Lyon	}	Rapporteurs
Monsieur le Professeur	Moussa NAÏT-ABDELAZIZ ▷ Université de Lille 1		
Monsieur le Professeur	René MULLER ▷ Université de Strasbourg		Examineur
Monsieur le Professeur	László TÓTH ▷ Université de Lorraine		Président, Examineur

---

Thèse préparée au sein d'ICube  
*Laboratoire des sciences de l'Ingénieur, de l'Informatique  
et de l'Imagerie, Département Mécanique*

Université de Strasbourg – CNRS UMR 7357  
2 rue Boussingault  
F-67000 Strasbourg





UNIVERSITÉ DE STRASBOURG  
École Doctorale Mathématiques, Sciences de l'Information et de l'Ingénieur (ED 269)

---

**THÈSE**

présentée devant  
l'Université de Strasbourg  
pour l'obtention du grade de

**DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ DE STRASBOURG**  
DISCIPLINE : MÉCANIQUE, MÉCANIQUE DES MATÉRIAUX

par

**Nicolas BARTH**

---

*Sur la modélisation et la simulation du comportement mécanique  
endommageable de verres borosilicatés sous sollicitation  
thermique*

---

Thèse dirigée par Monsieur le Professeur Yves RÉMOND, Université de Strasbourg, et  
Monsieur le Professeur Saïd AHZI, Université de Strasbourg.

Soutenue publiquement le 15 juillet 2013 devant :

Monsieur le Professeur	Philippe BOISSE ▷ INSA de Lyon	}	Rapporteurs
Monsieur le Professeur	Moussa NAÏT-ABDELAZIZ ▷ Université de Lille 1		
Monsieur le Professeur	René MULLER ▷ Université de Strasbourg		Examineur
Monsieur le Professeur	László TÓTH ▷ Université de Lorraine		Président, Examineur
Monsieur le Docteur	Frédéric BOUYER ▷ CEA – Centre de Marcoule	}	Invités
Monsieur le Docteur	Daniel GEORGE ▷ Université de Strasbourg		

---

Thèse préparée au sein d'ICube  
*Laboratoire des sciences de l'Ingénieur, de l'Informatique  
et de l'Imagerie, Département Mécanique*

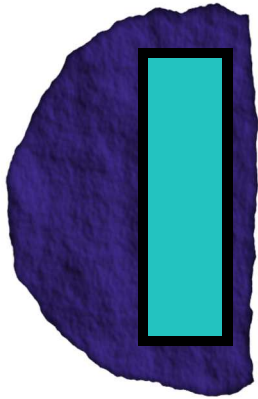
Université de Strasbourg – CNRS UMR 7357  
2 rue Boussingault  
F-67000 Strasbourg





*À ma famille,  
à mes amis*





# Avant-propos

Avant d'exposer le travail de doctorat, je souhaite en situer le contexte administratif et adresser mes plus chaleureux remerciements à ses différents acteurs et témoins.

Pendant près d'un an, j'ai commencé à travailler à la phase finale d'un projet industriel triennal sur la thermomécanique des verres borosilicatés, projet ensuite reconduit et délimitant alors ce doctorat. Ces travaux ont été menés à l'institut de mécanique des fluides et des solides, devenu par la suite laboratoire ICube, département mécanique ( $i^3$  = laboratoire des sciences de l'Ingénieur, de l'Informatique et de l'Imagerie, UMR 7357 Université de Strasbourg–CNRS–ENGEES–INSA de Strasbourg). Dans ce département, nous sommes au sein de l'équipe matériaux multi-échelles et biomécanique.

Outre les membres d'ICube ayant travaillé ou travaillant sur ce projet, nous comptons également des collaborateurs et superviseurs à l'ANDRA, à AREVA NC, au CEA – Centre de Marcoule – au Laboratoire de Géologie à l'École Normale Supérieure – Paris – ainsi qu'au Laboratoire de Mécanique des Solides à l'École Polytechnique – Palaiseau. Ils ont apporté leur excellence et leur expertise à la qualité des travaux de ce consortium, travaux qui plus est valorisés à de nombreuses occasions, par exemple au travers des publications (à ce jour) RÉFS [OSBG<sup>+</sup>10, DDC<sup>+</sup>10, OS10, OSFG<sup>+</sup>11, GAOS<sup>+</sup>11, OSGF<sup>+</sup>11, DBACB13].

## Remerciements

Je remercie grandement le Professeur Yves Rémond, Directeur du doctorat à ICube, pour avoir en toute constance apporté ses lumières et sa bienveillance au bon déroulement des recherches. Ses connaissances avancées dans les multiples domaines scientifiques concernés par le projet ont été d'un grand atout pour me permettre d'avancer dans les meilleurs délais.

Je remercie pareillement le Professeur Saïd Ahzi, Co-Directeur de la thèse à ICube, que j'apprécie notamment pour ses qualités permettant la mise en perspective des travaux scientifiques ainsi que d'en élargir les horizons. La vision d'ensemble du sujet de recherche, aussi complexe soit-il, est primordiale pour permettre les bons choix de direction dans la recherche, en cela je remercie mes Directeurs de thèse.

Travaillant en prise directe avec ce projet à ICube, j'ai de nombreuses raisons de remercier Daniel George, invité du jury de thèse et maître de conférences, que j'ai fréquemment côtoyé pour discuter de la science de nos modèles... mais aussi pour la valoriser, notamment aux moments

---

clés de la réalisation de ce doctorat. Toujours présent pour transmettre son savoir, il m'a permis en premier lieu de démarrer dans les meilleures conditions ces travaux. J'apprécie particulièrement le bon sens qu'il sait distiller, pour que les recherches progressent.

Faisant partie des plus proches collaborateurs en tant que premier relais du consortium, j'adresse mes remerciements à Frédéric Bouyer, invité du jury de thèse et travaillant au CEA de Marcoule. Son esprit de synthèse des connaissances ainsi que des tenants et aboutissants du projet de recherche, à l'échelle du consortium, a facilité la mesure de ce projet industriel. À travers lui, ce sont aussi les équipes en amont ou en aval de ce projet de recherche que je souhaite reconnaître pour les possibilités qu'elles nous ont accordées de mieux comprendre ces recherches en tant qu'élément d'un ensemble plus grand.

Je remercie collégalement ces plus directs (et fréquents) collaborateurs, car au fil du doctorat j'ai eu l'occasion de remarquer leur grande rigueur scientifique. Je place cette qualité au cœur de la définition d'un travail de recherche scientifique.

Je tiens à remercier le Professeur László Tóth, de l'Université de Lorraine, de m'avoir fait l'honneur de présider le jury de la thèse, ainsi que pour avoir examiné ce travail de doctorat. Au Professeur Philippe Boisse, de l'Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, ainsi qu'au Professeur Moussa Naït-Abdelaziz, de l'Université de Lille 1, je souhaite leur adresser mes remerciements pour avoir accepté d'être les rapporteurs auprès du jury, et donc d'avoir expertisé avec minutie ces travaux de doctorat. Je remercie le Professeur René Muller, de l'Université de Strasbourg et examinateur du jury, d'avoir lui aussi expertisé les travaux de doctorat.

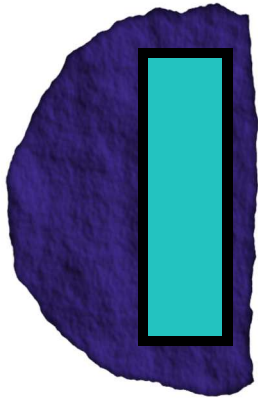
Enfin, je souhaite remercier l'équipe plus étendue d'ICube, en plus de mes collègues membres du jury : les autres encadrants Christiane, Nadia, Siham, Pedro, et leurs bien-encadrés (Chrystelle, Ophélie, Preeyam, Rania, Safaa, Akbar, Anthony, Aurélien, Charles-Henri, David, Jacques, Kui, Majid, Mathieu, Mossi, Patrick, Rodrigue, Wei . . .) ainsi que les autres personnes que j'ai aussi eu l'occasion d'apprécier au laboratoire et qui font tout autant de bons souvenirs de ces moments passés côte à côte.

## Parutions

Durant la période du doctorat, les travaux ont conduit à la publication de deux articles dans des revues internationales à comité de lecture par pairs :

- [BGA<sup>+</sup>12] BARTH, Nicolas ; GEORGE, Daniel ; AHZI, Saïd ; RÉMOND, Yves ; DOQUET, Véronique ; BOUYER, Frédéric et BÉTRÉMIEUX, Sophie : Modeling and Simulation of the Cooling Process of Borosilicate Glass. *Journal of Engineering Materials and Technology*, 2012, **134**(4):041001.1–10. DOI : <http://dx.doi.org/10.1115/1.4006132>
- [BGA<sup>+</sup>13] BARTH, Nicolas ; GEORGE, Daniel ; AHZI, Saïd ; RÉMOND, Yves ; JOULAE, Nasim ; KHALEEL, Mohammad A. et BOUYER, Frédéric : Simulation of cooling and solidification of three-dimensional bulk borosilicate glass : effect of structural relaxations. *Mechanics of Time-Dependent Materials*, 2013, nombre de pages : 16. En publication. DOI : <http://dx.doi.org/10.1007/s11043-013-9215-3>





# Table des matières

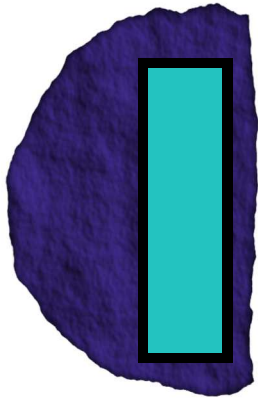
<b>Avant-propos</b>	<b>7</b>
<b>Introduction générale</b>	<b>13</b>
<b>I Contexte et état de l'art</b>	<b>15</b>
1.1 Vitrification des déchets nucléaires	16
1.2 Thermique du bloc de verre	21
1.2.1 Principes de modélisation	21
1.2.2 Applications similaires dans les verres inorganiques	22
1.2.3 Thermique des colis de verre nucléaire	23
1.3 Relaxations dans le verre	24
1.4 Mécanique de l'endommagement	27
1.4.1 Généralités sur l'endommagement	27
1.4.2 Modèle d'endommagement continu – Sun et Khaleel	29
1.4.2.1 Construction de la loi de comportement	29
1.4.2.2 Modèle de Sun et Khaleel (SK)	31
<b>II Phénoménologie, méthodes &amp; expériences</b>	<b>35</b>
II.1 Phénoménologie retenue	36
II.2 Thermique	38
II.2.1 Nécessités d'ordre général pour la modélisation par éléments finis	38
II.2.1.1 Cas d'échantillons de trempe	39
II.2.1.2 Cas de la coulée du verre dans un conteneur	39
II.2.1.3 Maillages des modèles thermomécaniques	40
II.2.1.4 Propriétés thermiques utilisées	44
II.2.2 Résultats des expériences thermiques utilisées	47
II.2.3 Conditions aux limites thermiques des colis	51
II.2.3.1 Creuset chaud – $T$ appliquées	51
II.2.3.2 Creuset froid – analyse inverse thermique	55
II.3 Relaxation	62
II.3.1 Loi de comportement en relaxation	62

II.3.2	Propriétés thermomécaniques et de relaxation structurale . . . . .	64
II.3.3	Essais de relaxation . . . . .	68
II.3.3.1	Changements de variable . . . . .	70
II.3.3.2	Courbes maîtresses obtenues . . . . .	73
II.4	Endommagement et fracturation . . . . .	77
II.4.1	Détermination des contraintes seuil et critique . . . . .	77
II.4.2	Modèle M2 : Admissibilité thermodynamique et positive, notation corrigée du modèle SK . . . . .	80
II.4.3	Modèle M3 : Évaluation des endommagements normaux et de cisaillement, additivité et négativité de $D$ . . . . .	82
II.4.4	Modèle M4, non couplé en mode II : Hypothèse des directions principales et adaptations . . . . .	83
II.4.4.1	Considérations supplémentaires . . . . .	83
II.4.4.2	Considérations énergétiques . . . . .	85
II.4.5	Modèle M4, couplé en mode II . . . . .	88
II.4.6	Prise en compte de l'énergie dissipée . . . . .	89
II.4.6.1	Incrémentation de l'énergie pendant la (visco)élasticité endommagée . . . . .	91
II.4.6.2	Principes de la dissipation de l'énergie . . . . .	92
II.5	Résumé du chapitre . . . . .	94
<b>III</b>	<b>Résultats de la simulation</b>	<b>97</b>
III.1	Températures simulées dans le bloc de verre . . . . .	98
III.1.1	Creuset chaud, thermique simplifiée . . . . .	98
III.1.2	Thermique des colis CSD-V . . . . .	103
III.1.3	Résumé des résultats thermiques . . . . .	106
III.2	Résultats de la relaxation structurale . . . . .	106
III.2.1	Températures de transition vitreuse finales . . . . .	107
III.2.2	Évolution de la transition vitreuse dans le colis . . . . .	109
III.3	Calcul de structure viscoélastique non endommageable . . . . .	113
III.3.1	Pression du verre liquide . . . . .	113
III.3.2	Calculs de structure (visco)élastique sur le bloc de verre seul . . . . .	117
III.3.3	Calculs de structure viscoélastique sur le colis avec conteneur . . . . .	122
III.3.4	Résumé des résultats de relaxation structurale dans le calcul de structure . . . . .	124
III.4	Endommagements par le modèle de CDM $\triangleright$ M4 . . . . .	124
III.4.1	Résultats du modèle M4 non couplé en mode II . . . . .	126
III.4.1.1	Échantillons de trempé, identification du mode I . . . . .	126
III.4.1.2	Résultats concernant les procédés de vitrification . . . . .	130
III.4.2	Résultats du modèle couplé en mode II . . . . .	135
III.4.2.1	Simulations test . . . . .	135
III.4.2.2	Comparatif pour le creuset froid, simulations d'une unique coulée . . . . .	140
III.4.3	Résumé des résultats d'endommagement . . . . .	144
	<b>Conclusion générale et perspectives</b>	<b>145</b>
	<b>Annexe</b>	
<b>A</b>	<b>Identification des coefficients <math>C_1</math> et <math>C_2</math> dans les modèles de Sun et Khaleel</b>	<b>151</b>
A.1	Modèle M1 . . . . .	152
A.1.1	Rappel sur le calage en traction simple . . . . .	152
A.1.2	Calage en traction biaxiale . . . . .	153

---

A.2	Modèle M2	154
A.2.1	Version corrigée du calage en traction simple	154
A.2.2	Version corrigée du calage en traction biaxiale	155
A.3	Cas de la traction triaxiale	156
	<b>Bibliographie</b>	<b>159</b>





---

# Introduction générale

Le travail présenté dans ce manuscrit de thèse s'inscrit dans le cadre de deux projets successifs (2008–2010 et 2011–2014) initiés et financés par le CEA\*, l'ANDRA† ainsi qu'AREVA‡ sur le comportement à long terme des colis de déchets radioactifs.

L'objectif de ces programmes est de disposer d'un outil de simulation de la fracturation des verres nucléaires, borosilicatés, utilisés pour le confinement des radionucléides. De nombreux scénarios sont possibles quant aux sollicitations thermiques et/ou mécaniques (ces dernières, qui consistent par exemple en des contraintes lithostatiques, ne sont pas spécifiquement traitées ici).

Les approches retenues pour la construction et la validation de cet outil sont autant expérimentales sur un verre de référence borosilicaté inactif (du point de vue de la radioactivité) que des approches sur les modèles, dont la majorité de la mise en œuvre repose sur l'équipe d'accueil de la thèse au sein d'ICube. Outre cette équipe, les partenaires sur ce programme sont le CEA pour la réalisation du procédé expérimental et des matériaux d'étude, ainsi que deux équipes davantage tournées sur les approches expérimentales (dans le cadre de ce projet) : l'équipe Guéguen au laboratoire de géologie à l'ENS Ulm§ et l'équipe Doquet au laboratoire de mécanique des solides¶ à l'École Polytechnique.



\*. Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives, laboratoire d'étude du comportement à long terme (LCLT)



†. Agence nationale pour la gestion des déchets radioactifs



‡. AREVA AREVA NC



§. Laboratoire de géologie, École Normale Supérieure – CNRS UMR 8538, Paris



¶. Laboratoire de mécanique des solides, UMR CNRS 7649 – École Polytechnique, Palaiseau

---

Le procédé de vitrification à l'origine du travail de ce consortium est un procédé utilisé à l'échelle industrielle, depuis de nombreuses années, afin de confiner dans des colis (à l'état solide) les radionucléides issus du traitement des combustibles usés. Le procédé est introduit dans le contexte au chapitre I, sachant qu'en pratique nous nous reposons sur des résultats issus des procédés de vitrification expérimentaux, réalisés avec du verre inactif, à la plate-forme de vitrification du CEA de Marcoule (Gard).

La coulée du verre en fusion y est réalisée dans des conteneurs en acier inoxydable, le verre contenant des familles d'éléments chimiques à confiner. La coulée et la solidification du verre (vitrification) fait intervenir plusieurs disciplines de la science des matériaux et de la mécanique lors du refroidissement (jusqu'à température ambiante). Ces disciplines sont la thermique, la solidification et la relaxation des verres inorganiques et le calcul du chargement thermomécanique tenant compte d'un éventuel endommagement des structures fragiles. Les aspects liés au colis ainsi que ces disciplines sont d'abord décrits conjointement et mis en perspective par la littérature au chapitre I. Au chapitre II, nous présenterons l'ensemble des protocoles mis en place pour leur étude, puis nous présenterons et discuterons des résultats appliqués à différents cas de colis vitrifiés au chapitre III.

Le comportement sur le long terme des colis (en centaines de milliers d'années pour les déchets radioactifs de haute activité et à vie longue), avec ce caractère multi-physique des phénomènes impliqués, nécessite pour permettre sa prédiction à la fois l'acquisition de données expérimentales et la modélisation des phénomènes. Nous verrons en quoi l'approche retenue ici pour la modélisation du verre, dans les colis en refroidissement, permet d'établir (et de comparer) ce comportement sur le long terme. Une fois les scénarios thermomécaniques appliqués au cas d'un colis, d'autres modèles peuvent prendre le relais et permettre de quantifier les espèces chimiques qui sont amenées à se dissoudre en supposant la présence d'eau au contact du verre (lixiviation du verre).

**CHAPITRE**

**I**

---

**Contexte et état de l'art**

Dans ce chapitre, nous présentons dans un premier temps au § 1.1 les aspects liés au contexte des colis étudiés dans le cadre de cette thèse. Nous présentons ensuite les résultats internationaux liés à la thermique de tels colis au § 1.2 page 21. Puis nous décrivons des modèles de relaxations pouvant s'appliquer au cas du verre se solidifiant dans les colis au § 1.3 page 24, avant enfin de traiter le cas des modèles d'endommagement au § 1.4 page 27.

## 1.1 Vitrification des déchets nucléaires

Le procédé de traitement des déchets nucléaires et de leur vitrification est illustré à la figure 1-1 page 19. Ce procédé de confinement, détaillé par exemple par Bonniaud *et al.* [BJS80] ou Advo-cat *et al.* [ADP08], repose en premier lieu sur la présence d'un calcinateur qui est alimenté d'une solution dissoute des radionucléides à traiter. Cette solution s'évapore et permet l'obtention du « calcinat » où les radionucléides sont alors en phase solide, oxydés. Le calcinat et de la fritte de verre alimentent un pot de fusion dans lequel s'effectue l'élaboration du verre. Le verre qui en résulte est au final coulé puis solidifié à l'intérieur de conteneurs en acier inoxydable (de type « CSD-V » – colis standard de déchets vitrifiés, *cf.* figure 1-2 page 19). Ces conteneurs contiennent environ 400 kg de verre.

Le verre simulant la gamme de verre nucléaire utilisée industriellement en France (nommé « R7T7 ») est le verre inactif « SON68 ». Ces verres sont des verres borosilicatés (leur stabilité chimique est optimisée), opaques dans le domaine visuel. La composition du verre simulant inactif SON68 est proche de celle donnée dans le TAB. 1-1 page ci-contre par Frugier *et al.* [FGM<sup>+</sup>08]. Ces nombreux oxydes, dans la phase liquide du verre, s'organisent en un réseau vitreux amorphe qui continue d'exister à l'état surfondu dans le solide. Certains des ions oxydés sont des formateurs du réseau vitreux, d'autres jouent le rôle de modificateurs de réseau. Excepté pour la puissance thermique, ce qui est traité spécifiquement plus tard, le verre considéré dans ce travail de thèse, ainsi que tous les résultats obtenus, sont liés au verre expérimental (SON68) choisi pour simuler le comportement du verre nucléaire utilisé sur le plan industriel (par des éléments ayant le même comportement chimique).

La plate-forme de vitrification du CEA de Marcoule a la maîtrise du procédé d'élaboration du verre et de manufacture des colis étudiés dans ce programme, et une illustration de coulée dans un conteneur est donnée à titre d'exemple à la figure 1-1 page 19. Ainsi, le verre SON68 obtenu est issu d'un procédé de vitrification sur une installation échelle 1:1 avec un principe de fonctionnement identique à celui détaillé. Des échantillons d'environ 500 g ont aussi été obtenus par des coulées du verre SON68 sous forme de barreaux dans des creusets en graphite.

En aval du procédé industriel de vitrification, les colis sont scellés et entreposés en puits ventilés pendant une période d'entreposage suffisante pour un refroidissement initial des colis (sur plusieurs dizaines d'années). La loi française (loi de 2006) prévoit un débat public sur le stockage souterrain des colis, dont l'Andra a la responsabilité. La réversibilité de ce stockage sur une durée fixée au moins à 100 ans est également prévue par la loi actuelle. L'Andra étudie ce stockage des colis, qui a pour l'heure été retenu dans des roches d'argilites, afin d'aider aux décisions politiques



TAB. 1-1 : Composition du verre borosilicaté SON68 selon Frugier *et al.* [FGM<sup>+</sup>08] (référence TC42c) [pourcentage en poids massique des différents oxydes constitutifs].

Oxyde	% massique	Oxyde	% massique	Oxyde	% massique
SiO <sub>2</sub>	45,85	MoO <sub>3</sub>	1,78	CdO	0,03
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	5,00	Cs <sub>2</sub> O	1,12	SnO <sub>2</sub>	0,02
B <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	14,14	NiO	0,43	TeO <sub>2</sub>	0,23
Na <sub>2</sub> O	10,22	P <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	0,29	BaO	0,62
CaO	4,07	SrO	0,35	La <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	0,93
Li <sub>2</sub> O	1,99	Cr <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	0,53	Ce <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	0,97
ZnO	2,53	Y <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	0,20	Pr <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	0,46
ZrO <sub>2</sub>	2,75	MnO <sub>2</sub>	0,39	Nd <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	2,04
Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	3,03	Ag <sub>2</sub> O	0,03		

à venir.

Selon ces hypothèses telles qu'un stockage géologique profond, les colis de déchets vitrifiés seraient ainsi stockés à l'intérieur de structures alvéolaires dans des galeries à 500 m sous terre, ce qui est illustré à la figure 1 - 3 page 20. Plusieurs centaines de milliers d'années sont alors nécessaires en l'état pour attendre les désintégrations (les moins instables) des radionucléides confinés dans les colis de haute activité et à vie longue (« HAVL », ou en anglais HLW pour « *high-level radioactive waste* »). La cinétique d'altération des colis est étudiée sur cette période, et prévoit notamment l'arrivée d'eau au niveau des colis, au contact du verre avec des phénomènes de lixiviation, ce qui fait l'objet de travaux à part entière [FGM<sup>+</sup>08, Cho08]. La cinétique d'altération du verre est illustrée à la figure 1 - 4 page 20 [GR05, ADP08, Cho08].

L'étude du comportement thermomécanique du verre peut commencer, en ce qui nous concerne, quand le verre en fusion est coulé dans les conteneurs en acier inoxydable à des températures de l'ordre de 1400 K. Des gradients de température sont susceptibles de se développer à l'intérieur du bloc de verre pendant le refroidissement jusqu'à un point où la fracturation du verre a lieu. Kamizono et Niwa [KN84] ont constaté ce fait, ainsi que Faletti et Ethridge [FE88]. Différentes surfaces de fracturations sont ainsi susceptibles d'être créées à l'issue du procédé de vitrification. Ces surfaces, si elles font partie d'un réseau de fissures ouvertes (en percolation), peuvent également interagir avec l'eau pendant l'altération des colis en milieu aqueux, ce qui a été démontré par Perez et Westnik [PJWJ81] sur des expériences de lixiviation d'un verre nucléaire.

Dans le cas de colis industriels de verre R7T7, une puissance thermique liée aux désintégrations nucléaires des radioéléments est à prendre en compte. Ce phénomène agit en tant que réducteur de la montée des contraintes d'origine thermique dans le colis, comme l'ont rapporté Faletti et Ethridge [FE88] et Kahl *et al.* [KKS<sup>+</sup>91]. Mis à part ce phénomène de puissance thermique, l'influence de la radioactivité sera négligée sur les matériaux étudiés ici.

Dans ce contexte, le travail de thèse réside dans la mise en place des modèles et outils de simulation afin de prédire de telles surfaces de fracturation, et ce à l'issue de familles connues de sollicitations thermiques (et mécaniques) liées à la manufacture et la durée de vie utile des colis de déchets vitrifiés.

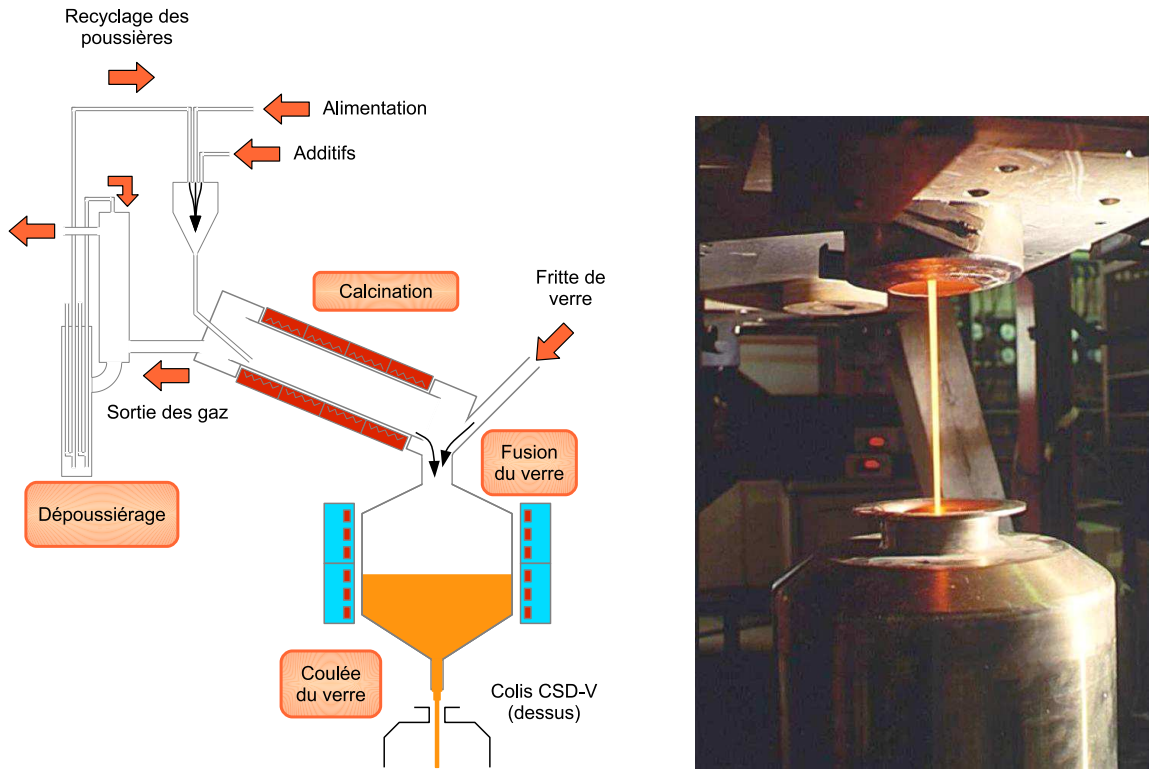


FIG. 1-1 : Schématisation du procédé de vitrification, simplifié des RÉFS [BJS80, ADP08], et illustration à la plate-forme de vitrification du CEA de Marcoule (Gard) [Sit05].



FIG. 1-2 : Colis de déchets vitrifiés CSD-V – photographie, schéma et aspect du verre [GR05, ASN10, MPS+10, And05] (crédits Andra).

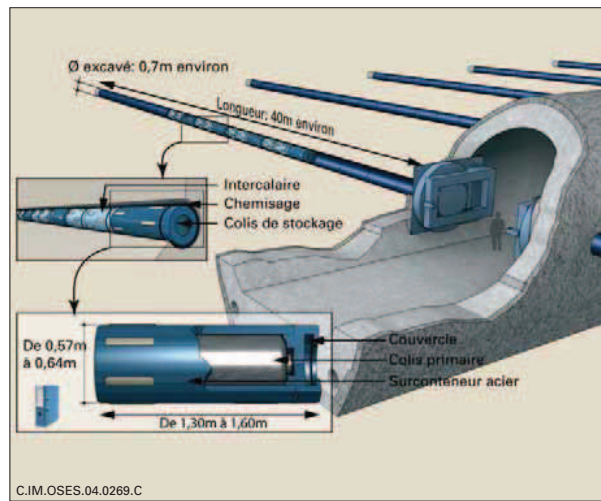


FIG. 1-3 : Schéma du stockage souterrain des colis CSD-V [And05] (crédits Andra).

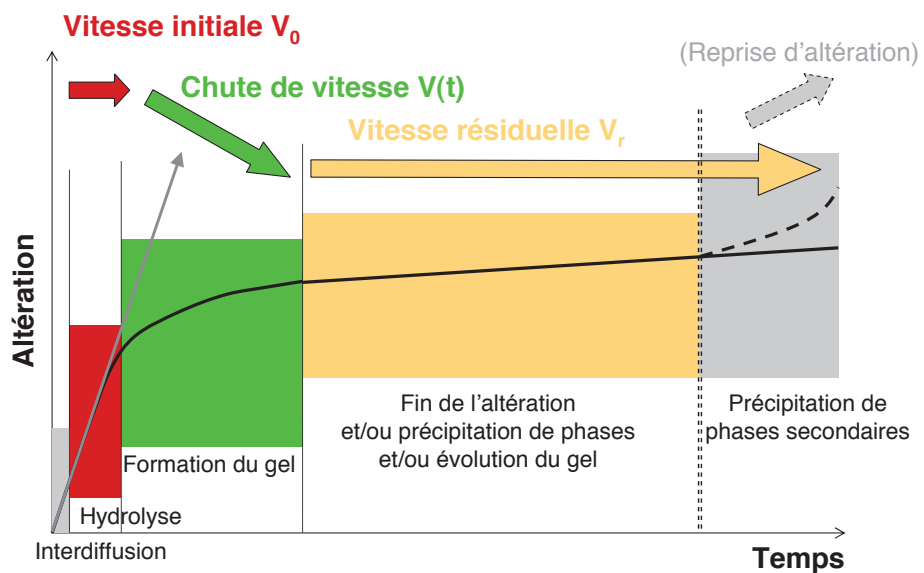


FIG. 1-4 : Cinétique d'altération d'un verre silicaté d'après [GR05, ADP08, Cho08].

## 1.2 Thermique du bloc de verre

L'analyse thermique des matériaux est passée à un stade technique assez facile d'accès dans le cadre de l'ingénierie des structures supportant les flux thermiques. Ceci a été rendu principalement possible par les techniques de modélisation par éléments finis (« FEM » – *finite element modeling* ou plus simplement « FE » quand on parle des éléments finis) [ZT91].

Pour les colis, une alternative à cette méthode pourrait être la détermination expérimentale de relevés de températures avec comme inconvénient majeur, outre le coût logistique, de n'avoir des relevés que ponctuellement dans les colis de déchets vitrifiés. L'histoire thermique dans le reste du volume de verre serait donc à extrapoler, par exemple par un outil de simulation thermique. C'est sur cette méthode complémentaire que reposera en fait notre analyse, présentée au chapitre II.

### 1.2.1 Principes de modélisation

Dans le cadre de la FEM thermique, l'approximation des structures à étudier se fait à travers un maillage de l'espace 3D dédié à la résolution de l'équation de la chaleur (selon la nature des matériaux, la géométrie et les conditions aux limites thermiques à étudier...).

Les températures et les flux thermiques sont obtenus à l'issue de la résolution du système d'équations aux dérivées partielles sur l'ensemble du volume modélisé (et de ses surfaces). Ils rendent possible dans une certaine mesure la prédiction de l'évolution thermique du colis. Les marges d'erreurs y sont d'autant plus faibles que l'approximation géométrique est fine (c'est-à-dire le maillage raffiné), et les conditions aux limites réalistes.

Pour un solide, on donne l'équation de la chaleur (ou loi de Fourier) à l'Éq. 1-1 pour un solide supposé homogène et isotrope du point de vue des échanges thermiques. C'est une équation aux dérivées partielles pour laquelle on obtient alors la solution en flux et en température  $T$ . Cette résolution est connue d'une part en fonction du temps simulé ( $t$ ), et d'autre part à chaque point d'intégration des éléments du maillage (qui sont autant de données spatiales discrètes à l'intérieur du solide, qu'on peut extrapoler sur l'ensemble du volume).

$$\rho \dot{U} \simeq \rho \dot{H} = \rho c_p(T) \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot [k(T) \nabla T] + \dot{Q} \quad (1-1)$$

avec  $\rho$  la densité du matériau considéré [typiquement en  $\text{kg}/\text{m}^3$ ];  $U$  l'énergie interne (massique) [J/kg];  $H$  l'enthalpie [J/kg];  $c_p(T)$  la chaleur spécifique/massique (capacité thermique massique) à pression  $p$  constante [J/K/kg];  $k(T)$  la conductivité thermique du solide [W/m/K]; et  $\dot{Q}$  le terme volumique d'une source thermique [W/m<sup>3</sup>].

Comme on l'a vu précédemment, le terme source  $\dot{Q}$  peut être non nul en ce qui concerne l'analyse du verre, si on décide de modéliser un colis chaud en verre R7T7 qui possède typiquement une puissance thermique à l'ordre du kW. Mis à part ce phénomène, le verre n'a pas de terme source thermique important, car son comportement énergétique à la transition de phase vitreuse n'est pas celui d'un liquide se cristallisant, mais celui d'un liquide en surfusion se figeant (nous reviendrons sur ce point à la section suivante). Il n'y a donc pas de chaleur latente de transformation de phase (et de terme source en conséquence). Pendant ce procédé et devant les échanges

thermiques en jeu, on peut également négliger la création de chaleur due aux sollicitations mécaniques (qui apporteraient également un terme source de chaleur par dissipation d'énergie mécanique).

### 1.2.2 Applications similaires dans les verres inorganiques

En dehors du domaine de la vitrification des déchets nucléaires, mais toujours pour le verre, de nombreux exemples d'application de la FEM sont disponibles dans la littérature. L'analyse thermique est alors souvent un prérequis à l'analyse de la vitrification d'un point de vue rhéologique ainsi que vis-à-vis de sa tenue mécanique (par les contraintes transitoires et résiduelles du verre). Ainsi par exemple, on en vient à modéliser le comportement d'un volume de verre moulé puis solidifié et refroidi à température ambiante afin de calculer la forme de lentilles optiques, et donc leurs propriétés optiques, dans les RÉFS [JY05, YJ05, JYXS06].

Les contraintes transitoires ou résiduelles à l'intérieur du verre, consécutives à la solidification et au refroidissement d'un volume de verre en fusion, sont également un facteur déterminant dans le domaine des verres trempés (à l'air). Ces verres sont manufacturés typiquement sous forme de plaques, et des analyses thermiques sont menées par exemple dans les RÉFS [DC98, BDG04, KKC07, NOPS10]. Les états de contraintes simulés à l'issue de ces procédures doivent rester faibles en traction pour éviter la fissuration de ces verres (et des phénomènes de ruine du matériau telle qu'observée par Nielsen *et al.* [NOS09]). Cependant, pour le verre trempé, les contraintes résiduelles de compression (en surface) doivent être suffisamment importantes pour obtenir une bonne tenue mécanique des plaques de verre. On ne peut que remarquer que ces applications, bien que similaires sur les approches employées ou les gammes de températures concernées, contiennent de par leur procédé et leur finalité des conditions et des objectifs assez différents de ceux introduits pour les colis de déchets vitrifiés.

Mises à part ces deux applications qui reposent sur la thermique de verres inorganiques avec des approches similaires au travail entrepris ici, on peut faire un dernier parallèle avec une classe très répandue de traitements industriels du verre : le verre flotté [PDE02, FOADSM<sup>+</sup>08]. Dans ce cas, des études thermiques sont également entreprises pour étudier le procédé de fusion en lui-même et la solidification du verre en plaque sur un bain d'étain. Dans ces procédés, le verre solidifié est amené à de faibles taux de refroidissement jusqu'à la température ambiante. Ce traitement particulier (pendant une phase critique du refroidissement) permet au verre d'obtenir de faibles contraintes résiduelles pour pouvoir subir sans ruine des mises en formes ultérieures après solidification. Le refroidissement lent pour éviter des gradients thermiques trop élevés (et la fracturation) seraient à mettre en opposition, dans le domaine des verres nucléaires, par le fait qu'une dévitrification peut avoir lieu à trop haute température dans la matrice vitreuse (pendant suffisamment longtemps). Cette cristallisation dans la matrice vitreuse, après coulée, peut nuire au confinement des oxydes du réseau vitreux.

Dans ces applications qui concernent en général des verres semi-transparentes, il existe un phénomène d'auto-rayonnement du volume de verre qui accentue les échanges thermiques conductifs. Le verre devient à la fois un corps rayonnant et pouvant recevoir le rayonnement en volume

(habituellement, seules les surfaces des corps gris sont susceptibles des échanges par rayonnement). Ce phénomène est étudié par Siegel [Sie98] et Siedow *et al.* [SGLR05]. Dans le cas du verre borosilicaté SON68, nous considérons ce phénomène comme négligeable du fait de l'opacité de ce verre constatée à l'œil nu, et nous n'en tiendrons donc plus compte par la suite.

### 1.2.3 Thermique des colis de verre nucléaire

Le domaine de la vitrification des déchets nucléaires est moins fréquemment représenté dans la littérature que ceux des traitements industriels susmentionnés. Une revue de différents procédés est proposée par Perez *et al.* [PBD<sup>+</sup>01]. En ce qui nous concerne, les gammes de températures rencontrées dans le creuset sont de l'ordre de 1400 K pour permettre une incorporation correcte du calcinat dans la matrice vitreuse. Il s'agit aussi de la température de coulée dans le conteneur, et la température de transition vitreuse du verre SON68 est proche de 775 K. De par la géométrie cylindrique massive du volume de verre (diamètre des colis de 43 cm), on a une thermique très dépendante de l'inertie thermique du bloc de verre (au contraire des procédés thermiques mentionnés précédemment où le verre est souvent manufacturé sous forme de plaque).

Même en cas de changement des dimensions du colis en fonction des différentes normes adoptées dans d'autres pays, le problème est le même quant à la quantité de chaleur à évacuer pour un bloc massif, en minimisant si possible l'influence des gradients thermiques. Divers ajustements du procédé ont été étudiés à cette fin, comme l'ajout d'une barre en aluminium au cœur d'un colis [BSB06]. Faletti et Ethridge [FE88] passent en revue également des procédés de vitrification avec un isolant thermique en place pour limiter les gradients thermiques. Riley *et al.* [RJOJ<sup>+</sup>99] notent autrement des tendances telles que la proportionnalité des gradients thermiques vis-à-vis du diamètre des colis (30 à 60 cm dans leur étude).

Différentes études sur les gradients thermiques dans les colis sont rapportées dans la littérature, certaines concernent même le cas de colis chauds (1000 W et 2500 W par colis) [KKS<sup>+</sup>91]. De multiples procédés sont pris en compte, souvent caractérisés en termes de surface de fracturation obtenue expérimentalement. Le type de conteneur utilisé (acier ou acier inoxydable), et le type de revêtement interne sont également étudiés du point de vue du contact verre/acier selon les différentiels thermiques observés, avec éventuellement des revêtements possibles au niveau de l'interface interne [FE88]. Du point de vue du procédé de vitrification, nous ne nous intéressons pas particulièrement à ce type de modification des paramètres procédé, mais plutôt à une fenêtre paramétrique restreinte à la thermique du procédé.

La thermique du procédé de vitrification est fondamentale dans le sens où les déformations issues des gradients thermiques sont la force motrice de la réponse mécanique de la structure du colis constituée par le verre (liquide et/ou à l'état solide) ainsi que l'acier. Les déformations thermiques sont des déformations de transformation (également nommées « *stress-free strain* », ne générant pas de contraintes du fait des seuls changements de température. Par contre, au niveau d'une structure mécanique, des changements de température non uniformes vont provoquer une réponse différenciée de la structure. Elle tend alors à se déformer et à suivre un équilibre mécanique propre (du champ de contraintes) intimement lié à la nature des gradients thermiques et

des propriétés des matériaux en termes de réponse thermomécanique à cette déformation. Dans le cas du verre, la sollicitation thermique sous forme de déformation thermique ainsi que la réponse mécanique aux sollicitations de la structure, via la viscoélasticité du réseau vitreux, sont connues pour être dépendantes du temps et de la température. C'est l'objet du prochain paragraphe § 1.3. Si le champ de contrainte devient tellement critique que le verre s'endommage, la réponse de la structure n'est plus seulement viscoélastique et fait intervenir des modèles d'endommagement du verre, c'est l'objet du § 1.4 page 27.

### 1.3 Relaxations dans le verre

On a introduit précédemment dans la partie thermique une température de transition vitreuse ( $T_g$ ) donnée à 775 K pour le verre SON68. En fait cette température de transition dépend de deux choses fondamentales qui ne peuvent se résumer à une seule donnée fixée par la température :

- ◇ d'une part l'histoire thermique  $T(t)$  du réseau vitreux et sa nature plus ou moins mobile dans les mouvements internes des structures moléculaires qui le constituent (mesurée notamment par la viscosité du verre) ;
- ◇ et d'autre part la transition vitreuse dépend de la propriété du verre qu'on considère (exemple : le volume massique  $\rho^{-1}$ , la conductivité thermique, la chaleur massique, la viscoélasticité, l'indice de réfraction, etc.).

Du point de vue de la propriété concernée, par exemple le volume massique, la température de transition vitreuse marque une transition ici continue entre le solide et le liquide. En refroidissant, lorsque le liquide se fige à configuration moléculaire de l'état vitreux identique, mais solide, une partie de sa structure interne a en fait perdu des degrés de liberté liés à l'agitation thermique du réseau vitreux (les barrières d'activation du déplacement des molécules les unes par rapport aux autres sont devenues infranchissables, statistiquement).

De fait, la cinétique de cette transition est fondamentale, car si on attend suffisamment longtemps à température élevée le verre se comporte toujours comme à l'état liquide, traité comme l'état d'équilibre puisque c'est l'état qui serait constaté à un temps infini. Nous n'avons donc pas affaire à une transition de phase seulement thermodynamique (de fusion), puisque la température de transition vitreuse dépend de la cinétique.

Le schéma présenté à la figure 1 - 5 page suivante illustre l'influence de la cinétique sur la  $T_g$  constatée pour le verre.  $T_g$  marque par définition le départ de l'état vitreux, solide, depuis le liquide surfondu et est donc située à l'intersection de ces deux courbes. Pour un refroidissement lent, comme on vient de le voir, la relaxation de la propriété a davantage le temps d'opérer et  $T_g$  devient inférieure à la  $T_g$  constatée expérimentalement lors d'une trempe rapide du verre par exemple.



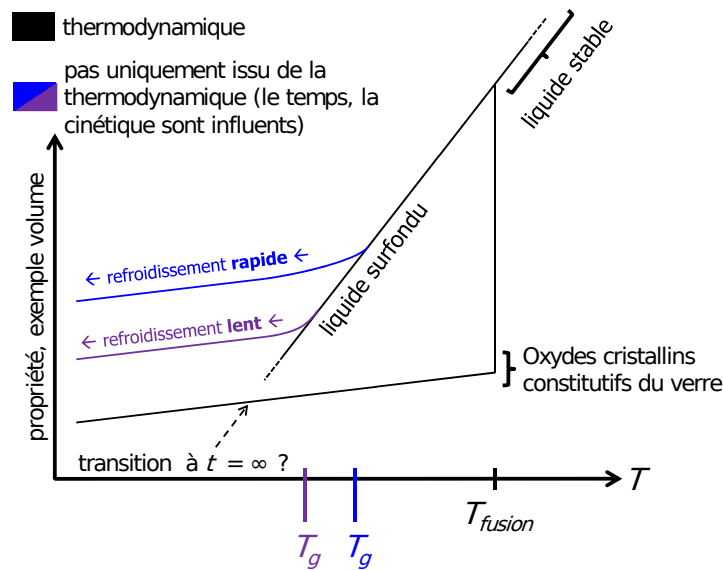


FIG. 1-5 : Schématisation de l'évolution d'une propriété du verre à la transition vitreuse pendant un refroidissement depuis le verre en fusion. La transition thermodynamique en question aux temps infinis est passée en revue par Hodge [Hod94].

Même si l'équivalence temps-température est fondamentale pour comprendre les propriétés du verre au niveau de la gamme de température concernée par la transition vitreuse, sa modélisation n'est devenue réellement prédictive qu'à partir du  $xx^e$  siècle (pour un large panel de traitements thermiques). Dans la mesure où le verre est forcément amené à se stabiliser dans un futur plus ou moins lointain, les modèles qui ont vu le jour prédisent la cinétique du verre dans ce cadre, qui comprend des essais simples fondés sur ces phénomènes sous le vocable générique de « relaxation structurale » ou de « recouvrance structurale ».

Tool [TE31, Too46, Too48] a introduit la notion de température fictive «  $T_f$  » permettant la caractérisation de l'état de relaxation interne du verre pendant la transition vitreuse. Plus tard, Narayanaswamy [Nar71] a généralisé un modèle de relaxation structurale qui repose sur des changements de variables où l'équivalence temps-température s'écrit notamment en fonction de deux énergies d'activation et de la température fictive marquant l'état interne du verre quel que soit le domaine de température considéré. Moynihan [DEMM76, MET<sup>+</sup>76] a enfin amélioré l'expression du modèle de Tool-Narayanaswamy en complétant le formalisme du modèle de relaxation structurale alors dénommé « TNM » (Tool-Narayanaswamy-Moynihan). On présente les fondements de ce modèle à l'équation 1-2.

$$\xi(t) = \int_0^t \frac{\tau_{\text{réf}}^P}{\tau^P(t')} dt' \quad (1-2a)$$

$$M_P(\xi(t)) \approx \exp \left[ - \left( \frac{\xi(t)}{\tau_{\text{réf}}^P} \right)^\beta \right] \approx \sum_{i=1}^{n^P} c_i^P \exp \left[ - \frac{\xi(t)}{\tau_{i,\text{réf}}^P} \right] \quad (1-2b)$$

$$T_{f,P}(t) = T(t) - \int_0^t M_P(\xi(t) - \xi(t')) \frac{dT(t')}{dt'} dt' \quad (1-2c)$$

avec  $\xi(t)$  le changement de variable de  $t$  en « temps réduit » ;  $\tau_{\text{réf}}^P$  le temps de relaxation à une température arbitraire  $T_{\text{réf}}$  pour la propriété  $P$  du verre en question ;  $\tau^P(t)$  est le temps de relaxation à un temps donné ;  $\beta$  est le paramètre d'exponentielle décroissante ( $0 \leq \beta \leq 1$  et typiquement proche de 0,5) qui est expérimentalement déterminé pour caler cette fonction sur l'allure observée de la fonction de réponse de la relaxation  $M_P$  ; on peut préférer à cette forme exponentielle décroissante une série de Prony en  $n^P$  termes, avec les  $c_i^P$  les coefficients de poids dont la somme est normalisée à 1, et  $\tau_{i,\text{réf}}^P$  les temps de relaxation partiels à  $T_{\text{réf}}$  ; enfin,  $T_{f,P}$  est la température fictive évoluant dans le temps pour cette propriété  $P$ .

En pratique dans le modèle de TNM, les temps de relaxation sont décrits en fonction de l'historique thermique et de l'état de structure interne (via  $T_{f,P}$ ) par :

$$\frac{\tau^P(t)}{\tau_{\text{réf}}^P} = \exp \left[ - \frac{\Delta h^*}{R} \left( \frac{1}{T_{\text{réf}}} - \frac{x}{T(t)} - \frac{1-x}{T_{f,P}(t)} \right) \right] \quad (1-3)$$

avec  $\Delta h^*/R$  la fraction de l'énergie d'activation totale (vitreuse ou solide + structurale) sur la constante des gaz parfaits ;  $x$  est le paramètre de non-linéarité ( $0 \leq x \leq 1$  et typiquement proche de 0,5) qui est la fraction de l'énergie d'activation vitreuse sur l'énergie d'activation totale  $\Delta h^*$ . De plus, il est fréquent de suivre une décomposition en série de Prony de la fonction de réponse de la relaxation, on obtient alors des temps de relaxation partiels  $\tau_i^P$  liés à des variables internes partielles ( $T_{f,P,i}$ ).

En parallèle des développements liés à ce modèle de relaxation structurale, l'équipe Kovacs *et al.* [KAHR79] développèrent le modèle KAHR (Kovacs-Aklonis-Hutchinson-Ramos). Dans cette phénoménologie, l'état interne du verre est donné par le paramètre de départ à l'équilibre (liquide)  $\delta$ , par exemple  $\delta = V/V_\infty - 1$ . Les spécificités de ces deux modèles ont par exemple été comparées par Hodge [Hod94] à l'équilibre, en particulier en ce qui concerne le paramètre  $x$ , en fait équivalent dans ces modèles, et qui définit le degré de non-linéarité des réponses aux sauts de températures (*T-jumps*). On présente à l'équation 1-4 les équations aux dérivées partielles à résoudre dans ce modèle, après partition du départ à l'équilibre en composantes partielles  $\delta_i$  du départ de l'équilibre total.

$$\frac{d\delta_i}{dt} = -\Delta\alpha_i \frac{dT}{dt} + \frac{\delta_i}{\tau_i} \quad (1-4)$$

avec  $\Delta\alpha = \alpha_l - \alpha_g$  l'excès de coefficient (de dilatation thermique par exemple), et  $\Delta\alpha = \sum^N \Delta\alpha_i$ .

Ces modèles de relaxation structurale sont maintenant connus sous le formalisme des modèles TNM-KAHR. Ils ne sont pas l'apanage des verres inorganiques seuls, puisque les verres organiques, notamment des polymères [Kov58], sont également concernés par des phénomènes de transition

vitreuse de nature identique (même si les températures de transition vitreuses de ces verres sont généralement bien plus basses).

Des extensions de ce modèle de relaxation structurale existent également pour d'autres types de sollicitation que la température, comme dans des résines époxy au travers de sauts de l'humidité ambiante [ZM03], ou de sauts en concentration de CO<sub>2</sub> [ABKS<sup>+</sup>11]. Kovacs mentionne également le cas de pressions de transition vitreuse [Kov64]. Ce formalisme peut rencontrer des limitations vis-à-vis des phénomènes expérimentaux de relaxation/recouvrance structurale à modéliser, ce qui est par exemple discuté dans la RÉF. [ABKS<sup>+</sup>11].

## 1.4 Mécanique de l'endommagement

Le calcul de structure mécanique par éléments finis devient possible avec les propriétés du verre telles qu'on peut les obtenir pour toute température et toute histoire thermique (à l'issue de la modélisation de sa relaxation structurale) en suivant des principes de simulation similaires au calcul thermique. Les lois de comportement utilisées dans le verre, en déformation et vis-à-vis de la réponse viscoélastique, sont détaillées ultérieurement au chapitre II. Du point de vue du calcul de structure, dans ce paragraphe, nous proposons de passer en revue uniquement les phénomènes de fracturation du verre qui peuvent arriver en cas de dépassement des critères de rupture dans le verre lors de chargements thermomécaniques critiques.

Dans un premier temps au § 1.4.1, nous introduisons l'endommagement et ses modélisations, avant de regarder plus en détail au § 1.4.2 page 29 un modèle d'endommagement qui est envisagé sur des problématiques similaires de simulation des colis de déchets nucléaires par le DoE (*Department of Energy*) des États-Unis au *Pacific Northwest National Laboratory*.

### 1.4.1 Généralités sur l'endommagement

Lorsqu'on conceptualise la mécanique de l'endommagement, on différencie généralement :

- ◇ d'une part la « mécanique de l'endommagement continu » (CDM – *continuum damage mechanics*) qui est l'évolution de la tenue mécanique des matériaux en tant que structure mécanique sollicitée, dans le cadre de la mécanique des milieux continus ;
- ◇ et la « mécanique de la rupture » d'autre part qui est la mécanique, à l'échelle de la fissure, propre aux propriétés des fissures une fois initiées (propagation et vitesse, concentration des contraintes en front de fissuration, bifurcation, rugosité des plans de fracturation, etc.).

Du point de vue de la tenue mécanique, en fonction des applications souhaitées des matériaux, on a longtemps considéré l'endommagement comme un simple phénomène seuillé, avec en deçà du seuil un matériau intact où l'endommagement est absent, et au-delà duquel l'endommagement est total (on parle de ruine – car effectivement les fissures sont elles-mêmes des défauts d'une criticité importante dans les matériaux qui peuvent initier en cascade davantage de fissuration). Par exemple, on peut prédire la ruine d'un matériau fragile, même s'il est en diamant, au-delà d'une contrainte suffisamment élevée, critique vis-à-vis de l'endommagement.

Dans les matériaux fragiles, ce type d'approche amène à étudier de façon plus détaillée le phénomène d'initiation de l'endommagement, susceptible de se propager très facilement à l'ensemble du volume solide (selon la mécanique de la rupture). Cette approche devient par nature stochastique car dépendante des défauts présents (en surface notamment), et on approche ces phénomènes par des outils statistiques ou probabilistes. Une analyse statistique répandue est le modèle statistique de Weibull [Lam07], elle lie un état de contrainte dans le matériau à une probabilité de rupture.

Le concept d'endommagement continu vient de Kachanov [Kac58] dans des expériences de fluage. Il ne considère plus l'endommagement dans les matériaux comme un phénomène à seuil (tout ou rien), mais au contraire la tenue mécanique dépend de façon continue de l'endommagement du matériau, en tant que transformation irréversible qu'on peut caractériser et quantifier expérimentalement. La CDM a été détaillée et étendue par Kachanov [Kac94], par Lemaître et Chaboche [LC85, Lem85], par Krajcinovic [Kra85, Kra89], par Pijaudier-Cabot *et al.* [PCB87, PCB93], et par Ladevèze *et al.* [LLD92, LGA94].

Ainsi, la prise en compte de l'endommagement en CDM fait remonter depuis l'échelle de la fissure, locale, une information globale quant à la raideur élastique des matériaux endommagés. Cette raideur endommagée fait évoluer le comportement des matériaux vis-à-vis des sollicitations appliquées. L'endommagement peut ainsi être établi de façon déterministe dans ces modèles en suivant la phénoménologie de l'endommagement qui a cours. Dans ces modèles phénoménologiques (plus ou moins complexes en fonction du nombre de paramètres à prendre en compte), la signification physique des paramètres tend à être liée à la nature du matériau ou de son endommagement. À titre d'exemple, le caractère anisotrope de l'endommagement (sur la rigidité) peut ne pas forcément être pris en compte dans des modèles d'endommagement simplifiés.

De façon toute aussi importante que l'équation de comportement des modèles d'endommagement en CDM, qui lie la déformation aux contraintes en fonction des variables internes d'endommagement, il faut déterminer comment mettre à jour les variables internes d'endommagement, notamment, quels critères leur appliquer entre par exemple des critères de déformation, de contraintes ou d'énergie mécanique.

De ce point de vue-là, il est nécessaire de reconnaître judicieusement un ensemble de phénomènes physiques à l'échelle des fissures et de la mécanique de la rupture qui les régit. Dans un matériau donné, il n'y a d'ailleurs pas une seule échelle de fissure imposée de façon absolue par les sollicitations de chargement ou la nature des matériaux qui s'endommagent. De multiples fissures sont souvent initiées à l'échelle microscopique sur les défauts, puis amenées à interagir entre elles et/ou se développer selon les sollicitations effectuées sur la structure du matériau. Les grandeurs caractéristiques de la fissure ou du réseau de fissures passent alors à une échelle mésoscopique et éventuellement macroscopique. Les modèles de CDM sont souvent construits tels des modèles de changement d'échelle pour passer de la distribution des défauts initiés à l'échelle micro-/ou mésoscopique au comportement élastique homogénéisé, macroscopique.

En mécanique de la rupture, on distingue trois modes de propagation élémentaires des fissures, illustrés à la figure 1 – 6 page ci-contre. Ces modes sont relatifs à la phénoménologie de l'endommagement étant donnée une fissure idéalisée, sollicitée mécaniquement. Des cinétiques

de propagations différentes peuvent avoir lieu dans un même matériau en fonction du/des modes de propagation actif(s).

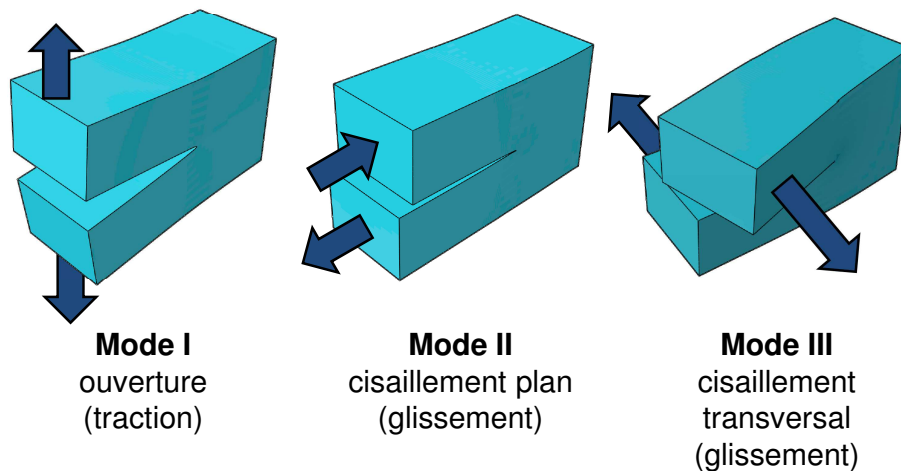


FIG. 1-6 : Schématisation d'une fissure dans les trois modes élémentaires de propagation.

#### 1.4.2 Modèle d'endommagement continu – Sun et Khaleel

Le modèle d'endommagement de Sun et Khaleel [SK04], dont la CDM est détaillée dans ce paragraphe, propose la prise en compte d'un tenseur d'endommagement piloté en contraintes principales. L'endommagement est écrit sous forme tensorielle – il peut donc être anisotrope dans le matériau simulé – de plus, il est possible d'avoir une incrémentation de l'endommagement pour le mode I et le mode II de rupture. Dans cet article fondateur, le matériau étudié est le verre et les sollicitations mécaniques par indentation. Le modèle a été appliqué par d'autres groupes de chercheurs sur ces mêmes problématiques d'indentation, par exemple par Ismail *et al.* [IZNAA08, IZNA<sup>+</sup>11]. D'autres types de problématiques, courantes en CDM, ont été envisagées pour ce modèle, comme des chocs en rupture dynamique [SLCT09].

Nous présenterons ce modèle au § 1.4.2.2 page 31, après revue des étapes de sa construction au § 1.4.2.1 (et rédigé telles que nous comprenons les différentes formulations apparues au cours du temps). La loi de comportement qui définit ce modèle a été mise en forme et appliquée au *Massachusetts Institute of Technology (Dept. of Ocean Engineering)* dans les années 80, dans le cadre des travaux de Choi [Cho89] et Karr et Choi [KC89]. Le but était alors d'étudier l'endommagement des structures de glace de type banquise. La loi de comportement elle-même a été développée par Krajcinovic [Kra85]. D'autres familles de matériaux sont couramment étudiées dans le cadre de la CDM, telles que les bétons, les composites, les polymères, les métaux etc.

##### 1.4.2.1 Construction de la loi de comportement

Pour étudier le comportement en endommagement macroscopique, Krajcinovic [Kra85] introduit des systèmes de micro-fissures à la même orientation plane  $\alpha$  (il suppose un grand nombre de micro-fissures). En un point donné,  $\omega^{(\alpha)}$  représente l'aire concernée, portée par le vecteur directeur normal au plan de fracturation  $\omega^{(\alpha)} = \omega^{(\alpha)} \mathbf{N}_k^{(\alpha)}$ . En ce point, on peut également écrire

l'endommagement sous la forme d'un tenseur d'ordre 2 sur lequel on projette l'ensemble de ces contributions :

$$\mathbf{D}_{kl} = \lim_{m \rightarrow \infty} \sum_{\alpha=1}^m \omega^{(\alpha)} N_k^{(\alpha)} N_l^{(\alpha)} \quad (1-5)$$

Choi [Cho89] écrit la thermodynamique des processus irréversibles, en se reposant sur des grandeurs thermodynamiques et des variables d'état internes :

- ◇ le tenseur des contraintes  $(\sigma_{ij})$ ,
- ◇ le flux de chaleur vectoriel  $(q_i)$ ,
- ◇ l'entropie massique  $(S)$ ,
- ◇ l'énergie libre  $(\Psi)$ ,
- ◇ le tenseur des déformations (totales)  $(\epsilon_{ij})$ ,
- ◇ le tenseur des déformations (élastiques)  $(\epsilon_{ij}^e)$ ,
- ◇ la température  $(T)$ ,
- ◇ et les variables internes  $\omega_i^{(\alpha)}$ .

Le premier principe donne :

$$\rho U - \sigma_{ij} \dot{\epsilon}_{ji} + q_{i,i} = \rho R \quad (1-6)$$

avec  $U$  l'énergie interne massique, et  $R$  le terme source de chaleur.

Le second principe donne :

$$\sigma_{ij} \dot{\epsilon}_{ji} - \rho (\dot{\Psi} + S\dot{T}) - \left( \frac{1}{T} q_i T \right)_{,i} \geq 0 \quad (1-7)$$

Le potentiel thermodynamique s'écrit alors  $\Psi = \Psi(\epsilon_{ij}^e, T, q_i, \omega_i^{(\alpha)})$  et vérifie :

$$\dot{\Psi} = \frac{\partial \Psi}{\partial \epsilon_{ij}^e} \dot{\epsilon}_{ij}^e + \frac{\partial \Psi}{\partial T} \dot{T} + \frac{\partial \Psi}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial \Psi}{\partial \omega_i^{(\alpha)}} \dot{\omega}_i^{(\alpha)} \quad (1-8)$$

De la théorie classique des invariants, et par une généralisation du modèle de Kachanov [Kac58], on obtient la forme suivante en ne gardant que les termes quadratiques (avec  $\alpha$  et  $\beta$  deux systèmes d'endommagement) :

$$\rho \Psi = \frac{\lambda}{2} (\epsilon_{ii}^e)^2 + \mu \epsilon_{ij}^e \epsilon_{ji}^e + \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \frac{C_1 \epsilon_{ii}^e \epsilon_{ij}^e \omega_j^{\alpha} \omega_i^{\beta} + C_2 \epsilon_{ij}^e \epsilon_{jk}^e \omega_k^{\alpha} \omega_i^{\beta}}{\sqrt{\omega_p^{\alpha} \omega_p^{\beta}}} \quad (1-9)$$

$\lambda$  et  $\mu$  sont les paramètres de Lamé,  $C_1$  et  $C_2$  sont des paramètres à déterminer expérimentalement qui définissent l'influence des micro-fissures sur l'énergie libre.

Chez Krajcinovic [Kra85] et Choi [Cho89], on arrive à la formulation suivante du potentiel :

$$\rho \Psi = \frac{\lambda}{2} (\epsilon_{ii}^e)^2 + \mu \epsilon_{ij}^e \epsilon_{ji}^e + C_1 \epsilon_{ii}^e \epsilon_{ij}^e \mathbf{D}_{ji} + C_2 \epsilon_{ij}^e \epsilon_{jk}^e \mathbf{D}_{ki} \quad (1-10)$$

Par contre, au niveau de l'opération de dérivée du potentiel :

$$\boldsymbol{\sigma}_{ij} = \rho \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_{ij}^e} = \mathbf{K}_{ijkl} \boldsymbol{\varepsilon}_{kl}^e \quad (1-11)$$

pour  $ij$  et  $kl \in \{11, 22, 33, 12, 13, 23\}$  par convention en notation matricielle, et  $\boldsymbol{\varepsilon}_{ij}^e$  en notation ingénieur contenant les  $\gamma_{ij} = 2\varepsilon_{ij}^e$  pour  $i \neq j$  ; avec  $\mathbf{K}_{ijkl}$  le tenseur de rigidité de la loi de comportement. Dans le domaine élastique seul, on a ainsi :

$$\llbracket \mathbf{K}^e \rrbracket_{ijkl} = \lambda \delta_{ij} \delta_{kl} + \mu (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) \quad (1-12)$$

Pour la partie endommagement, les résultats obtenus (ou utilisés) sont les suivants :

1. Krajcinovic [Kra85] ou Sun et Karr [SK01] :  $\llbracket \mathbf{K} \rrbracket_{ijkl} = \llbracket \mathbf{K}^e \rrbracket_{ijkl} + 2C_1 \delta_{ij} D_{kl} + 2C_2 \delta_{ik} D_{jl}$
2. Choi [Cho89] :  $\llbracket \mathbf{K} \rrbracket_{ijkl} = \llbracket \mathbf{K}^e \rrbracket_{ijkl} + C_1 (\delta_{ij} D_{kl} + \delta_{kl} D_{ij}) + C_2 (\delta_{jk} D_{il} + \delta_{il} D_{jk})$ . Cette forme est restée dans ce groupe après 1989, notamment dans l'article de Sun et Khaleel [SK04].
3. Sun *et al.* [SWK96], à travers certaines composantes de la rigidité employées :  $\llbracket \mathbf{K} \rrbracket_{ijkl} = \llbracket \mathbf{K}^e \rrbracket_{ijkl} + C_1 (\delta_{ij} D_{kl} + \delta_{kl} D_{ij}) + \frac{C_2}{2} (\delta_{jk} D_{il} + \delta_{il} D_{jk} + \delta_{ik} D_{jl} + \delta_{jl} D_{ik})$ . Les composantes de cisaillement concernées par une différence avec le résultat précédent sont aussi explicitées, en forme matricielle, dans ces travaux de Choi [Cho89] (avec une incohérence de convention à régler). Cette forme est celle qu'on retiendra au chapitre II (et la notation selon cette écriture condensée est inédite à notre connaissance sur ce modèle).

#### 1.4.2.2 Modèle de Sun et Khaleel (SK)

La loi de comportement utilisée dans ce modèle a été détaillée au paragraphe précédent et dans les RÉFS [Kra85, Cho89, KC89, SWK96] avec des écritures différentes. On retient dans le paragraphe actuel la forme en notation condensée suivante [Cho89, KC89, SWK96, SK04, SKD05] :

$$\llbracket \mathbf{K} \rrbracket_{ijkl} = \llbracket \mathbf{K}^e \rrbracket_{ijkl} + C_1 (\delta_{ij} D_{kl} + \delta_{kl} D_{ij}) + C_2 (\delta_{jk} D_{il} + \delta_{il} D_{jk}) \quad (1-13)$$

avec :  $ij$  et  $kl \in \{11, 22, 33, 12, 13, 23\}$  et  $\boldsymbol{\varepsilon}_{ij}^e$  en notation ingénieur par convention.  $\mathbf{K}_{ijkl}^e$  est suivant l'équation 1-12 :  $\llbracket \mathbf{K}^e \rrbracket_{ijkl} = \lambda \delta_{ij} \delta_{kl} + \mu (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk})$ .

La notation matricielle qui correspond à la notation condensée du modèle de Sun et Khaleel s'écrit\* :

\*. dans une convention différente de la notre, par exemple si  $ij$  et  $kl \in \{11, 22, 33, 12, 23, 31\}$ , il peut y avoir des modifications au niveau des termes non-diagonaux de la sous-matrice  $3 \times 3$  inférieure basse

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{12} \\ \sigma_{13} \\ \sigma_{23} \end{bmatrix} = \llbracket \mathbf{K}^e + \mathbf{K}^d \rrbracket_{ijkl} \cdot \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ \gamma_{12} \\ \gamma_{13} \\ \gamma_{23} \end{bmatrix}, ij \text{ et } kl \in \{11, 22, 33, 12, 13, 23\} \quad (1-14a)$$

avec :

$$\llbracket \mathbf{K}^e \rrbracket_{ijkl} = \begin{bmatrix} \lambda+2\mu & \lambda & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ & \lambda+2\mu & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ & & \lambda+2\mu & 0 & 0 & 0 \\ & & & \mu & 0 & 0 \\ \text{sym.} & & & & \mu & 0 \\ & & & & & \mu \end{bmatrix}, \quad (1-14b)$$

$$\text{et : } \llbracket \mathbf{K}^d \rrbracket_{ijkl} = \begin{bmatrix} 2(C_1+C_2)D_{11} & C_1(D_{11}+D_{22}) & C_1(D_{11}+D_{33}) & (C_1+C_2)D_{12} & (C_1+C_2)D_{13} & C_1D_{23} \\ 2(C_1+C_2)D_{22} & C_1(D_{22}+D_{33}) & (C_1+C_2)D_{12} & C_1D_{13} & (C_1+C_2)D_{23} \\ 2(C_1+C_2)D_{33} & (C_1+C_2)D_{12} & C_1D_{12} & (C_1+C_2)D_{13} & (C_1+C_2)D_{23} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_2D_{13} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Dans ces publications initiales ou les travaux ultérieurs du groupe de Sun et Khaleel, la généralisation à une mécanique pleinement 3D n'est pas appliquée. Les lois d'endommagement sont simplifiées par l'utilisation des symétries du problème pour ne garder qu'un ou deux endommagements sur l'ensemble du tenseur, par exemple, suivant les problèmes traités par Sun *et al.* [SLCT09] ou Liu *et al.* [LSCT12]. La forme d'incrément de l'endommagement reste néanmoins la même (on la détaille en cette fin de paragraphe).

Cette loi de comportement permet a priori de prendre en compte tout tenseur d'endommagement  $\mathbf{D}_{ij}$ , quelles que soient les directions de ses vecteurs propres vis-à-vis du repère principal. Néanmoins, il convient de quantifier son développement en chaque point du volume. L'endommagement dans le modèle de Sun et Khaleel [SK04, SLCT09] est pris en compte entre 0 et 1 et est mis à jour pour davantage d'endommagement selon un pilotage en contraintes principales pour le mode I (présenté à l'équation 1-15) et en cisaillement maximal pour le mode II (présenté à l'équation 1-16 page ci-contre) :

$$\llbracket \mathbf{D} \rrbracket_{ii} = \left\{ \begin{array}{ll} 0, & \sigma_i \leq \sigma_{seuil} \\ \frac{\sigma_i - \sigma_{seuil}}{\sigma_{critique} - \sigma_{seuil}}, & \sigma_{seuil} < \sigma_i < \sigma_{critique} \\ 1, & \sigma_i \geq \sigma_{critique} \end{array} \right\}, i \in \{1, 2, 3\} \quad (1-15)$$

avec les  $\sigma_i$  les contraintes principales qui orientent la diagonalisation de  $\mathbf{D}_{ij}$  lorsqu'on a uniquement du mode I ;  $\sigma_{seuil}$  et  $\sigma_{critique}$ , toutes deux en traction, sont respectivement la contrainte seuil et la contrainte critique pour l'endommagement de mode I, avec l'endommagement qui suit ici



linéairement l'état de contrainte entre ces deux valeurs.

$$\llbracket \mathbf{D} \rrbracket_{ij} = \left\{ \begin{array}{lll} 0, & |\tau^{\max}| \leq \tau_{seuil}, & \text{ou } \max_i(\sigma_i) \geq 0 \\ \frac{|\tau^{\max}| - \tau_{seuil}}{\tau_{critique} - \tau_{seuil}}, & \tau_{seuil} < |\tau^{\max}| < \tau_{critique}, & \text{et } \max_i(\sigma_i) < 0 \\ 1, & |\tau^{\max}| \geq \tau_{critique}, & \text{et } \max_i(\sigma_i) < 0 \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{l} i, j \in \{1, 2, 3\} \\ j \neq i \end{array} \right. \quad (1 - 16)$$

L'endommagement de mode II n'est possible ici que lorsque l'ensemble du cercle de Mohr est en compression ( $\sigma^{\max} < 0$ ). De même que pour les contraintes principales en mode I, mais à des valeurs pas forcément identiques, il y a un cisaillement seuil et un critique vis-à-vis de l'endommagement :  $\tau_{seuil}$  et  $\tau_{critique}$ . La composante tensorielle  $\llbracket \mathbf{D} \rrbracket_{ij}$  est due au cisaillement maximum  $\tau^{\max}$  dans le plan  $ij$  (il y en a trois).

L'identification des coefficients  $C_1$  et  $C_2$  est menée par Sun et Khaleel [SK04] pour l'obtention d'une contrainte nulle à un endommagement total (à 1) en traction uniaxiale. Ils obtiennent  $C_1 = \mu$  et  $C_2 = -\frac{3}{2}\mu$ . Cette identification est détaillée en annexe A.1 (le présent modèle y est renommé M1).



**CHAPITRE**

**II**

---

**Phénoménologie, méthodes &  
expériences**

Les lois de comportement retenues ici pour les matériaux, ainsi que les concepts présentés dans ce chapitre, ont été intégrés à un code FE commercial à travers des sous-routines d'instructions programmées en Fortran. Le calcul thermique par FE, ainsi que le calcul de structure thermomécanique, sont effectués pour ce travail de thèse dans le code FE Abaqus v6.9–12 (Dassault Systèmes).

Dans ce chapitre, nous décrivons au § II.1 le protocole général de modélisation et de simulation adopté dans ce travail pour le procédé de vitrification. Au § II.2 page 38, nous détaillons le protocole de simulation thermique des colis, ainsi que le cas d'échantillons en forme de disques sollicités thermiquement. Nous y présentons également les résultats d'essais thermiques effectués sur des colis à la plate-forme expérimentale du CEA, Centre de Marcoule.

La modélisation de la relaxation est ensuite détaillée au § II.3 page 62, et celle de la fracturation au § II.4 page 77.

## II.1 Phénoménologie retenue

Afin de répondre aux objectifs fixés, la modélisation et la simulation des colis (qu'on arrête aux frontières de l'acier et du verre) sont divisées en cinq physiques successives :

1. Calcul thermique du colis lors du procédé, fondé sur des expériences de coulées à l'échelle 1:1. L'histoire thermique est alors connue dans l'ensemble du colis (acier et verre).
2. L'identification de la solidification du verre vis-à-vis de la relaxation du volume : la dilatation du verre évolue en effet d'après l'histoire thermique, avec une transition liquide-solide qui n'est pas à température fixe.
3. La relaxation viscoélastique : les constantes élastiques évoluent de façon similaire en fonction de l'histoire thermique locale du verre.
4. Le calcul de structures mécaniques d'après ces états de relaxation, avec en plus la prise en compte de l'endommagement éventuel du verre par une mécanique d'endommagement continu du verre (code d'endommagement CDM).
5. La quantification de la fissuration et la détermination de sa nature (à travers le code de fracturation).

En thermique (1), on effectue le calcul de façon découplée des autres physiques, comme nous négligeons la rétroaction des contraintes sur les flux de chaleurs (pas de dissipation d'énergie mécanique contribuant à la thermique). En l'absence de données sur la relaxation des propriétés thermiques (propriétés qui ne sont pas déterminées à nouveau dans le cadre du programme), nous décidons de l'emploi d'une température fixe pour la transition de phase liquide/solide des propriétés thermiques vers 775 K, et une linéarité des propriétés au voisinage de cette transition. D'autre part, l'approximation géométrique utilisée dans le modèle FE thermique est conservée, par commodité, dans toutes les physiques introduites ici (pour le calcul de structure mécanique (4), le nombre de degrés de liberté est alors multiplié par 3 par rapport au calcul thermique). La modélisation s'effectue généralement en 3D sans symétrie utilisée pour le colis (il est pourtant à géométrie axisymétrique).

Les phénomènes de relaxation (2) et (3) peuvent être pris en compte dans le calcul, en se fondant uniquement sur cette histoire thermique déterminée avec les propriétés du verre SON68. Là encore, ce calcul est découplé de la réponse mécanique, en ce sens qu'il n'y a pas de rétroaction des contraintes sur les propriétés de relaxation du verre en ce qui concerne son volume massique et sa viscoélasticité (on néglige l'influence de l'intensité du champ de pression sur la relaxation).

Du point de vue de la viscoélasticité (3) plus particulièrement, on considère uniquement la relaxation du module de cisaillement ( $G$ ) en première approximation de ce phénomène. La relaxation du module de compressibilité iso-statique ( $K$ ) est absente et remplacée par un changement de valeur (liquide/solide) à température fixe (définie au moment de l'écart à l'équilibre, comme  $T_g$  est calculée pendant la solidification). En fait, on fixera  $K_{liquide} = K_{solide}(773 K)$ .

Le calcul de structure mécanique (4) prend en charge avant l'endommagement tous les aspects de calcul d'équilibre mécanique en comportement viscoélastique (pour le verre) et élastique (pour l'acier) tenant compte des relaxations du verre modélisées. De façon couplée à ce calcul par le modèle CDM, les phénomènes d'endommagement qui peuvent se produire dans le verre sont simulés. On peut être amené à traiter de façon différente dans ce dernier couplage l'endommagement de mode I et de mode II (voire même désactiver complètement le modèle CDM pour garder une loi de comportement viscoélastique non endommageable).

Le calcul de fracturation (5) est opéré, de façon découplée du calcul de structure, sur des résultats en termes énergétiques et sur les résultats du code d'endommagement CDM (notamment, sur l'énergie dissipée par endommagement, qu'on suppose totalement transmise à la création de surface de fracturation). Il répond également à des considérations dues à la mécanique de la rupture (propagation des fissures notamment).

D'autres hypothèses pratiques sont formulées quand la/les coulée(s) du verre sont réalisées pendant le procédé de vitrification et de manufacture des colis :

- ◇ on ne considère pas le travail des forces de pesanteur dans le calcul de structure mécanique, négligées devant le champ de contrainte dans le verre et l'acier ;
- ◇ les phénomènes de convection à l'intérieur du volume de verre ne sont pas pris en compte quand le verre en fusion est en place dans le conteneur ;
- ◇ le calcul thermomécanique du verre commence au moment où, dans le refroidissement final, le point le plus froid du bloc de verre passe sous une température considérée comme un point mou du verre : à 900 K (température de Littleton) ;
- ◇ la dépression du verre liquide est un phénomène désactivé dans le calcul de structure (énergétiquement, il est préférable d'avoir un phénomène proche de la cavitation dans le verre) ;
- ◇ la réponse mécanique du verre en fusion dans le conteneur est désactivée tant que le verre liquide n'est pas entouré de verre solide ou d'acier inoxydable, cet instant étant appelé « début de solidification » ;
- ◇ l'apparition de verre solide avant le début de solidification arrive forcément, et sa réponse mécanique est prise en compte en fonction des déformations thermiques dans ce verre solide seulement.

En dehors de ces concepts, d'autres phénomènes sont susceptibles d'arriver dans le verre ainsi que pendant la vie utile du colis, comme la présence de bulles, la refermeture du réseau de fissures

sous contraintes lithostatiques, la fissuration sous-critique du réseau de fissures une fois formé, sa corrosion ou sa cicatrisation. Ces aspects font partie du travail des deux laboratoires qui sont nos partenaires sur le programme (LMS\* et LG†). Certains de ces travaux ont déjà fait l'objet de publications [OS10, OSGF+11, DBACB13].

Les objectifs des modèles présentés dans ce chapitre ne sont donc pas focalisés sur les aspects ultérieurs de comportement à long terme des colis, en aval de la fissuration. Ces aspects sont par exemple (et de façon non exhaustive) la percolation du réseau de fissures, la rétroaction de l'altération du verre sur la fracturation, la cinétique de propagation des fissures sur de longues durées ou encore la régénération de l'endommagement.

## II.2 Thermique

On détaille dans cette partie des éléments du protocole de simulation thermique du procédé de vitrification, de façon à déterminer la sollicitation thermique dans nos modèles de colis. On introduit également le cas d'échantillons en verre SON68, qui sont utilisés en général pour l'étude du comportement thermomécanique.

### II.2.1 Nécessités d'ordre général pour la modélisation par éléments finis

Le calcul par FEM thermique dans un volume nécessite :

- ◇ un état initial des températures dans le modèle,
- ◇ des propriétés de conduction de la chaleur en volume des matériaux modélisés (telles que définies dans l'équation de la chaleur – Éq. 1 - 1 page 21),
- ◇ et des conditions aux limites thermiques qui sont exprimées soit en flux thermiques, soit en températures imposées.

On pourrait étendre les frontières du modèle thermique au-delà du colis (défini par le verre et l'acier seuls) pour prendre en compte les échanges thermiques dans l'air environnant, avec uniquement des phénomènes de transport, conduction et rayonnement (au niveau des surfaces internes du modèles, en cavité rayonnante). On modéliserait alors les murs de la pièce, les éléments tels que le creuset au-dessus du colis, duquel coule par gravité un filet de verre en fusion, etc. Cependant, cela ne fait que repousser plus loin la connaissance à acquérir des conditions aux limites à définir au modèle.

Ces frontières étant définies (et ici au plus près pour le colis, délimitées à la surface du colis), on peut y appliquer des températures  $T(\mathbf{x}, t)$  en tant que conditions aux limites. Si on ne peut pas ou ne souhaite pas appliquer des températures au bord des modèles, on peut appliquer des flux thermiques  $q(\mathbf{x}, t)$  (exprimés en  $W/m^2$ ) qui représentent classiquement deux grandes familles de phénomènes physiques se déroulant aux surfaces :

- ◇ des phénomènes de convection qui incluent tous les aspects de conduction au niveau de l'interface par contact d'un fluide soumis à la pesanteur (convection naturelle) ou à une

---

\*. Laboratoire de mécanique des solides, UMR CNRS 7649 – École Polytechnique, Palaiseau

†. Laboratoire de géologie, École Normale Supérieure – CNRS UMR 8538, Paris

vitesse (convection forcée) :

$$q_c = h_c (T - T_{0,c}) \quad (11-1)$$

avec  $h_c$  le coefficient de film en  $W/m^2/K$ , et  $T_{0,c}$  la température puits pour la convection ;

◇ et/ou des phénomènes de rayonnement :

$$q_r = a (T^4 - T_{0,r}^4) \quad (11-2)$$

avec  $a$  la constante de rayonnement (produit de l'émissivité et de la constante de Stefan-Boltzmann) en  $W/m^2/K^4$ , et  $T_{0,r}$  la température puits pour le rayonnement.

Si nous prenons en compte des phénomènes de convection naturelle de colis (à l'air), à titre d'exemple et pour fixer ces flux, la valeur du coefficient  $h_c$  dépend de la température et correspond empiriquement à [Cer79] :

$$h_c = 1,3 \left[ \frac{T - T_{0,c}}{d} \right]^{\frac{1}{4}} \quad (11-3)$$

avec  $d$  le diamètre du cylindre (supposé sans effet de bord – infini) en convection naturelle, soit ici  $d = 0,43$  m.

### 11.2.1.1 Cas d'échantillons de trempe

Des échantillons en forme de disque (40 mm de diamètre pour 2 mm d'épaisseur), constitués de SON68, sont étudiés au § III.4 page 124 du point de vue de l'endommagement provoqué par une sollicitation thermique forte (la trempe dans de l'eau à température ambiante depuis des différentiels de températures inférieurs à 200 K).

La simulation thermomécanique de ces essais simples est entreprise et nécessite en premier lieu de fixer les caractéristiques des échanges thermiques. On décide d'appliquer des flux à l'interface eau/verre de ces éprouvettes, en négligeant les échanges de rayonnement devant ceux de convection. La modélisation de la convection dans l'eau se fait classiquement par un coefficient  $h_c$  à 10 000  $W/m^2/K$  et par la température de l'eau lors de l'essai à  $T_{0,c} = 296$  K. Il suffit enfin de définir la température initiale des échantillons, identifiée à celle en sortie du four, pour permettre la simulation du comportement thermique qu'on a envisagé pour ces échantillons.

### 11.2.1.2 Cas de la coulée du verre dans un conteneur

Le remplissage du colis est un phénomène lié à l'écoulement du verre en fusion en tant que fluide visqueux dans le conteneur en acier inoxydable. Nous ne prenons pas en compte de modèle de surface libre pour rendre compte de ce phénomène que nous simplifions de la manière suivante :

- ◇ le bloc de verre est divisé en volumes élémentaires, activés successivement dans le calcul thermique lorsque, dans le procédé, une quantité équivalente de verre s'est écoulé du creuset ;

- ◇ chaque volume élémentaire de verre a une surface libre du verre parfaitement plane dans le colis, supposant un écoulement suffisamment fluide du verre pour occuper tout l'espace interne du conteneur inférieur à la hauteur de cette surface interne ;
- ◇ chaque volume élémentaire de verre, au moment de l'activation, a une température uniforme qui est imposée : celle du verre dans le creuset de fusion.

Nous mettons en évidence ces couches élémentaires de remplissage au niveau de maillages présentés au paragraphe suivant.

Il s'agit là d'un exemple de conditions aux limites à température imposée (en volume). Pour les surfaces de ce modèle, toutes les conditions aux limites qui représentent les échanges thermiques expérimentaux sont traitées au § II.2.3 page 51.

### II.2.1.3 Maillages des modèles thermomécaniques

Du point de vue des approximations géométriques, nous avons plusieurs cas de figure en fonction des simulations entreprises :

- ◇ celui d'échantillons, en utilisant un plan de symétrie, illustrés à la figure II - 1 page ci-contre :
  - \* nombre d'éléments : 168 000 ;
  - \* type d'éléments : hexaédriques à 8 points d'intégration chacun (type C3D8 sous Abaqus) ;
  - \* nombre de nœuds (et ici de degrés de liberté) : 184 000 ;
- ◇ celui d'un colis à la géométrie simplifiée, et notamment sans acier, en utilisant un plan de symétrie, illustré à la figure II - 2 page suivante :
  - \* nombre d'éléments : 21 500 ;
  - \* type d'éléments : hexaédriques à 8 points d'intégration chacun (type C3D8 sous Abaqus) ;
  - \* nombre de nœuds (et ici de degrés de liberté) : 24 000 ;
- ◇ pour le procédé creuset chaud, celui d'un colis selon la géométrie du conteneur en acier inoxydable CSD-V, et du verre rempli de façon nominale, illustré à la figure II - 3 page 42 :
  - \* nombre d'éléments : 55 500 ;
  - \* type d'éléments : hexaédriques à 8 points d'intégration chacun (type C3D8 sous Abaqus) ;
  - \* nombre de nœuds (et ici de degrés de liberté) : 59 000.
- ◇ pour le procédé creuset froid, celui d'un colis selon la géométrie du conteneur en acier inoxydable CSD-V, et du verre rempli de façon nominale, illustré à la figure II - 4 page 43 :
  - \* nombre d'éléments : 51 500 ;
  - \* type d'éléments : hexaédriques à 8 points d'intégration chacun (type C3D8 sous Abaqus) ;
  - \* nombre de nœuds (et ici de degrés de liberté) : 56 000.

En cas de symétrie à appliquer vis-à-vis d'une surface, les conditions aux limites thermiques correspondent à une absence de flux thermique (la surface plane longitudinale pour les échantillons de trempe, par exemple, doit donc suivre cette condition adiabatique).

D'un point de vue mécanique, quand il n'y a pas de condition de symétrie à reporter dans le modèle, nous définissons en général pour ces géométries cylindriques un 1<sup>er</sup> point fixe dans le modèle en bas de l'axe cylindrique, et un ou plusieurs points dont le déplacement est restreint selon le rayon (ces points appartiennent au plan perpendiculaire à l'axe passant par le 1<sup>er</sup> point).



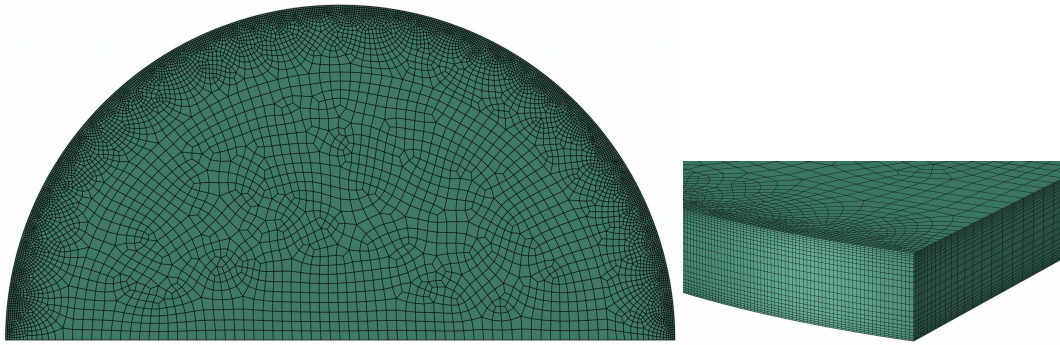


FIG. II - 1 : Approximations géométriques pour les modèles FE d'échantillons (demi-disques modélisés ici). Géométrie des échantillons :  $\varnothing$  4 cm, 2 mm d'épaisseur.

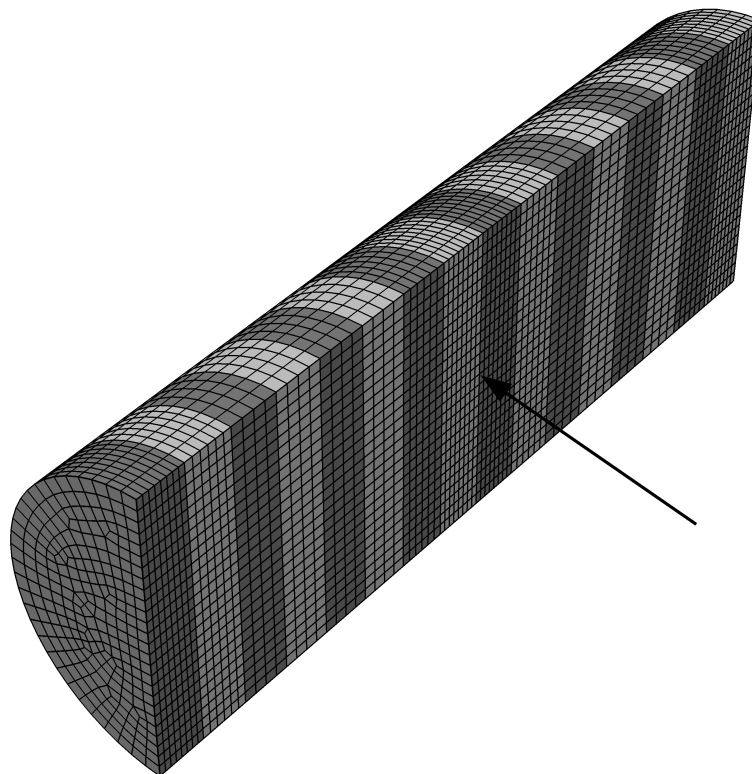


FIG. II - 2 : Approximations géométriques pour les modèles FE d'un demi-colis aux attributs géométriques simplifiés ( $\varnothing$  40 cm, 1,1 m de hauteur). La flèche marque le centre du colis et les teintes de gris les différentes strates de remplissage du colis par le verre (dans la simulation thermique).

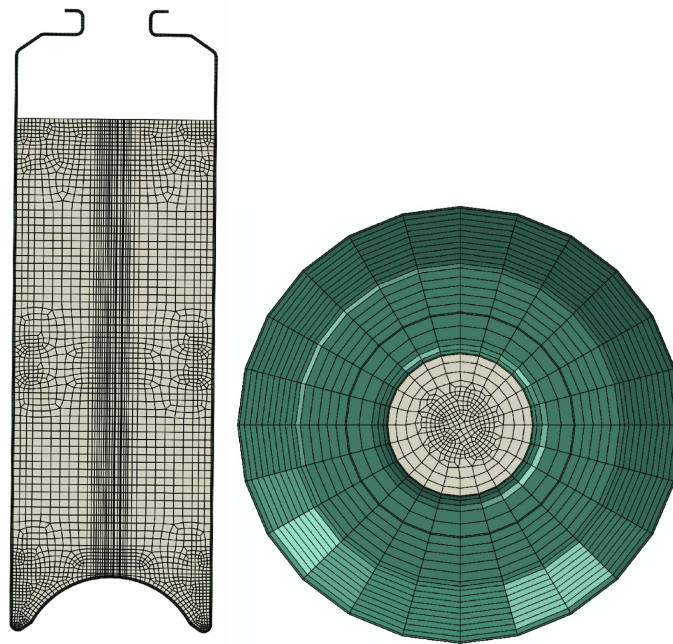


FIG. II - 3 : Approximations géométriques pour les modèles FE d'un colis CSD-V rempli de verre pour le procédé creuset chaud (vue en coupe longitudinale, vue du dessus). Il comprend un découpage en 16 couches élémentaires de remplissage, de même volume (non représentées). Éléments de géométrie : diamètre externe du conteneur de 43 cm, le bloc de verre ayant ici une hauteur de 1,1 m.

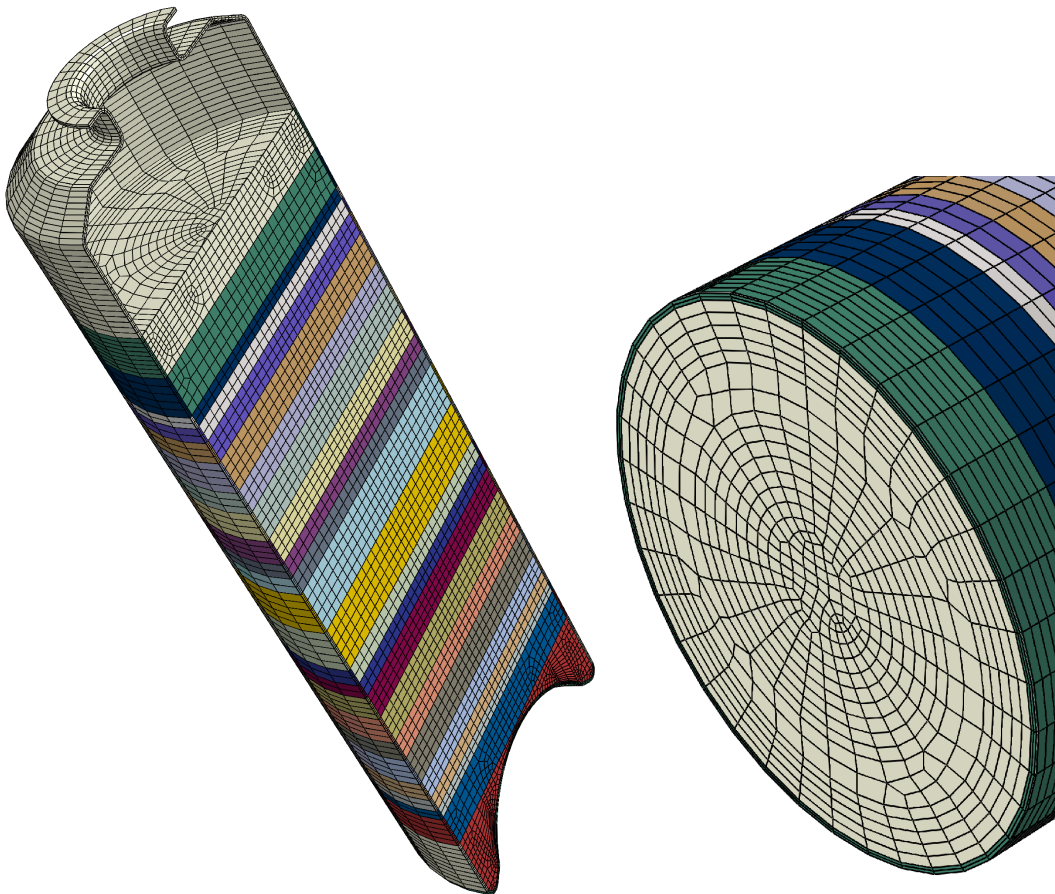


FIG. II - 4 : Approximations géométriques pour les modèles FE d'un colis CSD-V rempli de verre pour le procédé creuset froid (vue en coupe longitudinale, vue en coupe transverse). Les teintes de couleur pour le verre, délimité sur la partie supérieure par la surface libre, représentent des strates de remplissage pendant des procédés aux différents nombres de coulées envisagées pour le bloc de verre (1 à 8). Éléments de géométrie : diamètre externe du conteneur de 43 cm, le bloc de verre ayant ici une hauteur de 1,1 m.

#### II.2.1.4 Propriétés thermiques utilisées

L'utilisation d'un terme source de chaleur ( $\dot{Q}$ ) pour le verre R7T7 dans l'équation de la chaleur (Éq. I-1 page 21), implique une décroissance dans le temps de ce dernier avec la radioactivité, qui est supposée évoluer de façon interpolée linéairement dans les 100 premières années ainsi (à 1 % près) :

- ◇ 100 % de puissance thermique à la coulée ;
- ◇ 25 % à 50 ans ;
- ◇ 10 % à 100 ans.

Toutes les autres propriétés du verre et de l'acier données dans ce paragraphe évoluent également linéairement entre les valeurs fournies à des températures données (on rappelle qu'ici la température de transition vitreuse est supposée fixe).

Les propriétés liées à la conduction thermique sont données pour l'acier inoxydable (norme AFNOR Z 15 CN 24-13 [MAL91]) dans le TAB. II-1 page suivante. La conductivité thermique  $k$  et l'émissivité oxydée qui y sont données proviennent d'une note technique interne au CEA, le reste des propriétés provient des RÉFS [MAL91, Mat05].

Pour le verre SON68, les propriétés de conduction sont données pour une modélisation thermique simplifiée dans le TAB. II-2 page ci-contre. La densité est de  $2,8 \text{ g/cm}^3$  [DDC+10]. La conductivité thermique et la chaleur massique proviennent de Dubé *et al.* [DDC+10] entre 293 et 773 K (775 K est la température de transition vitreuse supposée). Les valeurs de chaleur massique au-delà sont approximées comme constantes et identiques à celles du solide à 773 K, les valeurs de conductivité sont données par la formule  $k(T) = 3,66 \times 10^{-3} T - 0,269$  avec  $T$  en °C [Bar03, MAL91].

Pour une modélisation thermique sur la géométrie complète du conteneur CSD-V, les propriétés du verre SON68 sont définies selon le TAB. II-3 page 46. Diverses propriétés supplémentaires sont issues de notes techniques internes au CEA. La transition vitreuse suppose ici une continuité des propriétés du solide et du verre suivant un intervalle de 30 K entre 773 K et 803 K.

TAB. II-1 : Propriétés thermiques de l'acier inoxydable, en partie de [MAL91, Mat05].

Température	$c_p$ [J/kg/K]	$k$ [W/m/K]	$\rho$ [kg/m <sup>3</sup> ]	Émissivité	
				(état oxydé)	(non-oxydé)
298 à 1273 K	484 à 696	15	$7966 - 0,425 \times T$ [ $T$ en °C]	0,5	
373 à 698				0,22 à 0,45	

TAB. II-2 : Propriétés thermiques simplifiées du verre SON68, en partie de [DDC<sup>+</sup>10, MAL91]. Elles sont uniquement utilisées sur la géométrie simplifiée du colis avec le bloc de verre sans acier.

$T$ [K]	293	373	473	573	673	773	873	973	1073	1173	1273	1373
$c_p$ $\left[ \frac{\text{J}}{\text{kg} \times \text{K}} \right]$ (±12% $\leq 773 \text{ K}$ )	800	800	875	920	950	1000	1000	1000	1000	1000	1000	1000
$k(T)$ $\left[ \frac{\text{W}}{\text{m} \times \text{K}} \right]$ (±12% $\leq 773 \text{ K}$ )	1,03	1,03	1,08	1,11	1,11	1,15	1,93	2,29	2,66	3,02	3,39	3,76

TAB. II – 3 : Propriétés thermiques du verre SON68 utilisées dans la modélisation d'un colis à la géométrie CSD-V.

$T$ [K]	<373	473	573	673	773	803	873	973	1073	1173	1273	1373	1473
$\left[ \frac{c_p}{\text{kg} \times \text{K}} \right]$	880	970	1020	1040	1140	1520	1520	1520	1520	1520	1520	1520	1520
$\left[ \frac{k(T)}{\text{m} \times \text{kg}} \right]$	1,02	1,13	1,22	1,25	1,25	1,45	1,93	2,29	2,66	3,02	3,39	3,76	4,12

## II.2.2 Résultats des expériences thermiques utilisées

Deux traitements de vitrification (creuset chaud et creuset froid) sont rapportés ici. Ils ont été appliqués pour manufacturer deux colis échelle 1:1 qui étaient équipés de thermocouples afin de suivre la thermique de chaque procédé en des points particuliers du colis. Ces expériences ont été réalisées à la plate-forme de vitrification de Marcoule et vont nous servir de référence thermique pour les conditions aux limites dans nos modèles, qu'on cherche à rendre réalistes. Un comparatif de ces deux familles de procédés de vitrification est présenté à la figure II - 5 page 49, pour des relevés de  $T$  en périphérie du colis.

Du point de vue de ces procédés, ils se ressemblent en ce sens que le volume de verre SON68 de 400 kg est coulé en deux fois 200 kg et que le refroidissement s'effectue jusqu'à température ambiante à l'air libre (convection naturelle) en deux jours environ. Autrement, les grandes caractéristiques thermiques et les paramètres remarquables qui différencient les deux procédés sont les suivants :

- ◇ la durée de l'inter-coulées n'est pas la même (visible sur la figure de comparatif) : environ 10 h pour le creuset chaud, contre environ 6 h pour le creuset froid ;
- ◇ la température extérieure n'est pas la même (visible sur la figure de comparatif) :
  - \* plus haute pour le creuset chaud, due à un maintien en température dans un four jusqu'à un peu avant 50 000 s depuis le début des coulées (au niveau de la rupture de pente du refroidissement final pour le creuset chaud),
  - \* contre aucun préchauffage de l'enveloppe en acier inoxydable pour le creuset froid, et aucun chauffage extérieur pendant les 50 000 premières secondes,
  - \* il en résulte, quand le verre est solide, que ces relevés montrent un taux de refroidissement plus important pour le creuset chaud que pour le creuset froid (aux bords, le verre se solidifie en fait vers  $T = 800$  K) ;
- ◇ la température de la fonte de verre dans le creuset est différente (les températures à l'intérieur du colis ne sont pas comparables sur la figure des relevés expérimentaux) :
  - \* à 1 373 K pour le creuset chaud,
  - \* contre une température de fonte plus chaude à 1 473 K pour le creuset froid.

En fait, l'instrumentation du colis traité par le procédé creuset froid était plus conséquente : 7 thermocouples sont équipés au total à l'intérieur (et au bout) de doigts de gant qui sont des fourreaux pour les thermocouples réalisés en acier inox, de forme cylindrique. Ils sont disposés à l'intérieur du conteneur à verre. Les thermocouples équipés dans le colis sont nommés en fonction de leur emplacement, plus précisément en fonction de leur position vis-à-vis des hauteurs nominales de verre coulé (les hauteurs sont données en partant du bas du colis) :

1. « C1 milieu cœur » est à une hauteur de  $\frac{1}{4}$  la hauteur nominale, le thermocouple étant placé au centre du colis (axe central cylindrique), soit au cœur de la coulée n° 1,
2. « C1 milieu 16 cm » est à une hauteur de  $\frac{1}{4}$ , le thermocouple étant placé à une distance de 16 cm de l'axe central cylindrique,
3. « C1 milieu 20 cm » est à une hauteur de  $\frac{1}{4}$ , le thermocouple étant placé à une distance de 20 cm de l'axe central,

4. « Interface C1-C2 11 cm » à la  $\frac{1}{2}$ -hauteur (soit vers l'interface des 2 coulées), le thermocouple étant placé à une distance de 11 cm de l'axe central cylindrique,
5. « C2 milieu cœur » est à une hauteur de  $\frac{3}{4}$ , le thermocouple étant placé au centre du colis (axe central), soit au cœur de la coulée n° 2,
6. « C2 milieu 16 cm » est à une hauteur de  $\frac{3}{4}$ , le thermocouple étant placé à une distance de 16 cm de l'axe central cylindrique,
7. « C2 milieu 20 cm » est à une hauteur de  $\frac{3}{4}$ , le thermocouple étant placé à une distance de 20 cm de l'axe central.

Ces emplacements sont schématisés à la figure II-6 page suivante, et les relevés bruts donnés à la figure II-7 page 50.

Un travail d'interprétation de ces résultats bruts doit être opéré, afin de ne garder que des informations utiles sur la thermique du colis, ce processus est illustré à la figure II-8 page 50. On suppose d'ailleurs qu'une fois réalisé ce travail de traitement des relevés en  $T$ , il n'y a pas de rétroaction des doigts de gants sur la cinétique de refroidissement du bloc de verre.

À la FIG. II-8 page 50 nous pouvons montrer dans quelle mesure la prise en compte d'une surface libre plane n'est pas correcte pour le verre : les trois croix (supposées représenter le positionnement d'un thermocouple au niveau de la surface libre) devraient être en effet, suivant cette hypothèse, à la même abscisse comme les 3 thermocouples correspondants sont à la même hauteur dans le colis. Cette différence est assez faible (100 s) ce qui valide tout à fait cette hypothèse.



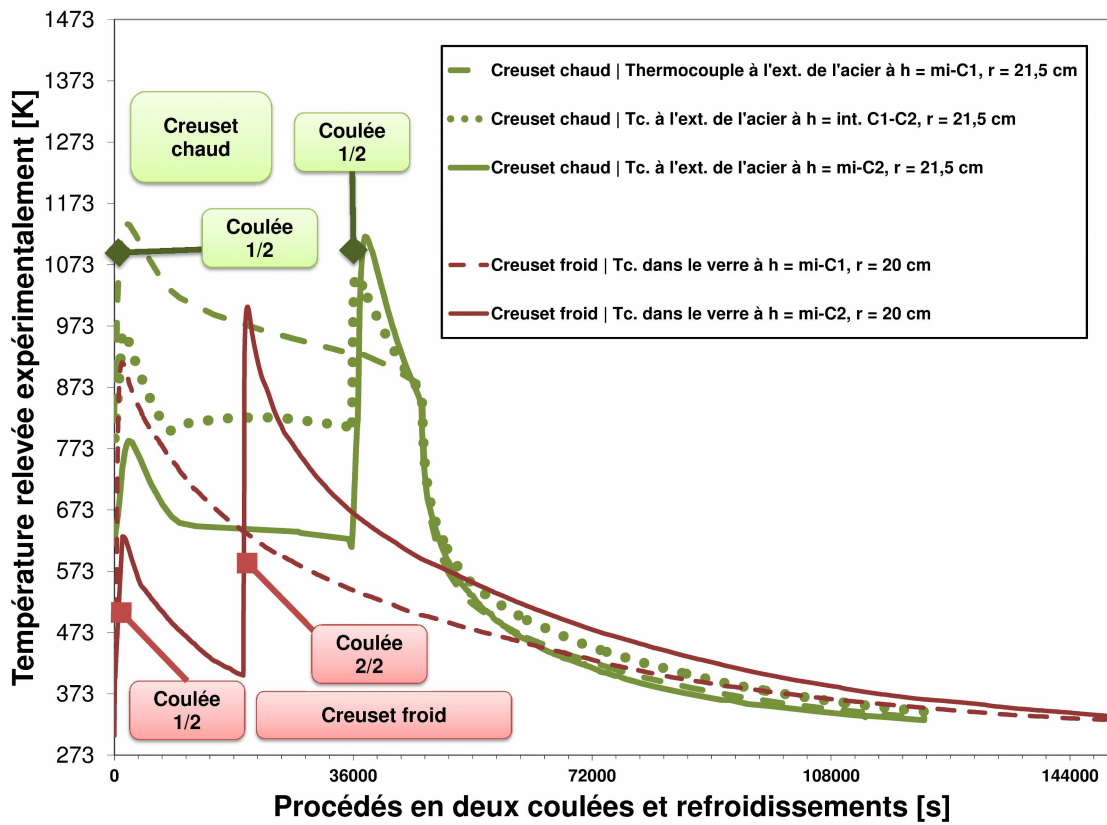


FIG. II-5 : Relevés de températures extérieures (proches de l'acier) de deux procédés de vitrification différents (pour chacun on procède à la coulée de 400 kg en deux fois).

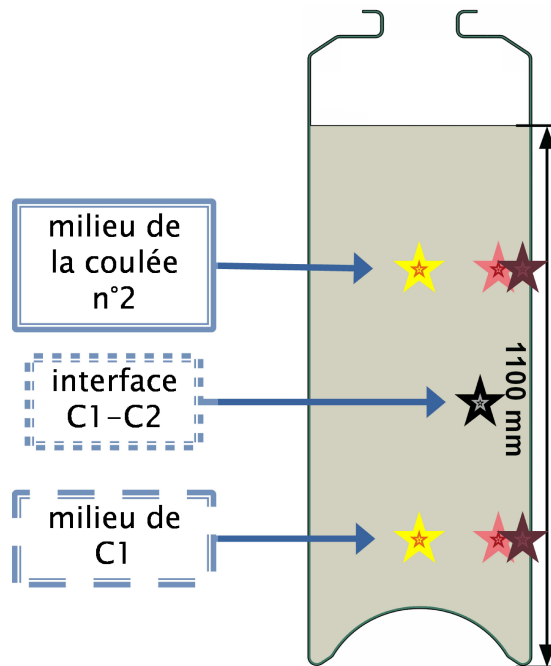


FIG. II-6 : Emplacement des thermocouples (en axisymétrie) pour le procédé creuset froid.

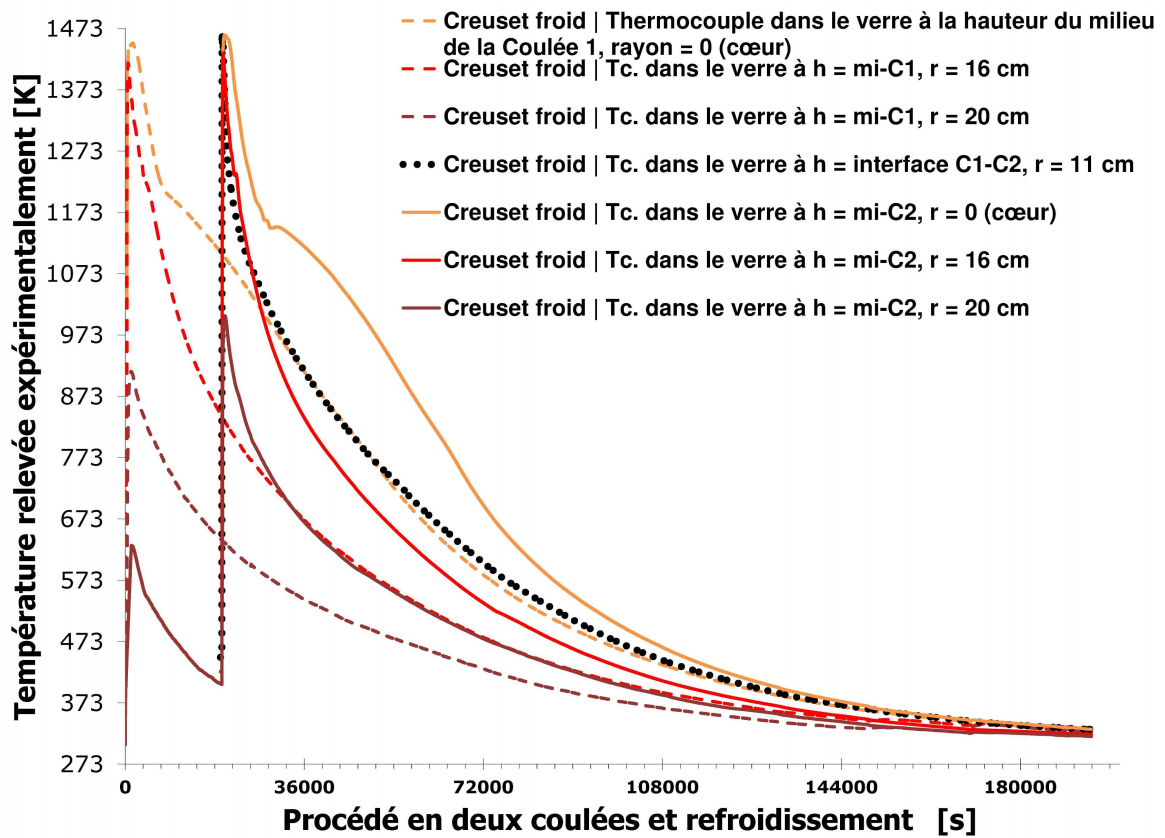


FIG. II - 7 : Relevés de températures complets du procédé creuset froid.

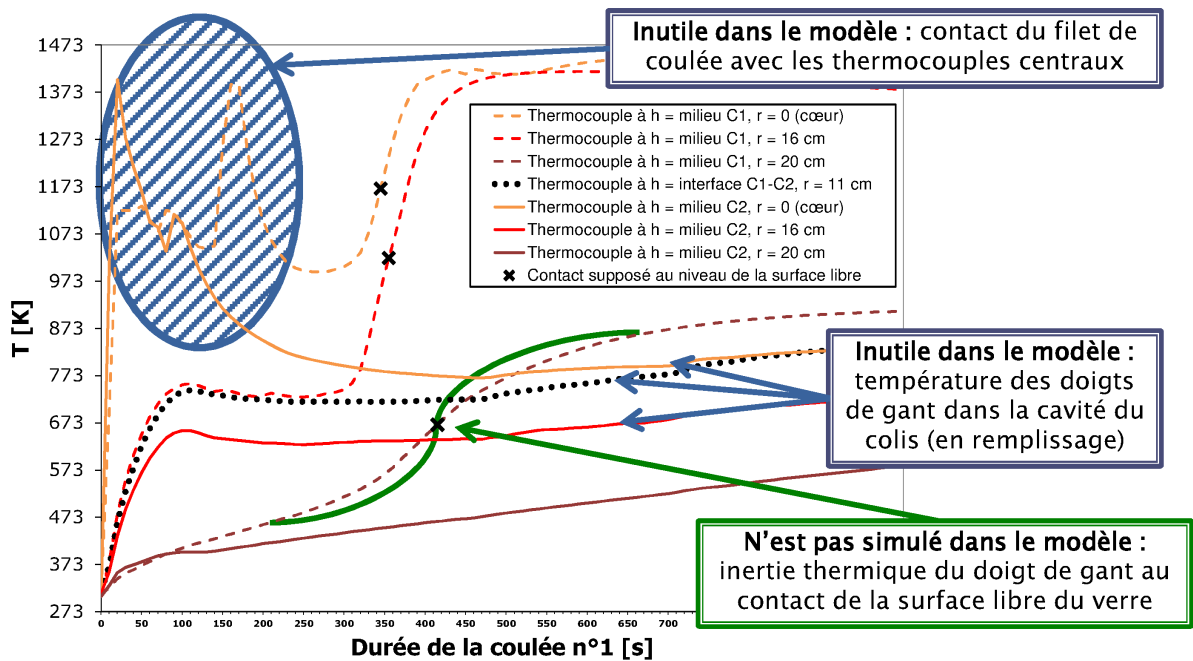


FIG. II - 8 : Relevés bruts des thermocouples équipant le colis, et leur traitement ici pendant la coulée n° 1.

### II.2.3 Conditions aux limites thermiques des colis

Dans les éléments présentés précédemment au § II.2.1.2 page 39 quant à la modélisation du colis, on a vu que des conditions aux limites étaient nécessaires vis-à-vis des couches de remplissage. Ces dernières sont initialisées à tour de rôle à la température du verre en fusion dans le creuset, dont on connaît déjà la valeur suivant qu'il s'agit du creuset chaud ou du creuset froid.

La thermique expérimentale obtenue pour le creuset froid étant arrivée chronologiquement après celle du creuset chaud, nous avons utilisé pour les bords du colis, successivement, les deux types d'application des conditions aux limites pendant le temps simulé du procédé, à savoir :

- ◇ pour le creuset chaud, l'application des températures expérimentales, disponibles et extrapolées :
  - \* directement à la surface du bloc de verre pour le colis simulé en propriétés thermiques simplifiées, sans conteneur,
  - \* directement à la surface du conteneur (et de la surface libre du verre) pour le colis simulé avec la géométrie complète du CSD-V ;
- ◇ pour le creuset froid, l'application de flux thermiques au colis (et uniquement à la géométrie complète du CSD-V), flux calés sur l'expérience à l'issue d'une procédure d'analyse inverse thermique (dans l'expérience, seules étaient disponibles des températures localisées, et non des flux de surface).

Seule cette dernière méthode d'analyse inverse permet d'appliquer facilement un terme source thermique afin de simuler la thermique extrapolée à un colis chaud à puissance thermique variable. Si on appliquait au colis chaud les mêmes températures externes imposées que celles du colis inactif, on surestimerait les gradients thermiques spatiaux, ce qui équivaut à la surestimation du refroidissement de ce colis chaud.

Cet avantage pratique ne se limite pas au terme source de la puissance thermique, on peut quantifier l'influence thermique d'autres modifications des paramètres procédé de la vitrification (à l'intérieur d'une fenêtre paramétrique plausible). Par exemple, en changeant le nombre de coulées, les temps d'inter-coulées, ou en analysant l'influence réciproque de plusieurs colis posés côte à côte (en étendant le modèle thermique), etc.

Nous détaillons la thermique du creuset chaud au § II.2.3.1, et l'analyse thermique inverse appliquée au creuset froid au § II.2.3.2 page 55. On propose des conditions aux limites variantes à la thermique expérimentale (« Cas de référence », ou « Cas I ») afin de dresser une fenêtre paramétrique de simulation au travers de quelques paramètres caractéristiques des procédés de vitrification.

#### II.2.3.1 Creuset chaud – $T$ appliquées

La thermique expérimentale du creuset chaud est rappelée à la figure II - 9 page 53 (aux deux relevés expérimentaux à mi-hauteur des coulées), les quatre autres conditions aux limites fondées sur ce procédé sont schématisées à la figure II - 10 page 54.

Les conditions aux limites thermiques concernant le creuset chaud sont donc au nombre de cinq :

- ◇ Cas I – Expérimental, conditions aux limites qui suivent les températures relevées pour le procédé de vitrification creuset chaud.
- ◇ Cas II et III – On commence les simulations à une température uniformisée dans l'ensemble du colis et on suit ensuite les relevés expérimentaux à la surface du colis pour le reste du refroidissement :
  - \* Pour le Cas II (*High T* pour homogénéisation à haute température) la température d'homogénéisation est de 1 373 K (température de coulée).
  - \* Pour le Cas III (*Low T* pour homogénéisation à basse température) la température d'homogénéisation est de 856 K (le verre liquide est plus de 50 K au-dessus de  $T_g$ ).
- ◇ Cas IV et V – On suit d'abord les conditions expérimentales du procédé creuset chaud (Cas I) avec les deux coulées qui produisent un état interne nommé ici hétérogène pour cette thermique. Dans le refroidissement final, on suit ces relevés expérimentaux extérieurs jusqu'à 856 K et ensuite on modifie le taux de refroidissement :
  - \* Pour le Cas IV (*linear BC* pour conditions aux limites linéaires) on passe à un très bas taux de refroidissement, constant jusqu'à température ambiante (ce taux est plus faible que celui du refroidissement expérimental, jusqu'à un temps où les gradients thermiques ne sont plus critiques).
  - \* Pour le Cas V (*quench BC* pour conditions aux limites de trempe) le refroidissement a un taux très élevé qui simule une trempe du colis.

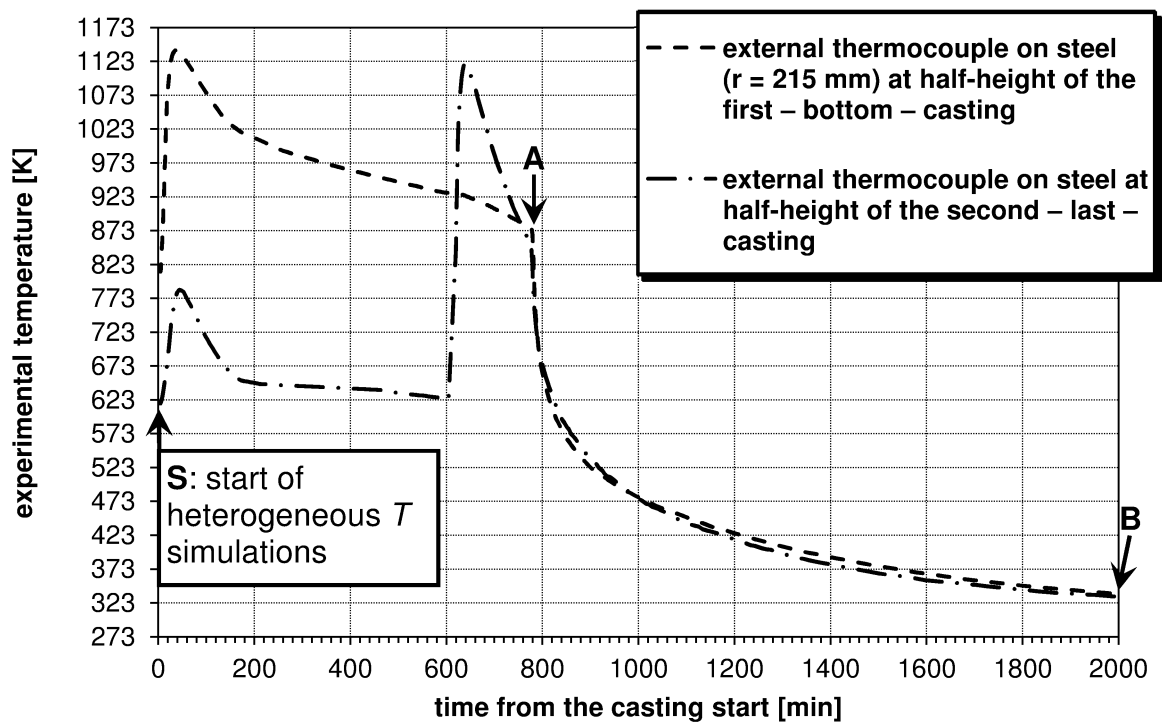


FIG. II - 9 : Relevés bruts des thermocouples équipant le colis pendant le procédé creuset chaud. Ce sont, après extrapolation, les températures externes appliquées au modèle. Les conditions aux limites modifiées en refroidissements externes voient des refroidissements différents de l'expérimental (de référence) entre les points A et B (ici ces simulations sont décrites comme « en  $T$  hétérogène » ; elles correspondent, outre celle de référence, aux conditions aux limites linéaires (*linear*) ou à celle de trempe (*quench*) ; elles commencent toutes au point S).

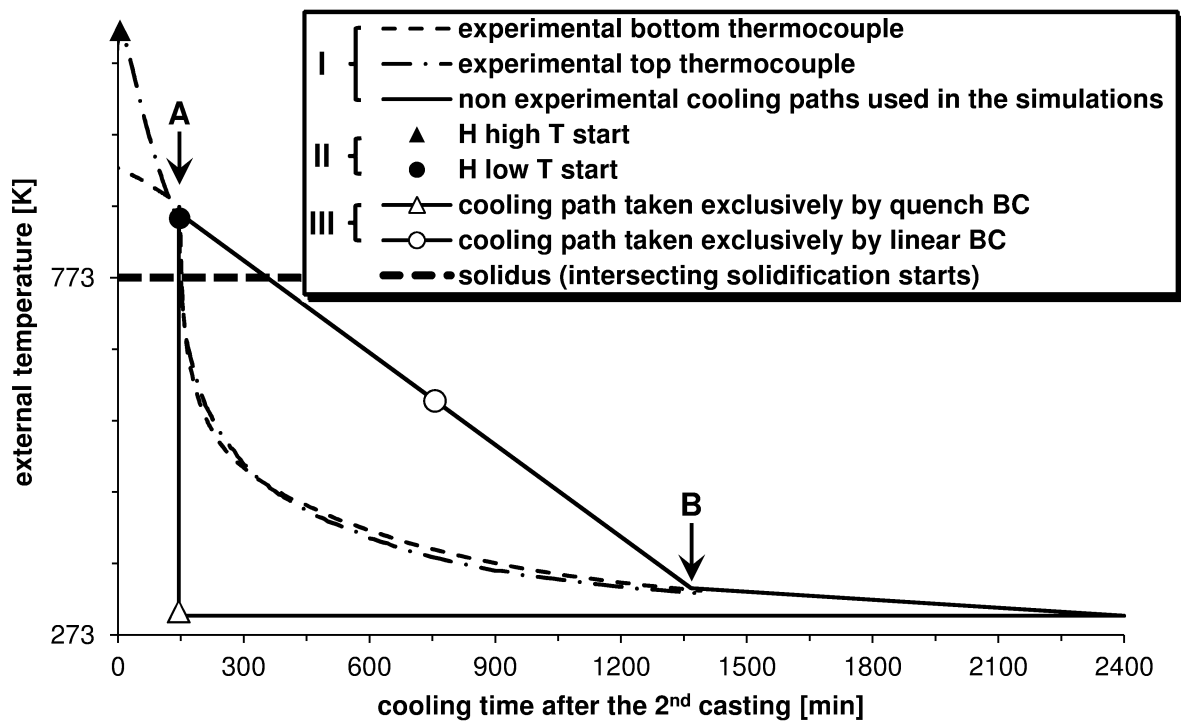


FIG. II-10 : Les différentes conditions aux limites appliquées au modèle. La simulation de référence suit les courbes des thermocouples (après extrapolation). I : en complément de la figure II-9, toutes les températures externes imposées via les différentes conditions aux limites sont représentées. II : début des simulations à température uniformisée dans le colis. III : modification des échanges thermiques avec l'extérieur en imposant des refroidissements très différents jusqu'à  $T_{amb}$ .

### II.2.3.2 Creuset froid – analyse inverse thermique

**i) Principes** La procédure d'analyse inverse est schématisée à la figure II - 11 page suivante. L'ensemble des flux modélisés dans cette procédure est représenté à la figure II - 12 page 57. Rappelons qu'il y a tout de même des températures imposées dans ce modèle en flux (ce sont les seules) :

- ◇ la température ambiante pour la convection et le rayonnement de l'acier à l'extérieur, et la température initiale de l'acier ;
- ◇ les températures puits dans la cavité juste après une coulée pour la convection et le rayonnement à la surface libre du verre ; on suppose ainsi qu'elles n'évoluent pas en cas de colis chauds (avec le terme  $\dot{Q}$  supplémentaire de puissance thermique) ;
- ◇ la température initiale du verre, en tant que variable ajustable lors de la procédure de convergence de l'analyse inverse ; on suppose ainsi que, même dans le cas du verre R7T7 pour un colis chaud, la puissance thermique dans le creuset froid ne change pas la consigne en température pour la fonte de verre dans le creuset.

Le principe de l'analyse inverse repose sur l'utilisation aux frontières du colis de flux qui ont une signification physique tels que ceux de convection ou de rayonnement (voir § II.2.1 page 38). Ces flux sont alors superposés à des flux de correction pour faire converger l'ensemble des flux, devenus homogénéisés, vers les relevés expérimentaux aux points étudiés du bloc de verre.

**ii) Résultats** Pour faire converger notre ensemble de flux vers les températures expérimentales dans le colis, nous avons choisi d'optimiser le rapprochement du modèle et de l'expérience sur les deux thermocouples dans le verre à 16 cm de l'axe cylindrique. Le flux de conductivité dans le verre n'a pas fait partie des flux à faire converger, seuls sont considérés les flux aux surfaces ; de fait si la conductivité n'est pas bien modélisée, elle peut empêcher une optimisation de la convergence des  $T$  aux 7 relevés simultanément. Les résultats de cette analyse inverse sont présentés dans les figures II - 13 à II - 17 pages 58–61 aux 7 points particuliers introduits.

Nous ne détaillons pas comment nous avons extrapolé l'ensemble des flux obtenus par cette analyse inverse vers des modifications des paramètres procédé tels que le nombre de coulées ou la durée des étapes de coulée. Une modélisation de poids est tout de même extrêmement facile à extrapoler : pour un colis chaud (avec puissance thermique quelconque) cet ensemble de flux appliqués au modèle reste strictement identique pendant le procédé de vitrification, et il suffit d'ajouter le terme source  $\dot{Q}$  à l'équation de la chaleur résolue dans le colis chaud.

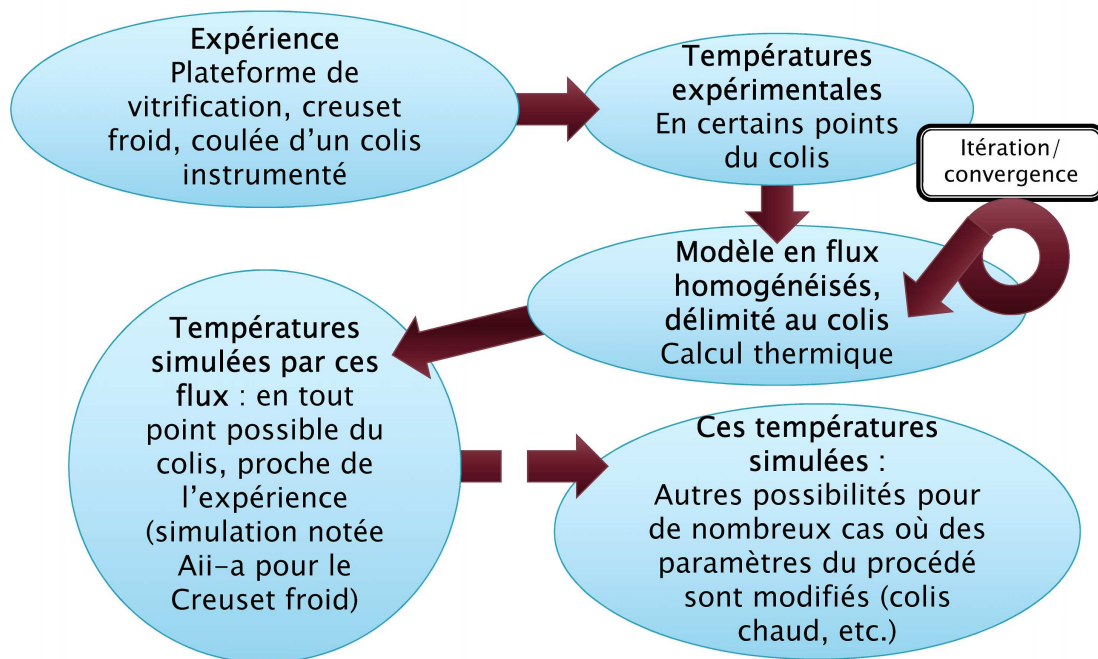


FIG. II - 11 : Algorithme suivi pour l'analyse inverse en flux thermiques homogénéisés (creuset froid uniquement).



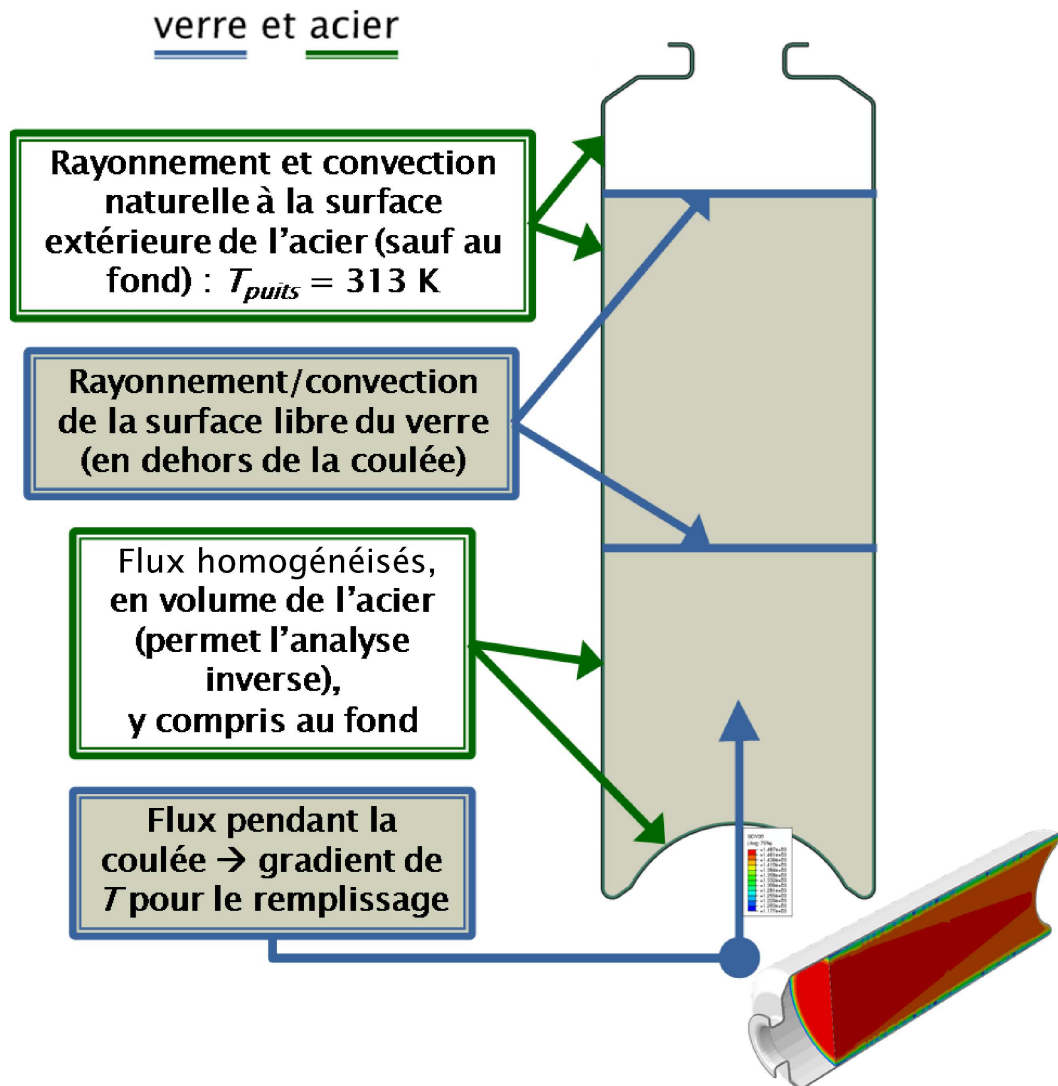


FIG. II - 12 : Nature des flux modélisés pendant la simulation thermique afin de retrouver les températures expérimentales (flux qui concernent l'acier en vert et blanc, et pour le verre en bleu et beige).

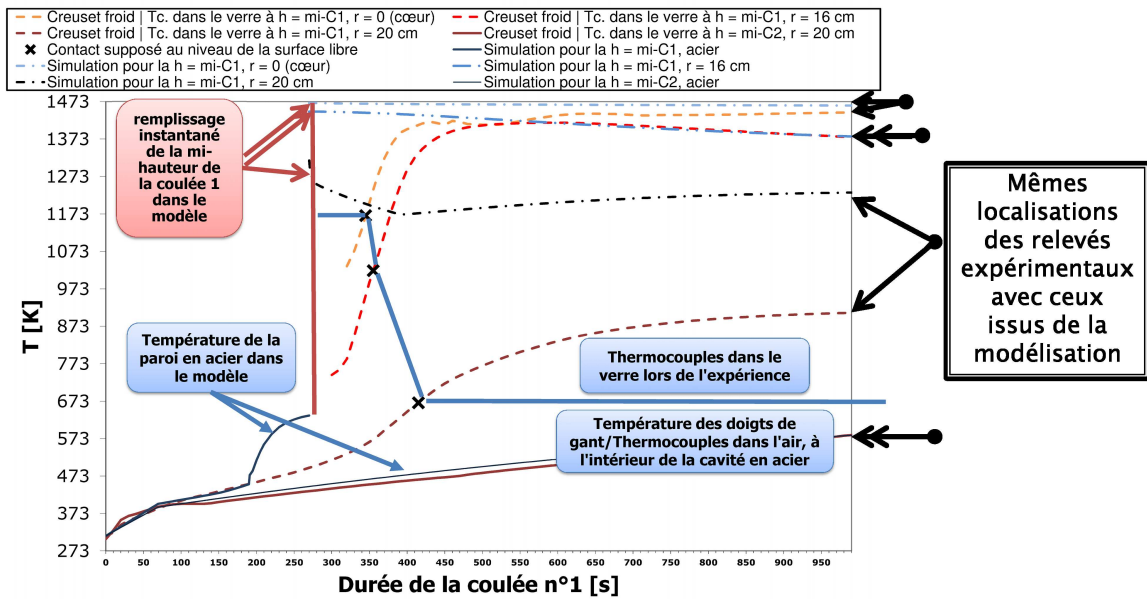


FIG. II- 13 : Confrontation avec le modèle thermique à l'issue de la procédure d'analyse inverse des résultats expérimentaux, ici lors de la coulée n° 1.

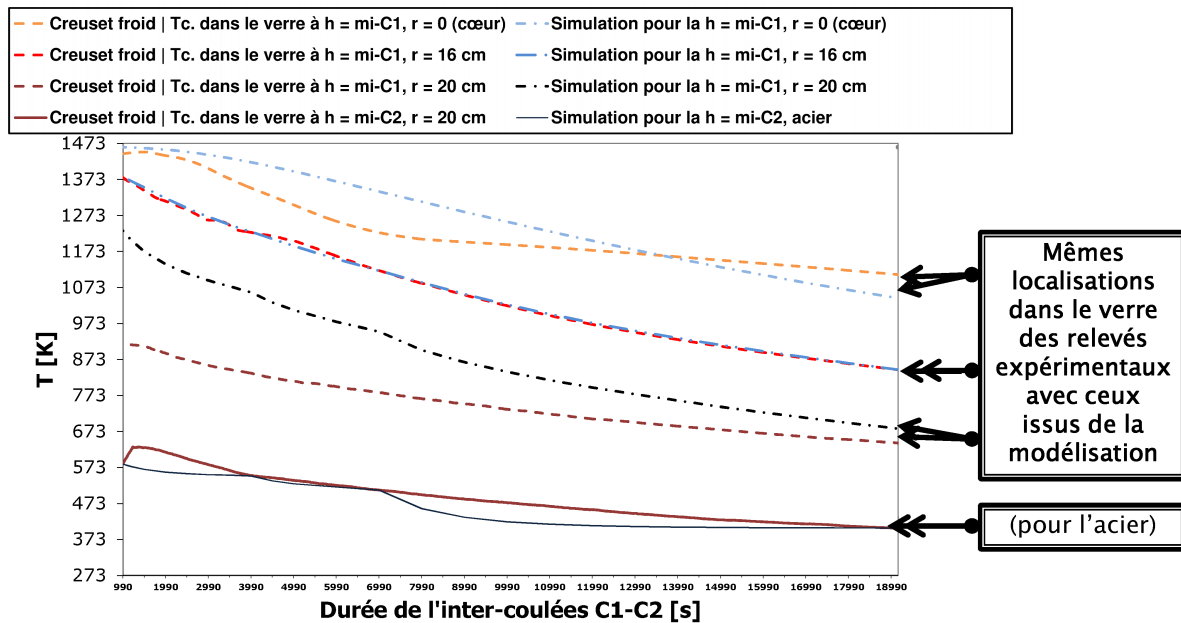


FIG. II - 14 : Inter-coulées C1-C2 : confrontation de l'expérience et de la simulation thermique à l'issue de l'analyse inverse.

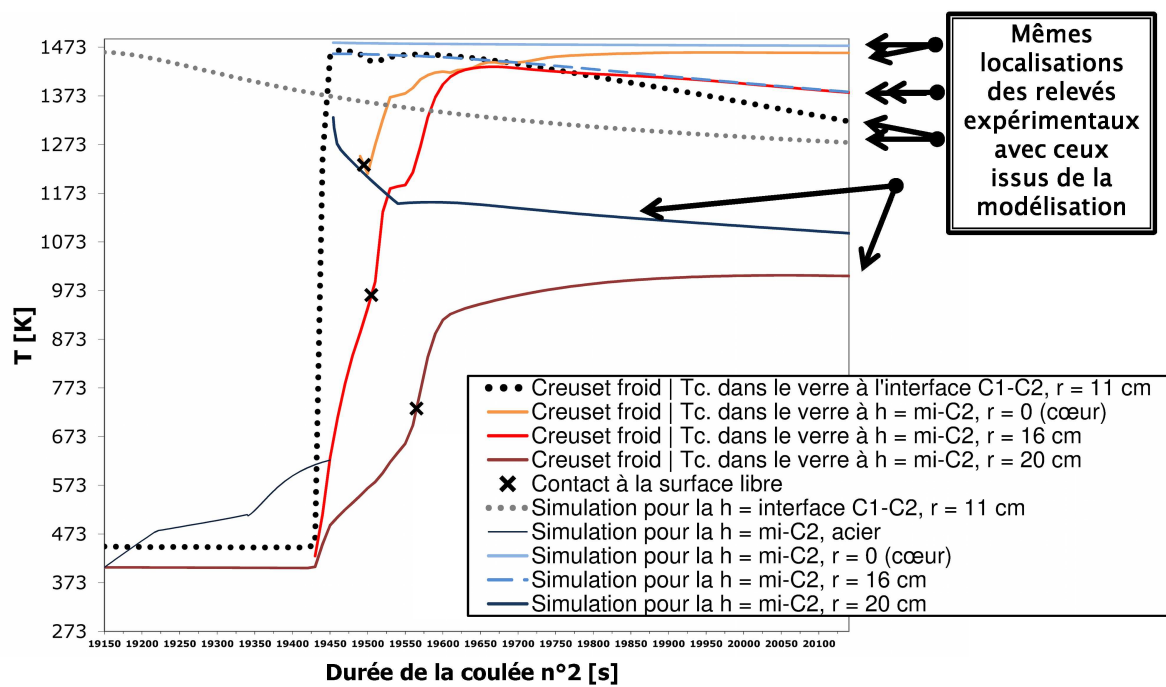
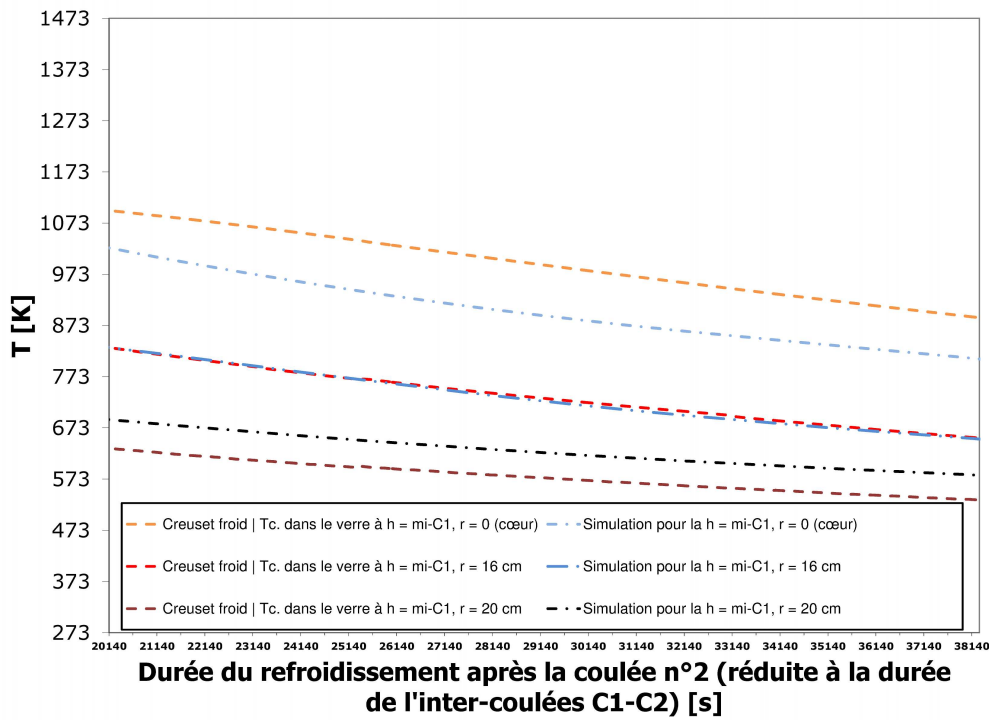
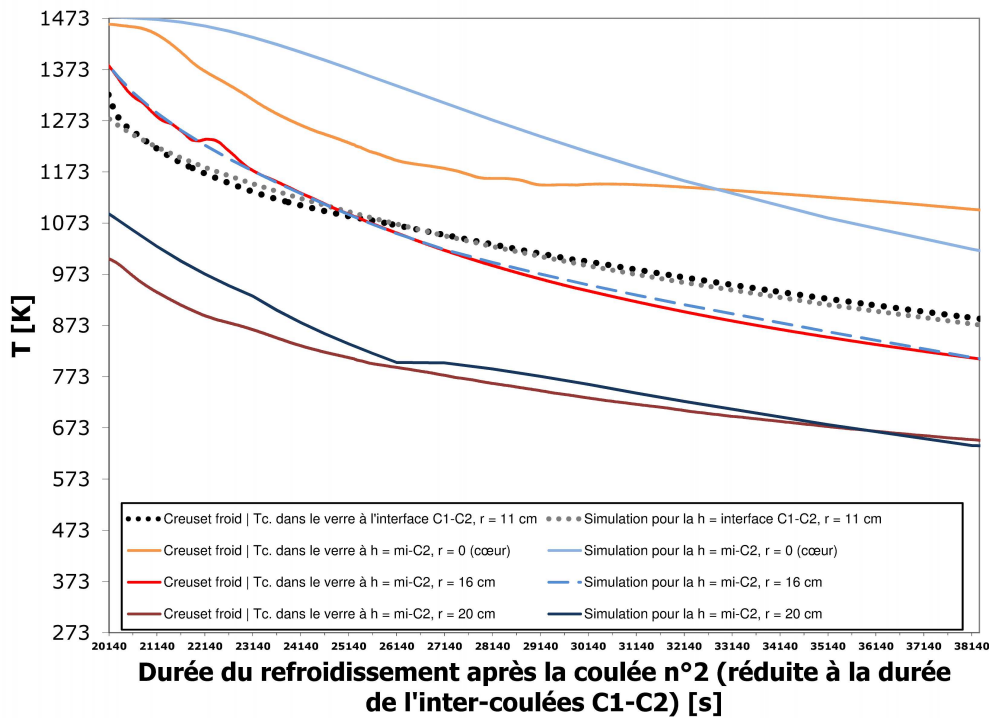


FIG. II - 15 : Coulée n° 2 : confrontation de l'expérience et de la simulation thermique à l'issue de l'analyse inverse.

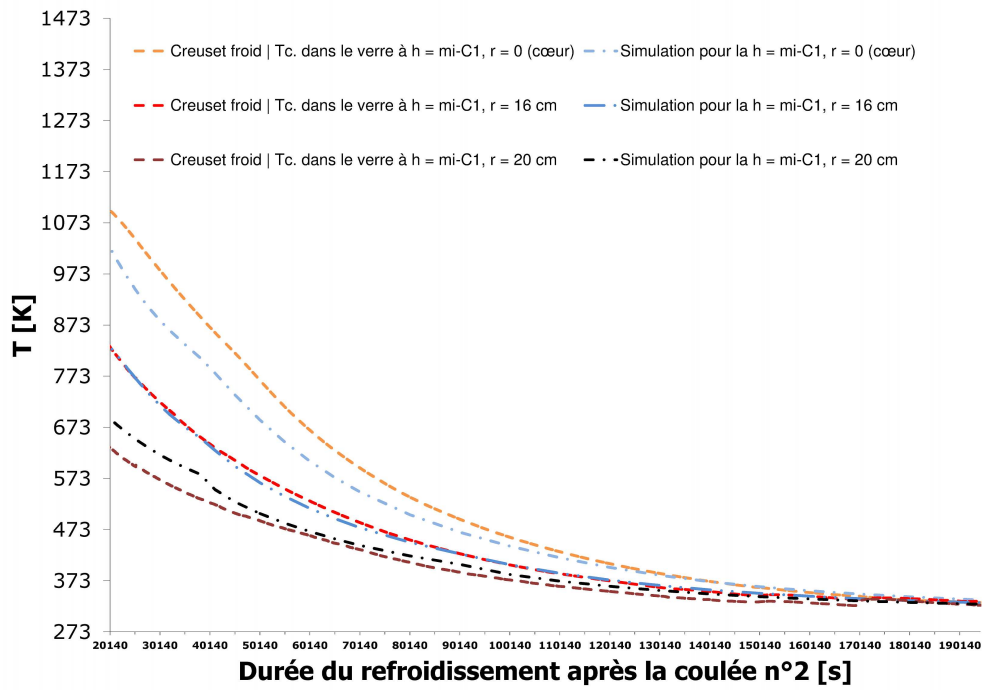


(a) Coulée n° 1

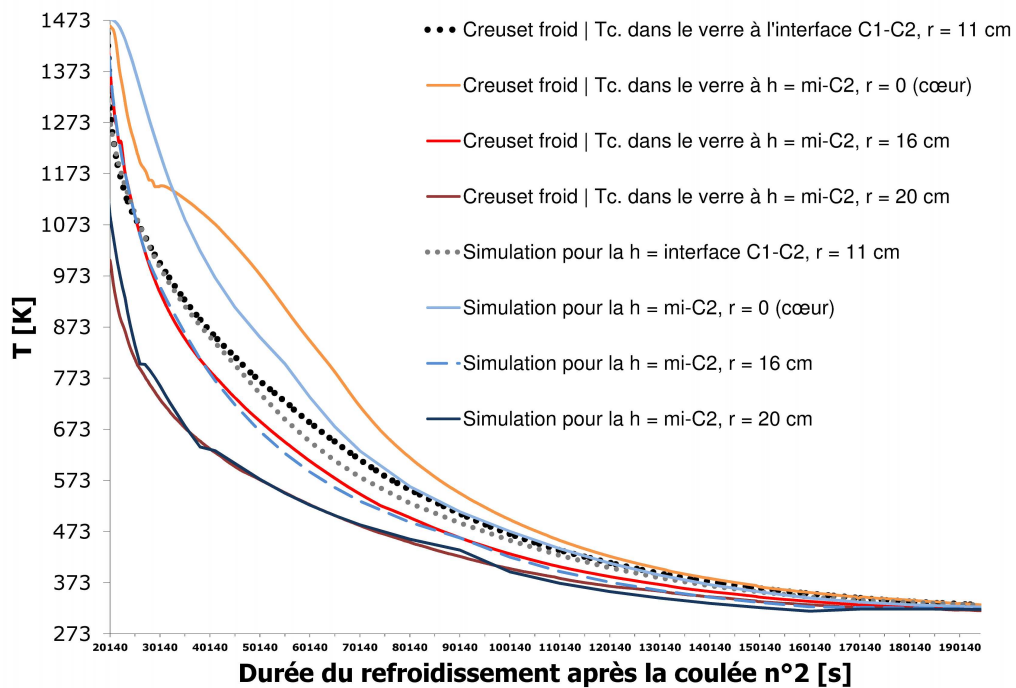


(b) Coulée n° 2

FIG. II - 16 : Confrontation de l'expérience et de la simulation thermique à l'issue de l'analyse inverse, ici immédiatement après la fin de la deuxième coulée, et pendant un temps de l'ordre de celui de l'inter-coulées (zoom initial sur le refroidissement complet en post-coulées, voir à la figure suivante).



(a) Coulée n° 1



(b) Coulée n° 2

FIG. II - 17 : Refroidissement complet en post-coulées, confrontation expérience/simulation thermique à l'issue de l'analyse inverse.

## II.3 Relaxation

Dorénavant, tout le protocole de modélisation thermique est en place pour permettre la simulation thermique des procédés de vitrification dans un colis. On connaît l'histoire thermique en chaque point du verre et on va alors pouvoir effectuer le calcul de structure tenant compte de la relaxation structurale du verre (en viscoélasticité non endommageable).

Le calcul de structure est entrepris en adaptant l'algorithme détaillé au § II.3.1 ci-dessous avec les propriétés du verre et de l'acier définies au § II.3.2 page 64.

### II.3.1 Loi de comportement en relaxation

Les principes du modèle de TNM (introduits au § I.3 page 24) sont portés aux modèles FE par Markovsky et Soules [MS84] et Soules *et al.* [SBR<sup>+</sup>87]. Nous appliquons à notre tour cet algorithme que nous présentons et adaptons ici.

Les modèles de recouvrance/relaxation structurale employés concernent, comme on l'a vu, la relaxation du volume spécifique «  $M_V$  » (donc de la déformation thermique) et la relaxation des contraintes «  $M_S$  » (à travers la relaxation du module de cisaillement  $G$  uniquement). Soules *et al.* [SBR<sup>+</sup>87] pratiquent par exemple cette modélisation pour un verre trempé. Cette même pratique d'un modèle viscoélastique avec une dépendance en temps pour  $G$  et non pour  $K$  est également rapportée par Ganghoffer [Gan00] qui trouve cette approximation réaliste dans des composites verre-céramique, par Jain et Yi [JY05] et Kong *et al.* [KKC07]. Mais on peut également employer un modèle plus élaboré de relaxation viscoélastique à la dépendance en temps prise en compte à la fois pour  $G$  et pour  $K$ , ce qui est rapporté par exemple pour du verre silico-sodo-calcique par Daudeville et Carré [DC98], Nielsen *et al.* [NOPS10] et Siedow *et al.* [SGLR05]. Pour les verres polymériques, Alcoutlabi *et al.* [AMS03] étudient et passent en revue le rôle de la dépendance en temps du module  $K$  et son influence sur les contraintes résiduelles isotropes.

L'état de relaxation structurale, obtenu à travers  $T_f$ , quantifie l'avancée de la relaxation structurale en fonction de l'histoire thermique  $T(t)$ . La température fictive  $T_f$  est calculée en tout point du volume de verre pour la relaxation du volume  $M_V$ . Cette dernière est caractérisée expérimentalement par une série de Prony à une température de référence (résultant de la construction d'une courbe maîtresse). Ensuite, cette même  $T_f$  et les mêmes paramètres énergétiques  $\Delta h^*$  et de non-linéarité  $x$  du modèle TNM sont appliqués pour estimer la relaxation structurale du module de cisaillement  $M_S$ , mais avec une courbe expérimentale de relaxation (série de Prony) venant d'une autre courbe maîtresse établie pour la relaxation des contraintes.

Les paramètres expérimentaux des séries de Prony que nous utilisons sont fournies au TAB. II-6 page 67. On y joint également les termes énergétiques du modèle TNM ( $\Delta h^*$  et de non-linéarité  $x$ ). Ces derniers n'ont pas été déterminés de manière différente pour chaque relaxation (ce qui est différent de ce qu'on avait introduit précédemment avec une seule  $T_{f,p}$  par propriété). Par rapport à cette hypothèse, il a été rapporté pour 70 verres silicatés du système de verres ternaires albite – anorthite – diopside<sup>‡</sup> une équivalence de ces termes énergétiques de la relaxation du volume et du cisaillement [WK96].

‡. albite(AB) :  $\text{NaAlSi}_3\text{O}_8$  – anorthite(AN) :  $\text{CaAl}_2\text{Si}_2\text{O}_8$  – diopside(DI) :  $\text{CaMgSi}_2\text{O}_6$

L'incrément de déformation thermique (pendant l'incrément de temps concerné du calcul FE) est donné directement par [MS84, SBR<sup>+</sup>87] :

$$\Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{th} = \alpha_g \left( T + \frac{\Delta T}{2} \right) \times \Delta T + [\alpha_l(T_f) - \alpha_g(T_f)] \times \Delta T_f \quad (11-4)$$

avec  $\alpha_g(T')$  et  $\alpha_l(T')$  les coefficients de dilatation linéiques du verre solide et liquide respectivement.

L'incrément qui met à jour l'état de relaxation structurale ( $\Delta T_f$ ) vient de l'algorithme itératif suivant (qui suit les incréments du calcul, supposant  $t = 0$  au tout premier incrément, le temps étant par convention  $t$  au début de l'incrément et  $t + \Delta t$  à la fin de l'incrément) [MS84] :

$$T_f(t + \Delta t) = \sum_{i=1}^{n^V} c_i^V T_{f,i}(t + \Delta t) \quad (11-5a)$$

avec :

$$T_{f,i}(t + \Delta t) = \frac{T_{f,i}(t) + \Delta t \times \frac{T(t + \Delta t)}{\tau_i^V(t + \Delta t)}}{1 + \frac{\Delta t}{\tau_i^V(t + \Delta t)}} \quad (11-5b)$$

avec :

$$\tau_i^V(t + \Delta t) = \tau_{i,réf}^V \times \exp \left[ -\frac{\Delta h^*}{R} \left( \frac{1}{T_{réf}} - \frac{x}{T(t + \Delta t)} - \frac{1-x}{T_f(t)} \right) \right] \quad (11-5c)$$

et :

$$T_{f,i}(0) = T_0 \quad (11-5d)$$

Ici, en dehors des variables explicitées aux Éqs. 1-2 à 1-3 page 26, nous avons  $T_{f,i}(t')$  la température fictive partielle (de la propriété  $V$ ), et  $T_0$  la température initiale dans le verre.

Nous appliquons ensuite la loi viscoélastique (d'hérédité linéaire – cf. une autre application à l'Éq. 11-12 page 70 pour en voir la forme), fournie par Soules *et al.* [SBR<sup>+</sup>87] mais sans la prise en compte de leurs contraintes partielles. En effet, une telle loi suppose en hypothèse une invariance des modules élastiques envers la température (ou l'endommagement...) qui n'est pas valide dans notre cas (on parle de *translational invariance*, voir par exemple Fielding *et al.* [FSC00]).

Après discrétisation, la loi de comportement qui fait intervenir les deux relaxations devient donc de façon locale (en notation intrinsèque) :

$$\Delta \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{K}^e \left( T \left( t + \frac{\Delta t}{2} \right), \left( t + \frac{\Delta t}{2} \right) \right) : (\Delta \boldsymbol{\varepsilon} - \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{th} \mathbf{1}) \quad (11-6)$$

où  $\boldsymbol{\sigma}$ ,  $\boldsymbol{\varepsilon}$  et  $\mathbf{1}$  sont respectivement les tenseurs d'ordre 2 des contraintes de Cauchy, de la déformation et unité ;  $\mathbf{K}^e$  est le tenseur de rigidité d'ordre 4, où interviennent les modules de viscoélasticité

$K(T)$  et  $G(T, t)$ , ce dernier étant tel que :

$$G\left(T\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right), \left(t + \frac{\Delta t}{2}\right)\right) = G\left(T\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right), 0\right) \times M_S\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) \quad (\text{II-7a})$$

avec  $G\left(T\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right), 0\right)$  le module de cisaillement non relaxé (instantané). Cette forme suppose implicitement un module  $G(T, \infty)$  très petit (proche de 0) devant le module instantané et elle dépend de la fonction de réponse  $M_S$  suivante :

$$M_S\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) = \sum_{k=1}^{n^S} c_k^S \exp\left[-\frac{t + \frac{\Delta t}{2}}{\tau_k^S\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right)}\right] \quad (\text{II-7b})$$

où :

$$\tau_k^S\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) = \tau_{k,\text{réf}}^S \times \exp\left[-\frac{\Delta h^*}{R} \left(\frac{1}{T_{\text{réf}}} - \frac{x}{T(t + \Delta t)} - \frac{1-x}{T_f(t + \Delta t)}\right)\right] \quad (\text{II-7c})$$

Pendant cette analyse, les incréments de temps ne doivent pas être trop grossiers, pour éviter des erreurs d'intégration telles que celles mentionnées par Chambers et Becker [CB86] et qui pourraient concerner des intégrales telles que celles exposées dans la théorie du modèle TNM à l'Éq. 1-2 page 26. Hodge [Hod94] a également discuté de ces approximations et proposait des incréments de temps tels que  $\Delta T_f < 1$  K. Soules *et al.* [SBR<sup>+</sup>87] ont proposé la règle empirique suivante :

$$\frac{\Delta t}{\tau_k^S(t)} \leq 0,4 \quad (\text{II-8})$$

En ce qui nous concerne dans les colis, nous n'avons pas imposé de telles règles comme la transition n'arrive pas au même moment pendant le procédé, et rendrait donc le calcul trop segmenté en temps pour des temps de calcul raisonnables. Néanmoins, nous avons en place des restrictions sur les  $\Delta T$  et sommes attentifs aux artefacts (discontinuités) du calcul des  $T_f$  selon la carte des histoires thermiques, qui est assez continue sur le bloc de verre (car la conductivité thermique l'est).

### II.3.2 Propriétés thermomécaniques et de relaxation structurale

Les propriétés thermomécaniques nécessaires au calcul de structure sont données par Moncouyoux *et al.* [MAL91] pour l'acier inoxydable au TAB. II-4 page ci-contre.

Pour le verre SON68 solide, le laboratoire LMS<sup>§</sup>, partenaire du programme, a déterminé les paramètres exposés pour le verre solide au TAB. II-5 page 66.

Pour le verre SON68 liquide, les propriétés élastiques présentées au TAB. II-5 page 66 proviennent de la continuité des résultats du LMS en termes de module d'élasticité en compressibilité iso-statique ( $K$ ), combinée avec les solutions techniques formulées dans la documentation sur la

§. Laboratoire de mécanique des solides, UMR CNRS 7649 – École Polytechnique, Palaiseau



TAB. II - 4 : Propriétés thermomécaniques de l'acier inoxydable [MAL91].

$T$ [K]	298	700	811	922	977	1089	1144
$\alpha$ [ $10^{-6}/K$ ]	◄◄◄ ◄◄◄ ◄◄◄ ◄◄◄ ◄◄◄ ◄◄◄ 19,5 ►►► ►►► ►►► ►►► ►►►						
Module d'Young $E$ [GPa]	190	159	156	150	146	137	132
Coefficient de Poisson $\nu$	◄◄◄ ◄◄◄ ◄◄◄ ◄◄◄ ◄◄◄ ◄◄◄ 0,3 ►►► ►►► ►►► ►►► ►►►						

sous-routine UMAT utilisée dans Abaqus (pour les liquides incompressibles). Enfin, le coefficient de dilatation linéique du verre liquide à  $76,2 \times 10^{-6}/K$  est quant à lui issu de l'analyse graphique au-delà de la transition vitreuse (entre 790 et 850 K) d'une courbe de dilatométrie avec une montée en température à 5 K/min qui permet également l'évaluation  $T_g = 775$  K (note technique interne au CEA).

Les propriétés de relaxation structurale sont issues de celles d'un verre silicaté sodo-calcique dont les deux séries de Prony de  $M_S$  et  $M_V$  ont été déterminées pour des temps de relaxation répartis sur au moins 3 ordres de grandeur, et utilisées dans un cas de verre trempé par Soules *et al.* [SBR<sup>+</sup>87]. Les propriétés de relaxation sont données au TAB. II - 6 page 67. Lorsqu'on utilise un modèle simplifié en paramètres de température et en géométrie du conteneur (acier inoxydable absent), les termes énergétiques pour le modèle de TNM sont de  $\Delta h^*/R = 76\ 200$  K et  $x = 0,5$  (verre silico-sodo-calcique [SBR<sup>+</sup>87]). Pour le verre SON68 simulé dans un conteneur CSD-V,  $\Delta h^*/R = 79\ 500$  K et  $x = 0,53$  d'après les énergies d'un verre borosilicaté (*crown*) déterminées par Narayanaswamy [Nar71].

Nous recherchons une certaine homogénéité des paramètres de ces relaxations dans le domaine des verres borosilicatés qui nous concerne, mais au final, à défaut d'en avoir trouvé des complètes, ce sont des propriétés de verres silicatés sodo-calciques que nous utilisons. La mise en perspective partielle de cette hypothèse de calcul sera illustrée au paragraphe § II.3.3 page 68 en étudiant des résultats de relaxation du verre borosilicaté SON68.

TAB. II - 5 : Propriétés thermomécaniques du verre SON68, en partie de [DDC<sup>+</sup>10].

Phase	solide						liquide
$T$ [K]	293	373	473	573	673	773	toute $T$
$\alpha_g$ ou $\alpha_l$ [ $10^{-6}/K$ ]	8,31	8,31	8,31	8,31	9,13	9,13	76,2
Module d'Young $E$ [GPa]	92,8	89,3	88,3	87,2	86,1	39,8	$6,625 \times 10^{-4}$
Coefficient de Poisson $\nu$	0,22	0,245	0,21	0,215	0,24	0,2	0,499995

TAB. II-6 : Fonctions de réponse de la relaxation d'un verre, utilisées dans les calculs, de Soules *et al.* [SBR<sup>+</sup>87]. Les termes  $c_i^V$  avaient leur somme mal normalisée à 1, ce que nous avons corrigé. Les paramètres  $M_S$  proviennent de Kurkjian [Kur63]. Notons que le 6<sup>e</sup> temps de relaxation est donné avec une erreur dans la référence correspondante :  $\tau_6^S = 107\,500$  s au lieu de  $\tau_6^S = 222\,222$  s. La différence est importante, néanmoins l'influence de cette relaxation reste mineure sur le calcul de structure.

Série de Prony (ici $n^V = n^S$ )	Fonctions de réponse des relaxation à $T_{\text{réf}} = 746,15$ K			
	$M_V$		$M_S$	
Premier terme	$c_1^V = 0,05640$	$\tau_1^V = 27\,070$ s	$c_1^S = 0,067$	$\tau_1^S = 10,75$ s
$i, k = 2$	$c_2^V = 0,51010$	$\tau_2^V = 121\,300$ s	$c_2^S = 0,053$	$\tau_2^S = 155$ s
$i, k = 3$	$c_3^V = 0,21745$	$\tau_3^V = 329\,700$ s	$c_3^S = 0,086$	$\tau_3^S = 1\,406$ s
$i, k = 4$	$c_4^V = 0,13270$	$\tau_4^V = 896\,300$ s	$c_4^S = 0,230$	$\tau_4^S = 10\,150$ s
$i, k = 5$	$c_8^V = 0,04101$	$\tau_5^V = 2\,436\,000$ s	$c_5^S = 0,340$	$\tau_5^S = 46\,080$ s
Dernier terme $i, k = 6$	$c_6^V = 0,04234$	$\tau_6^V = 10\,920\,000$ s	$c_6^S = 0,224$	$\tau_6^S = 107\,500$ s

### II.3.3 Essais de relaxation

Des essais de relaxation ont été menés au laboratoire LMS<sup>¶</sup>, partenaire du programme, sur des échantillons en flexion biaxiale (éprouvettes de 4 cm de diamètre, 2 mm d'épaisseur) dont le protocole expérimental suit la norme ASTM C1499–05. Ces essais sont effectués à des températures constantes (initiales et de maintien). Les courbes obtenues par le LMS présentent le niveau de contrainte en fonction du temps, et sont reproduites sur la FIG. II - 18 page suivante. Ces températures de maintien sont 643, 693, 733 et 773 K. Des séries de Prony à deux termes avaient été proposées pour chaque  $T$  afin de caractériser les relaxations observées.

Pour déterminer les caractéristiques de relaxation de ces échantillons, nous nous fondons sur l'évolution de leur état interne de relaxation structurale telle que prise en compte dans l'approche du modèle de TNM, par la valeur  $T_f$  (température fictive pour la relaxation du module de cisaillement étudiée ici).

Nous considérons donc que les éprouvettes maintenues aux températures des expériences de relaxation menées voient leur structure interne évoluer de sorte à être à une relaxation totale avant l'essai de relaxation ( $T_f = T$ ). C'est particulièrement vrai pour les essais de relaxation à haute température (773 K) mais peu crédible pour les essais à plus basse température (643 K) qui devraient en toute rigueur conserver la température fictive initiale, inconnue a priori à l'issue de l'ensemble des traitements thermiques appliqués. Lorsque  $T_f \neq T$  le modèle fait intervenir le paramètre  $x$  de non-linéarité du verre qui permet par exemple de prendre en compte des chutes de températures sur la structure interne du verre.

Par contre, à haute température, même si on suppose davantage connu l'état interne de relaxation structurale, l'essai de relaxation devient bien plus rapide et voit donc une baisse de fiabilité de certaines hypothèses qu'on va formuler, ainsi que de la définition dans le temps des mesures. Il apparaît que, même si le verre devient un liquide surfondu ( $T_f = T$ ) avant le commencement des essais, on suppose que la durée du chargement initial des essais est suffisamment courte pour qu'au début de la sollicitation mécanique (mesurant la relaxation) on a bien la réponse immédiate de l'état vitreux, solide.

Dans ces cas où  $T_f = T$ , pour ces éprouvettes où la température est maintenue à  $T$ , cela implique donc vis-à-vis du modèle de TNM de ne s'intéresser qu'à l'énergie d'activation totale  $\Delta h^*$ , ce que nous faisons dans cette partie.

Remarquons que le même type d'approche de relaxation structurale expérimentale pourrait être entrepris sur des essais de dilatométrie pour  $M_V$ , mais comme cela n'a pas été fait nous n'utiliserons pas les résultats partiels de cette partie dans le modèle (au sens de paramètres expérimentaux du verre SON68 uniquement pour  $M_S$ ). Notons également que des auteurs tels que Hodge [Hod94] discutent de protocoles efficaces expérimentalement pour déterminer les paramètres du modèles de TNM-KAHR, ce que nous n'avons pas suivi ici.

---

<sup>¶</sup>. Laboratoire de mécanique des solides, UMR CNRS 7649 – École Polytechnique, Palaiseau

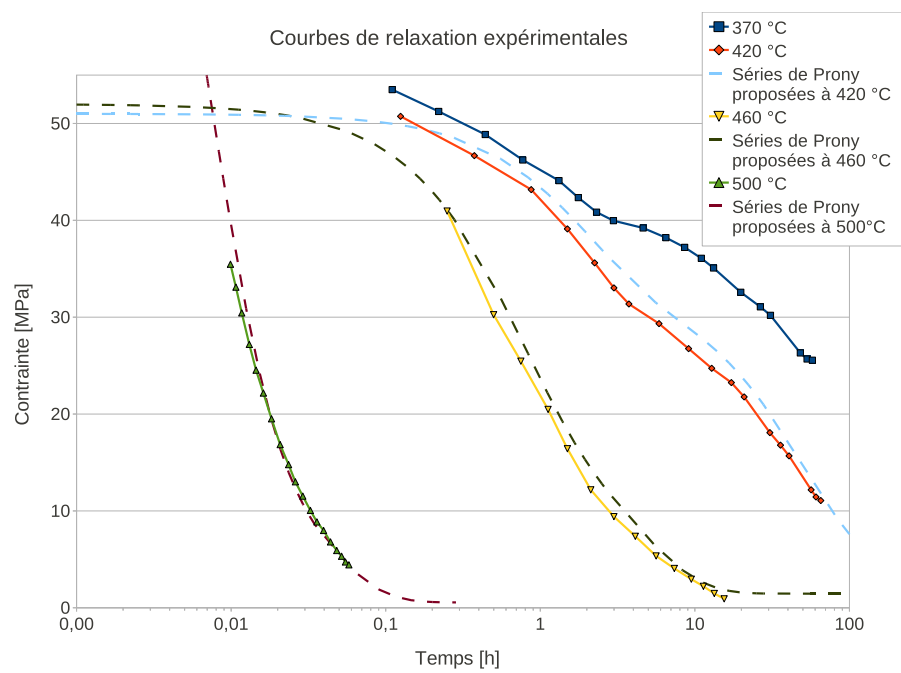


FIG. II - 18 : Courbes de relaxation expérimentales (arbitrairement discrétisées dans le domaine de mesure) et séries de Prony correspondantes proposées.

### II.3.3.1 Changements de variable

**i) Changement en temps réduit** Comme on vient de le voir, le traitement isotherme impose dans le modèle TNM un temps réduit  $\xi$  (cf. Éq. 1-2a page 25) qui se simplifie en :

$$\xi(t) = t \times \exp \left[ \frac{\Delta h^*}{R} \times \left( \frac{1}{T_{\text{réf}}} - \frac{1}{T} \right) \right] = t \times \text{constante} \quad (\text{II-9})$$

**ii) La relaxation viscoélastique**  $G$  avec sa fonction de réponse  $M_S$  est une relaxation qui se propage au module d'Young et au coefficient de Poisson sous les formes suivantes (tendant respectivement vers 0 et 0,5 à  $t = \infty$ ) :

$$E(T, t) = \frac{9K(T) \times G(T, 0) \times M_S(t)}{3K(T) + G(T, 0) \times M_S(t)} \quad (\text{II-10})$$

$$\nu(T, t) = \frac{3K(T) - 2G(T, 0) \times M_S(t)}{2(3K(T) + G(T, 0) \times M_S(t))} \quad (\text{II-11})$$

Pour information quant à l'état de relaxation structurale des éprouvettes, la fabrication des barreaux de verre SON68 desquels sont issus les échantillons a été effectuée selon les traitements thermiques suivants (note interne du CEA) :

- ◇ Montée en 3 h à 1423 K.
- ◇ Stabilisation de la fusion à 1423 K pendant 1 h–1 h 30.
- ◇ Coulée dans un creuset en graphite.
- ◇ Recuit d'une heure à 793 K.
- ◇ Descente en température de 10 K/h jusque 763 K.
- ◇ Descente en température jusqu'à température ambiante en suivant l'inertie du four.

Ensuite, pour les essais de relaxation correspondants sur la figure II-18 page précédente, les éprouvettes obtenues par découpe des barreaux traités thermiquement sont ensuite considérées comme directement montées à la température d'essai. Pour connaître la température fictive  $T_f$  du verre à l'issue de la fabrication des barreaux de verre, d'après cet historique thermique, en tenant compte en plus du recuit ultérieur, il faudrait connaître les propriétés de relaxation que nous cherchons à évaluer ici, ce qui n'est pas possible. Notons de plus que les constantes mécaniques nécessaires dans la norme à l'obtention de figure II-18 page précédente étaient prises aux valeurs instantanées ( $E$ ,  $\nu$  non relaxés).

En pratique, l'essai de relaxation comprend une courte période de chargement de durée  $t_L$  et jusqu'à l'état de contrainte qu'on nomme ici  $\sigma_{\text{Haut}}$  avant un maintien en déformation (en partant à  $t = 0$  d'un état libre de toute contrainte et toute déformation).

On peut écrire la loi d'évolution viscoélastique sous une forme de (*linear hereditary stress-strain law*) :

$$\sigma(t) = \int_0^t Y(t-\xi) \frac{d\varepsilon(\xi)}{d\xi} d\xi \quad (\text{II-12})$$

avec  $Y(t) = E(T, 0)f(t)$  et  $f(t)$  la fonction de réponse de la relaxation de  $E$  au sens de la propriété

viscoélastique  $S$  introduite ( $f(t)$  étant adimensionnel entre 0 et 1).

En supposant une déformation linéaire lors du chargement initial, et des phénomènes de relaxation qui ne sont pas pris en compte pendant ce temps  $t_L$  que dure le chargement, il vient :

$$\sigma(t) = t \frac{\sigma_{Haut}}{t_L}, \text{ pour tout } t \leq t_L \quad (\text{II-13})$$

Et pour tout  $t > t_L$  en supposant une déformation constante après  $t_L$  :

$$\sigma(t) = \int_0^t Y(t-\xi) \frac{d\epsilon(\xi)}{d\xi} d\xi = \int_0^{t_L} Y(t-\xi) \frac{\sigma_{Haut}}{E(T,0)t_L} d\xi \quad (\text{II-14})$$

d'où :

$$\sigma(t) = \frac{\sigma_{Haut}}{E(T,0)t_L} \times \int_0^{t_L} Y(t-\xi) d\xi \approx \frac{\sigma_{Haut}}{E(T,0)t_L} \times \frac{Y(t) + Y(t-t_L)}{2} \times t_L \quad (\text{II-15})$$

En supposant enfin que  $t_L$  tende vers 0, on obtient :

$$\sigma(t) = \sigma_{Haut} \times f(t), \text{ pour tout } t > 0 \quad (\text{II-16})$$

Or :

$$f(t) = \frac{\sigma(t)}{\sigma_{Haut}} = \frac{E(T,t)}{E(T,0)} = M_S(t) \times \frac{3K(T) + G(T,0)}{3K(T) + G(T,0) \times M_S(t)} \quad (\text{II-17})$$

Les  $\frac{\sigma(t)}{\sigma_{Haut}} = f(t)$  sont a priori fournies par les courbes de relaxation du LMS. On en déduit alors le changement de variable suivant en ordonnée, en inversant l'Éq. II-17 :

$$M_S(t) = \frac{1}{\frac{\sigma_{Haut}}{\sigma(t)} + \frac{G(T,0)}{3K(T)} \left( \frac{\sigma_{Haut}}{\sigma(t)} - 1 \right)} \quad (\text{II-18})$$

En fait,  $\sigma_{Haut}$  est calculé pour des paramètres mécaniques indépendants du temps ; afin de rétablir des modules élastiques corrects dans le changement de variable (qui évolue alors un peu), nous allons réintroduire les équations utilisées dans la norme d'essai, au paragraphe suivant, et améliorer ce changement de variable.

**iii) ASTM C1499 et changement de variable** Afin de relier les résultats expérimentaux avec les équations du modèle, nous avons extrait certaines équations de la norme ASTM C1499. L'utilisation de cette norme de flexion biaxiale implique que l'état de relaxation est le même partout dans l'échantillon. En particulier, quel que soit le champ de contrainte,  $E$  et  $\nu$  sont supposés être dans le même état de relaxation interne. De même, les histoires thermiques doivent être identiques à cœur et à la surface des échantillons (même  $T_f$ ).

La nomenclature utilisée ici (comprenant les longueurs caractéristiques de la géométrie de l'installation) est la suivante :

- $\delta$  déflexion de l'échantillon [mm]
- $D_D$  ou  $D$  diamètre de l'échantillon [mm]
- $D_L$  diamètre de l'anneau de chargement [mm]
- $D_S$  diamètre du support annulaire [mm]
- $E(T, t)$  module d'Young [MPa]
- $F$  force appliquée à l'échantillon [N]
- $G(T, t)$  module de cisaillement [MPa]
- $G_0 = G(T, 0)$
- $h$  épaisseur de l'échantillon [mm]
- $K(T)$  ou  $K$  module d'élasticité isostatique [MPa]
- $\nu(T, t)$  coefficient de Poisson
- $\sigma_f$  contrainte maximale dans l'échantillon (*equibiaxial flexural strength*) [MPa]

La géométrie suivante est employée en pratique pour les essais de relaxation :

$$\left\{ \begin{array}{l} D_L \quad 10 \text{ mm} \\ D_S \quad 30 \text{ mm} \\ h \quad 2 \text{ mm} \\ D_D \quad 40 \text{ mm} \end{array} \right.$$

La déflexion de l'échantillon, mesurée, s'écrit :

$$\delta = \frac{3F \times (1 - [\nu(T, t)]^2) \times D_L^2}{8\pi \times E(T, t) \times h^3} \left( \frac{D_S^2}{D_L^2} \left[ 1 + \frac{(1 - \nu(T, t)) \times (D_S^2 - D_L^2)}{2(1 + \nu(T, t)) \times D_D^2} \right] - \left( 1 + \ln \frac{D_S}{D_L} \right) \right) \quad (II - 19)$$

Une transformation de variable fondée sur cette formule doit permettre de récupérer  $M_S$  quelles que soient la température, la force mesurée et enfin la déflexion imposée. Nous n'avons pas validé cette démarche dans la suite du calcul pour déterminer  $M_S$  car nous nous sommes reposés sur l'exploitation des résultats obtenus par le LMS en termes de contrainte équibiaxiale en utilisant directement, après un premier calcul, les courbes de résultats présentées sur la figure II - 18 page 69.

On utilise ainsi plutôt la formule de la contrainte équibiaxiale à rupture :

$$\sigma_f = \frac{3F}{2\pi h^2} \left[ \frac{(1 - \nu(T, t)) \times (D_S^2 - D_L^2)}{2D_D^2} + (1 + \nu(T, t)) \times \ln \frac{D_S}{D_L} \right] \quad (II - 20)$$

L'évolution de  $\sigma(t)$  avec  $\nu(T, t)$  et  $F(t)$  est donc étendue en dehors du phénomène de rupture. En calculant avec  $\nu(T, t) = \nu(T, 0)$  cette contrainte, à déflexion  $\delta$  imposée (pour pratiquer un essai de relaxation), on obtient les courbes  $\sigma(t)$  de la figure II - 18 page 69 – notées dorénavant



$\sigma^{LMS}(t)$ . En se remplaçant dans les hypothèses d'hérédité linéaire de la viscoélasticité, avec la même approche qu'au § ii) page 70, on a toujours :

$$f(t) = \frac{\sigma(t)}{\sigma_{Haut}} = \frac{E(T, t)}{E(T, 0)} = M_S(t) \times \frac{3K(T) + G(T, 0)}{3K(T) + G(T, 0) \times M_S(t)} \quad (II-21)$$

mais avec l'expression corrigée de :

$$\sigma(t) = \sigma^{LMS}(t) \frac{\frac{(1-\nu(T, t)) \times (D_S^2 - D_L^2)}{2D_D^2} + (1 + \nu(T, t)) \times \ln \frac{D_S}{D_L}}{\frac{(1-\nu(T, 0)) \times (D_S^2 - D_L^2)}{2D_D^2} + (1 + \nu(T, 0)) \times \ln \frac{D_S}{D_L}} \quad (II-22)$$

Comme  $\sigma_{Haut}$  est supposé atteint avant toute relaxation à  $t = 0$ , sa valeur reste correcte. Et il vient en substituant l'Éq. II-22 dans l'Éq. II-21 que :

$$M_S = \frac{1}{\frac{\sigma_{Haut}}{\sigma^{LMS}(t)} + \frac{4G_0 \times (\frac{\sigma_{Haut}}{\sigma^{LMS}(t)} - 1) \times (D_S^2 - D_L^2)}{3K \times (6D_D^2 \times \ln \frac{D_S}{D_L} + D_S^2 - D_L^2)}} \quad (II-23)$$

Cette relation est valable pour une déflexion imposée constante lors de l'essai et un temps de chargement très court par rapport à la relaxation viscoélastique.

### II.3.3.2 Courbes maîtresses obtenues

Les équations de changement de variable Éq. II-9 page 70 et Éq. II-23 sont utilisées pour tenir compte de la relaxation. On peut alors obtenir des courbes maîtresses de cette relaxation où l'ensemble des séries de résultats sont mis côte à côte afin d'identifier le paramètre examiné du modèle de relaxation ( $\Delta h^*$ ) inconnu a priori mais importants vis-à-vis des changements de variable. Les séries des relaxations sont ainsi toutes rapprochées de façon optimale pour  $\Delta h^*/R$  vers 59 000 K. Ce résultat est présenté sur la figure II-19 page 75.

La courbe maîtresse devant normalement regrouper sur une courbe unique l'ensemble des essais effectués, il est nécessaire d'interpréter les résultats de la figure II-19 page 75. Comme indiqué précédemment, nous ne sommes pas certains de l'hypothèse  $T_f = T$  pour les essais à plus basse température. Nous proposons donc de présenter une nouvelle courbe maîtresse tenant compte d'un rapprochement optimal des séries à haute température seules (773 K et 733 K).

L'intérêt d'une mise en avant de ces températures les plus hautes provient de la connaissance de la transition liquide/solide qui y a lieu (du changement de phase) par l'estimation des températures fictives à ce moment-là, même si le début de la relaxation en devient très imprécis (à des temps courts). Ainsi, n'ayant pas d'information directement pertinente sur la relaxation à long terme du verre, il n'est pas possible de déterminer avec précision la courbe maîtresse aux « basses » températures (donc aux temps réduits les plus courts). Le résultat du rapprochement à « hautes » températures est illustré sur la figure II-20 page 75 ainsi que la figure II-21 page 76 en échelle logarithmique. La courbe maîtresse est obtenue par identification du paramètre matériau  $\Delta h^*/R$  vers 68 000 K.

Les données expérimentales actuellement disponibles sur la relaxation  $M_S$  du verre SON68 ne sont pas suffisantes pour déterminer l'ensemble des paramètres nécessaires au calcul visqueux du verre SON68 dans le code éléments finis. Pour cette raison, nous utilisons les propriétés de relaxation d'un verre silico-sodo-calcique [SBR<sup>+</sup>87], tant du point de vue de la relaxation du module de cisaillement (objet des résultats que nous venons d'étudier) que du point de vue de la relaxation du volume massique du verre. La relaxation  $M_S$  de ce verre est représentée par une courbe bien au-dessus des courbes maîtresses obtenues pour le SON68 aux figures précédentes. De plus, l'énergie d'activation de ce verre ( $\Delta h^*/R$  vers 80 000 K) est également supérieure à l'énergie déterminée par l'établissement de la courbe maîtresse de la figure II-20 page suivante (68 000 K). Le verre silico-sodo-calcique en question est donc plus visqueux que le SON68.

Pour pouvoir prendre en compte le comportement complet du verre SON68 à partir des données expérimentales, il conviendrait maintenant de déterminer la tendance de la non-linéarité des sauts en températures (*T-jumps*) par le paramètre de non-linéarité  $x$ . D'autres essais complémentaires sont donc nécessaires pour déterminer ces énergies d'activation et obtenir une forme fiable et étendue de la courbe maîtresse de relaxation (d'ailleurs, tant pour la relaxation du module de cisaillement que de celle du volume massique que nous n'avons pas traitée ici).

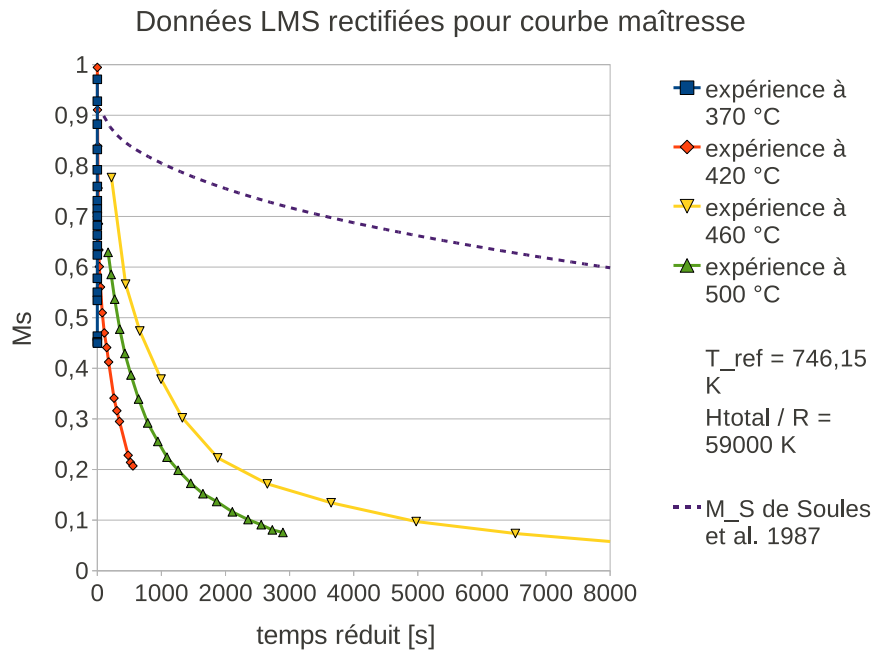


FIG. II - 19 : Courbe maîtresse de rapprochement optimal de toutes les séries d'essais de relaxation, la courbe maîtresse en pointillés montre la référence utilisée dans le code de relaxation actuel [SBR<sup>+</sup>87].

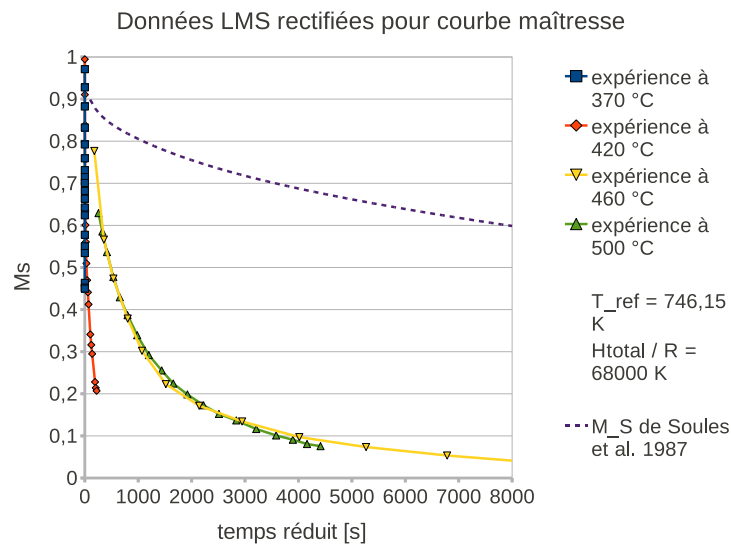


FIG. II - 20 : Courbe maîtresse de rapprochement optimal des deux séries d'essais de relaxation aux plus hautes températures (733 K et 773 K), la courbe maîtresse en pointillés montre la référence utilisée dans le code de relaxation actuel [SBR<sup>+</sup>87].

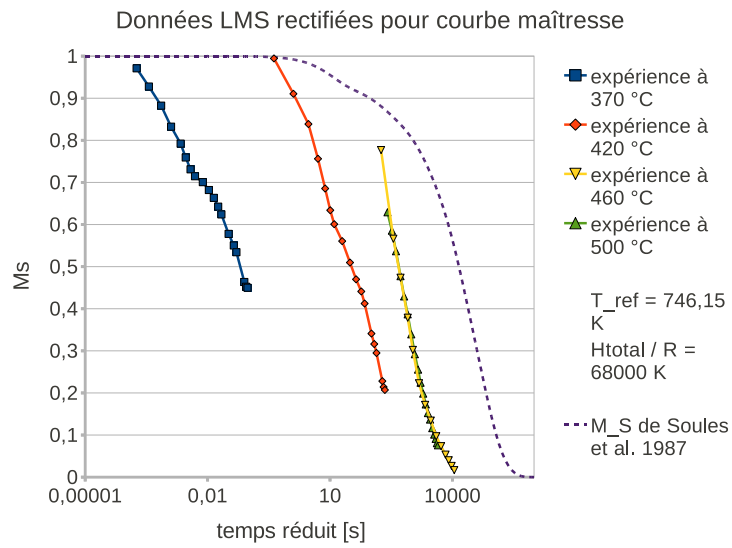


FIG. II-21 : Idem que la figure II-20 mais en échelle de temps logarithmique du temps réduit.

## II.4 Endommagement et fracturation

Le calcul de structure thermomécanique tel qu'établi actuellement donne une simulation plausible du comportement d'un colis expérimental, si on tient compte des relaxations structurales  $M_S$  dans le tenseur de rigidité  $\mathbf{K}$ , et  $M_V$  dans le tenseur des déformations totales (par  $\boldsymbol{\varepsilon}^{th}$ ) :

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{12} \\ \sigma_{13} \\ \sigma_{23} \end{bmatrix} = \llbracket \mathbf{K} \rrbracket_{ijkl} \begin{bmatrix} \varepsilon_{11}^{mécannique} - \varepsilon^{th} \\ \varepsilon_{22}^{mécannique} - \varepsilon^{th} \\ \varepsilon_{33}^{mécannique} - \varepsilon^{th} \\ \gamma_{12}^{mécannique} \\ \gamma_{13}^{mécannique} \\ \gamma_{23}^{mécannique} \end{bmatrix}, ij \text{ et } kl \in \{11, 22, 33, 12, 13, 23\} \quad (\text{II-24})$$

en considérant dorénavant le tenseur total des déformations «  $\boldsymbol{\varepsilon}$  » comme celui qu'on vient d'expliquer ici.

Quand on applique un tel calcul de structure au cas de la thermique expérimentale d'un procédé de vitrification, les phénomènes décrits permettent une bonne prise en compte de la physique initialement. Cependant, il peut arriver qu'elle ne devienne plus valable si la fracturation du verre a lieu. Cette physique supplémentaire à prendre en compte dans le calcul de structure est susceptible d'arriver vers des contraintes internes de l'ordre de 50 MPa en traction, par exemple en rupture de mode I.

Le modèle viscoélastique sans endommagement correspond donc à la modélisation retenue du comportement thermomécanique, plausible jusqu'à un endommagement du bloc de verre. On le nomme modèle « M0 ». Le modèle de Sun et Khaleel [SK04], qu'on appelle dorénavant modèle « M1 » ou « SK » (il a été introduit au § I.4.2 page 29) peut ensuite prendre le relais du modèle M0 à l'initiation de l'endommagement. Il superpose alors au comportement viscoélastique du verre un comportement de CDM.

À partir du § II.4.2 page 80 à venir, nous avons modifié le modèle SK après des prises en compte diverses relatives à la physique de ce modèle, jusqu'au modèle noté « M4 » que nous utilisons dans les résultats présentés au chapitre III page 98.

L'ensemble de ces modèles nécessitent la détermination des paramètres  $C_1$  et  $C_2$  que nous abordons succinctement dans la construction des modèles M2–M4 (et plus spécifiquement en annexe A page 152). Pour la réactualisation de l'endommagement dans tous ces modèles, nous avons besoin des seuils  $\sigma_{seuil}$ ,  $\sigma_{critique}$ ,  $\tau_{seuil}$  et  $\tau_{critique}$  qui sont conservés à l'identique sur l'ensemble de ces modèles (ce sont des paramètres matériau), et dont la détermination depuis l'expérience est abordée au § II.4.1.

### II.4.1 Détermination des contraintes seuil et critique

En mode I de rupture, afin de connaître les paramètres  $\sigma_{seuil}$  et  $\sigma_{critique}$ , la statistique de Weibull a été déterminée en flexion biaxiale sur des éprouvettes de verre SON68 (de 4 cm de diamètre et

2 mm d'épaisseur) par le LMS <sup>||</sup>, laboratoire partenaire du programme.

Cette statistique, illustrée à la figure II - 22 page suivante a été appliquée sur 12 échantillons ayant rompu conformément aux préconisations de la norme ASTM C1499, et la courbe de régression a été déterminée pour ces échantillons afin d'obtenir la probabilité de rupture du verre en fonction du niveau de contrainte  $\sigma_f$ .

Le choix des contraintes s'est ensuite effectué de la sorte :

- ◇  $\sigma_{seuil} = 41,6$  MPa, correspondant à une probabilité de rupture à 5 %,
- ◇  $\sigma_{critique} = 64,1$  MPa, correspondant à une probabilité de rupture à 50 %.

Quant à l'endommagement de mode II, nous n'avions pas à disposition de statistique de type Weibull, néanmoins le travail d'Ougier-Simonin [OS10, OSFG<sup>+</sup>11] au LG<sup>\*\*</sup>, laboratoire partenaire du programme, recense un grand nombre d'événements acoustiques liés à la fissuration sous sollicitation mécanique en cisaillement (sous presse triaxiale). Les éprouvettes correspondantes sont cylindriques, en verre SON68, de 4 cm de diamètre pour 8 cm de haut.

Pour la contrainte de cisaillement seuil «  $\tau_{seuil}$  » nous posons l'hypothèse que l'endommagement démarre globalement avec les premiers événements acoustiques caractérisés. Pour la contrainte de cisaillement critique «  $\tau_{critique}$  », nous posons qu'elle est atteinte lorsque les éprouvettes sont cassées. Nous avons des considérations identiques en ce qui concerne le mode I.

Nous interprétons ces critères de rupture à travers  $\tau^{\max}$  sur des échantillons pré-fissurés par trempe thermique, car pour une éprouvette vierge de toute fissuration (verre sain), analysée en suivant ces mêmes protocoles, nous n'aurions pu avoir qu'une unique donnée de rupture à un seuil de cisaillement unique (donc une statistique absente). Ces résultats donnent approximativement :

- ◇  $\tau_{seuil} \simeq \sigma_{seuil} = 41,6$  MPa,
- ◇  $\tau_{critique} = 85$  MPa.

---

<sup>||</sup>. Laboratoire de mécanique des solides, UMR CNRS 7649 – École Polytechnique, Palaiseau

<sup>\*\*</sup>. Laboratoire de géologie, École Normale Supérieure – CNRS UMR 8538, Paris

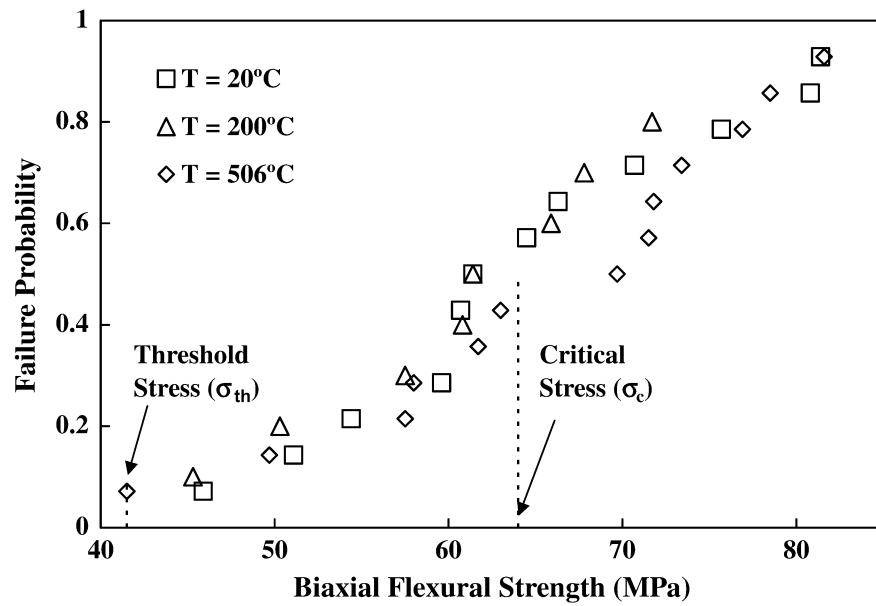


FIG. II-22 : Statistique de Weibull employée (à 20 °C) issue de [DDC<sup>+</sup>10].

## II.4.2 Modèle M2 : Admissibilité thermodynamique et positive, notation corrigée du modèle SK

i) **Loi de comportement** On a vu au § 1.4.2.1 page 29 que pour le potentiel écrit à l'Éq. 1 - 10 page 30, des auteurs de la littérature arrivaient à des formes condensées différentes du tenseur de rigidité  $\mathbf{K}^d$ . Nous considérons la dérivée du potentiel écrite correctement pour la notation condensée suivante, à comparer avec l'Éq. 1-13 page 31 du modèle SK (M1) :

$$\llbracket \mathbf{K} \rrbracket_{ijkl} = \llbracket \mathbf{K}^e \rrbracket_{ijkl} + C_1 (\delta_{ij} D_{kl} + \delta_{kl} D_{ij}) + \frac{C_2}{2} (\delta_{jk} D_{il} + \delta_{il} D_{jk} + \delta_{ik} D_{jl} + \delta_{jl} D_{ik}) \quad (11-25)$$

En explicitant cette notation condensée en notation matricielle avec les conventions habituelles de ce manuscrit, on obtient :

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{12} \\ \sigma_{13} \\ \sigma_{23} \end{bmatrix} = \llbracket \mathbf{K}^e + \mathbf{K}^d \rrbracket_{ijkl} \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ \gamma_{12} \\ \gamma_{13} \\ \gamma_{23} \end{bmatrix}, \quad ij \text{ et } kl \in \{11, 22, 33, 12, 13, 23\} \quad (11-26a)$$

avec :

$$\llbracket \mathbf{K}^e \rrbracket_{ijkl} = \begin{bmatrix} \lambda+2\mu & \lambda & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ & \lambda+2\mu & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ & & \lambda+2\mu & 0 & 0 & 0 \\ & & & \mu & 0 & 0 \\ & \text{sym.} & & & \mu & 0 \\ & & & & & \mu \end{bmatrix}, \quad (11-26b)$$

$$\text{et : } \llbracket \mathbf{K}^d \rrbracket_{ijkl} = \begin{bmatrix} 2(C_1+C_2)D_{11} & C_1(D_{11}+D_{22}) & C_1(D_{11}+D_{33}) & (C_1+C_2)D_{12} & (C_1+C_2)D_{13} & C_1 D_{23} \\ 2(C_1+C_2)D_{22} & C_1(D_{22}+D_{33}) & (C_1+C_2)D_{12} & C_1 D_{13} & (C_1+C_2)D_{23} & \\ 2(C_1+C_2)D_{33} & C_1 D_{12} & (C_1+C_2)D_{13} & (C_1+C_2)D_{23} & & \\ & \frac{C_2}{2}(D_{11}+D_{22}) & \frac{1}{2}C_2 D_{23} & \frac{1}{2}C_2 D_{13} & & \\ & \text{symétrique} & \frac{C_2}{2}(D_{11}+D_{33}) & \frac{1}{2}C_2 D_{12} & & \\ & & & \frac{C_2}{2}(D_{22}+D_{33}) & & \end{bmatrix}$$

Lorsqu'on écrit cette équation de comportement sous forme tensorielle, avec uniquement les tenseurs d'ordre 2 de ce modèle qui sont  $\sigma_{ij}$ ,  $\varepsilon_{ij}$  et  $D_{ij}$ , on obtient la forme suivante, (qui se résume à la loi de Hooke, comme pour le modèle SK, si  $D_{ij} = \mathbf{0}_{ij}$ ) :

$$\sigma_{ij} = \lambda \varepsilon_{kk} \delta_{ij} + 2\mu \varepsilon_{ij} + C_1 \varepsilon_{kl} D_{lk} \delta_{ij} + C_1 \varepsilon_{kk} D_{ij} + C_2 (\varepsilon_{ik} D_{kj} + D_{ik} \varepsilon_{kj}) \quad (11-27)$$

où  $\delta_{ij}$  est le tenseur de Kronecker (tenseur identité d'ordre 2).

Dans une autre notation tensorielle, l'Éq. 11-27 donne :

$$\boldsymbol{\sigma} = \lambda \text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}) \mathbf{1} + 2\mu \boldsymbol{\varepsilon} + C_1 (\boldsymbol{\varepsilon} : \mathbf{D}) \mathbf{1} + C_1 \text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}) \mathbf{D} + C_2 (\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{D} + \mathbf{D} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}) \quad (11-28)$$

où  $\mathbf{1}$  est le tenseur identité.



**ii) Positivité de la matrice de rigidité** Cette relation reste vraie pour toute rotation simultanée des tenseurs  $\boldsymbol{\sigma}$ ,  $\boldsymbol{\varepsilon}$  et  $\mathbf{D}$ . On se place alors dans un repère pour lequel  $D_{ij} = 0$  pour les  $i \neq j$ , le déterminant de  $\llbracket \mathbf{K}^e + \mathbf{K}^d \rrbracket_{ijkl}$  devient alors :

$$\text{Det} \left( \left[ \mathbf{K}_{ijkl}^e \right] + \left[ \mathbf{K}_{ijkl}^d \right] \right) = \left( \frac{1}{2} C_2 (D_{11} + D_{22}) + \mu \right) \left( \frac{1}{2} C_2 (D_{11} + D_{33}) + \mu \right) \left( \frac{1}{2} C_2 (D_{22} + D_{33}) + \mu \right) P \quad (\text{II-29a})$$

avec :

$$P = 2X_{12}X_{13}X_{23} - Y_1X_{23}^2 - Y_2X_{13}^2 - Y_3X_{12}^2 + Y_1Y_2Y_3 \quad (\text{II-29b})$$

et :

$$\left\{ \begin{array}{l} X_{12} = C_1(D_{11} + D_{22}) + \lambda \\ X_{13} = C_1(D_{11} + D_{33}) + \lambda \\ X_{23} = C_1(D_{22} + D_{33}) + \lambda \\ Y_1 = 2(C_1 + C_2)D_{11} + \lambda + 2\mu \\ Y_2 = 2(C_1 + C_2)D_{22} + \lambda + 2\mu \\ Y_3 = 2(C_1 + C_2)D_{33} + \lambda + 2\mu \end{array} \right. \quad (\text{II-29c})$$

La non positivité stricte de ce déterminant entraînant des problèmes de résolution de l'équilibre mécanique par le code de calcul FE, nous pouvons voir qu'en utilisant les paramètres pour la traction uniaxiale dans le modèle de M1 nous pouvons alors rencontrer fréquemment cette difficulté pour plusieurs endommagements actifs (ce qui est susceptible de se produire dans nos calculs en 3D). Ces valeurs de M1 qui correspondent au cas limite de la traction simple (pour un unique endommagement tendant vers 1) étaient de  $(C_1, C_2) = \left( \mu, -\frac{3}{2}\mu \right)$  (le problème resterait le même, physiquement, dans une version corrigée pour M2 – mais l'identification est alors moins évidente pour les problèmes qu'on a identifiés en annexe A page 152).

La question de la généralisation à un calcul pleinement 3D, susceptible de générer ces multiples endommagement, est donc en question ici vis-à-vis de l'identification en traction uni-/ ou biaxiale des paramètres  $(C_1, C_2)$  du modèle.

Ainsi, par exemple, prenons  $E = 93$  GPa,  $\nu = 0,24$ ,  $D_{11} = 1$ ,  $D_{22} = 0,25$  et  $D_{33} = 0$ ; nous obtenons alors un déterminant négatif de l'ordre de  $-53 \times 10^{66}$  Pa<sup>6</sup> (il était positif et égal à celui de la rigidité élastique à l'endommagement nul).

Choisir un jeu de paramètres  $(C_1, C_2) = (2\mu, -3\mu)$  calé sur le cas de la traction biaxiale revient à un cas identique.

Du point de vue de la résolution de ce problème, nous préférons alors le cas de la traction triaxiale  $(C_1, C_2) = \left( -\frac{\lambda}{2}, -\mu \right)$ , qui correspond en limite à l'écriture d'un tenseur  $\mathbf{D}_{ij}$  qui est unitaire dans la loi de comportement précédente de M2 (voir en annexe A page 152 cette identification). Le déterminant peut toujours s'annuler quand deux  $D_{ii}$  différents sont à la valeur 1, ce qui génère aussi quelques problèmes à travers le caractère de conditionnement des valeurs propres de la

matrice de rigidité, mais d'un point de vue numérique ce cas peut se contrôler plus facilement.

L'équation de comportement devient sous la forme tensorielle, en identification triaxiale :

$$\boldsymbol{\sigma} = \lambda \operatorname{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}) \mathbf{1} + 2\mu \boldsymbol{\varepsilon} - \frac{\lambda}{2} (\boldsymbol{\varepsilon} : \mathbf{D}) \mathbf{1} - \frac{\lambda}{2} \operatorname{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}) \mathbf{D} - \mu (\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{D} + \mathbf{D} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}) \quad (\text{II-30})$$

avec indifféremment l'une ou l'autre de ces notations  $\boldsymbol{\varepsilon} : \mathbf{D} = \operatorname{tr}(\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{D})$ ; et où  $\mathbf{1}$  est le tenseur identité.

Cette relation s'écrit également en fonction de  $\boldsymbol{\varepsilon}$  et de  $(\mathbf{D} - \mathbf{1})$  sous la forme factorisée :

$$\boldsymbol{\sigma} = -\frac{\lambda}{2} \operatorname{tr}(\boldsymbol{\varepsilon} \cdot (\mathbf{D} - \mathbf{1})) \mathbf{1} - \frac{\lambda}{2} \operatorname{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}) (\mathbf{D} - \mathbf{1}) - \mu (\boldsymbol{\varepsilon} \cdot (\mathbf{D} - \mathbf{1}) + (\mathbf{D} - \mathbf{1}) \cdot \boldsymbol{\varepsilon}) \quad (\text{II-31})$$

Cette relation rend évident le fait qu'à  $\mathbf{D} = \mathbf{1}$ ,  $\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0}$  (c'était la définition de cette identification triaxiale).

Signalons enfin qu'il existe des modèles CDM cadrés par des opérateurs mathématiques pour éviter justement ce genre de problèmes, par exemple le modèle de Genet-Ladevèze [Gen10].

### II.4.3 Modèle M3 : Évaluation des endommagements normaux et de cisaillement, additivité et négativité de $D$

M2 étant écrit en contraintes principales, il est donc nécessaire de diagonaliser la matrice des contraintes afin de pouvoir déterminer le tenseur  $\mathbf{D}$  qui en découle. Cela est vrai pour les contraintes normales. En ce qui concerne l'endommagement de cisaillement, il est déterminé à partir du calcul du cisaillement maximal, que nous supposons être propre à chacun des 3 systèmes de deux axes définissant un cisaillement une fois les contraintes principales déterminées (ou les 3 rayons des cercles de Mohr définis par les contraintes principales).

Tant que le repère dans lequel sont calculées les contraintes principales ne change pas, on peut accumuler les composantes de  $D$  de façon monotone en constante augmentation, ce qui ne pose pas de problème particulier. Par contre, lorsque les directions principales de chargement changent (à cause des conditions aux limites, de la physique ou du type de chargement), l'endommagement va s'accroître dans une direction différente de la précédente.

Afin de pouvoir incrémenter la matrice d'endommagement en un point donné, il est donc nécessaire de recalculer celle-ci dans le nouveau repère correspondant aux nouvelles contraintes principales évaluées. Malheureusement, tel que le tenseur  $\mathbf{D}$  est construit, cela pose un problème majeur car l'endommagement est une variable cumulative définie positive. Il existe de nombreux cas de figure montrant l'apparition de composantes négatives dans le tenseur  $\mathbf{D}$  pour une rotation donnée. Ce serait impossible car l'endommagement se doit d'être strictement positif.

Différentes rotations sont à mener lors du passage d'un repère principal à un autre et lors d'un changement de direction de chargement. En tournant le tenseur  $\mathbf{D}$ , on est amené à s'interroger sur sa positivité. La loi de comportement du modèle M2 reste vraie quand on tourne l'ensemble des tenseurs selon ces rotations, il convient donc d'avoir un tenseur  $\mathbf{D}$  tout à fait adapté à ces rotations, par exemple en recadrant l'ensemble des endommagements sur des valeurs propres de  $\mathbf{D}$ , ce qui dépasse le cadre du travail de la thèse.

L'endommagement ne doit pas seulement être positif, il doit aussi être inférieur à 1. De plus, lors d'un chargement complexe, on pourrait même devoir incrémenter du mode II après rotation du repère principal, sur des mêmes composantes incrémentées auparavant en mode I (le cumul des mode I et du mode II dépasse également le travail de cette thèse).

Il est donc clair que la non additivité du modèle nous impose de séparer les évaluations d'endommagements de traction  $[[D]]_{ii}$  des endommagements de cisaillement  $[[D]]_{ij}$ . Le tenseur d'endommagement  $D$  ne peut donc pas être considéré comme une seule entité pour ces deux modes simultanément.

#### II.4.4 Modèle M4, non couplé en mode II : Hypothèse des directions principales et adaptations

Nous avons laissé de côté dans un premier temps l'endommagement de mode II, qui ne nous semblait pas correctement formulé pour faire ce en quoi il avait sûrement été écrit dans M1 pour des problèmes simples : endommager via le déviateur des contraintes (le problème était alors de laisser les composantes diagonales identiques, même si elles contribuent au déviateur).

Inversement, l'endommagement de mode I tel qu'écrit dans le modèle de SK/M1 ne laissait pas présager de l'influence qu'on observe sur les termes non-diagonaux, du déviateur, qui s'annulent par exemple tout comme pour la pression à  $D = \mathbf{1}$  dans la loi de comportement de M2.

##### II.4.4.1 Considérations supplémentaires

Nous avons mené des études de l'orientation du repère principal dans un cas simplifié sur le creuset chaud où la viscoélasticité n'est pas prise en compte et où les propriétés élastiques sont constantes à celles de la température ambiante. Des résultats de cette étude simple sont illustrés par exemple dans les figures II - 23 à II - 26 pages 86-87 sans endommagement avec ces propriétés mécaniques particulières du colis.

Il est possible de restreindre l'hypothèse d'un endommagement exprimé dans le repère principal en endommagement fixé dans un repère particulier, par exemple le repère de structure, si et seulement si les contraintes principales sont orientées approximativement suivant le repère de structure pendant l'incrément de l'endommagement.

Nous avons mis en évidence les faibles variabilités des directions principales des contraintes pendant de telles périodes d'endommagement (à un chargement thermique important dans ce colis), ce qui nous amène à faire l'hypothèse suivante : on considère que le repère principal n'évolue pas pendant l'endommagement et qu'il est de plus identifié par le repère de structure cylindrique du colis (qui devient donc la base diagonalisant  $D$ , tenseur incrémenté ici uniquement par l'endommagement de mode I). Il est probable que cela mène à commettre des erreurs sur le calcul de l'endommagement en utilisant cette hypothèse : dans les zones où l'échange thermique est complexe par exemple (surface libre du verre et zone basse du colis). Ces zones présentent un accord moyen avec cette hypothèse, mais leur volume représente une faible fraction de l'ensemble du colis.

Le modèle d'incrémentation de l'endommagement de mode I qui correspond à ces hypothèses se réduit donc au problème suivant, mis à jour de l'Éq. 1-15 page 32 :

$$[[D]]_{ii} = \left\{ \begin{array}{ll} 0, & [[\sigma]]_{ii} \leq \sigma_{seuil} \\ \frac{[[\sigma]]_{ii} - \sigma_{seuil}}{\sigma_{critique} - \sigma_{seuil}}, & \sigma_{seuil} < [[\sigma]]_{ii} < \sigma_{critique} \\ 1, & [[\sigma]]_{ii} \geq \sigma_{critique} \end{array} \right\}, i \in \{r, \theta, z\} \quad (11-32)$$

En ce qui concerne l'endommagement de cisaillement, comme nous l'avons vu, il ne provoque pas de réactualisation des contraintes. Malheureusement, nous verrons qu'un certain nombre de contraintes de compression existent néanmoins dans les analyses thermomécaniques mises en place. Même si l'endommagement de cisaillement est difficile à interpréter ici, il est aisé de calculer un/ou des cisaillements maximaux critiques afin de caractériser leur évolution face aux critères d'endommagement de mode II en fonction de l'avancement du chargement thermique.

L'hypothèse qu'on vient de faire implique la loi de comportement suivante, tenant compte de l'identification du modèle en traction triaxiale, et de l'utilisation du repère de structure cylindrique :

$$\begin{bmatrix} \sigma_{rr} \\ \sigma_{\theta\theta} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{r\theta} \\ \sigma_{rz} \\ \sigma_{\theta z} \end{bmatrix} = [[\mathbf{K}^e + \mathbf{K}^d]]_{ijkl} \begin{bmatrix} \varepsilon_{rr} \\ \varepsilon_{\theta\theta} \\ \varepsilon_{zz} \\ \gamma_{r\theta} \\ \gamma_{rz} \\ \gamma_{\theta z} \end{bmatrix}, ij \text{ et } kl \in \{rr, \theta\theta, zz, r\theta, rz, \theta z\} \quad (11-33a)$$

avec :

$$\begin{aligned}
 \llbracket \mathbf{K}^d \rrbracket_{ijkl} &= \begin{bmatrix} 2(C_1 + C_2)D_{rr} & C_1(D_{rr} + D_{\theta\theta}) & C_1(D_{rr} + D_{zz}) & 0 & 0 & 0 \\ & 2(C_1 + C_2)D_{\theta\theta} & C_1(D_{\theta\theta} + D_{zz}) & 0 & 0 & 0 \\ & & 2(C_1 + C_2)D_{zz} & 0 & 0 & 0 \\ & & & \frac{C_2(D_{rr} + D_{\theta\theta})}{2} & 0 & 0 \\ & \text{symétrique} & & & \frac{C_2(D_{rr} + D_{zz})}{2} & 0 \\ & & & & & \frac{C_2(D_{\theta\theta} + D_{zz})}{2} \end{bmatrix} \\
 \llbracket \mathbf{K}^e \rrbracket_{ijkl} &= \begin{bmatrix} \lambda + 2\mu & \lambda & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ & \lambda + 2\mu & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ & & \lambda + 2\mu & 0 & 0 & 0 \\ & & & \mu & 0 & 0 \\ & \text{sym.} & & & \mu & 0 \\ & & & & & \mu \end{bmatrix}
 \end{aligned}$$

(II - 33b)

Ces modifications nous permettent donc de pouvoir faire un calcul d'endommagement par FE jusqu'au refroidissement complet du colis. Dans le cas de l'endommagement de mode I, le problème est simple à prendre en compte avec un endommagement cumulatif par direction du repère cylindrique. Pour les endommagements de cisaillements, ils seront évalués de manière qualitative par un critère unique de seuil sur le  $\tau^{\max}$ , même si le verre reste gouverné localement dans ces zones par une loi de comportement (visco)élastique sans CDM (en périphérie du colis généralement).

#### II.4.4.2 Considérations énergétiques

En mode I, on peut récupérer l'énergie dissipée par le modèle de CDM lors des mises à jour de  $D$ . Nous détaillons ce point au § II.4.6 page 89.

Quant aux surfaces de fracturation pour le mode II, il n'y a pas d'énergie dissipée dans ce modèle (non couplé) car le verre reste localement viscoélastique au-delà du critère  $\tau_{seuil}$ . On peut alors majorer de telles surfaces possibles en prenant en compte le maximum de l'énergie mécanique atteinte (ce qui arrive en fin de chargement thermique dans le colis, quand il est entièrement refroidi à température ambiante). Ce type de calcul des surfaces de fracturation a été appliqué pour le mode I à des échantillons de trempe en SON68 dans l'article de Dubé *et al.* [DDC<sup>+</sup>10].

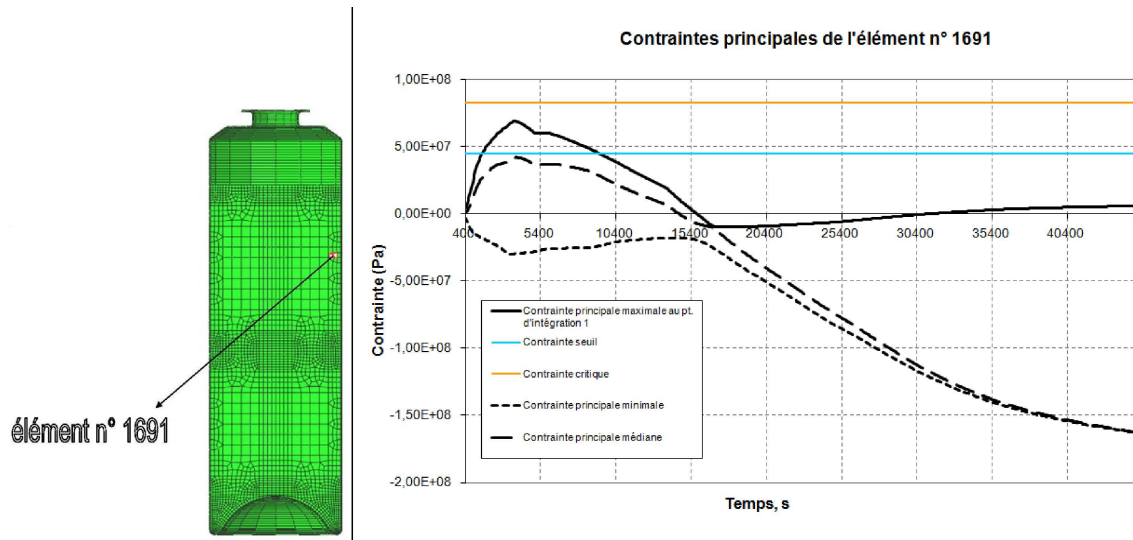


FIG. II - 23 : Une des localisations investiguées dans le colis, intensité des contraintes principales.

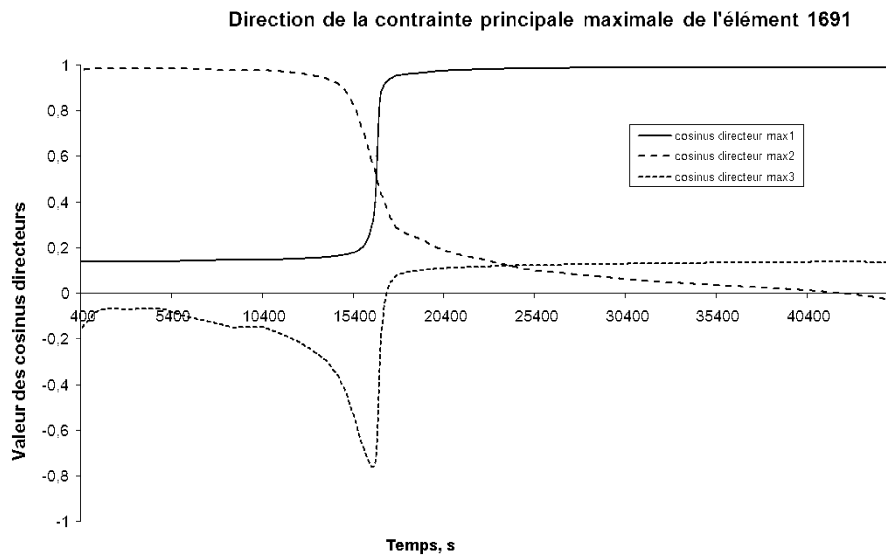


FIG. II - 24 : Directions de la contrainte maximale en termes de cosinus directeurs dans le repère cartésien.

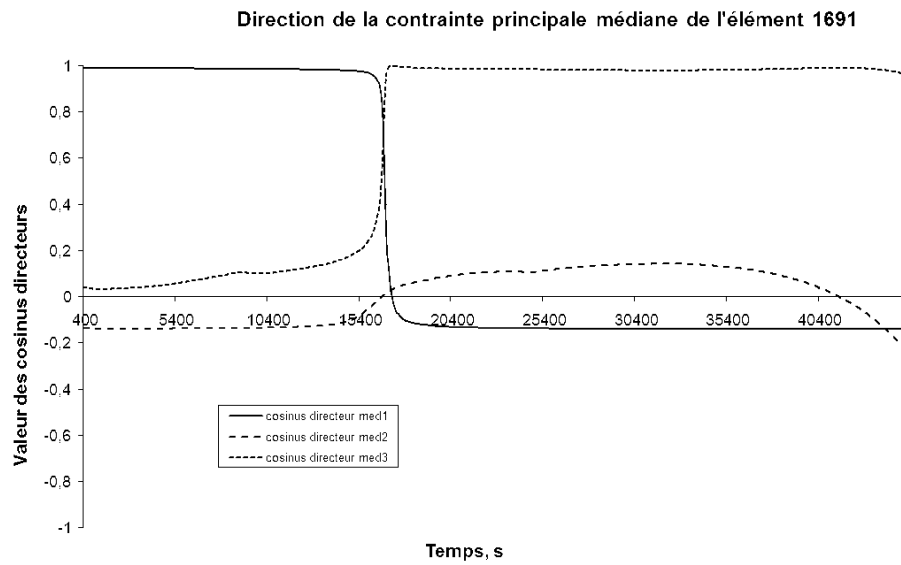


FIG. II - 25 : Directions de la contrainte principale intermédiaire en termes de cosinus directeurs dans le repère cartésien.

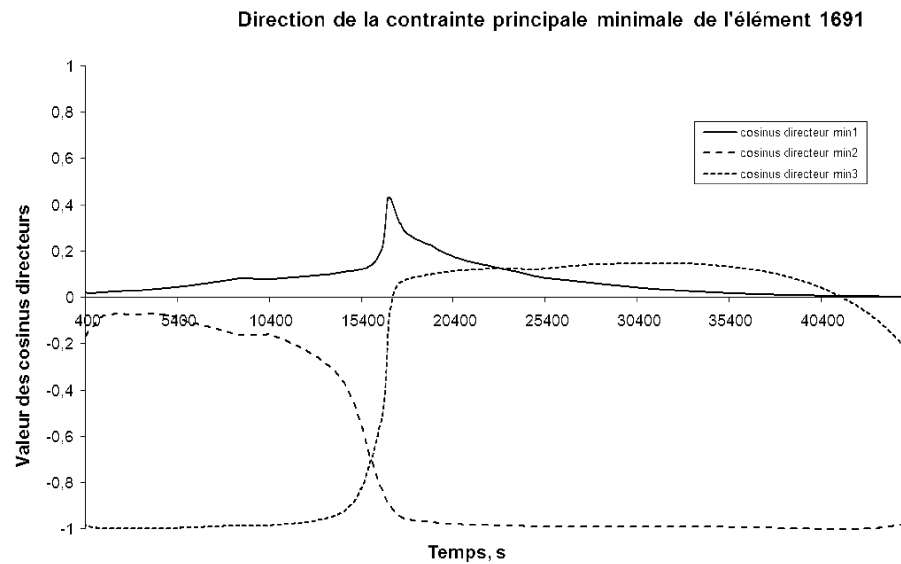


FIG. II - 26 : Directions de la contrainte minimale en termes de cosinus directeurs dans le repère cartésien.

#### II.4.5 Modèle M4, couplé en mode II

Dans le code d'endommagement M4 utilisé jusqu'à présent, les contraintes et la rigidité étaient mises à jour uniquement en mode I. Ce modèle M4 a été modifié afin d'introduire l'endommagement de mode II en complétant la loi d'incrémentation de l'endommagement, alors désactivée pour le mode II dans la version du modèle M4 non couplé. La réactualisation des contraintes et la réactualisation de la rigidité, quel que soit le mode d'endommagement (I ou II), étaient envisagées en modèle M1 mais avec les problèmes soulevés lors des modèles M2–M4.

Dans la mesure où l'endommagement de mode I, tel qu'il est écrit dans le modèle M4 non couplé, affecte également le cisaillement, il vaut mieux garder la formulation actuelle de la loi de comportement et de l'endommagement lié à ce qu'il est pour le mode I (afin d'éviter de devoir synthétiser deux ensembles de variables internes jouant un rôle similaire). Pour le mode II, comme pour le mode I, on écrit alors une incrémentation du mode II de sorte à avoir une diminution généralisée du tenseur des contraintes (par le biais d'une réactualisation de la rigidité qui baisse d'autant que  $\mathbf{D}$  s'approche de  $\mathbf{1}$ ). Cette réactualisation baisse les contraintes trop élevées en traction et en compression, et par ce rapprochement vers 0 baisse donc les cisaillements trop élevés (on ne sépare pas la contribution de la pression iso-statique d'un côté et du déviateur des contraintes de l'autre côté, comme cela avait envisagé sur des problèmes non 3D dans M1).

Il serait donc judicieux, avant d'appliquer ces règles, de réfléchir au cahier des charges que doit avoir l'endommagement de mode II dans nos modèles. (On peut formuler en amont de ce cahier des charges des questions classiques en CDM, comme le rôle de l'endommagement de mode I une fois repassé en compression.) En l'occurrence pour ce mode II prévu ici, il faut vérifier qu'on peut vraiment réactualiser les contraintes au prix d'un endommagement de la pression iso-statique, et si l'endommagement est cohérent avec ce qui se passe expérimentalement. Dans notre cas du colis, nous avons essentiellement de l'endommagement de mode II par cisaillement biaxial en périphérie. La contrainte maximum, contribuant à chaque cisaillement, est proche d'un état non contraint (nous illustrerons en détail la réponse mécanique du colis ultérieurement). Cet endommagement de mode II est donc tout à fait adapté.

Vis-à-vis du modèle M4, on continue à se placer dans le repère de structure cylindrique pour diagonaliser  $\mathbf{D}$  (en mode II comme en mode I). De plus, le mode I et le mode II se doivent de rester isolés pour pouvoir identifier séparément l'endommagement (et extraire les surfaces fissurées dans le code de fracturation, ultérieur, opérant par la mécanique de la rupture). Cette partition des endommagements de mode I et de mode II convient assez bien ici, dans les colis, comme les critères d'endommagement ne sont généralement pas atteints simultanément dans une même région du colis (sauf de façon marginale à la périphérie de la surface libre du verre dans le colis, zone pour laquelle l'endommagement de mode II arrive normalement en premier).

Au niveau de l'activation du mode II tel qu'écrit dans le modèle SK, qu'on généralise ici, l'hypothèse nous semblait trop forte sur le fait que la contrainte maximale devait être en compression pour permettre ce mode II. Nous utilisons ici dans le modèle M4 couplé plutôt une compétition entre le critère en mode I et celui en mode II (avec priorité au mode I en cas de franchissement simultané des seuils de fracturation, mais cela n'arrive pas dans les cas du colis ici).



On écrit ici dans le repère de structure cylindrique l'endommagement de mode II, repère qu'on suppose proche du repère principal. Le mode II est défini comme activable uniquement lorsqu'aucun critère de mode I n'a été activé ( $\max(\llbracket \boldsymbol{\sigma} \rrbracket_{ii}) < \sigma_{seuil}$ ). On évalue les 3 cisaillements maxima  $\tau_{ij}^{\max}$  simultanément, liés chacun aux deux composantes  $\llbracket \boldsymbol{\sigma} \rrbracket_{ii}$  et  $\llbracket \boldsymbol{\sigma} \rrbracket_{jj}$  (en négligeant les  $\llbracket \boldsymbol{\sigma} \rrbracket_{ij}$  avec  $i \neq j$ ) afin d'évaluer si le critère de mode II est atteint. Si c'est le cas avec  $\left| \tau_{ij}^{\max} \right| \geq \tau_{seuil}$ , le mode II devient irréversiblement activé et l'Éq. 1-16 page 33 (du modèle SK/M1) devient dans M4 :

$$\left\{ \begin{array}{l} \tau_{seuil} \leq \left| \tau_{ij}^{\max} \right| \leq \tau_{critique} \\ \left| \tau_{ij}^{\max} \right| \geq \tau_{critique} \end{array} \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \llbracket \mathbf{D} \rrbracket_{ii} = \max \left( \llbracket \mathbf{D} \rrbracket_{ii}, \frac{\left| \tau_{ij}^{\max} \right| - \tau_{seuil}}{\tau_{critique} - \tau_{seuil}} \right) \\ \llbracket \mathbf{D} \rrbracket_{jj} = \max \left( \llbracket \mathbf{D} \rrbracket_{jj}, \frac{\left| \tau_{ij}^{\max} \right| - \tau_{seuil}}{\tau_{critique} - \tau_{seuil}} \right) \\ \llbracket \mathbf{D} \rrbracket_{ii} = \llbracket \mathbf{D} \rrbracket_{jj} = 1 \end{array} \right\} i, j \in \{r, \theta, z\}, i \neq j \quad (11-34)$$

avec  $\tau_{seuil}$  la contrainte de cisaillement seuil ;  $\tau_{critique}$  la contrainte de cisaillement critique ;  $\llbracket \mathbf{D} \rrbracket_{ii}$  et  $\llbracket \mathbf{D} \rrbracket_{jj}$  sont les deux composantes diagonales de  $\mathbf{D}$  qui sont mises à jour simultanément pour tout cisaillement actif  $\left| \tau_{ij}^{\max} \right|$ . Cette double mise à jour assure un cisaillement borné par cet endommagement accru, et avec une rigidité correspondante en décroissance suivant les composantes diagonales concernées de  $\mathbf{D}$  tendant vers  $\mathbf{1}$ .

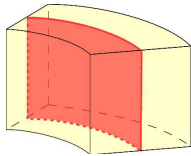
À l'intérieur du code de fracturation, pour calculer les surfaces de fracturation, on peut utiliser directement les incréments d'endommagement obtenus en mode I ou II. Les surfaces de fracturation sont donc toutes calculées, cette fois, à partir de l'énergie dissipée au moment de ces endommagements (à chaque incrément d'endommagement  $\Delta \mathbf{D}$ , et non plus pour partie en fonction d'un critère d'énergie mécanique totale qui majore les surfaces).

#### 11.4.6 Prise en compte de l'énergie dissipée

Dans le modèle M4, les endommagements sont incrémentés selon trois directions dans le repère de structure. La topologie des fissures correspondant aux différents modes d'endommagement est illustrée à la figure 11-27 page suivante. Ces surfaces de fracturation sont supposées adopter une topologie particulière dans le repère de structure cylindrique, repère lié au verre par exemple dans le colis (ou dans des échantillons sollicités selon une axisymétrie). Dans un repère principal qui serait cartésien, les plans de fissures restent planaires à l'échelle macroscopique. Parfois, le modèle génère des singularités/instabilités qui se propagent dans le modèle FE avec ces topologies. Plus généralement, on suppose ces surfaces de fracturation créées localement à chaque incrément d'endommagement (et quelle que soit la fissuration macroscopique propagée dans le modèle FE).

Les surfaces sont quantifiées à partir de l'endommagement créé dans le modèle M4, selon la procédure détaillée dans cette partie, qui comprend une phase de mise à jour de l'énergie mécanique au § 11.4.6.1 page 91, et la phase de dissipation au § 11.4.6.2 page 92. Toute l'énergie dissipée par ce modèle est supposée créer des surfaces de fracturation, à la topologie correspondant aux composantes de  $\mathbf{D}$  qui augmentent lors de la dissipation. Nous voyons au chapitre 111 page 98 comment, en plus, identifier de telles surfaces de fracturation sur des essais d'endommagement.

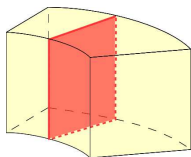
**Fissures circonférentielles**



Fissures ouvertes en mode I par  $D_{rr}$

---

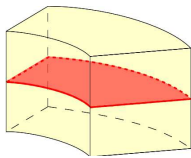
**Fissures radiales**



Fissures ouvertes en mode I par  $D_{\theta\theta}$

---

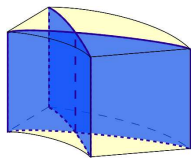
**Fissures axiales**



Fissures ouvertes en mode I par  $D_{zz}$

---

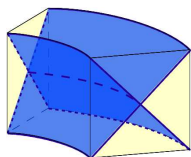
**Fissures en spirales cylindriques**



Fissures ouvertes en mode II par  $D_{r\theta}$  (venant pour M4 de  $D_{rr}$  et  $D_{\theta\theta}$ )

---

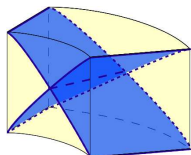
**Fissures coniques**



Fissures ouvertes en mode II par  $D_{rz}$  (venant pour M4 de  $D_{rr}$  et  $D_{zz}$ )

---

**Fissures hélicoïdales**



Fissures ouvertes en mode II par  $D_{\theta z}$  (venant pour M4 de  $D_{\theta\theta}$  et  $D_{zz}$ )

FIG. II-27 : Endommagements et surfaces de fracturation en repère cylindrique.

#### II.4.6.1 Incrémentation de l'énergie pendant la (visco)élasticité endommagée

La forme globale de l'énergie mécanique, valable pour des modules d'élasticité constants, est :

$$W = \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma}_{ij} \boldsymbol{\varepsilon}_{ji} \quad (\text{II-35})$$

Entre l'influence de la température sur les modules d'élasticité, de la viscoélasticité (relaxation de  $G$ ), et surtout de l'endommagement, cette forme globale n'est plus valable. On généralise donc l'énergie au cas qui nous concerne par sa forme incrémentale dans le modèle M4 (suivant la méthode d'intégration numérique par des trapèzes) :

$$\Delta W = \left( \boldsymbol{\sigma}_{ij} + \frac{1}{2} \Delta \boldsymbol{\sigma}_{ij} \right) \Delta \boldsymbol{\varepsilon}_{ji} \quad (\text{II-36})$$

En cas de non linéarité de la loi de comportement, cette méthode est soumise aux erreurs d'intégration qui sont fonction de la taille des incréments.

En prenant par la suite le cas particulier d'un tenseur d'endommagement  $\mathbf{D}$  diagonalisé dans la base en cours, on choisit de séparer la contribution à l'énergie liée à chacune des composantes diagonales du tenseur  $\mathbf{D}$ . À cette fin, on commence par séparer les différentes contributions aux incréments des contraintes en fonction des composantes diagonales  $[\mathbf{D}]_{ii}$  concernées :

$$\begin{cases} \Delta \sigma_{kk}^{(ll)} = [\mathbf{K}^e + \mathbf{K}^d]_{kkll} \times \Delta \varepsilon_{ll} & \text{avec } k, l \in \{1, 2, 3\}, \text{ pour les } D_{kk} \text{ et éventuellement } D_{ll} \\ \Delta \sigma_{kl}^{(kl)} = [\mathbf{K}^e + \mathbf{K}^d]_{klkl} \times \Delta \gamma_{kl} & \text{avec } kl \in \{12, 13, 23\}, \text{ pour les } D_{kk} \text{ et } D_{ll} \end{cases} \quad (\text{II-37})$$

de sorte qu'au début de l'incrément ayant cours, on obtient ainsi le champ total des contraintes discrétisé sur ces 12 éléments :

$$\begin{cases} \sigma_{kk}^{(ll)} = \sum \Delta \sigma_{kk}^{(ll)} & \text{avec } k, l \in \{1, 2, 3\} \\ \sigma_{kl}^{(kl)} = \sum \Delta \sigma_{kl}^{(kl)} & \text{avec } kl \in \{12, 13, 23\} \end{cases} \quad (\text{II-38})$$

avec les composantes diagonales du tenseur des contraintes définies par :

$$\begin{cases} \Delta \sigma_{kk} = \sum_{l=1}^3 \Delta \sigma_{kk}^{(ll)} & \text{avec } k \in \{1, 2, 3\} \\ \sigma_{kk} = \sum_{l=1}^3 \sigma_{kk}^{(ll)} & \text{avec } k \in \{1, 2, 3\} \end{cases} \quad (\text{II-39})$$

et les composantes non diagonales du tenseur des contraintes étant inchangées dans cette notation :

$$\begin{cases} \Delta \sigma_{kl} = \Delta \sigma_{kl}^{(kl)} & \text{avec } kl \in \{12, 13, 23\} \\ \sigma_{kl} = \sigma_{kl}^{(kl)} & \text{avec } kl \in \{12, 13, 23\} \end{cases} \quad (\text{II-40})$$

Enfin, on sépare les incréments de l'énergie en 9 éléments issus des projections de ces contraintes :

$$\begin{cases} \Delta W_{kk}^{(kk)} = \left( \sigma_{kk}^{(kk)} + \frac{1}{2} \Delta \sigma_{kk}^{(kk)} \right) \times \Delta \varepsilon_{kk} & \text{avec } k \in \{1, 2, 3\} \\ \Delta W_{kk}^{(ll)} = \left( \sigma_{kk}^{(ll)} + \frac{1}{2} \Delta \sigma_{kk}^{(ll)} \right) \times \Delta \varepsilon_{kk} + \left( \sigma_{ll}^{(kk)} + \frac{1}{2} \Delta \sigma_{ll}^{(kk)} \right) \times \Delta \varepsilon_{ll} & \text{avec } kl \in \{12, 13, 23\} \\ \Delta W_{kl}^{(kl)} = \left( \sigma_{kl}^{(kl)} + \frac{1}{2} \Delta \sigma_{kl}^{(kl)} \right) \times \Delta \gamma_{kl} & \text{avec } kl \in \{12, 13, 23\} \end{cases} \quad (\text{II-41})$$

tout en conservant l'identification de la somme de ces 9 éléments à l'incrément d'énergie totale :

$$\Delta W = \sum_{k \leq l}^{k, l \in \{1, 2, 3\}} \Delta W_{kl}^{(kl)} + \sum_{k < l}^{k, l \in \{1, 2, 3\}} \Delta W_{kk}^{(ll)} \quad (\text{II-42})$$

Chaque élément d'énergie mécanique est concerné par un type d'endommagement ou des types conjoints d'endommagement. Cette discrétisation et ce découpage particulier n'a pas d'origine thermodynamique, seule la somme de tous ces termes a un sens thermodynamique. Il convient donc d'éviter de récupérer de l'énergie dissipée qui donnerait des surfaces de fracturation négatives à partir de certains de ces éléments énergétiques. Ce phénomène peut se produire en endommagement quelconque 3D et, s'il arrive, on surestime alors la fracturation qui arrive dans ces cas de figure particuliers (la somme de l'énergie, dissipée par l'ensemble des endommagements, était en fait moindre).

#### II.4.6.2 Principes de la dissipation de l'énergie

À chaque incrément, le code FE fournit l'état de contraintes initial, l'incrément de température et l'incrément de déformation mécanique à appliquer. Les contraintes en début d'incrément dictent si un incrément d'endommagement devra avoir lieu lors de l'incrément en cours selon les principes du modèle de SK, en réactualisant l'endommagement piloté en contrainte à l'incrément d'après.

Si aucun incrément d'endommagement n'a lieu (contraintes initiales trop faibles), on se situe dans le cas de figure du paragraphe précédent, et on doit simplement mettre à jour les variables internes de l'énergie de déformation emmagasinée – on met à jour les contraintes et l'énergie avec  $\mathbf{D}$  constant sur cet incrément.

Si un incrément d'endommagement doit avoir lieu, nous décidons d'effectuer la prise en compte de la dissipation au milieu de l'incrément en cours. Les déformations et le travail des forces sont appliqués selon le paragraphe précédent :

- ◇ pour la première moitié de l'incrément avec l'endommagement initial ( $\mathbf{D}$ ),
- ◇ et pour une rigidité avec l'endommagement final ( $\mathbf{D} + \Delta \mathbf{D}$ ) dans la seconde moitié de l'incrément.

Pour prendre en compte la dissipation d'énergie au milieu de l'incrément lorsqu'on incrémente  $\Delta \mathbf{D}$ , on établit tout d'abord les 9 modules suivants en fonction de l'endommagement en début

d'incrément et de celui à prendre en compte dans l'incrément :

$$\left\{ \begin{array}{l} M_{ii}^{(ii)} = \frac{1 - D_{ii} - \Delta D_{ii}}{1 - D_{ii}} \quad \text{avec } i \in \{1, 2, 3\} \\ M_{jj}^{(kk)} = \frac{2 - D_{jj} - D_{kk} - \Delta D_{jj} - \Delta D_{kk}}{2 - D_{jj} - D_{kk}} \quad \text{avec } jk \in \{12, 13, 23\} \\ M_{lm}^{(lm)} = \frac{\Delta D_{ll}}{\Delta D_{ll} + \Delta D_{mm}} \quad \text{avec } lm \in \{12, 13, 23\} \end{array} \right. \quad (\text{II-43})$$

Avec les 6 premiers de ces modules, on peut alors réactualiser l'ensemble du tenseur des contraintes (décomposé suivant les 12 éléments comme précédemment) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \sigma_{kk}^{(ll)} \leftarrow \sigma_{kk}^{(ll)} \times M_{kk}^{(ll)} \quad \text{avec } k, l \in \{1, 2, 3\}, k \leq l \\ \sigma_{kk}^{(ll)} \leftarrow \sigma_{kk}^{(ll)} \times M_{ll}^{(kk)} \quad \text{avec } k, l \in \{1, 2, 3\}, k > l \\ \sigma_{kl} \leftarrow \sigma_{kl} \times M_{kk}^{(ll)} \quad \text{avec } kl \in \{12, 13, 23\} \end{array} \right. \quad (\text{II-44})$$

On souhaite récupérer l'énergie qui est dissipée par cette mise à jour des contraintes (par la mise à jour de la rigidité). Toute l'énergie qui est au-dessus de la courbe  $\sigma(\varepsilon)$  avec la nouvelle rigidité abaissée doit être récupérée, cette rigidité diminuant d'autant plus avec  $\Delta \mathbf{D}$ .

Cette énergie est donc projetée suivant les 3 directions liées aux composantes diagonales de  $\mathbf{D}$  et convertie entièrement en surface de fracturation si cette projection est bien positive (on rappelle que si elle est négative, on surestime alors l'endommagement ; c'est ce qui arrive dans certains cas de chargements tels que ceux où une contrainte joue un rôle de force résistante) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \Delta S_{11} = \max \left[ \begin{array}{l} W_{11}^{(11)} \times (1 - M_{11}^{(11)}) \\ 0, + (1 - M_{11}^{(22)}) \times M_{12}^{(12)} \times (W_{11}^{(22)} + W_{12}^{(12)}) \\ \quad + (1 - M_{11}^{(33)}) \times M_{13}^{(13)} \times (W_{11}^{(33)} + W_{13}^{(13)}) \end{array} \right] / 2 / \gamma_S \\ \Delta S_{22} = \max \left[ \begin{array}{l} W_{22}^{(22)} \times (1 - M_{22}^{(22)}) \\ 0, + (1 - M_{11}^{(22)}) \times (1 - M_{12}^{(12)}) \times (W_{11}^{(22)} + W_{12}^{(12)}) \\ \quad + (1 - M_{22}^{(33)}) \times M_{23}^{(23)} \times (W_{22}^{(33)} + W_{23}^{(23)}) \end{array} \right] / 2 / \gamma_S \\ \Delta S_{33} = \max \left[ \begin{array}{l} W_{33}^{(33)} \times (1 - M_{33}^{(33)}) \\ 0, + (1 - M_{11}^{(33)}) \times (1 - M_{13}^{(13)}) \times (W_{11}^{(33)} + W_{13}^{(13)}) \\ \quad + (1 - M_{22}^{(33)}) \times (1 - M_{23}^{(23)}) \times (W_{22}^{(33)} + W_{23}^{(23)}) \end{array} \right] / 2 / \gamma_S \end{array} \right. \quad (\text{II-45})$$

avec  $\gamma_S$  l'énergie de surface en  $\text{J} \times \text{m}^2$  (le coefficient 2 dénombre les 2 surfaces topologiques ouvertes de part et d'autre, parallèlement au plan de fracturation, virtuel). On prend ce paramètre matériau à  $\gamma_S = 3,89 \text{ J} \times \text{m}^2$  pour le verre SON68 selon la relation :

$$\gamma_S = \frac{K_{IC}^2}{2E} \quad (\text{II-46})$$

à 293 K, pour  $K_{IC} = 0,85 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$  [DDC+10].

Quelle qu'en soit la nature, l'énergie qui était accumulée suivant 9 éléments doit aussi être diminuée au final du fait de la réactualisation des contraintes à déformation constante, ceci à l'aide des 6 premiers modules :

$$\left\{ \begin{array}{l} W_{kk}^{(ll)} \leftarrow W_{kk}^{(ll)} \times M_{kk}^{(ll)} \quad \text{avec } k, l \in \{1, 2, 3\}, k \leq l \\ W_{kl}^{(kl)} \leftarrow W_{kl}^{(kl)} \times M_{kk}^{(ll)} \quad \text{avec } kl \in \{12, 13, 23\} \end{array} \right. \quad (\text{II-47})$$

Le but de toute cette procédure est donc dans un premier temps la récupération de l'énergie dissipée dans le modèle M4, à savoir que l'énergie dissipée à l'Éq. II-47 est récupérée entièrement, voire en excès, à l'Éq. II-45 page précédente. Cette énergie sert de donnée intermédiaire au code de fracturation qui quantifie ensuite la fracturation sans se préoccuper après cela de l'énergie dans le modèle d'endommagement ou de sa réactualisation dans le modèle FE (le code de fracturation est découplé). D'autres retours expérimentaux sont enfin pris en compte sur ces surfaces  $S_{kk}$  établies afin d'identifier le modèle M4 à des essais simples où la surface de fracturation expérimentale est caractérisée dans le verre. Cela implique alors de la mécanique de la rupture qui ne faisait pas partie du modèle M4 qui est en effet un modèle CDM (par essence d'initiation de l'endommagement).

## II.5 Résumé du chapitre

Les simulations du comportement thermomécanique des colis de déchets vitrifiés sont issues de la prise en compte d'une modélisation multi-physiques dont la force motrice est la sollicitation thermique. Un calcul thermique par la méthode des éléments finis est entrepris. Il se fonde sur des expériences de vitrification donnant les relevés en température de certains points du verre nucléaire ou de l'acier inoxydable du conteneur (pour deux procédés de vitrification différents présentés). Une méthode d'analyse inverse en flux thermiques est appliquée pour obtenir un ensemble de flux homogénéisés convergeant vers des relevés expérimentaux du verre. Ainsi, on permet des applications plus réalistes des conditions aux limites thermiques étudiées (comme prendre en compte une puissance thermique dans les colis chauds pour en étudier le refroidissement à long terme, en milliers d'années).

De façon découplée vis-à-vis de ce calcul thermique, les propriétés de relaxation structurale du verre sont établies pendant le procédé de vitrification, en fonction de l'histoire thermique locale du verre (à l'intérieur du modèle d'éléments finis, conservé tout au long des simulations multi-physiques). La relaxation du volume massique et celle du module de cisaillement permettent de rendre compte de phénomènes complexes de transition de phase, néanmoins fondamentaux pour permettre un calcul correct de la réponse thermomécanique de la structure-colis. Les propriétés de relaxation du verre nucléaire étudié n'étaient pas toutes disponibles, et il a fallu effectuer des compromis sur cette physique en tenant compte de propriétés de verres similaires étudiés dans la littérature sur des approches identiques de la relaxation structurale.

De façon découplée de la thermique du colis, et du calcul des propriétés en relaxation, le calcul de structure de l'ensemble du colis (acier et verre) est ensuite réalisé (il n'y a pas de rétroaction de la réponse mécanique du colis sur les deux premières physiques). L'algorithme proposé par Soules *et al.* [SBR<sup>+</sup>87] a été adapté à la résolution de la réponse viscoélastique du verre pendant le procédé de vitrification, et à la particularité de la présence d'un volume de verre liquide à cœur.

Un couplage du calcul de structure viscoélastique est ensuite réalisé, pour le verre solide, à la mécanique de l'endommagement continu du verre lorsque ce dernier dépasse localement une criticité du champ de contrainte. Le modèle d'endommagement élaboré par Sun et Khaleel [SK04] a été envisagé pour atteindre des objectifs identiques sur d'autres verres nucléaires, et a été également appliqué à d'autres endommagements des verres. Suite à des incohérences rencontrées lors du travail de documentation sur la construction de ce modèle, il a d'abord été reformulé de façon correcte, puis il a été porté à une généralisation pleinement 3D dans le cadre du travail de thèse. Le modèle obtenu, nommé M4, est couplé en endommagement de mode I et de mode II pour prendre en compte l'endommagement du bloc de verre dans le colis. Ces lois d'endommagement sont synthétisées dans le TAB. II-8 page suivante.

Une attention particulière a enfin été portée à l'énergie emmagasinée et dissipée lors du calcul de structure. En la considérant de façon découplée (en *post-process*), elle permet d'aborder des notions comme la nature et la quantité des surfaces de fracturation supposées créées lors de l'endommagement du verre pour le colis sollicité thermiquement.

TAB. II - 8 : Récapitulatif des modèles et hypothèses.

Modèles	M1 modèle de SK [SK04]	M2 modèle corrigé	M3 modèle à incrémentation des $D$ figée	M4 non couplé modèle en mode I sur le repère de structure cylindrique	M4 couplé modèle en mode I et II (incrémenta-tion séparée des modes)
Potentiel	$\rho\Psi = \frac{\lambda}{2} (\boldsymbol{\varepsilon}_{ii}^e)^2 + \mu \boldsymbol{\varepsilon}_{ij}^e \boldsymbol{\varepsilon}_{ji}^e + C_1 \boldsymbol{\varepsilon}_{ii}^e \boldsymbol{\varepsilon}_{ij}^e D_{ji} + C_2 \boldsymbol{\varepsilon}_{ij}^e \boldsymbol{\varepsilon}_{jk}^e D_{ki}$				
Loi de comportement	$\begin{bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{12} \\ \sigma_{13} \\ \sigma_{23} \end{bmatrix} = \llbracket \mathbf{K}^e + \mathbf{K}^d \rrbracket_{ijkl} \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ \gamma_{12} \\ \gamma_{13} \\ \gamma_{23} \end{bmatrix}, ij \text{ et } kl \in \{11, 22, 33, 12, 13, 23\}$ $\llbracket \mathbf{K}^e \rrbracket_{ijkl} = \lambda \delta_{ij} \delta_{kl} + \mu (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk})$ $\llbracket \mathbf{K}^d \rrbracket_{ijkl} = C_1 (\delta_{ij} D_{kl} + \delta_{kl} D_{ij}) + \dots$ $C_2 (\delta_{jk} D_{il} + \delta_{il} D_{jk}) \quad \left  \quad \frac{C_2}{2} (\delta_{jk} D_{il} + \delta_{il} D_{jk} + \delta_{ik} D_{jl} + \delta_{jl} D_{ik}) \right.$				
$(C_1, C_2)$	$= (\mu, -\frac{3}{2}\mu)$	$= (-\frac{\lambda}{2}, -\mu)$ en traction triaxiale			
Concernant l'endommagement	<p>Mode I et II de rupture :</p> $\llbracket D \rrbracket_{ii} = \begin{cases} 0, & \sigma_i \leq \sigma_{seuil} \\ \frac{\sigma_i - \sigma_{seuil}}{\sigma_{cr} - \sigma_{seuil}}, & \sigma_{seuil} < \sigma_i < \sigma_{cr} \\ 1, & \sigma_i \geq \sigma_{cr} \end{cases}, i \in \{1, 2, 3\}$ $\llbracket D \rrbracket_{ij} = \begin{cases} 0, &  \tau_{max}  \leq \tau_{seuil}, \text{ ou } \max(\sigma_i) \geq 0 \\ \frac{ \tau_{max}  - \tau_{seuil}}{\tau_{cr} - \tau_{seuil}}, & \tau_{seuil} <  \tau_{max}  < \tau_{cr}, \text{ et } \max(\sigma_i) < 0 \\ 1, &  \tau_{max}  \geq \tau_{cr}, \text{ et } \max(\sigma_i) < 0 \end{cases} \left\{ \begin{array}{l} i, j \in \{1, 2, 3\} \\ j \neq i \end{array} \right.$		<p>Modes I ou II précédents, mais il faut garder <math>D</math> tourné dans la même base (celle du repère principal en début d'endommagement)</p>	<p>Mode I dans le repère de structure cylindrique :</p> $\llbracket D \rrbracket_{ii} = \begin{cases} 0, & \llbracket \sigma \rrbracket_{ii} \leq \sigma_{seuil} \\ \frac{\llbracket \sigma \rrbracket_{ii} - \sigma_{seuil}}{\sigma_{cr} - \sigma_{seuil}}, & \sigma_{seuil} < \llbracket \sigma \rrbracket_{ii} < \sigma_{cr} \\ 1, & \llbracket \sigma \rrbracket_{ii} \geq \sigma_{cr} \end{cases}, i \in \{r, \theta, z\}$	<p>Mode II supplémentaire :</p> $\left\{ \begin{array}{l} \tau_{seuil} \leq  \tau_{ij}^{max}  \leq \tau_{cr} \Rightarrow \\  \tau_{ij}^{max}  \geq \tau_{cr} \Rightarrow \end{array} \right. \left\{ \begin{array}{l} \llbracket D \rrbracket_{ii} = \max \left( \frac{ \tau_{ij}^{max}  - \tau_{seuil}}{\tau_{cr} - \tau_{seuil}} \right)_{ir}, \\ \llbracket D \rrbracket_{jj} = \max \left( \frac{ \tau_{ij}^{max}  - \tau_{seuil}}{\tau_{cr} - \tau_{seuil}} \right)_{jr}, \\ \llbracket D \rrbracket_{ir} = \llbracket D \rrbracket_{jr} = 1 \end{array} \right\}, i, j \in \{r, \theta, z\}, i \neq j$



**CHAPITRE**

**III**

---

**Résultats de la simulation**

Nous voyons dans ce chapitre des résultats successifs en thermique au § III.1, en relaxation structurale au § III.2 page 106, du calcul de structure appliqué au colis au § III.3 page 113 et enfin en endommagement au § III.4 page 124.

### III.1 Températures simulées dans le bloc de verre

Les simulations thermiques, issues de l'expérience thermique du procédé creuset chaud, sont menées sur le bloc de verre simplifié (sans acier, 40 cm de diamètre, 1,1 m de haut). Elles permettent de définir les grandes tendances observables sur le verre et permettent aussi de mettre en perspective d'autres procédés de vitrification. Nous présentons ces résultats au § III.1.1, avant de passer à l'application de la même méthodologie mais au cas plus réaliste des colis CSD-V au § III.1.2 page 103. La présence d'acier ne change pas fondamentalement les conditions aux limites thermiques dans ces simulations puisque la conduction y est bien plus importante que dans le verre (ce n'est pas une barrière de diffusion thermique).

#### III.1.1 Creuset chaud, thermique simplifiée

On caractérise l'état interne des colis par des profils de température à des moments particuliers de la solidification du verre. La solidification est une période clé, d'une part vis-à-vis des contraintes transitoires qui peuvent être critiques en mode I (en périphérie du verre), comme cela a été rapporté pour le verre trempé [DC98] ou observé dans un cas de modélisation particulier à la figure II-23 page 86 ; et d'autre part pour l'établissement des contraintes résiduelles à température ambiante (une fois tous les profils de température refroidis et aplanis – sans gradient thermique spatial – ce qui se passe par rapport aux profils en début de solidification est donc important). Les temps successifs de référence, choisis pour caractériser la solidification, sont au nombre de quatre et décrits ci-dessous :

- (i) le début de la solidification (ici à la température fixe de 773 K, repérée par des droites en tirets dans certaines des figures), la solidification commence en périphérie du verre sur le bord à  $R = \pm 0,2$  m dans le repère cylindrique ;
- (ii) lorsque le profil de température (selon un diamètre passant par le point le plus chaud du colis) est tel qu'il est solidifié sur  $\frac{1}{4}$  du rayon en périphérie (front de solidification à  $R = \pm 0,15$  m) ;
- (iii) lorsque ce profil de température est tel qu'il est solidifié sur la moitié du rayon en périphérie (front de solidification à  $R = \pm 0,1$  m) ;
- (iv) la fin de la solidification (l'ensemble des profils de température vient de passer sous 773 K).

Les conditions aux limites thermiques présentées au § II.2.3.1 page 51 correspondent à une première approximation de procédés de vitrification alternatifs ou de traitements thermiques qu'on pourrait appliquer aux colis réalisés selon la thermique du creuset chaud. On rappelle brièvement leur signification en ces termes :

- ◇ Cas I – De référence, expérimental.

TAB. III - 1 : Temps de référence [minutes écoulées depuis la fin de la coulée, le Cas II et le Cas III commençant respectivement à 0 et 150 minutes dans ce référentiel, cf. FIG. II - 10 p. 54].

Temps de référence	Cas I	Cas II	Cas III	Cas IV	Cas V
	Réf.	H high T	H low T	Linear BC	Quench BC
(i)	159	159	161	386	150
(ii)	273	294	215	516	198
(iii)	374	400	308	593	295
(iv)	478	508	408	754	367

- ◇ Cas II et III – Traitements thermiques d’homogénéisation des  $T$  :
  - \* Cas II :  $H$  high  $T$  à haute température – 1373 K (température de coulée).
  - \* Cas III :  $H$  low  $T$  à « basse » température – 856 K (proche de  $T_g$  dans la phase liquide, d’au moins 50 K au-dessus).
- ◇ Cas IV et V – Conditions expérimentales suivies jusqu’à 856 K dans le refroidissement final, puis on modifie le taux de refroidissement des surfaces :
  - \* Cas IV : taux linéaires (*linear BC*), on passe initialement à un plus bas taux de refroidissement que le refroidissement expérimental (taux constant jusqu’à température ambiante).
  - \* Cas V : pour des conditions aux limites de trempe (*quench BC*).

Les profils de température correspondant à ces temps de référence et à ces conditions aux limites thermiques sont illustrés à la figure III - 1 page 101 aux gradients spatiaux les plus importants (soit des profils positionnés sur un diamètre du bloc de verre où  $T_{\text{cœur}} - T_{\text{extérieur}}$  est maximum).

Les temps exprimés dans le même repère lié au procédé sont donnés au TAB. III - 1, là aussi pour chaque temps de référence et chaque cas de conditions aux limites thermiques.

La carte complète des températures pour ce Cas I expérimental est illustrée à la figure III - 2 page 101 pour un colis dans cette géométrie simplifiée, dans le référentiel de temps du TAB. III - 1 mais à partir du début de la solidification (i).

Des résultats sur l’évolution du gradient thermique spatial selon l’épaisseur de verre solidifié sont donnés aux figures III - 3a à III - 3b page 102. Cette valeur n’est pas déterminée numériquement en tout début de solidification – vers le temps (i) – mais elle y tend à la valeur de la pente aux bords des profils de température de la figure III - 1 page 101 (pente liée au flux de Fourier – de conduction – dans le verre à proximité du bord).

Ces résultats de gradients thermiques sont pour le moment exprimés de façon spatiale, mais la dimension temporelle est également importante dans l'évolution des profils de température, telle qu'on l'observe au travers de la séquence des temps (i) – (ii) – (iii) – (iv) présentée à la figure III-1 page ci-contre. Cette séquence est à mettre en perspective également avec un profil plat à  $T_{amb}$  en fin de refroidissement. Cette caractéristique temporelle des gradients thermiques est par exemple rapportée par Faletti et Ethridge [FE88], mais dans la mesure où nous effectuons le calcul de structure mécanique sur ces thermiques plus loin dans ce chapitre, nous ne traiterons pas de ces aspects dans les résultats thermiques.

Les gradients thermiques spatiaux déterminés ici peuvent être mis en perspective par les traitements similaires étudiés dans la littérature :

- ◇ Faletti et Ethridge [FE88] rapportent autour de leur début de solidification une différence de températures du centre au bord du colis qui est de l'ordre de 150 K alors qu'elle est à 350 K dans le procédé expérimental à creuset chaud (Cas I, (i), à la figure III-1 page suivante).
- ◇ Dans les mêmes travaux [FE88], lorsque la température descend à 473 K, cette différence n'est plus que de 85 K alors qu'elle reste élevée à 300 K pour le procédé creuset chaud étudié ici.
- ◇ Dans les mêmes travaux [FE88], Faletti et Ethridge passent en revue de nombreuses expériences caractérisant des profils de température à une température extérieure de 773 K qui correspond à notre début de solidification (i). Les traitements les plus élevés passés en revue dépassent 300 K de différence de températures entre le centre et le bord, ce qui est proche des 350 K du procédé creuset chaud ici.
- ◇ Divers auteurs expriment ces gradients en K/m comme nous l'avons fait. Dans notre simulation thermique de référence du creuset chaud (Cas I), les températures de 350 à 400 K majorent les différences du centre au bord du bloc de verre (vers 2 h après le début de la solidification, au niveau de la deuxième coulée) ; ils deviendraient dans ce cas 1750 K/m à 2000 K/m.
- ◇ Ainsi, Kahl *et al.* [KKS<sup>+</sup>91] rapportent des gradients thermiques maxima (sur 0,15 m de rayon) qui sont de 767 K/m et 1 000 K/m pour des colis chauds avec une puissance thermique de volume (l'un étant isolé thermiquement). Initialement, dans le four de recuit à 1 200 K, ces gradients étaient de 433 K/m et 667 K/m (même pour un four où la température est imposée en régime permanent, un gradient existe dans le verre dû à la puissance thermique). Ces gradients sont difficiles à comparer directement à la thermique du creuset chaud comme le diamètre a une différence de 13 cm.
- ◇ Quant au procédé de verre trempé, Daudeville et Carré [DC98] rapportent des gradients de l'ordre de 150 K entre le centre et le bord de plaques fines (6,1 mm d'épaisseur), ce qui correspond à 49 180 K/m. Ce gradient est bien au-dessus des simulations entreprises ici dans notre fenêtre paramétrique autour du procédé creuset chaud, le maximum des gradients établis ici étant obtenu par le cas d'une trempe (Cas V) qui donne 9 500 K/m (au temps (ii) pour une épaisseur de solide de 50 mm, même si la taille des éléments dans ce modèle à géométrie simplifiée commence à être discutable pour la bonne définition de tels gradients).

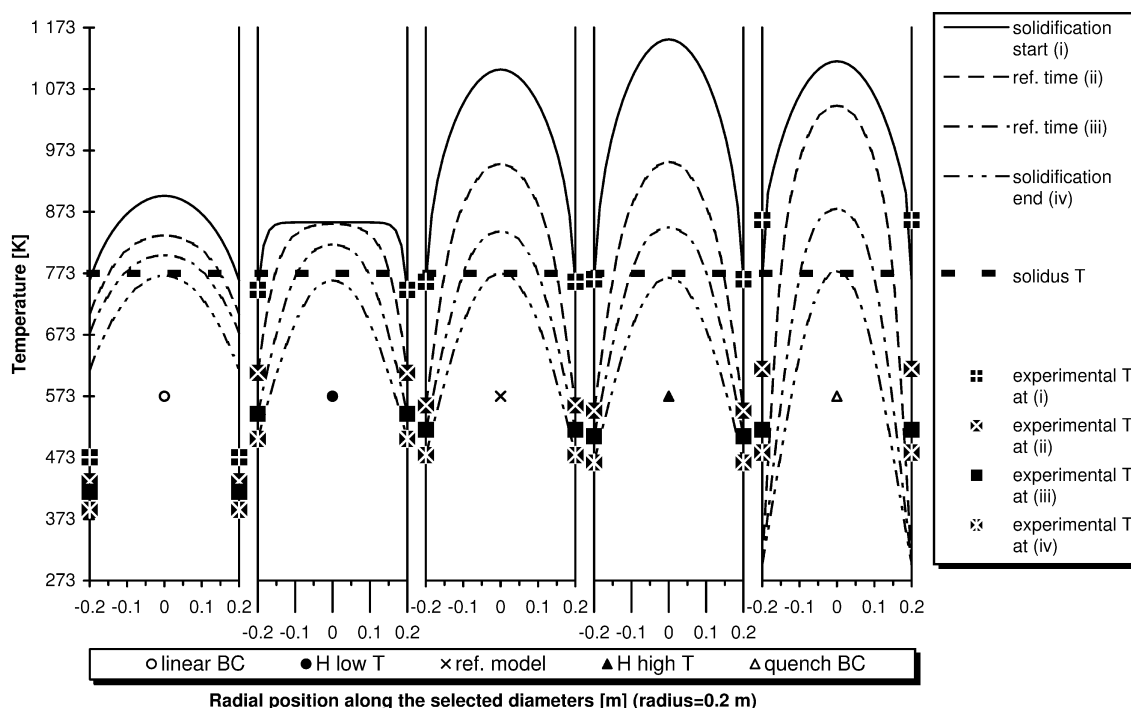


FIG. III - 1 : Série des profils de température qui correspondent aux temps de référence (i à iv) pour chaque système de conditions aux limites thermiques étudié ici pour le creuset chaud. Ces profils sont tracés selon des diamètres passant par le point le plus chaud du colis. Les températures expérimentales sont rapportées (aux bords) aux mêmes temps que ceux auxquels sont définis les profils (*cf.* FIG. II - 10 p. 54).

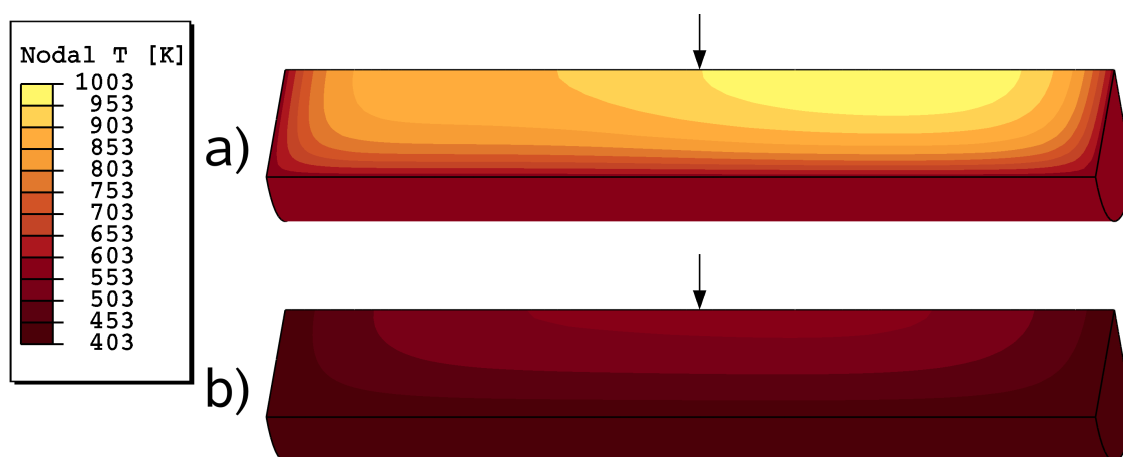
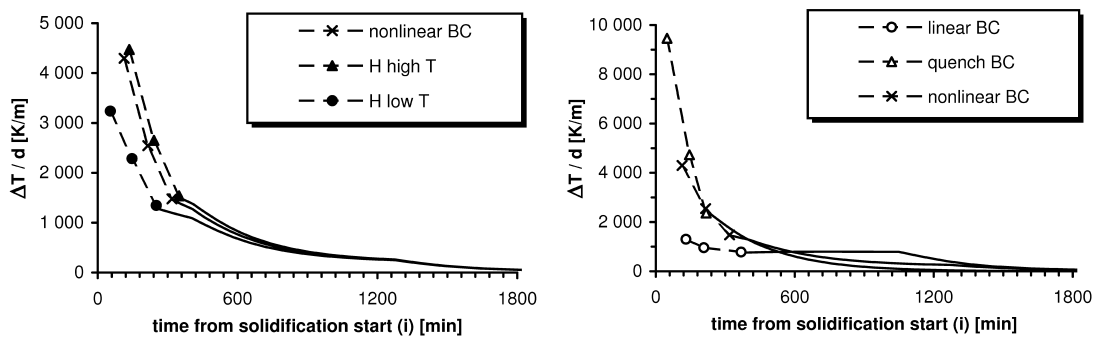


FIG. III-2 : Cas I, expérimental du creuset chaud, à 76 min (a) et 620 min (b) après le début de la solidification (i). Les températures internes sont axisymétriques comme les conditions aux limites le sont aussi (la moitié du modèle est représentée ici). Les teintes de couleurs définissent les courbes iso- $T$  tous les 50 K. La même température uniforme est appliquée à toute la surface à ce stade du refroidissement. Les flèches montrent le centre du colis (hauteur de mi-coulée) avec la 1<sup>ère</sup> coulée (la plus ancienne) à gauche, et la 2<sup>e</sup> à droite.



(a) Cas I, II, III : Simulations thermiques à températures internes homogénéisées (et celle du Cas I à titre comparatif) et au refroidissement externe identique au Cas I.

(b) Cas I, IV, V : Simulations thermiques à températures internes identiques au Cas I jusqu'au refroidissement final différent pour chaque simulation.

FIG. III - 3 : Différences radiales maximum des températures exprimées par rapport à l'épaisseur radiale de la phase solide du verre. Les trois premiers points illustrés sur chaque courbe correspondent aux temps de référence consécutifs (ii) – (iii) – (iv). La ligne continue est utilisée dès lors que le colis est entièrement solidifié ( $d = 0,2$  m).

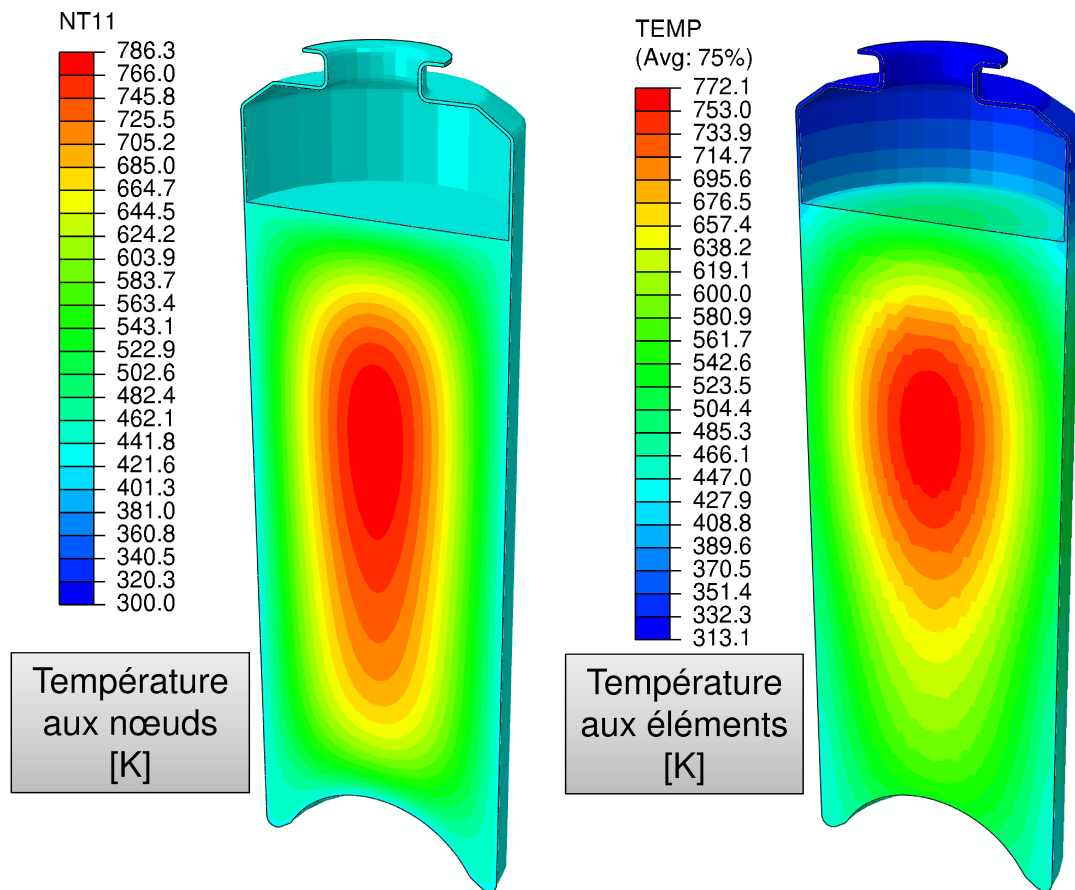
### III.1.2 Thermique des colis CSD-V

La thermique des procédés de vitrification est simulée également de façon plus réaliste avec la présence du conteneur en acier inoxydable et des propriétés thermiques plus adaptées pour le verre liquide. On confronte les deux procédés de vitrification étudiés à la figure III - 4 page suivante (creuset chaud/creuset froid), non plus avec des températures en périphérie du colis, comme c'était le cas à la figure II - 5 page 49, mais par rapport aux cartes des températures calculées dans le colis pour chaque procédé. Un temps caractéristique commun est choisi pour représenter ces procédés, il correspond à la fin de la solidification, qui avait également été illustrée par un profil de température à la figure III - 1 page 101 pour la simulation en propriétés simplifiées (Cas I, temps (iv)).

Les gradients thermiques spatiaux pour le creuset chaud apparaissent comme étant du même ordre de grandeur (et qualitativement semblables) dans cette nouvelle simulation plus réaliste. Les gradients y sont maintenant légèrement supérieurs. En effet, le colis en propriétés simplifiées avait un plus petit diamètre de 3 cm et surtout moins d'énergie interne dans la phase liquide à cause des chaleurs massiques sous-estimées dans la simulation simplifiée.

Les deux procédés creuset chaud et creuset froid ont des signatures très différentes au niveau des cartes de températures, nous aurons l'occasion d'y revenir en confrontant les différentes physiques des modèles, appliquées à ces sollicitations thermiques.

Pour le creuset froid, comme la simulation actuelle (notée « Aii-a ») est modélisée en flux homogénéisés fondés sur l'expérience, nous pouvons considérer directement le cas d'un colis chaud réalisé pour ce même procédé, qu'on fixe à une puissance thermique de 2 500 W pour l'ensemble du colis au moment de la coulée (simulation notée « Aii-b »). Les conditions aux limites de refroidissement, simplifiées, sont appliquées sur 100 ans de temps simulé par des conditions de refroidissement en convection naturelle (identiquement à ce qui se passe en fin du refroidissement pour la simulation du colis inactif Aii-a). On confronte les deux thermiques sur une échelle logarithmique des temps, pour le cœur et à la surface externe à mi-hauteur de chaque colis, à la figure III - 5 page 105.



(a) Procédé creuset chaud, à 20 h depuis le début de la coulée (n° 1) ou 10 h depuis la fin de la coulée (n° 2).

(b) Procédé creuset froid, à un peu plus de 10 h depuis le début de la coulée (ou coulée n° 1) ou 5 h depuis la fin de la coulée (ou coulée n° 2).

FIG. III - 4 : Comparatif des cartes thermiques dans les procédés de vitrification expérimentaux simulés, instant choisi à la fin de la solidification, qui était référencé (iv) précédemment pour le bloc de verre simplifié [les échelles de température, en K, sont similaires dans cette figure].



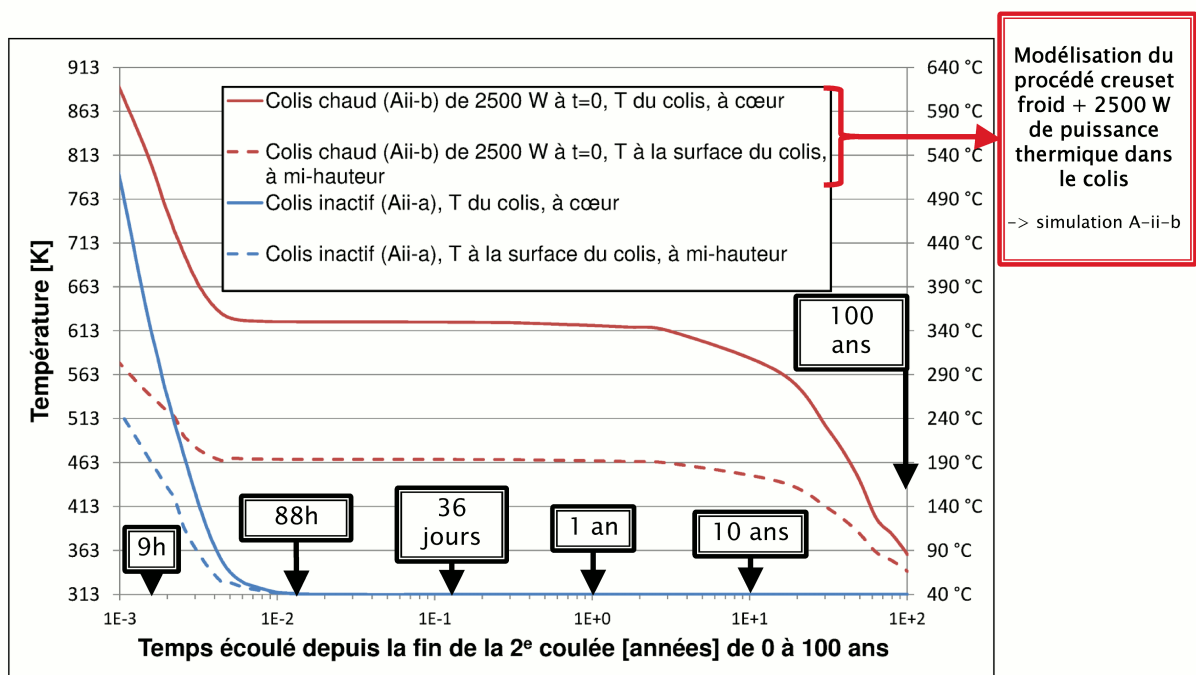


FIG. III - 5 : Comparatif des températures simulées dans un colis inactif et dans un colis chaud, pour le procédé creuset froid. Les points de comparaison sont ici à cœur et à la surface externe à mi-hauteur dans chacune des simulations.

### III.1.3 Résumé des résultats thermiques

Le protocole de simulation thermique mis en place permet, en fonction des relevés expérimentaux, de simuler la thermique des colis dans les procédés de vitrification étudiés (creuset chaud ou creuset froid). Diverses caractéristiques importantes de la sollicitation thermique sont accessibles, comme les gradients thermiques qui au niveau du calcul de structure à venir en sont la force motrice.

Des conditions aux limites thermiques alternatives aux deux procédés ont été testées et permettent d'entrevoir les capacités de cet outil à prévoir les gradients thermiques des expériences de vitrifications correspondantes. La thermique en géométrie simplifiée du bloc de verre, abordée principalement ici, s'avère une bonne approximation par rapport au cas plus réaliste d'un colis CSD-V.

Du point de vue des conditions aux limites alternatives étudiées, les gradients thermiques permettent la quantification fine des grandes tendances observées ici. De façon totalement attendue, la trempe les augmente fortement alors qu'une simulation d'isolation thermique particulière les diminue significativement. Les changements internes de la carte des températures (dans la fenêtre paramétrique simulée) ont une influence moindre sur les gradients thermiques déterminés. Ces résultats avec des thermiques différentes ont forcément une influence sur le calcul de structure (l'histoire thermique donne une transition vitreuse qui peut fortement évoluer, et les gradients donnent une réponse mécanique qui peut fortement évoluer aussi).

Le cas du colis chaud a été traité avec un terme source de 2 500 W à la coulée et qui évolue dans le temps (puissance thermique de ce colis en entier). Ce cas n'est pas tellement différent du reste des conditions aux limites étudiées ici, quand on le considère à chargement thermique constant (distance à  $T_{amb}$  en fin de refroidissement). Les périodes mises en jeu dans la thermique du colis chaud, qu'on simule en centaines d'années quel que soit le refroidissement, sont ici totalement équivalentes à des périodes de quelques heures en fin de refroidissement d'un colis inactif. Néanmoins, la considération de telles périodes de temps dans le calcul viscoélastique à suivre n'est pas équivalent a priori (à cause de l'équivalence temps-température, la transition vitreuse peut fortement évoluer).

## III.2 Résultats de la relaxation structurale

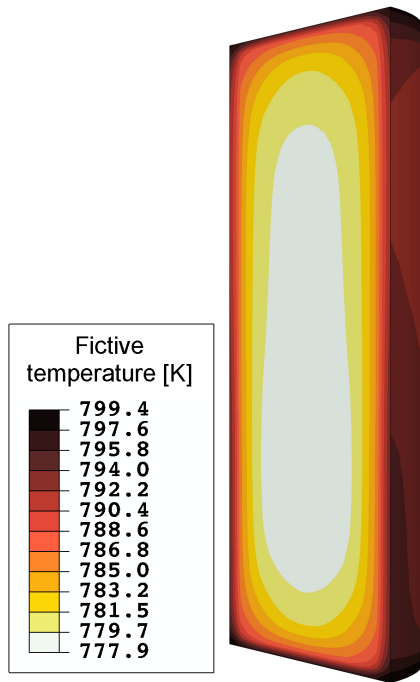
Dans un premier temps, nous voyons uniquement des résultats quant à la transition vitreuse, pour l'étudier séparément en dehors du calcul de structure qui viendra s'y greffer. Au § III.2.1 page ci-contre nous voyons les grandes tendances des températures de transition vitreuse calculées à l'échelle d'un colis à la fin du refroidissement à  $T_{amb}$  (et au bout d'une période allant jusqu'à 100 ans). Puis au § III.2.2 page 109 nous étudions l'évolution de cette transition, telle que quantifiée dans le temps en fonction de l'histoire thermique locale par l'état interne de relaxation structurale  $T_f$  (dans le modèle de TNM).

### III.2.1 Températures de transition vitreuse finales

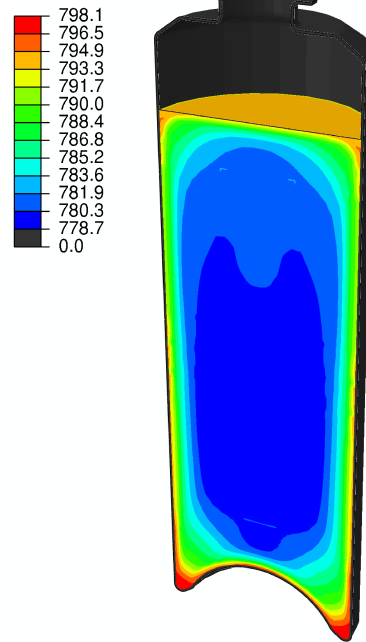
L'application des modèles de transition de phase (code de relaxation) aux différents résultats thermiques obtenus et présentés jusqu'à présent donne une relaxation structurale qui n'évolue plus dans l'état solide après le refroidissement subi lors de la transition vitreuse (durant les 100 premières années, et d'après les propriétés matériau de relaxation structurale  $M_V$  utilisées dans le modèle de TNM, cf. TAB. II - 6 page 67). Ce phénomène de stabilisation du verre est absent notamment de la simulation du procédé creuset froid pour le cas d'un colis chaud à 2 500 W (Aii-b), pour ce refroidissement proposé en convection naturelle. Nous n'avons pas étudié les spécificités de début des phénomènes de relaxation du verre dans nos modèles (selon une équivalence temps-température par exemple). Néanmoins, des procédés thermiques comme ce dernier (colis chaud) favorisent fortement l'apparition de ce phénomène.

On représente la carte des températures de transition vitreuse dans le colis, telles qu'on pourrait les obtenir après un refroidissement qui suit de près la transition vitreuse, ou à 100 ans. Comme on l'a vu, cette carte dépend de l'histoire thermique locale du verre de sorte que les zones refroidissant plus lentement autour de la transition vitreuse ont une température de transition vitreuse plus faible. Quatre procédés sont confrontés entre eux à la figure III - 6 page suivante :

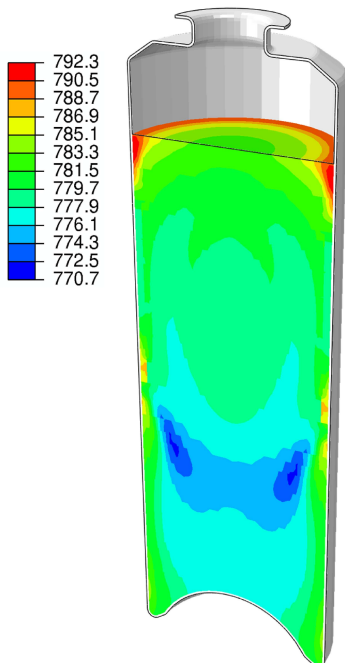
- a) le procédé creuset chaud expérimental en propriétés thermiques et géométriques simplifiées,
- b) le procédé creuset chaud avec le bloc de verre en configuration de conteneur CSD-V,
- c) le procédé creuset froid, d'un colis inactif, avec le bloc de verre en configuration de conteneur CSD-V,
- d) le procédé creuset froid, d'un colis chaud à 2 500 W, avec le bloc de verre en configuration de conteneur CSD-V.



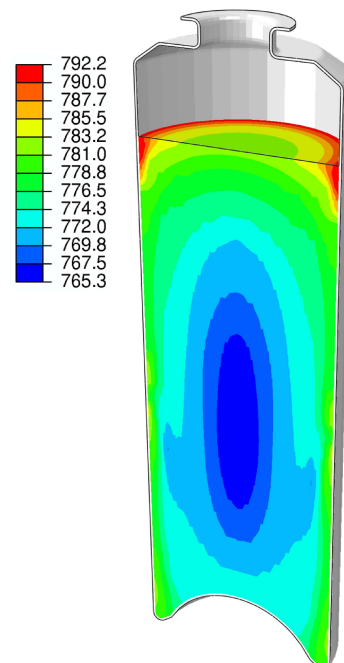
(a) Creuset chaud en propriétés simplifiées.



(b) Creuset chaud avec le bloc de verre en configuration de conteneur CSD-V.



(c) Creuset froid, colis inactif (Aii-a), avec le bloc de verre en configuration de conteneur CSD-V.



(d) Creuset froid, colis chaud (Aii-b), avec le bloc de verre en configuration de conteneur CSD-V.

FIG. III-6 : Comparatif des cartes des températures de transition vitreuse finales pour les procédés expérimentaux modélisés [les légendes des  $T_g$ , en K, sont différentes].

### III.2.2 Évolution de la transition vitreuse dans le colis

**i) Front de solidification** Pendant la solidification, le front de solidification évolue de façon caractéristique en fonction du procédé (due à la répartition des histoires thermiques dans le colis), ce qu'on visualise par exemple séquentiellement pour le procédé creuset chaud à la figure III - 7 page suivante.

Le front de solidification à l'instant qu'on appelle début de solidification (lorsque le liquide est entièrement entouré de solide), est très différent pour le creuset froid, que ce soit pour le colis inactif (Aii-a), représenté à la figure III - 8 page 111, ou le colis chaud (Aii-b). Dans le procédé creuset froid, le solide qui se forme à l'issue de la coulée n° 1 ne redevient pas totalement liquide au moment de la coulée n° 2, alors que c'était le cas pour le creuset chaud. Cela entraîne des phénomènes complexes de refonte qu'il faut prendre ensuite en charge dans le calcul de structure, ce que nous avons fait avec des outils simples. Il n'empêche qu'une trempe chaude par la deuxième coulée est quand même en activité en périphérie de l'interface des deux coulées, sur un verre qui reste solide jusqu'à  $T_{amb}$ .

Dans le procédé creuset chaud étudié le premier dans les résultats de thermique, le calcul commence plus tard comme les températures sont plus élevées, globalement dans le colis, ce qui efface tout aspect mécanique lié à la seule coulée n° 1.

**ii) Évolution des températures fictives** Pour le creuset chaud étudié en propriétés simplifiées nous caractérisons l'évolution temporelle de la relaxation structurale en deux points extrêmes de chaque colis, du point de vue de ce comportement-là (toutes les autres températures de transition vitreuse dans chaque simulation de colis sont comprises dans cet intervalle délimité).

Nous voyons à la figure III - 9 page 112 à quel point la transition vitreuse dépend de l'histoire thermique en illustrant les différents cas de conditions aux limites thermiques étudiées dans ce modèle (Cas I à V). (Les taux de refroidissement sont les pentes des courbes dans la figure III - 9a page 112, même si une partie de l'histoire thermique avant la transition n'est pas visible.)

D'autre part, pour chaque cas étudié, l'étendue entre ces deux valeurs extrêmes de températures de transition vitreuse est d'autant plus grande que la différence de taux de refroidissement entre le cœur et la périphérie est grande (le refroidissement a généralement le plus bas taux au cœur pendant la transition).

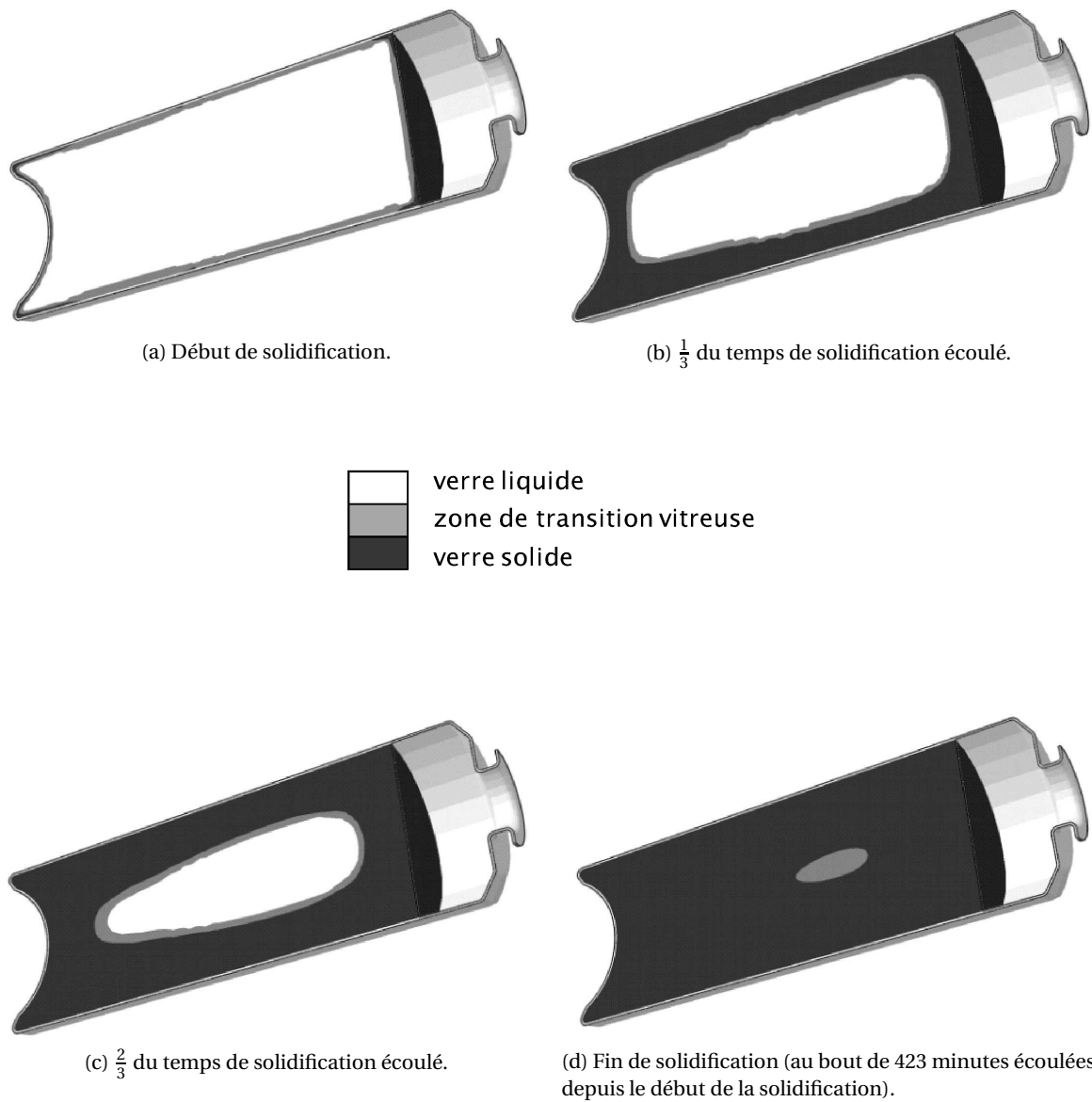


FIG. III - 7 : Évolution du front de solidification dans le procédé à creuset chaud, telle que simulée après relaxation du verre SON68 en étudiant le retard  $T_f - T$  (qui s'écarte de l'équilibre  $T_f = T$  à la solidification).

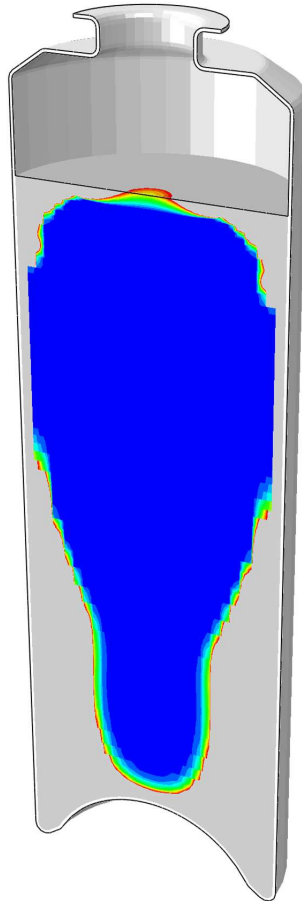
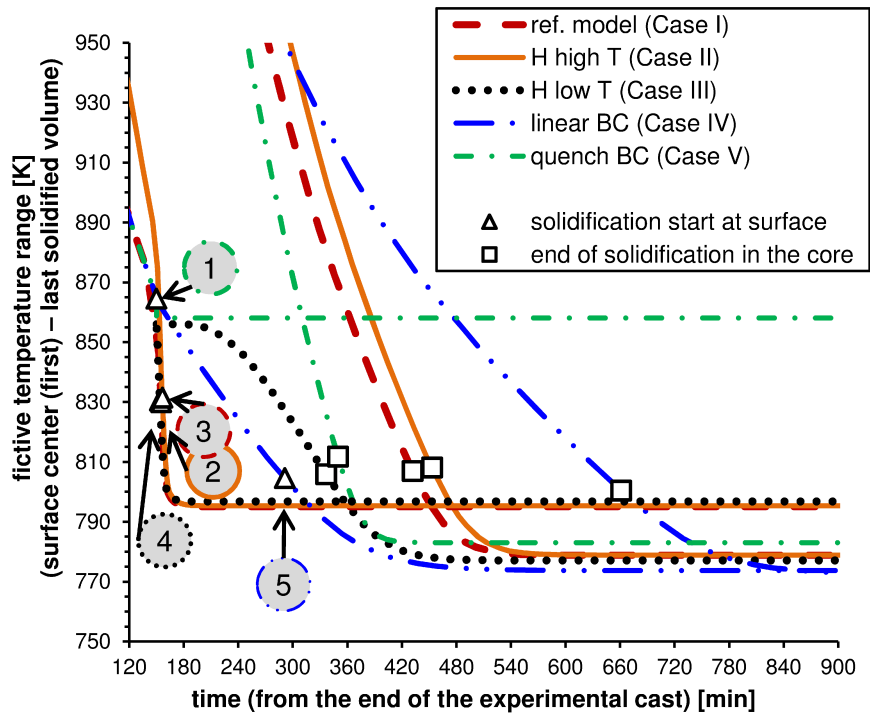
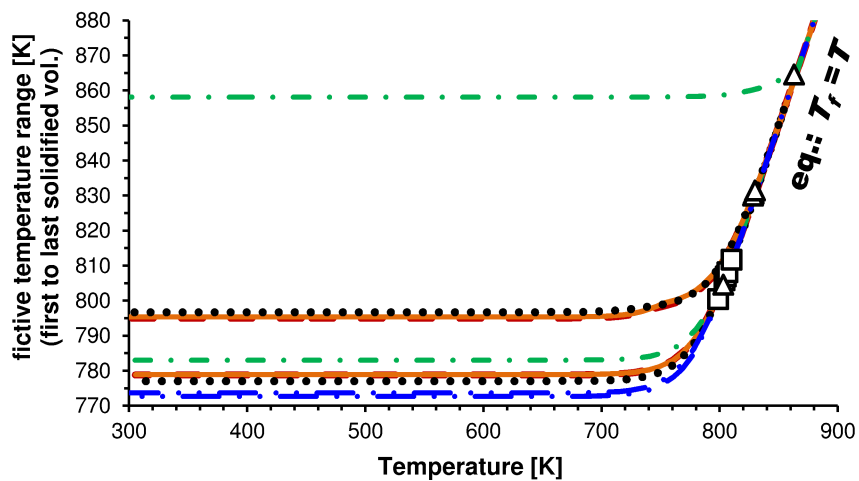


FIG. III- 8 : Front de solidification pour le colis inactif (Aii-a) du procédé creuset froid, au moment où le verre liquide est initialement entouré de solide (on considèrerait ce phénomène comme le début de la solidification pour le creuset chaud) [liquide en bleu, solide en grisé, les autres couleurs marquant la zone où la transition est active à ce moment-là].



(a)  $T_f$  en fonction du temps dans le procédé. Dans l'étude purement thermique, les simulations donnent des résultats en termes de gradients thermiques, ordonnés ici de (1) à (5) du plus élevé au plus faible, avec les valeurs respectives suivantes : 9460, 4472, 4297, 3239 et 1303 K/m, gradients calculés dans le verre solide.



(b) Les  $T_f$ , dont l'évolution est identique ici, sont maintenant présentées en fonction de la température.

FIG. III - 9 : Dans le référentiel de temps lié au procédé, deux évolutions extrêmes à deux positions différentes du bloc de verre en ce qui concerne les températures fictives dans les modèles (procédés en creuset chaud à propriétés simplifiées, Cas I-V des conditions aux limites thermiques). Ces deux points extrêmes sont obtenus pour l'un au milieu de la surface libre du verre en haut du bloc de verre, et pour l'autre à cœur au niveau du dernier volume de verre solidifié (ce qui n'est pas forcément à la même hauteur pour toutes les simulations). Les symboles sur chaque courbe délimitent le début de la solidification globale et sa fin dans les simulations.



### III.3 Calcul de structure viscoélastique non endommageable

La loi de comportement viscoélastique ayant plusieurs relaxations prises en compte ( $M_V$  et  $M_S$ ), on peut être amené dans cette partie à étudier successivement l'influence de chacune de ces relaxations, pour le creuset chaud par exemple (les températures de transition vitreuse  $\gamma$  sont déterminées à des valeurs entre 778 K et 799 K sur l'ensemble du colis) :

- ◇ Cas I-a «  $M_V$  &  $M_S$  » : on prend en compte les deux relaxations dans l'algorithme, une  $T_f$  est calculée d'après  $M_V$ .
- ◇ Cas I-b «  $M_V - M_S$  » : on prend en compte  $M_V$  dans l'algorithme,  $T_f$  est calculée mais ensuite la relaxation  $M_S$  n'est pas prise en compte : si on est dans le solide (d'après  $T_f$ ), on applique les propriétés thermomécaniques du verre solide, sinon ce sont directement les propriétés du liquide qui sont appliquées.
- ◇ Cas I-c « ni  $M_V$  ni  $M_S$  » : modèle sans aucune relaxation. On prend la température de transition fixe pour le verre SON68, caractérisée par dilatométrie à 775 K, pour déterminer ses propriétés élastiques et de dilatation : soit à celles du liquide, soit à celles du solide.

Cette approche rapportée par Ganghoffer [Gan00] permet d'étudier l'influence de la relaxation  $M_S$  en comparant les résultats du Cas I-a avec ceux du Cas I-b. L'influence de la relaxation  $M_V$  (et de la distribution des  $T_g$  dans le colis) s'effectue en comparant les résultats du Cas I-b avec ceux du Cas I-c.

#### III.3.1 Pression du verre liquide

Dans les modèles viscoélastiques appliqués au cas des procédés de vitrification, on peut avoir accès à l'état de contrainte en périphérie du colis, où le verre vient de solidifier, afin de voir si ce dernier est susceptible de s'endommager en mode I par les contraintes transitoires régissant le début de la solidification. Avec une très bonne approximation géométrique de ce bord, on pourrait étudier le dépassement local de la contrainte seuil/critique pour l'endommagement lors de phénomènes violents de type trempe (ce cas est traité – pour des simulations de résultats expérimentaux – pour des échantillons de trempe au § III.4.1.1 page 126). Une autre approche consiste à considérer le verre liquide, qui est à cœur, en équilibre mécanique avec ce solide qui l'entoure.

Dans le domaine des verres trempés, l'équilibre du cœur liquide en compression est rapporté par Daudeville et Carré [DC98] qui s'intéressent aux contraintes transitoires de traction au bord. Ils expliquent ce phénomène comme étant dû au voisinage de la surface du verre qui se contracte plus rapidement que le cœur (pour des géométries de plaques en verre).

Nous avons extrait de tels résultats pour le procédé expérimental selon les modélisations successives de la relaxation (Cas I-a, Cas I-b et Cas I-c) à la figure III - 10 page 115, ainsi que pour les différentes conditions aux limites thermiques (Cas I-V) à la figure III - 11 page 116.

Il n'y a pas de montée en surpression significative du verre liquide pour le traitement de référence (Cas I-a). D'après le calcul de structure correspondant aux différents cas abordés, les Cas I-a à /-c n'ont pas franchi de seuil d'endommagement en mode I dans ce modèle du creuset chaud aux propriétés simplifiées. Pour la fenêtre paramétrique liée aux Cas I à V, seul le Cas V de trempe présente des contraintes transitoires critiques dans ce modèle (Cas V-a), même si elles ne sont

présentes que de façon isolées aux bords supérieur et inférieur du bloc de verre simplifié. Cette simulation avait bien la plus haute pression du liquide, à la figure III - 11 page 116, qui monte à 1 300 kPa pour causer ce cas de figure (les pressions positives sont par convention en surpression).

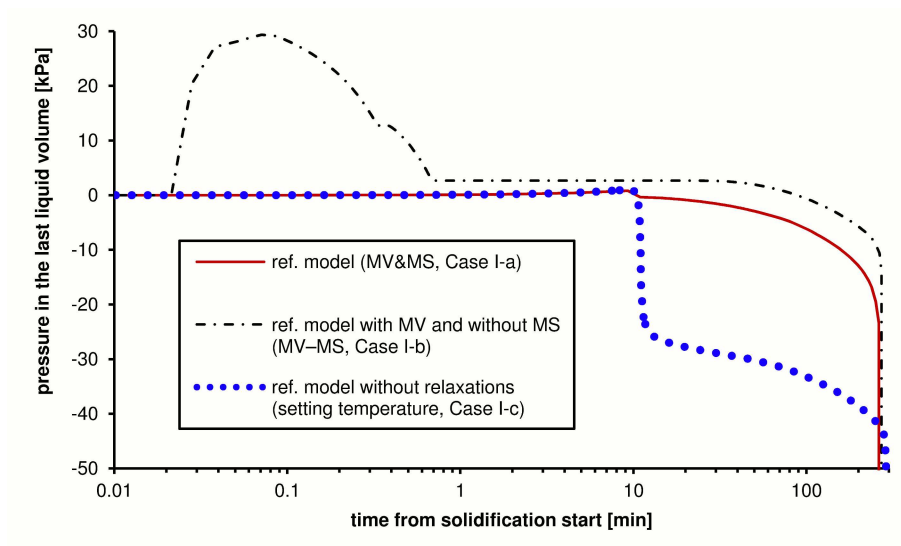
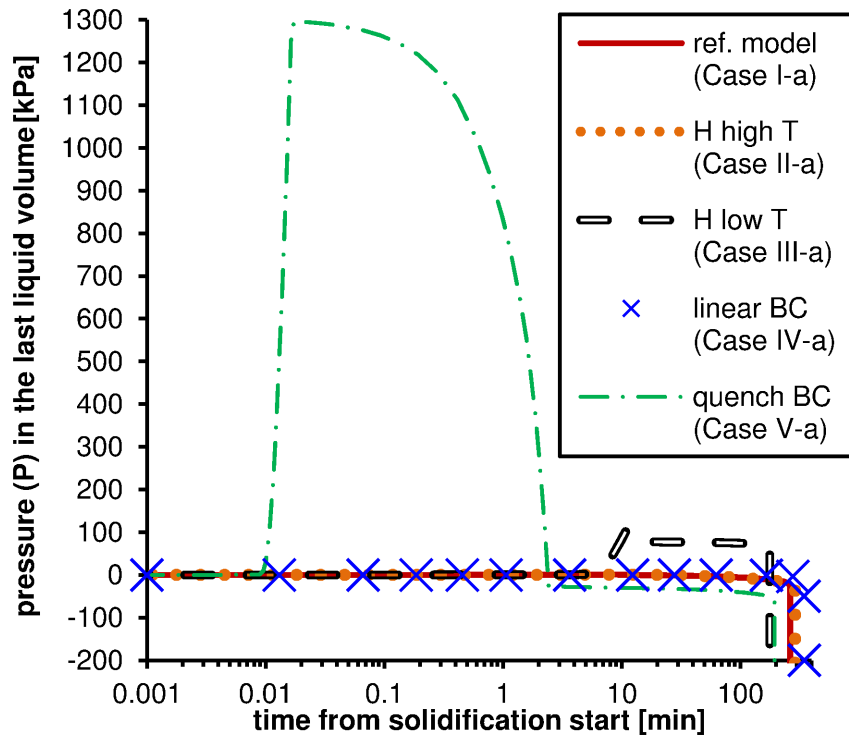
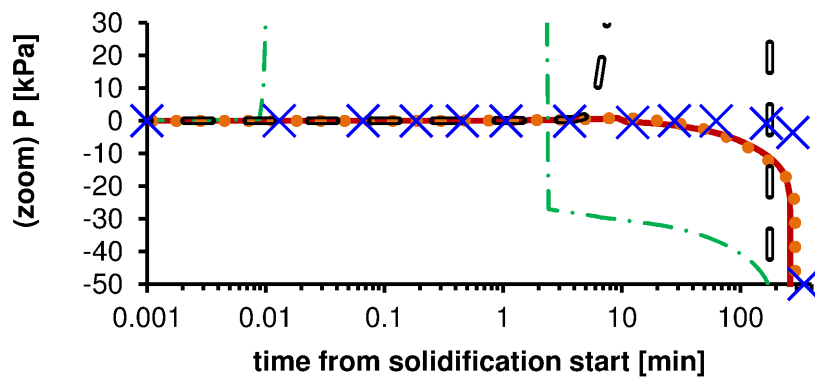


FIG. III- 10 : Pression du verre liquide pendant la solidification du creuset chaud (Cas I, en propriétés simplifiées). La pression est déterminée suivant 3 modèles (visco)élastiques introduits (Cas I-a, Cas I-b, Cas I-c).



(a) Vue globale de l'échelle des pressions.



(b) Zoom sur les petites pressions.

FIG. III - 11 : Pression du verre liquide pendant la solidification du creuset chaud (Cas I à V, en propriétés simplifiées, avec la prise en compte des relaxations  $M_V$  &  $M_S$ ).

### III.3.2 Calculs de structure (visco)élastique sur le bloc de verre seul

On caractérise dans le procédé de vitrification creuset chaud, en propriétés simplifiées, les contraintes résiduelles à la figure III - 12 page 119 (Cas I-a, fin du refroidissement à  $T_{amb}$ ).

Tous les procédés de vitrification simulés, ainsi que les variantes avec des conditions aux limites thermiques modifiées, montrent dans le colis des états de contrainte qualitativement similaires à celui du bloc de verre seul : traction proche d'une traction triaxiale au centre, et compression biaxiale en périphérie.

Pour caractériser de façon simple ces contraintes résiduelles, nous pouvons extraire les intensités extrêmes du champ de contrainte rencontrées dans ces volumes caractéristiques :

- ◇ pour caractériser l'état en traction triaxiale (mode I susceptible), en récupérant à cœur le long de l'axe cylindrique la valeur maximum de la contrainte maximum ;
- ◇ pour caractériser l'état en compression biaxiale du bord (mode II susceptible), en récupérant sur la périphérie du bloc de verre la valeur maximum du cisaillement maximum ;
- ◇ (par volumes caractéristiques on excluait en fait une zone du bloc de verre d' $1/16$  de la hauteur à chaque extrémité, considérant qu'il s'agit là d'un effet de bords non significatif).

Des caractérisations de ce type ont été relevées aux TABS. III - 2 à III - 3 page suivante, dans les calculs menés pour les mêmes simulations du creuset chaud en conditions simplifiées (dont on avait regardé précédemment la pression du verre liquide pendant la solidification).

Deux représentations rencontrées habituellement dans la littérature caractérisent assez bien l'évolution des contraintes internes avant le chargement thermique final (contraintes résiduelles), il s'agit d'une représentation en profils de contraintes à des instants successifs, à la figure III - 13 page 120, et l'évolution de l'état de contrainte à des positions particulières du colis à la figure III - 14 page 121 (une telle représentation pour le verre trempé est rapportée par exemple par Nielsen *et al.* [NOPS10]).

TAB. III-2 : Évaluation des contraintes résiduelles à la fin du refroidissement pour le procédé creuset chaud en propriétés simplifiées (Cas I) en ce qui concerne les différents modèles (visco)élastiques utilisés.

Modèle mécanique	Cas I-a $M_V$ & $M_S$ Réf. exp.	Cas I-b $M_V - M_S$  $M_V$ mais sans relaxation $M_S$	Cas I-c ni $M_V$ ni $M_S$ sans relaxation
Contrainte principale maximum, valeur maximum à cœur [MPa]	193	258	185
Contrainte de Tresca ( $2\tau^{\max}$ ), maximum sur la périphérie du colis [MPa]	233	415	206

TAB. III - 3 : Évaluation des contraintes résiduelles à la fin du refroidissement pour les différentes conditions aux limites thermiques (Cas I à V) et pour le modèle tenant compte de  $M_V$ & $M_S$  (-a).

Modèle thermomécanique	Cas I-a Réf. exp.	Cas II-a H high T	Cas III-a H low T	Cas IV-a Linear BC	Cas V-a Quench BC
Contrainte principale maximum, valeur maximum à cœur [MPa]	193	192	176	112	294
Contrainte de Tresca ( $2\tau^{\max}$ ), maximum sur la périphérie du colis [MPa]	233	235	206	136	449

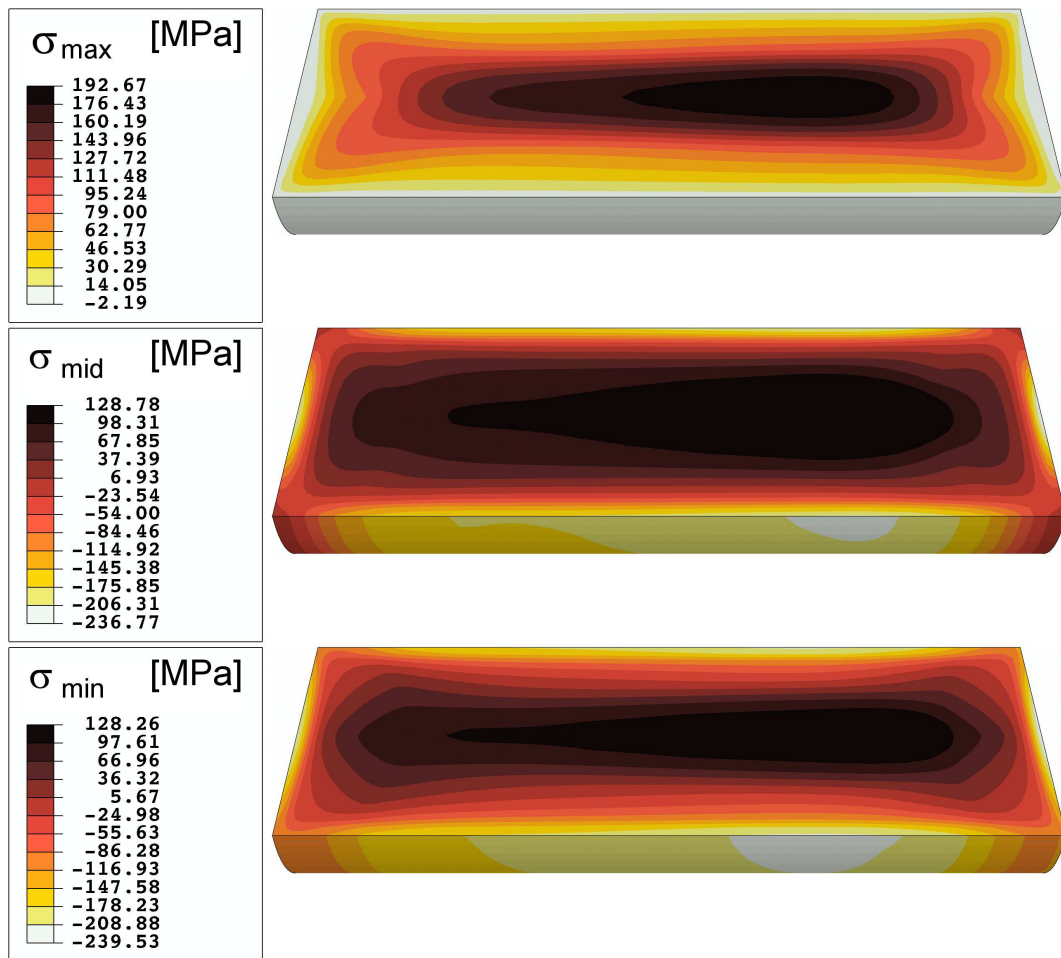


FIG. III - 12 : Contraintes résiduelles à l'issue de la vitrification creuset chaud, en propriétés simplifiées, pour le modèle tenant compte de  $M_V$  &  $M_S$  (Cas I-a). La coulée n° 2 est ici à droite.

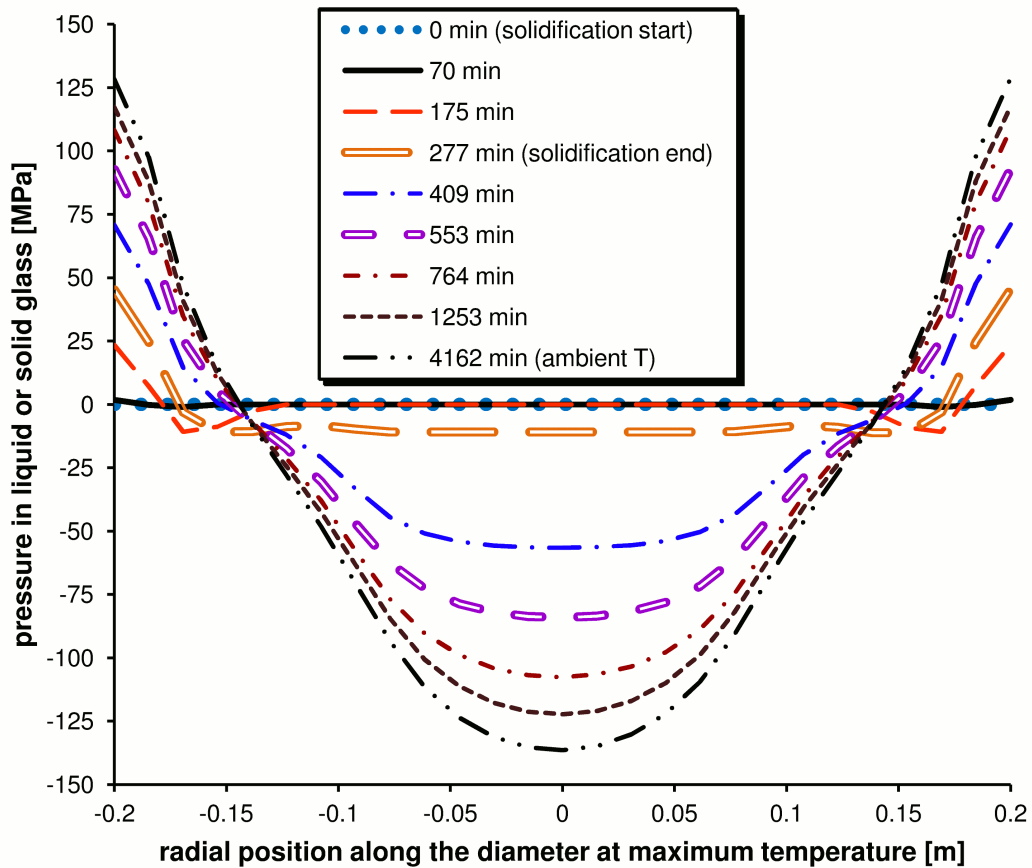


FIG. III- 13 : Profils de pression du tenseur des contraintes sur des diamètres du bloc de verre. Les temps choisis sont arbitraires, néanmoins les quatre premiers (0 min ; 70 min ; 175 min ; 277 min) correspondent aux temps caractéristiques introduits dans les résultats thermiques (i) à (iv) ; les temps suivants concernent donc forcément des diamètres au long desquels le verre est uniquement solide. Cette simulation est le Cas I-a.



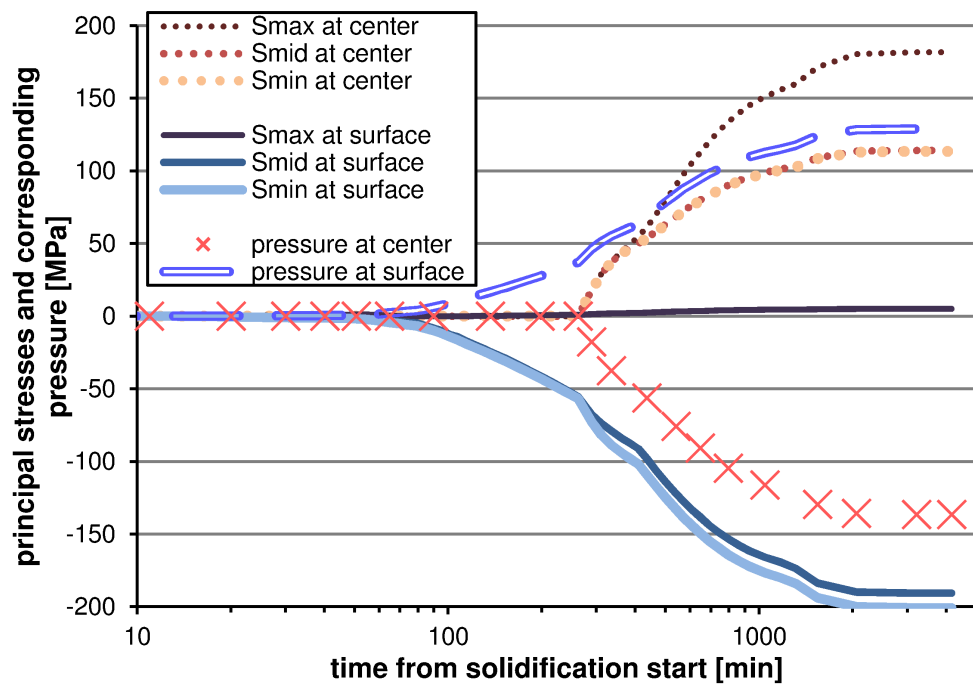


FIG. III-14 : Contraintes principales à la mi-hauteur du bloc de verre. Cette simulation est le Cas I-a. Les temps courts (0–1000 s) ne sont pas représentés, ils ne montraient pas de contrainte significative.

### III.3.3 Calculs de structure viscoélastique sur le colis avec conteneur

Afin de comparer ces réponses (visco)élastiques à un cas plus réaliste de procédé de vitrification (avec la géométrie du bloc de verre en configuration de colis à conteneur en acier inoxydable), on représente ici uniquement la thermique du creuset chaud pour en fournir les grandes tendances à comparer avec les réponses du bloc de verre seul vues précédemment. La caractérisation des contraintes résiduelles donne pour ce cas plus réaliste :

- ◇ La contrainte principale maximum, valeur maximum à cœur, de 200 MPa (+7 MPa par rapport à la géométrie simplifiée).
- ◇ Contrainte de Tresca ( $2\tau^{\max}$ ), maximum sur la périphérie du colis, à 305 MPa (+172 MPa par rapport à la géométrie simplifiée).

Ce cas plus réaliste du creuset chaud avec un colis en géométrie de conteneur CSD-V est présenté à travers ses contraintes résiduelles à la figure III - 15 page ci-contre (en fin de refroidissement). La réponse mécanique du colis pour ce procédé creuset chaud est de même nature que celle qu'on vient de caractériser pour le bloc de verre seul (simulation correspondante : Cas I-a tenant compte de  $M_V$  &  $M_S$ ).

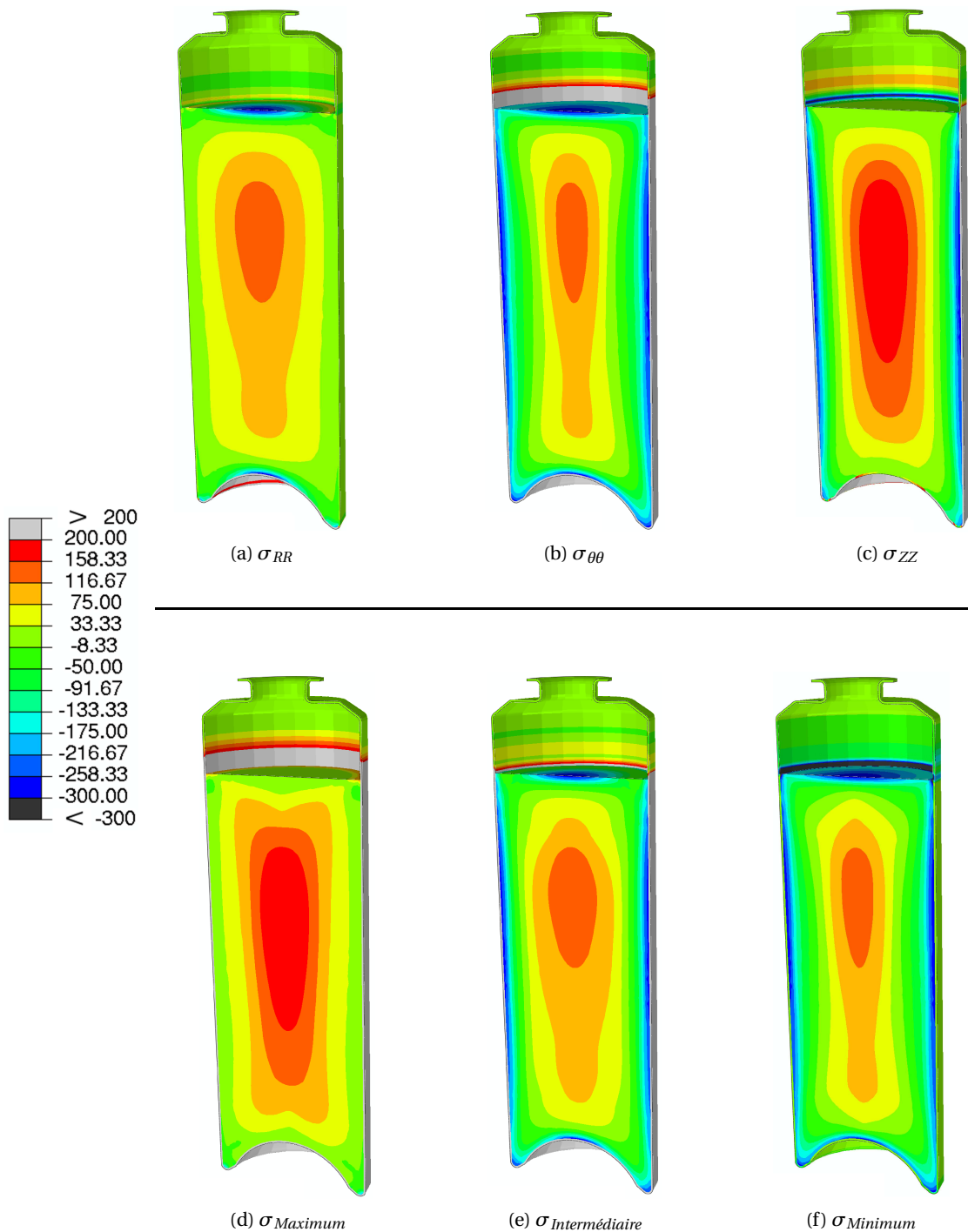


FIG. III - 15 : Contraintes résiduelles [en MPa] à la fin du procédé creuset chaud appliqué au cas d'un colis CSD-V, comportement viscoélastique du procédé expérimental (avec les relaxations  $M_V$  &  $M_S$ ), sans qu'un modèle d'endommagement ne soit appliqué au verre (M0).

### III.3.4 Résumé des résultats de relaxation structurale dans le calcul de structure

Le code viscoélastique permet la détermination des températures de transition de phase de façon différenciée en périphérie et en cœur des colis, qui connaissent effectivement en général des histoires thermiques différentes (un taux de refroidissement différent autour de la transition vitreuse). Au niveau des simulations de type creuset froid, la théorie prévoit même la transition en chemin inverse pour les procédés en plusieurs coulées lorsqu'une nouvelle coulée arrive sur la précédente dont la surface libre est déjà solidifiée.

Ce gradient de propriétés dans le bloc de verre, allié au chargement thermomécanique piloté par la relaxation structurale du volume  $M_V$  (qui contribue à fournir un excès de contraction à l'état relaxé), tend à rendre bien plus importantes les contraintes résiduelles que s'il y avait une température de transition vitreuse fixée dans le calcul de structure à 775 K. Parallèlement, la relaxation des contraintes (telle qu'on a pu l'écrire de Soules *et al.* [SBR<sup>+</sup>87]) opère sur cette structure un abaissement des contraintes résiduelles de l'ordre de la même importance.

Le gradient de ces températures de transition vitreuse dans les colis, est tout aussi dépendant de la thermique globale appliquée au colis lors du procédé étudié, comme cela a été caractérisé dans une fenêtre paramétrique autour du procédé creuset chaud.

Les contraintes résiduelles caractérisées à l'issue de nos procédés de vitrification (à  $T_{amb}$ ) montrent un état assez similaire au verre trempé (contraintes de compression au bord, et de traction au centre). Néanmoins, la compression du cœur par le verre solide environnant, rapportée dans des travaux sur le verre trempé, n'est pas un processus qui arrive facilement pour le procédé creuset chaud étudié ici.

La fenêtre paramétrique autour du procédé creuset chaud, définie et caractérisée par des gradients maxima de température dans le bloc de verre simple, précédemment, suit aussi ces mêmes tendances pour le calcul de structure, tendances caractérisées cette fois par une réponse mécanique en contraintes résiduelles.

Le cas du colis chaud étudié pour le procédé creuset froid n'a pas permis d'observer d'évolution significative de l'état de relaxation structural pendant 100 années simulées (la carte des températures de transition vitreuse est néanmoins légèrement différente, comme le refroidissement évolue en s'atténuant légèrement à la transition dans ce cas du colis chaud).

Le chargement menant aux contraintes résiduelles a été illustré dans le temps pour le procédé creuset chaud expérimental, et l'état de contraintes résiduelles comparé dans ce cas à la simulation plus réaliste du colis avec un conteneur en acier enveloppant le bloc de verre.

## III.4 Endommagements par le modèle de CDM▷M4

Dans la réponse uniquement viscoélastique du colis, modélisée pour le creuset froid ou le creuset chaud, la réponse mécanique du colis est assez continue sur l'ensemble du volume de verre. À température ambiante, vis-à-vis des contraintes résiduelles supposées atteintes en l'absence d'endommagement, il y a clairement des zones qui dépassent les critères de rupture fixés en mode I (traction triaxiale importante au centre du colis) et en mode II (compression biaxiale importante

en périphérie).

Pour ces procédés, nous n'étudions plus spécifiquement les contraintes transitoires qui sont susceptibles de fracturer la périphérie du verre en mode I, car étant donnés les seuils de fracturation, cet endommagement n'apparaît pas dans nos modèles les plus réalistes vis-à-vis des procédés de vitrification (creuset chaud ou froid). Le chargement thermomécanique, et donc l'endommagement progressif de la structure afin de borner le niveau de contrainte, va constamment en augmentant lorsqu'on s'approche du refroidissement final (à  $T_{amb}$ ).

Dans les zones où l'endommagement est critique, l'état de contrainte est donc majoré dans le modèle M4 (notamment par  $\sigma_{critique}$  pour les composantes  $[\sigma]_{ii}$  en mode I, et le  $\tau^{\max}$  est majoré par  $\tau_{critique}$  lorsque le mode II est couplé au modèle). Néanmoins, l'endommagement n'y est généralement pas présent sous forme régulière avec des iso- $D$  qui correspondraient aux iso- $\sigma$  du calcul viscoélastique seul (ce qui arrive tout de même en début d'endommagement).

L'endommagement dans notre modèle CDM est un processus non linéaire et la concentration des contraintes dans le modèle peut devenir telle que des singularités/instabilités sont favorisées dans la structure, ce qui superpose 2 phénomènes dans le volume, à l'échelle de la réponse viscoélastique du modèle :

- ◇ cette notion d'endommagement régulier qui suit de près les iso- $\sigma$  du calcul viscoélastique seul (nos sollicitations thermiques restent les mêmes après endommagement, mais la structure évolue) ; il correspond à de l'endommagement en initiation seulement ;
- ◇ un endommagement qui est lui davantage cinétique ou de propagation dans le modèle (on pourrait passer quelques incréments de calculs à sollicitation constante afin qu'il trouve un équilibre) ; ce deuxième type d'endommagement est affecté par exemple par :
  - \* des éléments propres au calcul numérique et au code FE,
  - \* divers paramètres de l'algorithme de M4 en place,
  - \* la qualité du maillage, ou la présence de défauts (bulles par exemple) modélisés dans l'approximation géométrique.

Le code de fracturation tient compte de ces deux endommagements de la même façon afin de calculer les surfaces de fracturation dans les simulations. Le calcul FE peut ne pas converger s'il y a trop de singularités qui se développent dans le modèle.

Les résultats de thermique avec des propriétés thermiques simplifiées (qu'on avait obtenus sur une géométrie simplifiée du bloc de verre) ne sont pas utilisés dans un calcul de structure endommageable dans cette partie. Les tendances n'ont pas de raison d'être différentes de celles qu'on s'apprête à dresser dans la géométrie plus réaliste avec le conteneur en acier inoxydable (qui ne joue pas à lui seul le rôle de force motrice du chargement thermomécanique, comme on l'a déjà vu). De plus, nous ne traitons plus des conditions aux limites thermiques alternatives appliquées en températures imposées au procédé creuset chaud, en leur préférant celles appliquées au procédé creuset froid (procédé modélisé en flux, elles sont donc plus réalistes).

On se focalise dans cette partie essentiellement sur ce qui fait suite à la thermique des essais expérimentaux pour les procédés creuset chaud et creuset froid, pour le modèle M4 en mode I uniquement au § III.4.1.2 page 130, pour le modèle M4 couplé en mode II au § III.4.2.2 page 140. En tout début des § III.4.1 page suivante et § III.4.2 page 135 concernés, on détaille des simulations

sur des modèles élémentaires pour chaque mode d'endommagement.

### III.4.1 Résultats du modèle M4 non couplé en mode II

Des résultats du modèle en termes d'endommagement de mode I sont présentés dans cette partie. Des expériences et simulations de trempe à l'eau froide sont présentées au § III.4.1.1, puis nous passons aux cas de colis vitrifiés au § III.4.1.2 page 130.

#### III.4.1.1 Échantillons de trempe, identification du mode I

Divers essais de trempe à l'eau froide ( $T_{amb}$ ) ont été entrepris par nos partenaires sur le programme de recherche. Nous rapportons ici le cas des échantillons de trempe publiés par Dubé *et al.* [DDC<sup>+</sup>10].

Des éprouvettes cylindriques (4 cm de diamètre pour 2 mm d'épaisseur) ont été soumises à des chocs thermiques par trempe dans de l'eau à 23 °C depuis différentes températures, puis la fissuration a été quantifiée au microscope optique sur des coupes longitudinales de ces disques de verre SON68 :

- ◇ 80 °C aucune fracturation constatée ( $\Delta T = 57$  °C),
- ◇ 100 °C aucune fracturation constatée ( $\Delta T = 77$  °C),
- ◇ 110 °C avec de la fissuration macroscopique mesurée ( $\Delta T = 87$  °C),
- ◇ 120 °C avec de la fissuration macroscopique mesurée ( $\Delta T = 97$  °C),
- ◇ 140 °C avec de la fissuration macroscopique mesurée ( $\Delta T = 117$  °C),
- ◇ 160 °C avec de la fissuration macroscopique mesurée ( $\Delta T = 137$  °C),
- ◇ 180 °C avec de la fissuration macroscopique mesurée ( $\Delta T = 157$  °C),
- ◇ 190 °C ( $\Delta T = 167$  °C) la fissuration traverse l'épaisseur de l'échantillon de part et d'autre, et on considère que les surfaces ne sont plus mesurables suivant le protocole fixé (ce différentiel de températures n'est pas pris en compte dans les résultats expérimentaux).

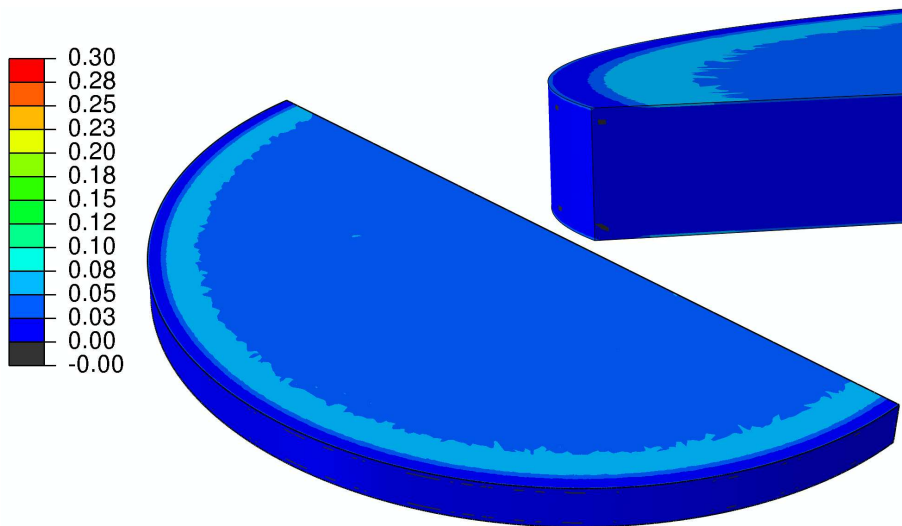
Ces essais ont été modélisés suivant le protocole de simulation thermique introduit au § II.2.1.1 page 39 et du modèle M4 non couplé. La viscoélasticité est négligeable à ces basses températures, seule compte la sollicitation thermique de la structure.

Le chargement thermique de trempe provoque des contraintes transitoires biaxiales en mode I à la surface, conformes au repère cylindrique à proximité de la majorité des surfaces. Le cisaillement ne dépasse pas les seuils de fracturation de mode II dans ces simulations. Les contraintes résiduelles obtenues sont proches de 0 à  $T_{amb}$  (comme nous avons considéré qu'elles l'étaient aussi en sortie du four).

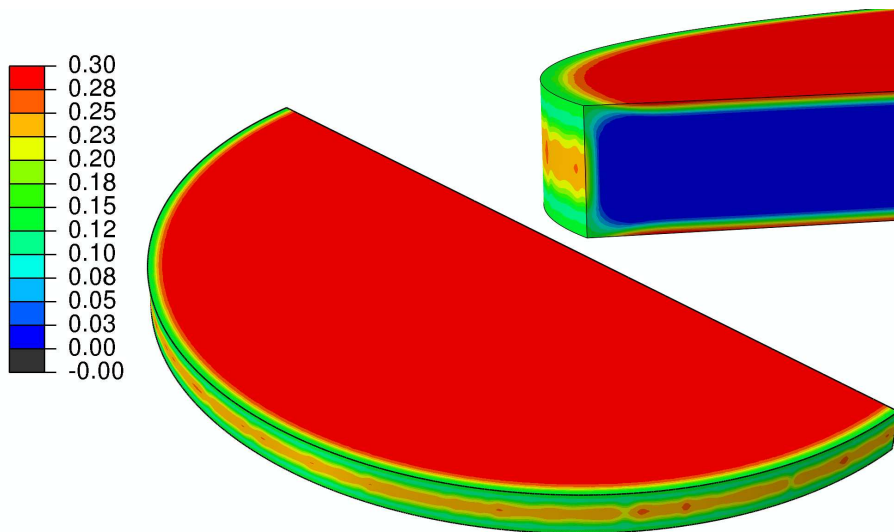
Les résultats du calcul d'endommagement montrent, pour des différentiels de températures de plus en plus importants, des zones d'endommagement de plus en plus marquées à la surface des échantillons (voir à la figure III - 16 page 128).

Nous représentons à la figure III - 17 page 129 les surfaces obtenues à l'issue du code de fracturation (« Surface dissipée ») confrontées à celles mesurées expérimentalement. Le rapport des pentes des régressions linéaires de chacune de ces deux séries de résultats (dès lors que la surface dissipée est supérieure à 0 mm<sup>2</sup>, et avant la ruine expérimentale des échantillons trempés) donne

un coefficient d'identification lié à la propagation des fissures (macroscopiques, en mode I) qui est mal prise en compte dans le modèle d'endommagement continu M4 (il sous-estime ce phénomène en endommageant ici uniquement la zone d'initiation des fissures, de faible volume). Ce rapport est de 5 dans cette campagne d'identification, et l'application de ce coefficient est illustrée par exemple par la courbe « Surface dissipée avec identification » à la figure III - 17 page 129.



(a) Trempe de 110 °C à 23 °C.



(b) Trempe de 190 °C à 23 °C.

FIG. III - 16 : Résultat final d'une simulation d'endommagement (modèle M4) d'échantillons de 4 cm de diamètre, 2 mm d'épaisseur par un traitement thermique de trempe dans l'eau [endommagement moyen  $\frac{D_{ii}}{3}$ ].



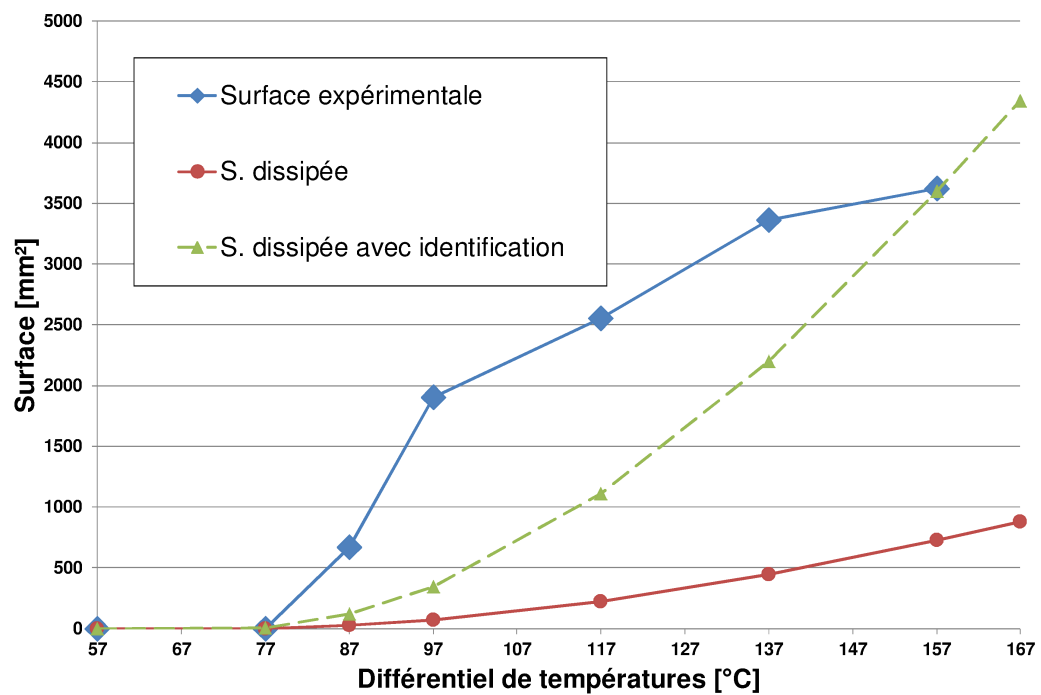


FIG. III - 17 : Surfaces de fracturation obtenues à l'issue du code de fracturation sur ces essais de trempe, appliqué au modèle M4 ; les surfaces expérimentales viennent de Dubé *et al.* [DDC<sup>+</sup>10].

#### III.4.1.2 Résultats concernant les procédés de vitrification

L'ensemble du protocole de simulation est appliqué aux cas réalistes des sollicitations thermiques d'un colis vitrifié. Le protocole de simulation tient compte ici au final du modèle d'endommagement M4 avec le mode II qui n'est pas couplé au mode I, et du calcul des surfaces de fracturation tel qu'identifié au paragraphe précédent pour le mode I. On rappelle que pour le mode II on surestime la fracturation en prenant en compte le terme total de l'énergie mécanique disponible, cela dit, sans que ce mode de fracturation ne soit identifié à l'expérience.

De tels résultats d'endommagement sont présentés à la figure III - 18 page suivante pour le creuset chaud, à un instant du refroidissement final où la température extérieure est proche de  $T_{amb}$  (mais le chargement thermique se poursuit après cet instant illustré ici). Nous y avons repéré des propagations de singularités, par le modèle M4, en accord avec la théorie proposée sur la topologie des fissures pour un tenseur  $D$  diagonalisé dans le repère cylindrique, topologie rappelée dans cette figure uniquement pour le mode I de rupture à cœur.

En ce qui concerne le procédé creuset froid, nous illustrons à la fin du refroidissement (chargement thermique total) :

- ◇ l'endommagement de mode I et le critère de mode II à la figure III - 19 page 132 ;
- ◇ les contraintes résiduelles après ces endommagements, illustrées dans le repère principal à la figure III - 20 page 133.

En fait, l'endommagement du creuset chaud s'est développé de façon importante sur la toute fin du refroidissement, par rapport à l'endommagement illustré à la figure III - 18 page ci-contre. On visualise cet endommagement final (à  $T_{amb}$  atteinte totalement dans le verre) de façon synthétisée à la figure III - 21a page 134.

Le creuset froid dont on vient d'illustrer l'état de contrainte (cf. FIG. III - 20) est confronté selon la même représentation de l'endommagement à la figure III - 21b page 134 afin d'établir une comparaison. De plus, des surfaces de fracturation qu'on calcule à l'issue de ces procédés y sont exprimées ici après normalisation. Pour le creuset chaud, on montre aussi l'évolution de ces surfaces de fracturation, plus importantes que pour le creuset froid, selon leur mode de rupture (à la figure III - 21c page 134).

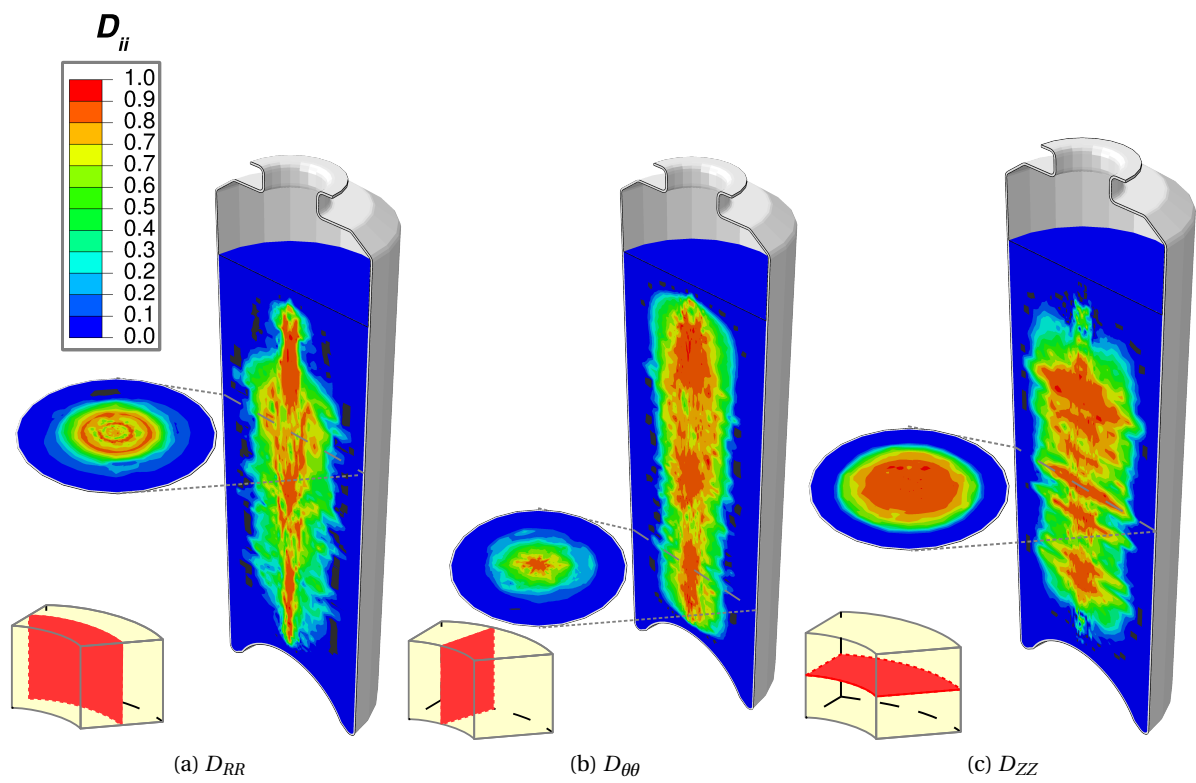


FIG. III-18 : Endommagement simulé au cours du refroidissement final du procédé creuset chaud [à 30 h depuis la fin de la 2<sup>e</sup> et dernière coulée].

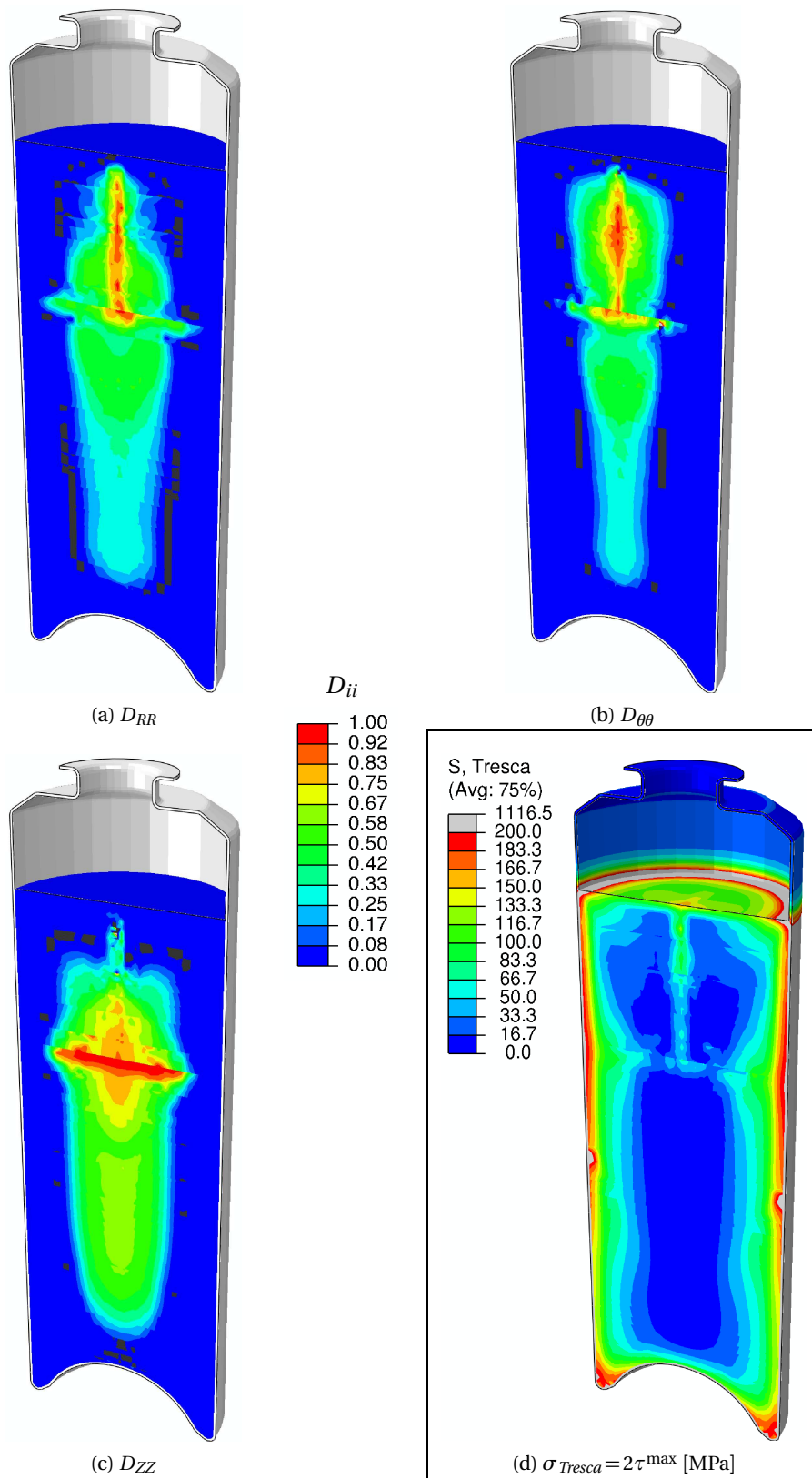
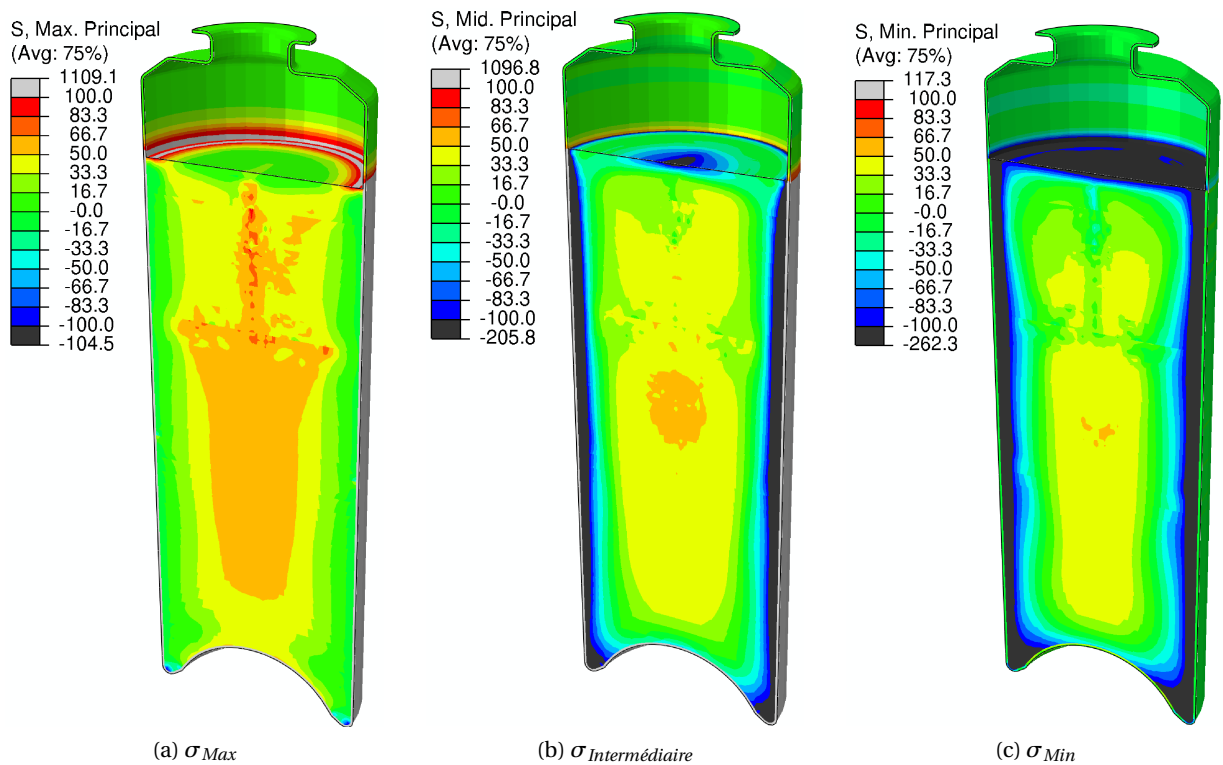
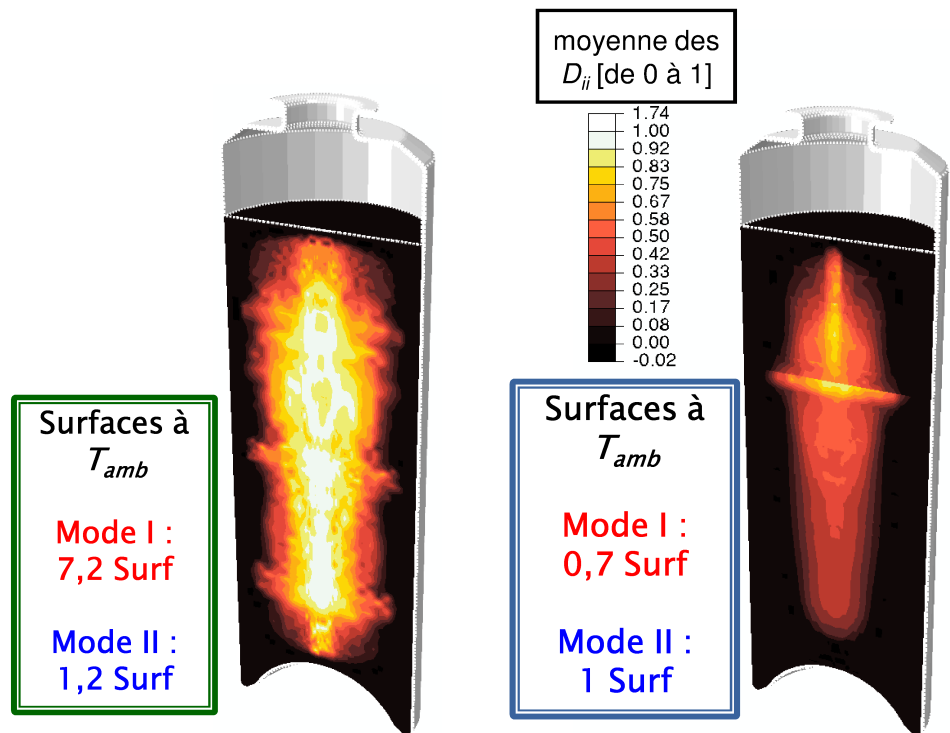


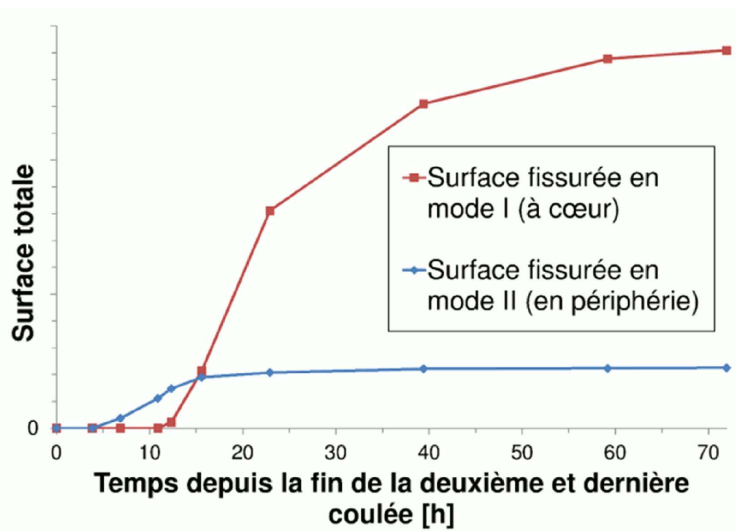
FIG. III-19 : Endommagement simulé à la fin du refroidissement final pour le procédé creuset froid, et le critère de mode II dans le colis  $\tau^{\max}$ .





(a) Endommagement moyen  $\frac{D_{ii}}{3}$  pour le creuset chaud en fin de refroidissement.

(b) Endommagement moyen  $\frac{D_{ii}}{3}$  pour le creuset froid en fin de refroidissement.



(c) Évolution de la somme des surfaces de fracturation dans le procédé creuset chaud, selon que la fracturation est de mode I ou de mode II (qui n'est pas couplé ici).

FIG. III-21 : Résultats synthétisés de l'endommagement par M4 non couplé en mode II, et résultats des surfaces de fracturation de mode I et II calculées à l'issue de ce modèle pour les procédés creuset chaud et le creuset froid [unité arbitraire de surface; « Surf » représente une unité de surface normalisée, permettant de comparer entre eux les taux de fracturation obtenus].

### III.4.2 Résultats du modèle couplé en mode II

Nous avons obtenu des surfaces de fracturation en mode I ou II dans le modèle M4 non couplé, mais nous pouvons également considérer l'équilibre mécanique de la structure, et les résultats obtenus des surfaces de fracturation, dans le cadre du modèle M4 couplé en mode II, ce qui est traité au § III.4.2.2 page 140. Avant cela, au § III.4.2.1, testons ce modèle sur des cas plus ou moins généraux d'endommagement de mode II en cisaillement.

#### III.4.2.1 Simulations test

Le mode II d'endommagement a été testé sur des configurations simples telles que le modèle suivant à géométrie cubique de  $20 \times 20 \times 20$  m représentant un 8<sup>ième</sup> de cube par les symétries imposées sur les faces non visibles de la figure III-22 page 137, qui représente ce modèle FE.

Le repère de structure y est cartésien (M4 fonctionne aussi en cartésien, seul compte la justesse du repère par rapport au repère principal). On impose des pressions ou déplacements quelconques aux faces du cube dans ce modèle pour favoriser l'apparition de cisaillements critiques, ces conditions aux limites étant appliquées sur les faces visibles de la figure III-22 page 137. Il y a 8 000 éléments hexaédriques dans ce modèle de validation, à 8 points de Gauss chacun.

Le matériau modélisé est le verre SON68 à 20 °C, mais les contraintes de cisaillement seuil et critiques ont été prises arbitrairement à 50 et 75 MPa. Les sollicitations imposées, uniquement mécaniques, sont respectivement :

1. En déplacement imposé dans un cas symétrique forcé « E0 », cas illustré au sommet du cube à la figure III-23 page 138 (en favorisant l'apparition de singularités d'endommagement pendant cette simulation).
2. En déplacement imposé pour une sollicitation quelconque d'endommagement de mode II « E1 ».

**i) Cas symétrique forcé (E0)** Un cas de sollicitation par un seul des 3 cisaillements maxima possibles est activé en endommagement de mode II ( $\tau_{XY}^{\max}$ ), par des contraintes  $\sigma_{XX}$  et  $\sigma_{YY}$  de valeurs opposées (dont on force en plus le comportement de sorte à ne pas activer de critère de mode I). Cette simulation a été employée sur le modèle en effectuant de multiples incréments pendant la sollicitation (638 incréments ici), de sorte à favoriser l'apparition de singularités représentant les fissures se propageant dans le modèle CDM utilisé (à l'échelle du maillage).

La finesse d'incrémentation pour cette sollicitation en déplacement s'observe par exemple au niveau de la discrétisation de la courbe d'incrémentation en endommagement, visualisée dans le cadran central de la figure III-23 page 138, cette figure montrant la réponse particulière d'un point d'intégration du sommet du cube, au centre de la figure III-22 page 137.

Nous arrivons ainsi à faire en sorte que le modèle perde l'homogénéité de sa réponse mécanique, visualisée par exemple par un endommagement moyen ( $\frac{D_{ii}}{3}$ ) uniforme dans tout le modèle aux premiers instants enregistrés de la figure III-23 page 138.

La figure III - 24 page 138 montre le résultat de telles propagations/singularités pouvant avoir lieu dans cette configuration lors de la mise à jour de l'endommagement de mode II (les endommagements devenant proches de 1 dans ces zones du volume concernées par des singularités). Les singularités apparaissent avec un angle de 45° avec les axes principaux, correspondant bien au cisaillement  $\tau_{XY}^{\max}$  théorique.

**ii) Déformation imposée (E1)** Pour passer à un cas plus général d'endommagement de mode II, sous sollicitation à déformation imposée, nous utilisons à présent des valeurs assez quelconques de déplacement des facettes du cube modélisé. Ce cas appelle à un endommagement de mode II car le critère de rupture en mode I est sous le seuil d'endommagement pour chacune des 3 directions principales.

La réponse du modèle obtenue pour une incrémentation dans le temps assez grossière (72 incréments) est présentée en figure III - 25 page 139. Le modèle se comporte de façon uniforme selon cette réponse. On y voit qu'un endommagement de cisaillement dans deux systèmes différents de directions est pris en compte ( $\tau_{XY}^{\max}$  commençant vers 1 500 s et  $\tau_{XZ}^{\max}$  commençant vers 2 500 s).

Nous reprenons ensuite cette même sollicitation avec une incrémentation plus fine (en 547 incréments), ce qui amène à un certain moment le développement de singularités dans le modèle, et donc la perte d'homogénéité de la réponse mécanique du cube.

De la même façon que pour le cas symétrique forcé, on représente des vues globales de l'endommagement moyen aux bords du modèle  $\frac{D_{ii}}{3}$  à la figure III - 26 page 139 pour visualiser la topologie des singularités propres au modèle d'endommagement (appliqué à cette sollicitation).

La morphologie des singularités se développant dans cette simulation présente des angles différents d'un  $\tau^{\max}$  dans ce cas plus général ( $\neq 45^\circ$ ). Les surfaces de propagation des fissures perpendiculaires à l'axe X sont ici moins bien représentées que pour la propagation des fissures suivant l'autre axe des cisaillements activés. Comme il s'agit d'un endommagement biaxial de cisaillement, on observe tout à fait la morphologie pyramidale théorique (mis à part l'angle) pour ces surfaces de fracturation propagées par le modèle.

La contrainte  $\sigma_{XX}$  est d'amplitude moindre que les autres (en valeur absolue) pour cette sollicitation E1, ce qui pourrait expliquer pourquoi le modèle a tendance à davantage répercuter la propagation des fissures suivant ces deux autres axes où la réactualisation des contraintes est plus importante. Dans le modèle M4 couplé en mode II, l'endommagement provoque en effet l'application d'un même facteur de proportionnalité pour de mêmes endommagements (via la rigidité). Ce phénomène existe car les deux axes participant au cisaillement ne sont pas réactualisés, en contraintes, avec des incréments de contraintes opposés (pression isostatique non endommagée) mais à rigidité égale (pression endommagée, de plus il y a forcément une perte du champ de contrainte suivant les deux axes, champ qui tend vers  $\mathbf{0}$  à l'endommagement total  $\mathbf{D} = \mathbf{1}$ ).



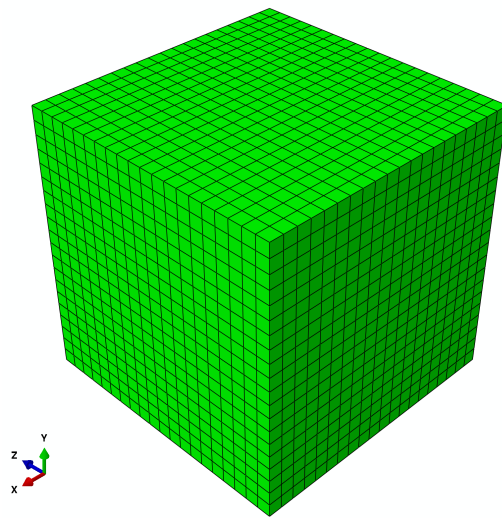


FIG. III-22 : Maillage utilisé pour représenter 1/8 de cube pour le modèle considéré ici pour les cas test.

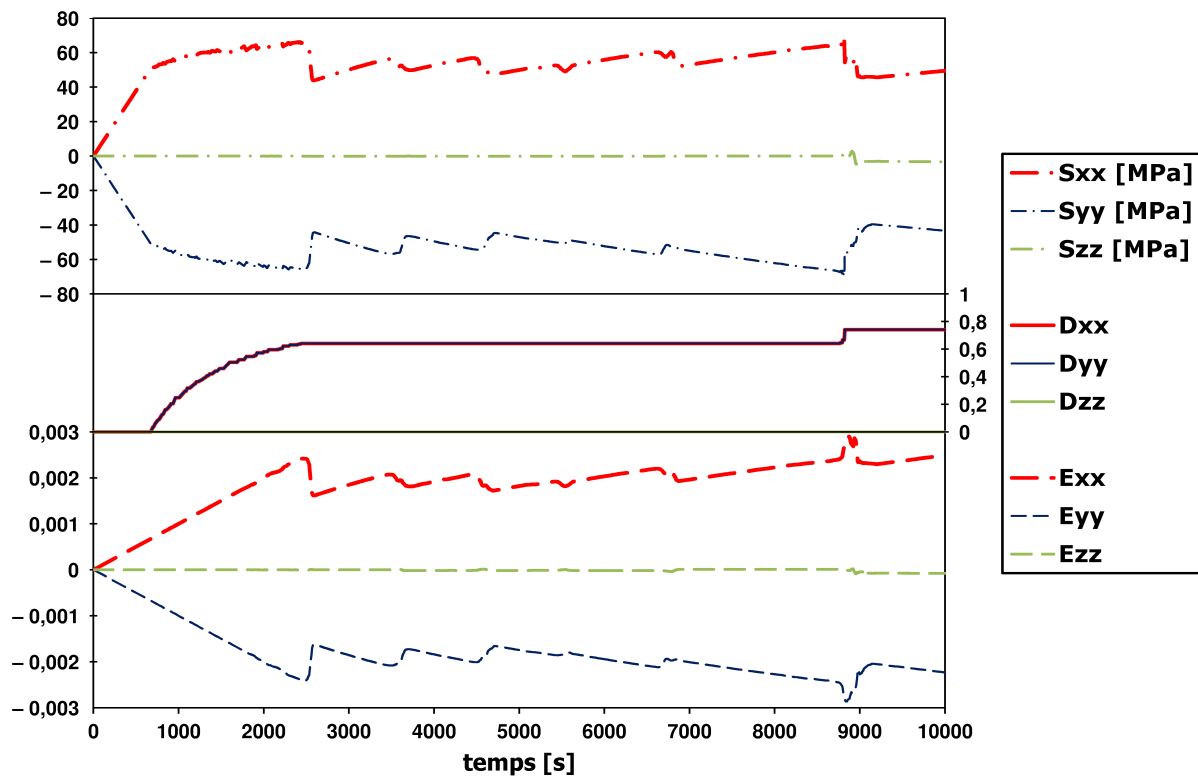


FIG. III-23 : État des contraintes, endommagements, déformations lors de la sollicitation E0 pour un cas à incrémentation fine. Le cube étant non homogène du point de vue de la réponse mécanique à la fin du chargement, ici il s'agit d'un point d'intégration de l'élément au sommet du cube.

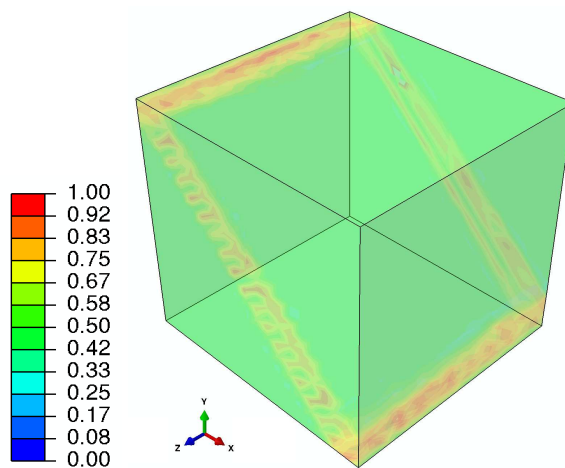


FIG. III-24 : Simulation en déformation imposée, cas symétrique E0, au temps caractéristique de  $t = 4\,000$  s. Le déplacement du modèle est accentué d'un facteur 10, l'endommagement moyen  $[\frac{D_{ii}}{3}]$  est visualisé par transparence sur les 6 bords du modèle, dont 3 représentent un plan de symétrie différent.

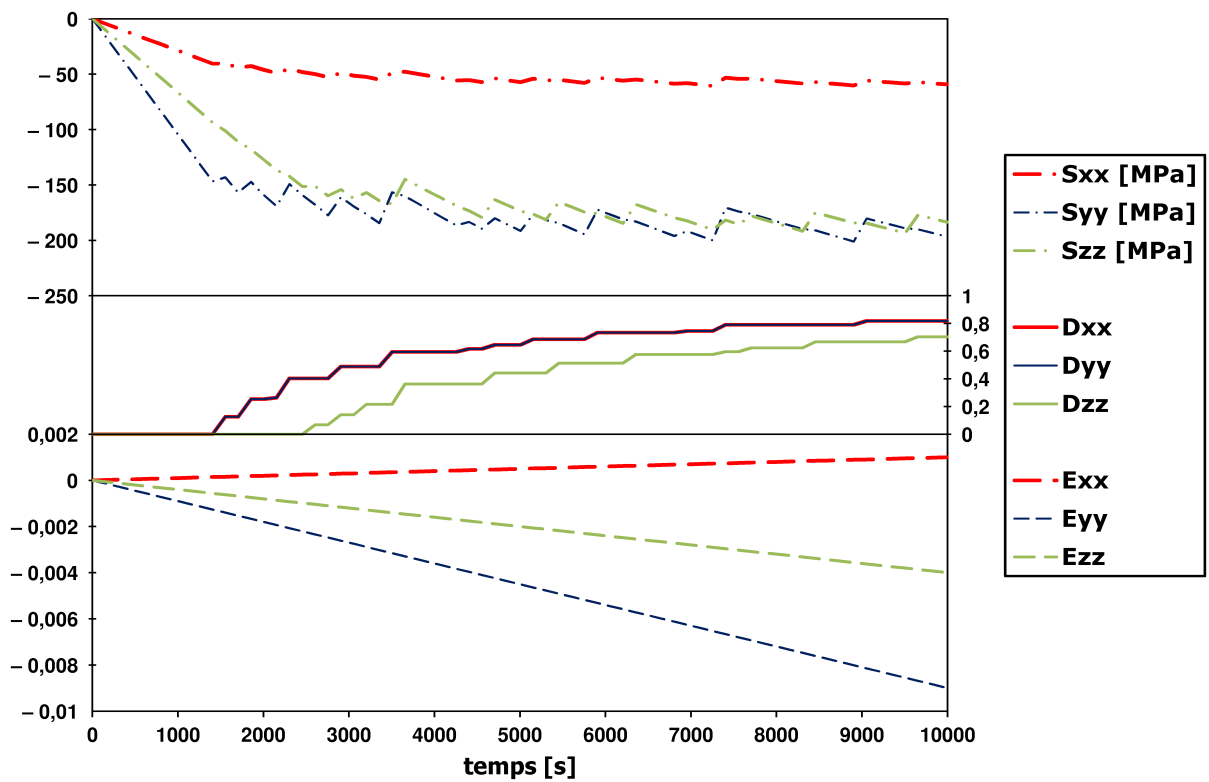


FIG. III - 25 : État des contraintes, endommagements, déformations lors de la sollicitation E1 pour un cas à incrémentation assez grossière (la réponse mécanique du cube est homogène à ce qui est observé ici).  $D_{XX}$  et  $D_{YY}$  sont superposés sur cette plage de temps.

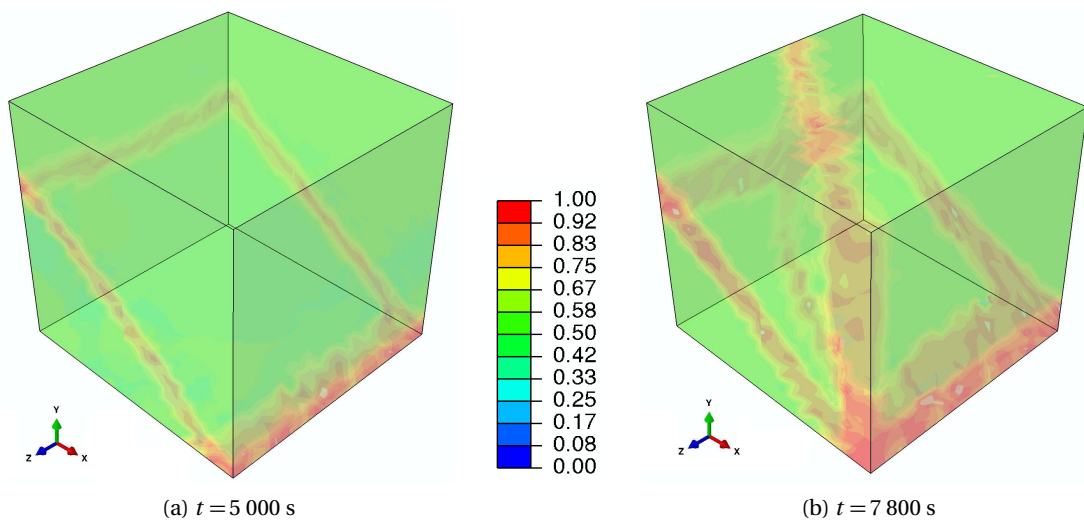


FIG. III - 26 : Endommagement moyen  $\left[\frac{D_{ii}}{3}\right]$  pour la sollicitation E1 (en incrémentation fine) à 2 temps caractéristiques. Le déplacement du modèle est accentué d'un facteur 10, l'endommagement est visualisé par transparence sur les 6 bords du modèle, dont 3 représentent un plan de symétrie différent.

### III.4.2.2 Comparatif pour le creuset froid, simulations d'une unique coulée

Une petite zone énergétiquement mal définie\* est liée à l'endommagement de mode II qui arrive pendant la sollicitation thermique du creuset froid, et puisque nous regardons la fracturation d'un point de vue énergétique aussi, nous préférons utiliser un autre modèle thermique issu du procédé creuset froid. Ce modèle retenu ici ne compte qu'une unique coulée du verre de 400 kg (simulation notée « E ») au lieu d'être manufacturé suivant les deux coulées du procédé de vitrification expérimental (Aii-a).

La simulation en fin de refroidissement après application du modèle M4 non couplé en mode II est d'abord présentée à la figure III-27 page 142 à titre de référence, en ce qui concerne ses endommagements de mode I à cœur et le critère de rupture utilisé en mode II.

La simulation en fin de refroidissement après application, cette fois-ci, du modèle M4 couplé en mode II est présentée à la figure III-28 page 143 (endommagements de mode I à cœur, endommagements de mode II en périphérie). Le critère de rupture de mode II à la figure III-28d page 143 est à comparer à celui de la figure III-27d page 142 pour illustrer l'efficacité de cette mise à jour des cisaillements par l'endommagement.

Les surfaces dans le colis sont comparées au TAB. III-5 page suivante quant au couplage en mode II dans ce procédé. Pour information, les surfaces obtenues dans la simulation d'une coulée monobloc sont environ 10–20 % supérieures à celles calculées précédemment pour le procédé à creuset froid (résultat à l'issue du modèle M4 non couplé en mode II). D'autre part, on rappelle que la méthode de calcul des surfaces de mode II change en fonction du modèle utilisé ici (avec couplage, on se repose sur l'énergie dissipée par l'endommagement). Les résultats de mode I sont proposés ici après identification expérimentale (cf. § III.4.1.1 page 126), alors qu'il viennent directement du modèle M4 ici pour le mode II.

Les résultats des surfaces de fracturation à l'issue du couplage sur la simulation de la coulée monobloc (E) montrent une forte décroissance de la quantification de la surface en mode II, due à la modification du calcul de l'énergie (énergie mécanique totale – énergie dissipée). De plus, l'endommagement de mode I est lui aussi réduit par la réactualisation des contraintes de compression à la périphérie (par équilibre de la structure).

---

\*. En ce qui concerne l'énergie mécanique dans la simulation du creuset froid, pour utiliser les résultats bruts du creuset froid en deux coulées il est nécessaire de gérer un pic d'énergie mécanique du verre solide. Il se situe pendant la transformation solide-liquide, et est très localisé selon une couronne au niveau de la surface libre de la coulée n° 1. La surface qu'on pourrait en extraire en mode II, depuis le modèle M4 non couplé en mode II, est de l'ordre de 2 fois l'ensemble de la surface calculée dans le colis.

La prise en compte de la physique au niveau de la fusion du verre solidifié en haut de la coulée n° 1 est actuellement très simple et explique en grande partie cet artefact numérique pour la variable interne de l'énergie. Le modèle visco-élastique de transition de phase, tel qu'écrit actuellement, ne peut pas gérer – en quelque sorte – cet endommagement total à appliquer au verre solide en mode II à pression constante (pour le liquéfier du point de vue du comportement). Pour les éléments solides qui redeviennent totalement liquides, cela ne pose pas particulièrement de problèmes. Il y a cependant du verre qui reste quant à lui solide, à proximité de ceux-ci, et qui est affecté par la modélisation de cette transition.

TAB. III - 5 : Résultats du code de fracturation, à l'issue du modèle d'endommagement M4 sur la simulation de coulée monobloc (E), M4 pratiquant, ou non, l'endommagement de mode II dans le colis, selon les cas.

	Creuset froid, coulée monobloc (E) :	
	M4 sans couplage de mode II	M4 couplé en mode II
Surface de mode I [unité arbitraire]	2,1	1,5
Surface de mode II [même u. a.]	5,9	1

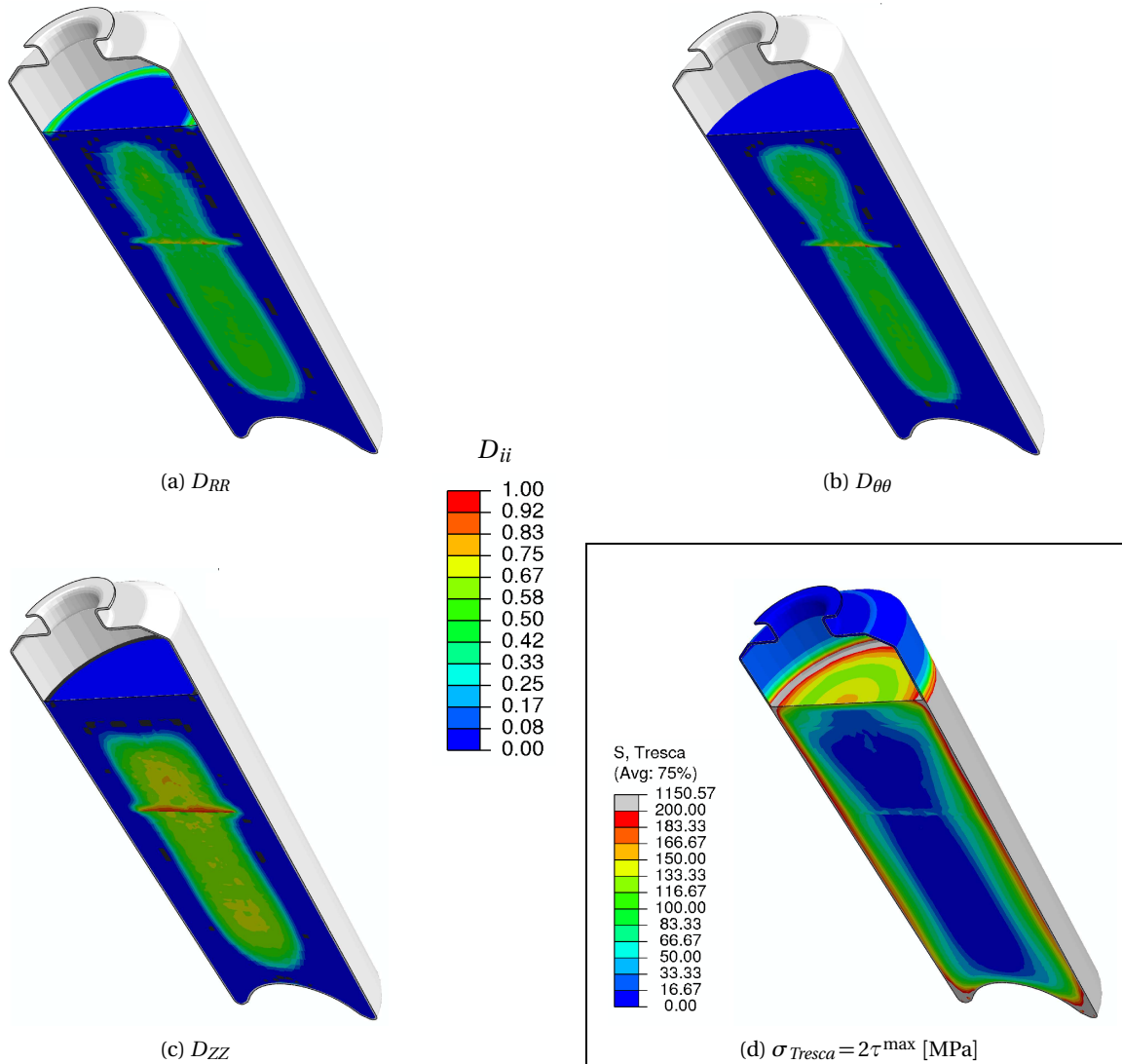


FIG. III - 27 : Endommagement M4 où le mode II n'est pas encore couplé. Ici cette simulation est à la fin du refroidissement final pour le procédé creuset froid, pour une modélisation d'un procédé à une unique coulée. On y montre les endommagements de mode I et le critère de mode II dans le colis,  $\tau^{\max}$ .

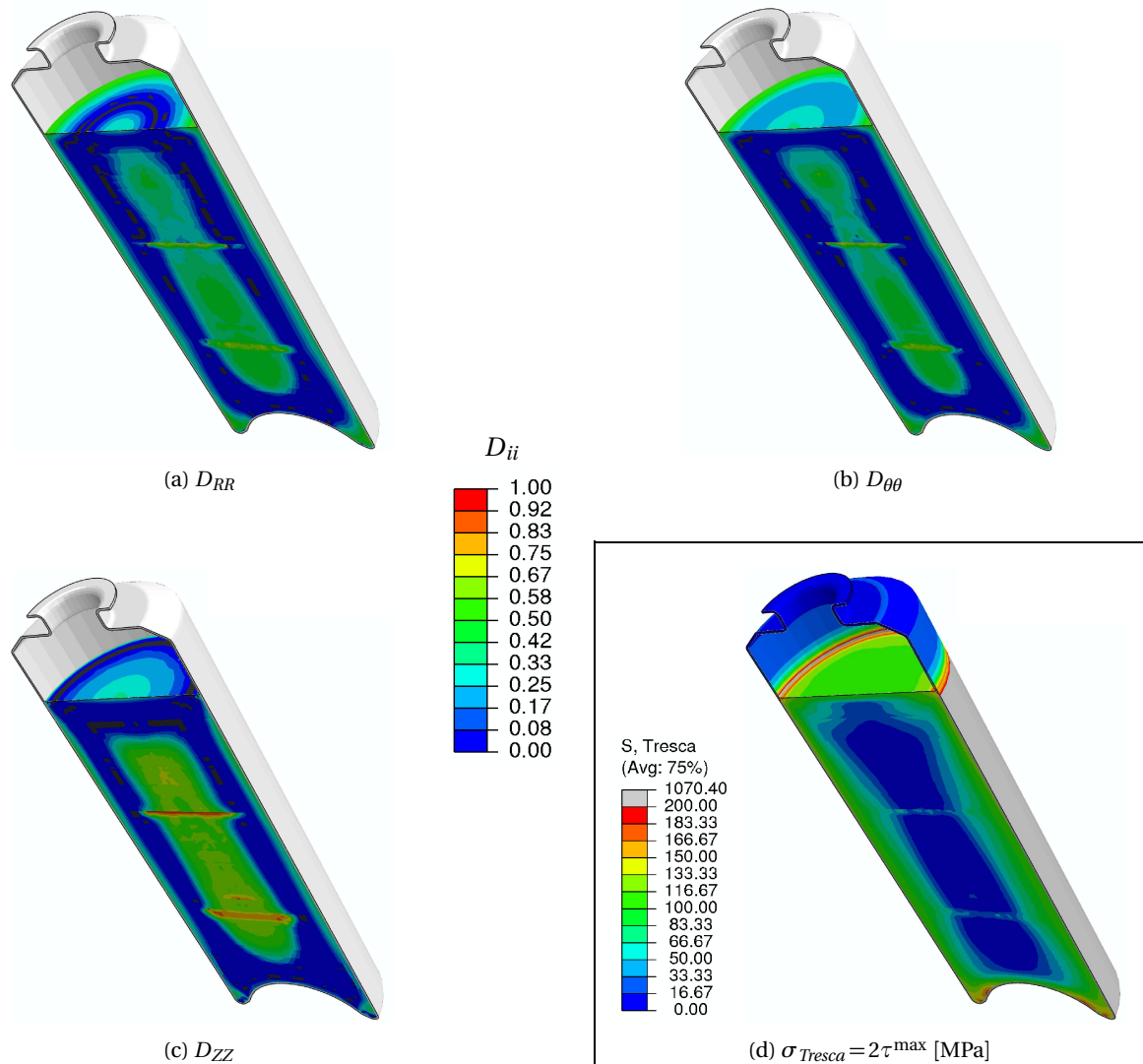


FIG. III - 28 : Endommagement M4 où le mode II est couplé. Ici cette simulation est à la fin du refroidissement final pour le procédé creuset froid, pour la même modélisation d'un procédé à une unique coulée. On y montre les endommagements valables pour le mode I à cœur et pour le mode II en périphérie du colis. Le critère de mode II est aussi illustré dans le colis ( $\tau^{\max}$ ), à l'issue de la réactualisation des contraintes par l'endommagement de mode II.

### III.4.3 Résumé des résultats d'endommagement

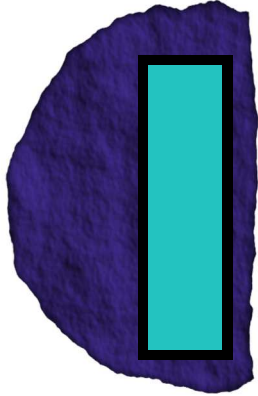
L'endommagement de mode I et l'endommagement de mode II ont été illustrés tout d'abord sur des cas simples.

Pour le mode I, ces simulations simples sont celles d'échantillons de trempe où la fissuration macroscopique a été caractérisée expérimentalement. La modélisation de tels essais permet l'identification de paramètres énergétiques employés pour rendre compte de la propagation expérimentale des fissures de mode I. En effet, à l'issue du code d'endommagement utilisé (M4), l'endommagement est par nature majoritairement un endommagement d'initiation.

Pour le mode II, des chargements sont simulés en repère cartésien dans un cube, et constituent essentiellement un outil de validation sur des cas test de la loi de comportement en endommagement (dont la loi de réactualisation de l'endommagement qui est associée au modèle M4 couplé). Ces cas test sont soit très spécifiques, soit volontairement plutôt généraux pour évaluer la tenue du modèle M4 lors du chargement 3D.

En se reposant sur l'ensemble des physiques modélisées précédemment, l'endommagement est ensuite étudié en détail sur les procédés de vitrification illustrés ici, à savoir le procédé creuset chaud expérimental, celui creuset froid expérimental, et un procédé creuset froid extrapolé pour une coulée monobloc du verre dans le conteneur. Les surfaces de fracturation y sont également rapportées afin de pouvoir en faire une étude comparative (à l'issue des codes de fracturation adaptés au modèle en cours : M4 couplé en endommagement de mode II ou non couplé).





## Conclusion générale et perspectives

L'approche retenue dans le travail de thèse pour la modélisation et la simulation du comportement à long terme de déchets radioactifs vitrifiés repose sur l'application de physiques successives qui ont été appliquées et adaptées au cas des colis simulés.

La simulation thermique du procédé de vitrification est primordiale pour toute la suite du comportement du colis en tant que structure à la réponse thermomécanique. Elle a reposé sur des expériences de vitrification de colis à l'échelle 1:1 dont une a été modélisée en flux thermiques homogénéisés pour reproduire la thermique expérimentale. Cette modélisation nous permet d'extrapoler ces conditions aux limites thermiques à des procédés aux paramètres modifiés, en supposant la présence d'un terme source de chaleur (puissance thermique des colis chauds) et sa décroissance sur le long terme.

La relaxation structurale du verre a été modélisée pour le volume massique et le module d'élasticité en cisaillement dans la loi de comportement viscoélastique appliquée au calcul de structure du colis sous sollicitations thermiques. Au travers de différentes conditions aux limites thermiques, et pour un colis ayant des caractéristiques au plus près du procédé expérimental, nous avons illustré la variation de la température de transition vitreuse en fonction de l'histoire thermique pendant le refroidissement et la solidification du verre dans le colis.

L'importance de la réponse mécanique viscoélastique du colis, vis-à-vis de la fracturation, a exigé le couplage de la viscoélasticité à un modèle d'endommagement dont il a fallu contrôler et adapter la physique au cas qui nous concerne ici. Ce modèle employé, qui entre dans le cadre de la mécanique de l'endommagement continu, est formulé de façon robuste du point de vue de la loi de comportement. Dans notre modèle, l'endommagement augmente linéairement en fonction des contraintes, entre la contrainte seuil et la contrainte critique. Cependant, il est tout à fait possible de prendre en compte une phénoménologie plus complexe par une évolution modifiée de la variation d'endommagement.

D'un point de vue énergétique, la dissipation dans le modèle permet d'extraire les surfaces de

fracturation qu'on suppose créées lors de l'augmentation d'endommagement dans le modèle. Ces surfaces peuvent être identifiées lors d'expériences de fracturation où on cherche à déterminer la morphologie de la fissuration macroscopique, afin de pouvoir estimer le comportement des surfaces en configuration de lixiviation du verre.

En perspectives de ce travail de thèse, un certain nombre d'améliorations sont possibles pour tâcher de rendre les modèles plus précis. On ordonne ces considérations selon les physiques successives entreprises ici :

- ◇ Étudier et considérer la relaxation structurale des propriétés thermiques du verre, lors du calcul thermique, ce qui modifierait (probablement faiblement) le profil des températures.
- ◇ Pour la relaxation structurale, dans le calcul thermomécanique :
  - \* Il serait souhaitable d'obtenir une détermination complète des paramètres de relaxation pour le verre nucléaire utilisé, la simulation ayant été effectuée avec des paramètres de la littérature.
  - \* Étudier les couplages entre l'endommagement et la viscoélasticité et leurs effets sur la stabilisation du verre (contraintes partielles de Soules *et al.* [SBR<sup>+</sup>87]).
  - \* Étudier les effets de fluage de l'acier sur le comportement global du colis.
- ◇ Pour l'endommagement dans les modèles :
  - \* Dans le cadre des modèles de Sun et Khaleel (M4 couplé en mode II, à ce jour) :
    - ◆ écrire une version du modèle reposant sur les valeurs propres de  $\mathbf{D}$ , dans un cadre généralisé où on rétablit des rotations dans la loi de comportement (elles sont négligées dans le modèle car le plus souvent faibles),
    - ◆ cumuler mode I et mode II de rupture.
  - \* Amélioration de la caractérisation expérimentale de la phénoménologie de l'endommagement (seuils, fracturation macroscopique expérimentale) :
    - ◆ de mode I en conditions de traction triaxiale similaires à celles en cœur du colis,
    - ◆ de mode II, pour en répercuter le comportement sur les modèles. Dans ce cadre peut-être, modéliser de façon plus réaliste le contact acier/verre, la transmission de la pression de l'acier au verre éventuellement endommagé, et étudier si le verre doit conserver cette pression dans l'endommagement de mode II.
  - \* Coupler les phénomènes de propagation de la fissuration (mécanique de la rupture) au modèle d'endommagement mésoscopique. Mieux prendre en compte le réseau de fissures réel par des techniques d'homogénéisation et de changements d'échelles.

De façon générale, on peut noter que le problème qui était à traiter est complexe. Une des difficultés majeures réside dans le côté multi-échelles de la problématique. En effet, l'échelle des fissures, voire des micro-fissures, n'a rien à voir avec l'échelle macroscopique du colis. À l'échelle de la fissure, seules les approches de mécanique de la rupture sont susceptibles de fournir des résultats d'initiation et de propagation vraiment fiables. Malheureusement, peu d'outils existent

à l'heure actuelle pour passer de cette échelle à une vision de l'endommagement telle que nous l'avons proposée.

Certes, différents auteurs (Marigo [BFM08], ...) ont travaillé cette question de façon très originale mais il était difficile de prendre en compte leurs travaux dans notre modèle. C'est la raison pour laquelle nous avons choisi cette approche simplifiée, qui pourtant a soulevé de nombreuses questions au cours de son implantation, notamment dans la gestion des physiques en jeu.

L'approche retenue dans le travail de la thèse est néanmoins associée à la quantification statistique des phénomènes de fracturation. Ce choix qui a guidé la modélisation permet de disposer au final d'un outil d'évaluation et de prévision du refroidissement des colis. Ce travail aura fourni une première vision des choses et il pourra être progressivement amélioré dans l'avenir.



# **Annexe**



**ANNEXE**

**A**

---

**Identification des coefficients  
 $C_1$  et  $C_2$  dans les modèles de  
Sun et Khaleel**

Cette annexe présente les résolutions de systèmes d'équations nécessaires à l'identification des coefficients  $C_1$  et  $C_2$  sur des essais de traction simple (mode I) dans les modèles de Sun et Khaleel (le modèle original, M1, vient de la RÉF. [SK04]). Nous ne nous attachons ici qu'à des aspects mathématiques, ce qui risque généralement de mettre de côté les justifications physiques de telles identifications.

## A.1 Modèle M1

### A.1.1 Rappel sur le calage en traction simple

C'est une identification dont le résultat est formulé par Sun et Khaleel dans leur modèle initial [SK04].

Hypothèses lors de l'essai de traction :

$$\begin{cases} \sigma_{11} = \sigma_T \\ \sigma_{22} = \sigma_{33} = \sigma_{12} = \sigma_{23} = \sigma_{31} = 0 \\ D_{11} = D \\ D_{22} = D_{33} = D_{12} = D_{23} = D_{31} = 0 \\ \varepsilon_{11} = \varepsilon_T \neq 0 \\ \varepsilon_{22} = \varepsilon_{33} = \varepsilon_P \end{cases}$$

Quand l'endommagement  $D_{11}$  devient égal à 1, à la rupture, le système d'équations devient :

$$\begin{pmatrix} \sigma_T \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda + 2\mu + 2(C_1 + C_2) & \lambda + C_1 & \lambda + C_1 & 0 & 0 & 0 \\ \lambda + C_1 & \lambda + 2\mu & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda + C_1 & \lambda & \lambda + 2\mu & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mu & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mu & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_T \\ \varepsilon_P \\ \varepsilon_P \\ 2\varepsilon_{\tau_a} \\ 2\varepsilon_{\tau_b} \\ 2\varepsilon_{\tau_c} \end{pmatrix}$$

$$\Leftrightarrow \begin{cases} \varepsilon_{\tau_I} = 0 & , I = a, b, c \\ (\lambda + 2\mu + 2(C_1 + C_2))\varepsilon_T + 2(\lambda + C_1)\varepsilon_P = \sigma_T = 0 & (11) \\ (\lambda + C_1)\varepsilon_T + 2(\lambda + \mu)\varepsilon_P = 0 & (22) \text{ ou } (33) \end{cases}$$

Si  $\text{tr}(\underline{\underline{\varepsilon}}) = 0$  alors :

$$(22) \text{ ou } (33) \Rightarrow C_1 = \mu$$

Et il vient :

$$(11) \Rightarrow C_2 = -\frac{3}{2}\mu$$

Remarquons que pour une déformation quelconque, avec cette identification de l'endommagement en traction, les contraintes s'écrivent dans la base de vecteurs propres du tenseur  $\underline{\underline{D}}$  utilisée ci-dessus, pour  $D = 1$  dans un cas général :

$$\left\{ \begin{array}{l} \tau_I = 2\mu\varepsilon_{\tau_I} \\ \sigma_{11} = (\lambda + \mu)\text{tr}(\underline{\underline{\varepsilon}}) \\ \sigma_{22} = \lambda\text{tr}(\underline{\underline{\varepsilon}}) + \mu\varepsilon_{11} + 2\mu\varepsilon_{22} \\ \sigma_{33} = \lambda\text{tr}(\underline{\underline{\varepsilon}}) + \mu\varepsilon_{11} + 2\mu\varepsilon_{33} \end{array} \right\} \quad , I = a, b, c \quad \sigma_{ii} = (\lambda + \mu)\text{tr}(\underline{\underline{\varepsilon}}) \quad , i = 1, 2, 3 \text{ dans le cas où } \varepsilon_{22} = \varepsilon_{33}$$



Notons ainsi particulièrement que les contraintes de cisaillement ont un comportement identique au cas non endommagé avec une rigidité purement élastique.

### A.1.2 Calage en traction biaxiale

Hypothèses lors de l'essai de traction :

$$\begin{cases} \sigma_{11} = \sigma_{22} = \sigma_T \\ \sigma_{33} = \sigma_{12} = \sigma_{23} = \sigma_{31} = 0 \\ D_{11} = D_{22} = D \\ D_{33} = D_{12} = D_{23} = D_{31} = 0 \\ \varepsilon_{11} = \varepsilon_{22} = \varepsilon_T \neq 0 \\ \varepsilon_{33} = \varepsilon_P \end{cases}$$

Quand les endommagements  $D_{11}$  et  $D_{22}$  deviennent simultanément égaux à 1, à la rupture, le système d'équations devient :

$$\begin{pmatrix} \sigma_T \\ \sigma_T \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda+2\mu+2(C_1+C_2) & \lambda+2C_1 & \lambda+C_1 & 0 & 0 & 0 \\ \lambda+2C_1 & \lambda+2\mu+2(C_1+C_2) & \lambda+C_1 & 0 & 0 & 0 \\ \lambda+C_1 & \lambda+C_1 & \lambda+2\mu & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mu & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mu & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_T \\ \varepsilon_T \\ \varepsilon_P \\ 2\varepsilon_{\tau_a} \\ 2\varepsilon_{\tau_b} \\ 2\varepsilon_{\tau_c} \end{pmatrix}$$

$$\Leftrightarrow \begin{cases} \varepsilon_{\tau_I} = 0 & , I = a, b, c \\ (2(\lambda+\mu)+2(2C_1+C_2))\varepsilon_T + (\lambda+C_1)\varepsilon_P = \sigma_T = 0 & (11) \text{ ou } (22) \\ 2(\lambda+C_1)\varepsilon_T + (\lambda+2\mu)\varepsilon_P = 0 & (33) \end{cases}$$

Si  $\text{tr}(\underline{\underline{\varepsilon}}) = 0$  alors :

$$(33) \Rightarrow C_1 = 2\mu$$

Et il vient :

$$(11) \text{ ou } (22) \Rightarrow C_2 = -3\mu$$

Avec cette nouvelle identification, les contraintes s'écrivent dans la base de vecteurs propres du tenseur  $\underline{\underline{D}}$  utilisée ci-dessus, pour  $D = 1$  :

$$\left\{ \begin{array}{l} \tau_I = 2\mu\varepsilon_{\tau_I} \\ \sigma_{11} = \lambda\text{tr}(\underline{\underline{\varepsilon}}) + 4\mu\varepsilon_{22} + 2\mu\varepsilon_{33} \\ \sigma_{22} = \lambda\text{tr}(\underline{\underline{\varepsilon}}) + 4\mu\varepsilon_{11} + 2\mu\varepsilon_{33} \\ \sigma_{33} = (\lambda+2\mu)\text{tr}(\underline{\underline{\varepsilon}}) \end{array} \right\} , I = a, b, c \quad \sigma_{ii} = (\lambda+2\mu)\text{tr}(\underline{\underline{\varepsilon}}) \quad , i = 1, 2, 3 \text{ dans le cas où } \varepsilon_{11} = \varepsilon_{22}$$

Notons là aussi que les contraintes de cisaillement ont un comportement identique au cas non endommagé avec une rigidité purement élastique.

## A.2 Modèle M2

### A.2.1 Version corrigée du calage en traction simple

Prenons les mêmes hypothèses lors de l'essai de traction que pour M1 :

$$\begin{cases} \sigma_{11} = \sigma_T \\ \sigma_{22} = \sigma_{33} = \sigma_{12} = \sigma_{23} = \sigma_{31} = 0 \\ D_{11} = D \\ D_{22} = D_{33} = D_{12} = D_{23} = D_{31} = 0 \\ \varepsilon_{11} = \varepsilon_T \neq 0 \\ \varepsilon_{22} = \varepsilon_{33} = \varepsilon_P \end{cases}$$

Comme le chargement se fait suivant (11) et que le cisaillement devient anisotrope dans M2, il convient de choisir par convention l'ordre dans lequel apparaissent les cisaillements dans la matrice de rigidité.

La convention choisie ci-dessous pour représenter la matrice de rigidité est différente de celle d'Abaqus/Standard pour une routine UMAT.

Quand l'endommagement  $D_{11}$  devient égal à 1, à la rupture, le système d'équations devient :

$$\begin{pmatrix} \sigma_T \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda + 2\mu + 2(C_1 + C_2) & \lambda + C_1 & \lambda + C_1 & 0 & 0 & 0 \\ \lambda + C_1 & \lambda + 2\mu & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda + C_1 & \lambda & \lambda + 2\mu & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mu + \frac{C_2}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mu & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mu + \frac{C_2}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_T \\ \varepsilon_P \\ \varepsilon_P \\ 2\varepsilon_{12} \\ 2\varepsilon_{23} \\ 2\varepsilon_{31} \end{pmatrix}$$

Deux choix se posent alors à nous pour résoudre ce système : soit on continue à supposer des  $\varepsilon_{12}$ ,  $\varepsilon_{23}$  ou  $\varepsilon_{31}$  négligeables dans cette base pour toutes les sollicitations à venir du comportement endommagé, soit on introduit un  $C_2$  adapté pour annuler, par exemple, certaines sollicitations en cisaillement pour toute déformation correspondante.

La première alternative nous renvoie au  $(C_1, C_2)$  calculés pour le modèle précédent M1. Appliquer ces coefficients ici ne provoque pas a priori le changement du signe du déterminant de la matrice de rigidité – pour cet unique endommagement  $D_{11}$  entre 0 et 1.

La deuxième alternative conduit au nouveau système d'équations :

$$\Leftrightarrow \begin{cases} \varepsilon_{23} = 0 \\ 2(\mu + \frac{C_2}{2})\varepsilon_{IJ} = 0 & , IJ = 12, 31 \\ (\lambda + 2\mu + 2(C_1 + C_2))\varepsilon_T + 2(\lambda + C_1)\varepsilon_P = \sigma_T = 0 & (11) \\ (\lambda + C_1)\varepsilon_T + 2(\lambda + \mu)\varepsilon_P = 0 & (22) \text{ ou } (33) \end{cases}$$

Les cisaillements donnent alors :

$$C_2 = -2\mu$$

Si  $\text{tr}(\underline{\underline{\varepsilon}}) = 0$  alors on ne peut pas résoudre ((22) ou (33)) et (11) simultanément.

Nécessairement  $\text{tr}(\underline{\underline{\varepsilon}}) \neq 0$ , mais  $C_1$  n'admet pas de racine dans  $\mathfrak{R}$  à l'issue de son écriture dans une équation du second degré (et après élimination de  $\varepsilon_T/\text{tr}(\underline{\underline{\varepsilon}})$  ou  $\varepsilon_P/\text{tr}(\underline{\underline{\varepsilon}})$  de ce système d'équations). L'identification n'est donc ici pas possible.

### A.2.2 Version corrigée du calage en traction biaxiale

Prenons les mêmes hypothèses lors de l'essai de traction que pour M1 :

$$\begin{cases} \sigma_{11} = \sigma_{22} = \sigma_T \\ \sigma_{33} = \sigma_{12} = \sigma_{23} = \sigma_{31} = 0 \\ D_{11} = D_{22} = D \\ D_{33} = D_{12} = D_{23} = D_{31} = 0 \\ \varepsilon_{11} = \varepsilon_{22} = \varepsilon_T \neq 0 \\ \varepsilon_{33} = \varepsilon_P \end{cases}$$

Comme le chargement se fait suivant (11) et (22) et que le cisaillement devient anisotrope dans M2, il convient de choisir par convention l'ordre dans lequel apparaissent les cisaillements dans la matrice de rigidité. Rappelons que la convention choisie ci-dessous est différente de celle d'Abaqus/Standard pour une routine UMAT.

Quand les endommagements  $D_{11}$  et  $D_{22}$  deviennent simultanément égaux à 1, à la rupture, le système d'équations devient :

$$\begin{pmatrix} \sigma_T \\ \sigma_T \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda+2\mu+2(C_1+C_2) & \lambda+2C_1 & \lambda+C_1 & 0 & 0 & 0 \\ \lambda+2C_1 & \lambda+2\mu+2(C_1+C_2) & \lambda+C_1 & 0 & 0 & 0 \\ \lambda+C_1 & \lambda+C_1 & \lambda+2\mu & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mu+C_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mu+\frac{C_2}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mu+\frac{C_2}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_T \\ \varepsilon_T \\ \varepsilon_P \\ 2\varepsilon_{12} \\ 2\varepsilon_{23} \\ 2\varepsilon_{31} \end{pmatrix}$$

Deux choix se posent à nouveau à nous pour résoudre ce système : soit on continue de supposer des  $\varepsilon_{12}$ ,  $\varepsilon_{23}$  ou  $\varepsilon_{31}$  négligeables dans cette base pour toutes les sollicitations à venir du comportement endommagé, soit on introduit un  $C_2$  adapté pour annuler certaines sollicitations en cisaillement, par exemple.

La première alternative nous renvoie au  $(C_1, C_2)$  calculés pour le modèle précédent M1 ce qui produit ici les composantes dont un changement de signe a été remarqué sur la deuxième moitié de la diagonale de la matrice de rigidité. Entre le moment où  $(D_{11}, D_{22}) = (0, 0)$  et  $(D_{11}, D_{22}) = (1, 1)$ , le déterminant de la matrice de rigidité change effectivement de signe.

La deuxième alternative nous conduit quant à elle au nouveau système d'équations :

$$\Leftrightarrow \begin{cases} 2(\mu + C_2)\varepsilon_{12} = 0 \\ 2(\mu + \frac{C_2}{2})\varepsilon_{IJ} = 0 & , IJ = 23, 31 \\ (2(\lambda + \mu) + 2(2C_1 + C_2))\varepsilon_T + (\lambda + C_1)\varepsilon_P = \sigma_T = 0 & (11) \text{ ou } (22) \\ 2(\lambda + C_1)\varepsilon_T + (\lambda + 2\mu)\varepsilon_P = 0 & (33) \end{cases}$$

Le cisaillement (12) donne alors :

$$C_2 = -\mu$$

Si  $\text{tr}(\underline{\underline{\varepsilon}}) = 0$  alors on peut montrer qu'on ne peut pas résoudre ((11) ou (22)) et (33) simultanément. Nécessairement  $\text{tr}(\underline{\underline{\varepsilon}}) \neq 0$  et on a :

$$\Leftrightarrow \begin{cases} \varepsilon_{IJ} = 0 & , IJ = 23, 31 \\ (\lambda + 2C_1) - C_1 \frac{\varepsilon_P}{\text{tr}(\underline{\underline{\varepsilon}})} = \frac{\sigma_T}{\text{tr}(\underline{\underline{\varepsilon}})} = 0 & (11) \text{ ou } (22) \\ (\lambda + C_1) + (2\mu - C_1) \frac{\varepsilon_P}{\text{tr}(\underline{\underline{\varepsilon}})} = 0 & (33) \end{cases}$$

Ces solutions possibles impliquent alors une relation précise entre  $\varepsilon_T$ ,  $\varepsilon_P$  ou  $\underline{\underline{\varepsilon}}$ , en fonction de la valeur  $C_1$ .

L'équation du second degré en  $C_1$  obtenue de (11) ou (22) et (33) a deux solutions possibles de signes contraires avec ci-dessous  $\frac{\lambda}{2\mu} = \frac{\nu}{1-2\nu} > 0$  (comme  $\nu < 0,5$ ) :

$$\begin{cases} C_1 = 2\mu \left(1 + \sqrt{1 + \frac{\nu}{1-2\nu}}\right) > 0 \\ C_2 = -\mu \end{cases} \quad \text{et} \quad \begin{cases} C_1 = 2\mu \left(1 - \sqrt{1 + \frac{\nu}{1-2\nu}}\right) < 0 \\ C_2 = -\mu \end{cases}$$

Remarquons que pour une déformation quelconque, à la suite de cet endommagement total de traction, les contraintes de cisaillement s'écrivent dans la base de vecteurs propres du tenseur  $\underline{D}$  utilisée ci-dessus :

$$\begin{cases} \sigma_{12} = 0 \\ \sigma_{23} = \mu \varepsilon_{23} \\ \sigma_{31} = \mu \varepsilon_{31} \end{cases}$$

Et donc pour ce double endommagement  $D_{11}$  et  $D_{22}$  la contrainte de cisaillement liée aux deux axes de traction sera toujours nulle quelque soit  $\varepsilon_{12}$  alors que les autres cisaillements avec un unique axe non endommagé dans leur plan sont modulés de moitié par rapport au cas purement élastique.

Cette conclusion restera vraie dans le cas de coefficients calés sur la traction triaxiale pour un endommagement total selon 2 axes (et aucun selon le 3<sup>e</sup> axe).

### A.3 Cas de la traction triaxiale

Hypothèses communes lors de l'essai de traction :

$$\begin{cases} \sigma_{11} = \sigma_{22} = \sigma_{33} = \sigma_T \\ \sigma_{12} = \sigma_{23} = \sigma_{31} = 0 \\ D_{11} = D_{22} = D_{33} = D \\ D_{12} = D_{23} = D_{31} = 0 \\ \varepsilon_{11} = \varepsilon_{22} = \varepsilon_{33} = \varepsilon_T \neq 0 \end{cases}$$

Quand les endommagements  $D_{11}$ ,  $D_{22}$  et  $D_{33}$  deviennent simultanément égaux à 1, à la rupture, le système d'équations devient :

$$\begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda+2\mu+2(C_1+C_2) & \lambda+2C_1 & \lambda+2C_1 & 0 & 0 & 0 \\ \lambda+2C_1 & \lambda+2\mu+2(C_1+C_2) & \lambda+2C_1 & 0 & 0 & 0 \\ \lambda+2C_1 & \lambda+2C_1 & \lambda+2\mu+2(C_1+C_2) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mu+C_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mu+C_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mu+C_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_T \\ \varepsilon_T \\ \varepsilon_T \\ 2\varepsilon_{12} \\ 2\varepsilon_{23} \\ 2\varepsilon_{31} \end{pmatrix}$$

$$\Leftrightarrow \begin{cases} 2(\mu+C_2)\varepsilon_{IJ} = 0 & , IJ = 12, 23, 31 \\ (3\lambda+2\mu+6C_1+2C_2)\varepsilon_T = \sigma_T = 0 & (11), (22) \text{ ou } (33) \end{cases}$$

Si on se place dans le cadre du modèle M1 où les cisaillements sont supposés négligés alors il n'y a pas unicité de la solution en  $(C_1, C_2)$  qui se trouve sur la droite :

$$3\lambda+2\mu+6C_1+2C_2=0$$

Par contre dans le cadre du modèle corrigé en cisaillement M2 on résout (12), (23) et (31) en fixant :

$$C_2 = -\mu$$

donc d'après l'équation de la droite :

$$C_1 = -\frac{\lambda}{2}$$

Ceci se vérifie aussi avec l'écriture tensorielle de la relation constitutive corrigée :

$$\underline{\underline{\sigma}} = \lambda(\text{tr}(\underline{\underline{\epsilon}}))\underline{\underline{1}} + 2\mu\underline{\underline{\epsilon}} + C_1 \text{tr}(\underline{\underline{\epsilon}} \cdot \underline{\underline{D}})\underline{\underline{1}} + C_1(\text{tr}\underline{\underline{\epsilon}})\underline{\underline{D}} + C_2(\underline{\underline{\epsilon}} \cdot \underline{\underline{D}} + \underline{\underline{D}} \cdot \underline{\underline{\epsilon}})$$

avec  $\underline{\underline{1}}$  le tenseur unité et pour laquelle en faisant  $\underline{\underline{D}} = \underline{\underline{1}}$  on obtient le cas limite :

$$\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{0}} = (\lambda + 2C_1)(\text{tr}(\underline{\underline{\epsilon}}))\underline{\underline{1}} + 2(\mu + C_2)\underline{\underline{\epsilon}}$$

Qu'on peut résoudre quel que soit  $\underline{\underline{\epsilon}}$  en commençant par annuler les termes non diagonaux :

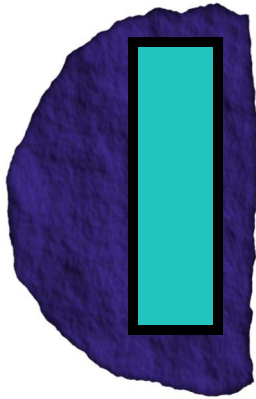
$$\mu + C_2 = 0$$

Puis les termes diagonaux restants :

$$\lambda + 2C_1 = 0$$

On remarque ici qu'on a aucun reliquat des déformations sur les contraintes de cisaillement lorsqu'on est totalement endommagé, contrairement au modèle M1.





---

## Bibliographie

- [ABKS<sup>+</sup>11] ALCOUHLABI, Mataz ; BANDA, Lameck ; KOLLENGODU-SUBRAMANIAN, Shankar ; ZHAO, Jing et McKENNA, Gregory B. : Environmental Effects on the Structural Recovery Responses of an Epoxy Resin after Carbon Dioxide Pressure Jumps: Intrinsic Isopiestic, Asymmetry of Approach, and Memory Effect. *Macromolecules*, avril 2011, **44**(10):3828–3839. DOI : <http://dx.doi.org/10.1021/ma1027577>
- [ADP08] ADVOCAT, Thierry ; DUSSOSSOY, Jean-Luc et PETITJEAN, Valérie : Vitrification des déchets radioactifs. *Éditions Techniques de l'Ingénieur*, 2008, **Génie nucléaire**:BN 3 664.1–24.
- [AMS03] ALCOUHLABI, Mataz ; McKENNA, Gregory B. et SIMON, Sindee L. : Analysis of the development of isotropic residual stresses in a bismaleimide/spiro orthocarbonate thermosetting resin for composite materials. *Journal of Applied Polymer Science*, avril 2003, **88**(1):227–244. DOI : <http://dx.doi.org/10.1002/app.11649>
- [And05] ANDRA, n° 265 : Dossier 2005 – Les recherches de l'Andra sur le stockage géologique des déchets radioactifs à haute activité et à vie longue – Résultats et perspectives. Rapport technique, Andra, juin 2005. 40 pp.
- [ASN10] ASN, Synthèse : Plan national de gestion des déchets radioactifs, 2010–2012. Rapport technique, Agence de sûreté nucléaire, 2010. 28 pp.
- [Bar03] BARTHELEMY, Benoît : *Combustion – Vitrification de déchets radioactifs par plasma d'arc : Modélisation de la thermique et de la dynamique*. Thèse de doctorat, Matériaux Céramiques et Traitements de Surface, Université de Limoges, 2003. 186 pp.
- [BDG04] BERNARD, Fabrice ; DAUDEVILLE, Laurent et GY, René : Load bearing capacity of connections in tempered glass structures. *Structural Engineering International*, 2004, **14**(2):107–110. DOI : <http://dx.doi.org/10.2749/101686604777964116>
- [BFM08] BOURDIN, Blaise ; FRANCFORT, Gilles A. et MARIGO, Jean-Jacques : The Variational Approach to Fracture. *Journal of Elasticity*, avril 2008, **91**(1–3):5–148. DOI : <http://dx.doi.org/10.1007/s10659-007-9107-3>
- [BGA<sup>+</sup>12] BARTH, Nicolas ; GEORGE, Daniel ; AHZI, Saïd ; RÉMOND, Yves ; DOQUET, Véronique ; BOUYER, Frédéric et BÉTRÉMIEUX, Sophie : Modeling and Simulation of the Cooling Process of Borosilicate Glass. *Journal of Engineering Materials and Technology*, 2012, **134**(4):041001.1–10. DOI : <http://dx.doi.org/10.1115/1.4006132>
- [BGA<sup>+</sup>13] BARTH, Nicolas ; GEORGE, Daniel ; AHZI, Saïd ; RÉMOND, Yves ; JOULAEI, Nasim ; KHALLEEL, Mohammad A. et BOUYER, Frédéric : Simulation of cooling and solidification of three-dimensional bulk borosilicate glass : effect of structural relaxations. *Mechanics of Time-Dependent Materials*, 2013, nombre de pages : 16. En publication. DOI : <http://dx.doi.org/10.1007/s11043-013-9215-3>

- [BJS80] BONNIAUD, Roger ; JOUAN, Antoine et SOMBRET, Claude : Large scale production of glass for high level radioactive waste. *Nuclear and Chemical Waste Management*, 1980, **1**(1):3–16. DOI : [http://dx.doi.org/10.1016/0191-815X\(80\)90024-8](http://dx.doi.org/10.1016/0191-815X(80)90024-8)
- [BSB06] BATEMAN, Kenneth J. ; SOLBRIG, Charles W. et BENEDICT, Robert W. : Heat transfer design for ceramic waste forms from pyroprocessing. Dans *American Nuclear Society Embedded Topical Meeting – 2006 International Congress on Advances in Nuclear Power Plants, ICAPP'06*, volume 2006, pages 1973–1983, Reno, Nevada, États-Unis, 2006.
- [CB86] CHAMBERS, Robert S. et BECKER, Eric B. : Integration error controls for a finite element viscoelastic analysis. *Computers & Structures*, 1986, **24**(4):537–544. DOI : [http://dx.doi.org/10.1016/0045-7949\(86\)90192-6](http://dx.doi.org/10.1016/0045-7949(86)90192-6)
- [Cer79] CERESER, Walter : Tuyauteries – Transmission de la chaleur. *Éditions Techniques de l'Ingénieur*, 1979, **Génie mécanique**:A 820.1–17.
- [Cho89] CHOI, Kyungsik : *A damage mechanics approach to the three dimensional constitutive modelling of ice deformation*. Thèse de doctorat, Massachusetts Institute of Technology, Department of Ocean Engineering, 1989. 175 pp.
- [Cho08] CHOMAT, Laure : *Compréhension de l'altération à long terme des colis de verre R7T7 : étude du couplage chimie transport dans un milieu fissuré*. Thèse de doctorat, Physique et Chimie des Matériaux–Chimie, Université Pierre et Marie Curie, Paris 6, CEA, Centre de Marcoule, Département d'études du traitement et du conditionnement des déchets, Service d'étude et comportement des matériaux de conditionnement, 2008. Rapport CEA, ISSN 0429-3460 (R-6208), 213 pp.
- [DBACB13] DOQUET, Véronique ; BEN ALI, Neji ; CONSTANTINESCU, Andrei et BOUTILLON, Xavier : Fracture of a borosilicate glass under triaxial tension. *Mechanics of Materials*, février 2013, **57**:15–29. DOI : <http://dx.doi.org/10.1016/j.mechmat.2012.10.008>
- [DC98] DAUDEVILLE, Laurent et CARRÉ, Hélène : Thermal tempering simulation of glass plates: inner and edge residual stresses. *Journal of Thermal Stresses*, 1998, **21**(6):667–689. DOI : <http://dx.doi.org/10.1080/01495739808956168>
- [DDC+10] DUBÉ, Martine ; DOQUET, Véronique ; CONSTANTINESCU, Andrei ; GEORGE, Daniel ; RÉMOND, Yves et AHZI, Saïd : Modeling of Thermal Shock-Induced Damage in a Borosilicate Glass. *Mechanics of Materials*, 2010, **42**(9):863–872. DOI : <http://dx.doi.org/10.1016/j.mechmat.2010.07.002>
- [DEMM76] DEBOLT, Mary A. ; EASTEAL, Allan J. ; MACEDO, Pedro B. et MOYNIHAN, Cornelius T. : Analysis of Structural Relaxation in Glass Using Rate Heating Data. *Journal of the American Ceramic Society*, janvier 1976, **59**(1–2):16–21. DOI : <http://dx.doi.org/10.1111/j.1151-2916.1976.tb09377.x>
- [FE88] FALETTI, Duane W. et ETHRIDGE, Lore J. : A method for predicting cracking in waste glass canisters. *Nuclear and Chemical Waste Management*, 1988, **8**(2):123–133. DOI : [http://dx.doi.org/10.1016/0191-815X\(88\)90071-X](http://dx.doi.org/10.1016/0191-815X(88)90071-X)
- [FGM+08] FRUGIER, Pierre ; GIN, Stéphane ; MINET, Yves ; CHAVE, Tony ; BONIN, Bernard ; GODON, Nicole ; LARTIGUE, Jean-Éric ; JOLLIVET, Patrick ; AYRAL, André ; DE WINDT, Laurent et SANTARINI, Gérard : SON68 nuclear glass dissolution kinetics: Current state of knowledge and basis of the new GRAAL model. *Journal of Nuclear Materials*, octobre 2008, **380**(1–3):8–21. DOI : <http://dx.doi.org/10.1016/j.jnucmat.2008.06.044>
- [FOADSM+08] FERNÁNDEZ ORO, Jesús M. ; ARGÜELLES DÍAZ, Katia M. ; SANTOLARIA MORROS, Carlos ; COBO HEDILLA, Angel F. et LEMAILLE, Maurice : Multiphase modelling of pouring glass over the spout lip of an industrial float in the flat glass forming process. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 2008, **58**(10):1147–1177. DOI : <http://dx.doi.org/10.1002/flid.1793>
- [FSC00] FIELDING, Suzanne M. ; SOLLICH, Peter et CATES, Michael E. : Aging and rheology in soft materials. *Journal of Rheology*, mars 2000, **44**(2):323–369. DOI : <http://dx.doi.org/10.1122/1.551088>



- [Gan00] GANGHOFFER, Jean-François : Calculation of Thermal Stresses in Glass-Ceramic Composites. *Mechanics of Time-Dependent Materials*, 2000, **4**(4):359–379. DOI : <http://dx.doi.org/10.1023/A:1026581906549>
- [GAOS+11] GUÉGUEN, Y.; ADELINET, M.; OUGIER-SIMONIN, A.; FORTIN, J. et SCHUBNEL, A. : How cracks modify permeability and introduce velocity dispersion: Examples of glass and basalt. *The Leading Edge*, 2011, **30**(12):1392–1398. DOI : <http://dx.doi.org/10.1190/1.3672484>
- [Gen10] GENET, Martin : *Vers un matériau virtuel pour les composites céramiques*. Thèse de doctorat, Mécanique, École Normale Supérieure de Cachan, 2010. 196 pp.
- [GR05] GIN, Stéphane et RIBET, Isabelle : Comportement à long terme des verres nucléaires de type R7T7 – Bilan des connaissances près de l'échéance de la loi Bataille. *Actualité chimique*, avril–mai 2005, **285–286**:72–77.
- [Hod94] HODGE, Ian M. : Enthalpy relaxation and recovery in amorphous materials. *Journal of Non-Crystalline Solids*, avril 1994, **169**(3):211–266. DOI : [http://dx.doi.org/10.1016/0022-3093\(94\)90321-2](http://dx.doi.org/10.1016/0022-3093(94)90321-2)
- [IZNA+11] ISMAIL, Jewan; ZAÏRI, Fahmi; NAÏT-ABDELAZIZ, Moussa; BOUZID, Said et AZARI, Zitouni : Experimental and numerical investigations on erosion damage in glass by impact of small-sized particles. *Wear*, juin 2011, **271**(5–6):817–826. DOI : <http://dx.doi.org/10.1016/j.wear.2011.03.009>
- [IZNAA08] ISMAIL, Jewan; ZAÏRI, Fahmi; NAÏT-ABDELAZIZ, Moussa et AZARI, Zitouni : Computational modelling of static indentation-induced damage in glass. *Computational Materials Science*, mai 2008, **42**(3):407–415. DOI : <http://dx.doi.org/10.1016/j.commat.2007.08.006>
- [JY05] JAIN, Anurag et YI, Allen Y. : Numerical Modeling of Viscoelastic Stress Relaxation During Glass Lens Forming Process. *Journal of the American Ceramic Society*, 2005, **88**(3):530–535. DOI : <http://dx.doi.org/10.1111/j.1551-2916.2005.00114.x>
- [JYXS06] JAIN, Anurag; YI, Allen Y.; XIE, Xipeng et SOORYAKUMAR, Ratnasingham : Finite element modelling of stress relaxation in glass lens moulding using measured, temperature-dependent elastic modulus and viscosity data of glass. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2006, **14**(3):465–477. DOI : <http://dx.doi.org/10.1088/0965-0393/14/3/009>
- [Kac58] KACHANOV, Lazar M. : Rupture Time Under Creep Conditions. *Izvestia Akademii Nauk SSSR, Otdelenie tekhnicheskikh nauk*, 1958, **8**:26–31. En russe, traduit en anglais dans *International Journal of Fracture*, 1999, **97**(1–4):11–18. DOI : <http://dx.doi.org/10.1023/A:1018671022008>
- [Kac94] KACHANOV, Mark : Elastic Solids with Many Cracks and Related Problems. Dans HUTCHINSON, John W. et WU, Theodore Y., éditeurs : *Advances in Applied Mechanics*, volume 30, pages 259–445. Elsevier, 1994. DOI : [http://dx.doi.org/10.1016/S0065-2156\(08\)70176-5](http://dx.doi.org/10.1016/S0065-2156(08)70176-5)
- [KAHR79] KOVACS, André J.; AKLONIS, John J.; HUTCHINSON, John M. et RAMOS, Ariel R. : Isobaric volume and enthalpy recovery of glasses. II. A transparent multiparameter theory. *Journal of Polymer Science: Polymer Physics Edition*, juillet 1979, **17**(7):1097–1162. DOI : <http://dx.doi.org/10.1002/pol.1979.180170701>
- [KC89] KARR, Dale G. et CHOI, Kyungsik : A three-dimensional constitutive damage model for polycrystalline ice. *Mechanics of Materials*, août 1989, **8**(1):55–66. DOI : [http://dx.doi.org/10.1016/0167-6636\(89\)90005-7](http://dx.doi.org/10.1016/0167-6636(89)90005-7)
- [KKC07] KONG, Jinhak; KIM, Ji et CHUNG, Kwansoo : Residual stress analysis with improved numerical methods for tempered plate glasses based on structural relaxation model. *Metals and Materials International*, février 2007, **13**(1):67–75. DOI : <http://dx.doi.org/10.1007/BF03027825>
- [KKS+91] KAHL, Lothar; KROEBEL, Reinhard H.; STORCH, Werner; HOLTON, Langdon K. et DIERKS, Richard D. : Investigation of the thermal behaviour of high level waste glass in steel canisters during cooling and at equilibrium. *Nuclear Engineering and Design*, septembre 1991, **130**(1):77–88. DOI : [http://dx.doi.org/10.1016/0029-5493\(91\)90195-N](http://dx.doi.org/10.1016/0029-5493(91)90195-N)

- [KN84] KAMIZONO, Hiroshi et NIWA, Kazukuni : An estimation of the thermal shock resistance of simulated nuclear waste glass under water quenching conditions. *Journal of Materials Science Letters*, juillet 1984, **3**(7):588–590. DOI : <http://dx.doi.org/10.1007/BF00719619>
- [Kov58] KOVACS, André J. : La contraction isotherme du volume des polymères amorphes. *Journal of Polymer Science*, juillet 1958, **30**(121):131–147. DOI : <http://dx.doi.org/10.1002/pol.1958.1203012111>
- [Kov64] KOVACS, André J. : Transition vitreuse dans les polymères amorphes. Étude phénoménologique. Dans *Advances in Polymer Science*, volume 3/3, pages 394–507. Springer Berlin Heidelberg, 1964. DOI : <http://dx.doi.org/10.1007/BFb0050366>
- [Kra85] KRAJČINOVIC, Dusan : Continuous Damage Mechanics Revisited: Basic Concepts and Definitions. *Journal of Applied Mechanics*, 1985, **52**(4):829–834. DOI : <http://dx.doi.org/10.1115/1.3169154>
- [Kra89] KRAJČINOVIC, Dusan : Damage mechanics. *Mechanics of Materials*, décembre 1989, **8**(2–3):117–197. DOI : [http://dx.doi.org/10.1016/0167-6636\(89\)90011-2](http://dx.doi.org/10.1016/0167-6636(89)90011-2)
- [Kur63] KURKJIAN, Chuck R. : Relaxation of Torsional Stress in the Transformation Range of a Soda-Lime-Silica Glass. *Physics and Chemistry of Glasses*, 1963, **4**(4):128–136.
- [Lam07] LAMON, Jacques : *Mécanique de la rupture fragile et de l'endommagement – approches statistiques et probabilistes*. Hermes-Science, 2007. Collection : *Étude en mécanique des matériaux et des structures*, dirigée par Paul GERMAIN et Pierre LADEVÈZE.
- [LC85] LEMAÎTRE, Jean et CHABOCHE, Jean-Louis : *Mécanique des matériaux solides*. Dunod, Paris, 1985. 532 pp.
- [Lem85] LEMAÎTRE, Jean : Coupled elasto-plasticity and damage constitutive equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, septembre 1985, **51**(1–3):31–49. DOI : [http://dx.doi.org/10.1016/0045-7825\(85\)90026-X](http://dx.doi.org/10.1016/0045-7825(85)90026-X)
- [LGA94] LADEVÈZE, Pierre; GASSER, Alain et ALLIX, Olivier : Damage Mechanisms Modeling for Ceramic Composites. *Journal of Engineering Materials and Technology*, juillet 1994, **116**(3):331–336. DOI : <http://dx.doi.org/10.1115/1.2904296>
- [LLD92] LADEVÈZE, Pierre et LE DANTEC, Éric : Damage modelling of the elementary ply for laminated composites. *Composites Science and Technology*, 1992, **43**(3):257–267. DOI : [http://dx.doi.org/10.1016/0266-3538\(92\)90097-M](http://dx.doi.org/10.1016/0266-3538(92)90097-M)
- [LSCT12] LIU, Wenning; SUN, Xin; CHEN, Weinong et TEMPLETON, Douglas : Modeling and Characterization of Dynamic Failure of Soda-lime Glass Under High Speed Impact. *International Journal of Damage Mechanics*, 2012, **21**(4):577–598. DOI : <http://dx.doi.org/10.1177/1056789511411430>
- [MAL91] MONCOUYOUX, Jean-Pierre; AURE, A. et LADIRAT, Christian : Investigation of full-scale high-level waste containment glass blocks – Task 3. Characterization of radioactive waste forms. A series of final reports (1985–89) ; n° 24. Rapport technique, CEA, 1991. ISBN 92-826-2818-3. EUR 13612 EN.
- [Mat05] MATTEÏ, Simone : Rayonnement thermique des matériaux opaques. *Éditions Techniques de l'Ingénieur*, 2005, **Génie énergétique**:BE 8 210.1–24.
- [MET+76] MOYNIHAN, Cornelius T.; EASTEAL, Allan J.; TRAN, Danh C.; WILDER, James A. et DONOVAN, Edward P. : Heat Capacity and Structural Relaxation of Mixed-Alkali Glasses. *Journal of the American Ceramic Society*, mars 1976, **59**(3–4):137–140. DOI : <http://dx.doi.org/10.1111/j.1151-2916.1976.tb09450.x>
- [MPS+10] MARTIN, Marc-Antoine; POIROT, Éric; SUTRE, Éric; TINOCO, Bertrand; DEMAIL, P.; LE GARS, E.; MERCENIER, F.; PAUL, V. et REZZOUG, A. : Le laboratoire souterrain – Un outil scientifique unique pour concevoir un stockage réversible profond. Rapport technique, Andra, 2010. Brochure n° 377b, 5 pp.
- [MS84] MARKOVSKY, Alex et SOULES, Thomas F. : An Efficient and Stable Algorithm for Calculating Fictive Temperatures. *Journal of the American Ceramic Society*, 1984, **67**(4):c56–c57. DOI : <http://dx.doi.org/10.1111/j.1151-2916.1984.tb18826.x>

- [Nar71] NARAYANASWAMY, O. S. : A Model of Structural Relaxation in Glass. *Journal of the American Ceramic Society*, 1971, **54**(10):491–498. DOI : <http://dx.doi.org/10.1111/j.1151-2916.1971.tb12186.x>
- [NOPS10] NIELSEN, Jens Henrik; OLESEN, John F.; POULSEN, Peter N. et STANG, Henrik : Finite element implementation of a glass tempering model in three dimensions. *Computers & Structures*, 2010, **88**(17–18):963–972.
- [NOS09] NIELSEN, Jens H.; OLESEN, John F. et STANG, Henrik : The Fracture Process of Tempered Soda-Lime-Silica Glass. *Experimental Mechanics*, décembre 2009, **49**(6):855–870. DOI : <http://dx.doi.org/10.1007/s11340-008-9200-y>
- [OS10] OUGIER-SIMONIN, Audrey : *Propriétés mécaniques et de transport des verres fissurés*. Thèse de doctorat, Sciences de la Terre, Géophysique, Université Paris VII Denis Diderot, 2010. 246 pp.
- [OSBG+10] OUGIER-SIMONIN, A.; BOUYER, F.; GUÉGUEN, Y.; FORTIN, J. et SCHUBNEL, A. : Endommagement et fissuration du verre en compression triaxiale. *Matériaux & Techniques*, 2010, **98**(6–7):423–441. DOI : <http://dx.doi.org/10.1051/mattech/2010118>
- [OSFG+11] OUGIER-SIMONIN, Audrey; FORTIN, Jérôme; GUÉGUEN, Yves; SCHUBNEL, Alexandre et BOUYER, Frédéric : Cracks in glass under triaxial conditions. *International Journal of Engineering Science*, janvier 2011, **49**(1):105–121. DOI : <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijengsci.2010.06.026>
- [OSGF+11] OUGIER-SIMONIN, Audrey; GUÉGUEN, Yves; FORTIN, Jérôme; SCHUBNEL, Alexandre et BOUYER, Frédéric : Permeability and elastic properties of cracked glass under pressure. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*, juillet 2011, **116**(B7):B07203.1–12. DOI : <http://dx.doi.org/10.1029/2010JB008077>
- [PBD+01] PEREZ JR., J. M.; BICKFORD, D. F.; DAY, D. E.; KIM, D. S.; LAMBERT, S. L.; MARRA, S. L.; PEELER, D. K.; STRACHAN, D. M.; TRIPLETT, M. B.; VIENNA, J. D. et WITTMAN, R. S. : High-Level Waste Melter Study Report. Rapport technique PNNL-13582, Pacific Northwest National Laboratory, 2001.
- [PCB87] PIJAUDIER-CABOT, Gilles et BAŽANT, Zdeněk : Nonlocal Damage Theory. *Journal of Engineering Mechanics*, octobre 1987, **113**(10):1512–1533. DOI : [http://dx.doi.org/10.1061/\(ASCE\)0733-9399\(1987\)113:10\(1512\)](http://dx.doi.org/10.1061/(ASCE)0733-9399(1987)113:10(1512))
- [PCB93] PIJAUDIER-CABOT, Gilles et BENALLAL, Ahmed : Strain localization and bifurcation in a non-local continuum. *International Journal of Solids and Structures*, 1993, **30**(13):1761–1775. DOI : [http://dx.doi.org/10.1016/0020-7683\(93\)90232-V](http://dx.doi.org/10.1016/0020-7683(93)90232-V)
- [PDE02] PRIETO, Manuela; DÍAZ, José et EGUSQUIZA, Eduardo : Analysis of the fluid-dynamic and thermal behaviour of a tin bath in float glass manufacturing. *International Journal of Thermal Sciences*, avril 2002, **41**(4):348–359. DOI : [http://dx.doi.org/10.1016/S1290-0729\(02\)01325-X](http://dx.doi.org/10.1016/S1290-0729(02)01325-X)
- [PJWJ81] PEREZ JR., Joseph M. et WESTSIK JR., Joseph H. : Effects of cracks on glass leaching. *Nuclear and Chemical Waste Management*, 1981, **2**(2):165–168. DOI : [http://dx.doi.org/10.1016/0191-815X\(81\)90034-6](http://dx.doi.org/10.1016/0191-815X(81)90034-6)
- [RJOJ+99] RILEY JR., William P.; O'HOLLERAN, Thomas; JOHNSON, Stephen G.; DiSANTO, Thomas; BATEMAN, Kenneth J. et GOFF, Kenneth M. : Scale Up Issues Involved With the Ceramic Waste Form: Ceramic-Container Interactions and Ceramic Cracking Quantification. Dans *101<sup>st</sup> Annual Meeting – Symposium: Waste Management Science and Technology in the Ceramic and Nuclear Industries*, Indianapolis, Indiana, États-Unis, 25–30 avril 1999. American Ceramic Society.
- [SBR+87] SOULES, Thomas E.; BUSBEY, Robert E.; REKHSOON, Simon M.; MARKOVSKY, Alex et BURKE, Michael A. : Finite-Element Calculation of Stresses in Glass Parts Undergoing Viscous Relaxation. *Journal of the American Ceramic Society*, 1987, **70**(2):90–95. DOI : <http://dx.doi.org/10.1111/j.1151-2916.1987.tb04935.x>
- [SGLR05] SIEDOW, Norbert; GROSAN, Teodor; LOCHEGNIEN, Dominique et ROMÉRO, Éric : Application of a New Method for Radiative Heat Transfer to Flat Glass Tempering. *Journal of the*

- American Ceramic Society*, 2005, **88**(8):2181–2187. DOI : <http://dx.doi.org/10.1111/j.1551-2916.2005.00402.x>
- [Sie98] SIEGEL, Robert : Transient effects of radiative transfer in semitransparent materials. *International Journal of Engineering Science*, septembre 1998, **36**(12–14):1701–1739. DOI : [http://dx.doi.org/10.1016/S0020-7225\(98\)00054-8](http://dx.doi.org/10.1016/S0020-7225(98)00054-8)
- [Sit05] SITE INTERNET DU CEA : Coulée de verre en laboratoire à Marcoule (Gard), novembre 2005. Depuis [http://nucleaire.cea.fr/fr/environnement\\_sante/recherches\\_dechets.htm](http://nucleaire.cea.fr/fr/environnement_sante/recherches_dechets.htm) et [http://nucleaire.cea.fr/fr/environnement\\_sante/pu\\_coulee\\_verre.htm](http://nucleaire.cea.fr/fr/environnement_sante/pu_coulee_verre.htm) [en juin 2013].
- [SK01] SUN, Xin et KARR, Dale G. : A Dynamical Systems Approach to Bifurcation and Instability of Constitutive Relations for Brittle Damage Materials. *International Journal of Damage Mechanics*, 2001, **10**:279–299. DOI : <http://dx.doi.org/10.1106/1K1Y-W6C2-7AD7-GTQ7>
- [SK04] SUN, Xin et KHALEEL, Mohammad A. : Modeling of Glass Fracture Damage Using Continuum Damage Mechanics – Static Spherical Indentation. *International Journal of Damage Mechanics*, 2004, **13**(3):263–285. DOI : <http://dx.doi.org/10.1177/1056789504042593>
- [SKD05] SUN, Xin; KHALEEL, Mohammad A. et DAVIES, Richard W. : Modeling of Stone-impact Resistance of Monolithic Glass Ply Using Continuum Damage Mechanics. *International Journal of Damage Mechanics*, 2005, **14**(2):165–178. DOI : <http://dx.doi.org/10.1177/1056789505048601>
- [SLCT09] SUN, Xin; LIU, Wenning; CHEN, Weinong et TEMPLETON, Douglas : Modeling and characterization of dynamic failure of borosilicate glass under compression/shear loading. *International Journal of Impact Engineering*, février 2009, **36**(2):226–234. DOI : <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijimpeng.2008.01.014>
- [SWK96] SUN, Xin; WIMMER, Stephanie A. et KARR, Dale G. : Shear Band Initiation of Brittle Damage Materials. *International Journal of Damage Mechanics*, 1996, **5**(4):403–421. DOI : <http://dx.doi.org/10.1177/105678959600500404>
- [TE31] TOOL, Arthur Q. et EICHLIN, Charles G. : Variations caused in the heating curves of glass by heat treatment. *Journal of the American Ceramic Society*, avril 1931, **14**(4):276–308. DOI : <http://dx.doi.org/10.1111/j.1151-2916.1931.tb16602.x>
- [Too46] TOOL, Arthur Q. : Relation between inelastic deformability and thermal expansion of glass in its annealing range. *Journal of the American Ceramic Society*, 1946, **29**(9):240–253. DOI : <http://dx.doi.org/10.1111/j.1151-2916.1946.tb11592.x>
- [Too48] TOOL, Arthur Q. : Effect of heat-treatment on the density and constitution of high-silica glasses of the borosilicate type. *Journal of the American Ceramic Society*, juillet 1948, **31**(7):177–186. DOI : <http://dx.doi.org/10.1111/j.1151-2916.1948.tb14287.x>
- [WK96] WEBB, Sharon et KNOCHE, Ruth : The glass-transition, structural relaxation and shear viscosity of silicate melts. *Chemical Geology*, juin 1996, **128**(1–4):165–183. DOI : [http://dx.doi.org/10.1016/0009-2541\(95\)00171-9](http://dx.doi.org/10.1016/0009-2541(95)00171-9)
- [YJ05] Yi, Allen Y. et JAIN, Anurag : Compression Molding of Aspherical Glass Lenses – A Combined Experimental and Numerical Analysis. *Journal of the American Ceramic Society*, 2005, **88**(3):579–586. DOI : <http://dx.doi.org/10.1111/j.1551-2916.2005.00137.x>
- [ZM03] ZHENG, Yong et MCKENNA, Gregory B. : Structural Recovery in a Model Epoxy: Comparison of Responses after Temperature and Relative Humidity Jumps. *Macromolecules*, mars 2003, **36**(7):2387–2396. DOI : <http://dx.doi.org/10.1021/ma025930c>
- [ZT91] ZIENKIEWICZ, Olgierd C. et TAYLOR, Robert L. : *La méthode des éléments finis – Formulation de base et problèmes linéaires*. Afnor technique, 1991. Traduit de « *The Finite Element Method. Basic Formulation and Linear Problems* », 1989, par SAIAC, J.-H. ; JAFFRÉ, J. ; KERN, M. ; MAMMERI, B. et MARROCCO, A. 620 pp.







## **Résumé**

On étudie le comportement thermomécanique de colis de déchets vitrifiés par modélisation multi-physiques. Les colis sont réalisés avec un conteneur en acier inoxydable dans lequel est coulé un verre borosilicaté. Pour le verre, la méthode des éléments finis est employée pour les calculs thermiques, la relaxation structurale du volume massique, le comportement viscoélastique et l'endommagement. Ces lois consécutives modélisent l'influence de la sollicitation thermique initiale.

La relaxation structurale du verre, issue du modèle TNM-KAHR, permet la prise en compte d'effets fondamentaux quant à la transition vitreuse, en fonction des traitements thermiques expérimentaux et simulés.

Lorsque le verre dépasse localement une criticité du champ de contrainte, on procède au couplage du calcul de structure viscoélastique, pour le verre solide en relaxation, avec la mécanique de l'endommagement qui réactualise la rigidité et les contraintes en mode I et en mode II.

On applique cette méthodologie complète de simulation à l'issue des adaptations nécessaires au cas de blocs de verre massifs en solidification. Ces modèles permettent alors l'obtention de surfaces de fracturation quantifiées, dans le verre, à partir de l'énergie dissipée par le modèle d'endommagement.

---

*On the modeling and simulation of the mechanical behavior and damage of borosilicate glass under thermal loading*

## **Abstract**

We study the thermomechanical behavior of vitrified waste packages by multi-physics modeling. The packages are manufactured by the cast of borosilicate glass into stainless steel canisters. The finite element method is used for the thermal computations. In the glass, the finite element analysis is also used to compute the specific volume evolution and the viscoelastic behavior, due to the structural relaxation of glass, as well as the simulation of the damage behavior. These consecutive behavior laws model the influence of the initial thermal response.

Glass structural relaxation is computed using the TNM-KAHR model, which allows us to take into account fundamental phenomena of the glass transition, depending on the results of experimental and simulated thermal treatments.

For the solid glass within this relaxation process, the stress may locally increase beyond critical values. The viscoelastic structure simulation is then coupled with continuum damage mechanics where stresses and stiffness are updated in mode I and mode II.

We apply this simulation protocol after adopting conditions relative to the case of these manufactured bulky solidifying glass casts. The models then allow us to quantify the cracking surfaces inside the glass from the energy dissipated within the damage model.