TABLE DES MATIÈRES

RÉSUMÉ			1
ABSTRACT			2
AVANT-	AVANT-PROPOS		
REMERCIEMENTS			4
TABLE DES MATIÈRES			6
			11
LISTEDI	ES TAE	SLEAUX	16
LISTE DI	ES SYN	/BOLES	18
LISTE DI	ES OPI	ÉRATEURS	22
CHAPITRE 1 PRÉSENTATION DU PROJET DE RECHERCHE			1
1.1	Gén	ÉRALITÉS SUR L'ALUMINIUM	1
1.2	Pro	BLÉMATIQUE	3
1.3 Овј		ECTIFS	8
1.4	Éта	T DES CONNAISSANCES	8
1.4	4.1	Composition de la pâte monolithique	8
1.4	4.2	Caractérisation du comportement élastoplastique	11
1.4	4.3	Comportement spécifique en cours de cuisson	14
1.4	4.4	l des modèles de comportement existants	17
1.5	Mét	HODOLOGIE	19
1.5	5.1	Sélection et implémentation de la loi de comportement	20
1.5	5.2	Validation du banc d'essai pour validation expérimentale	20
1.6	Ore	ANISATION DU DOCUMENT	21
CHAPIT	RE 2	MODÈLE CONSTITUTIF ÉLASTOPLASTIQUE POUR LA PÂTE MONOLITHIQUE	22
2.1	Gén	ÉRALITÉS	22
2.2 Défi		NITION DU MODÈLE ÉLASTOPLASTIQUE AVEC ADOUCISSEMENT POUR LA PÂTE MONOLITHIQUE	23

vi

2.2	2.1	Justification de la stratégie retenue	23
2.2	2.2	Introduction du modèle	26
2.2	2.3	Définition de la surface de charge	26
2.2	2.4	Définition du potentiel d'écoulement plastique	29
2.2	2.5	Écrouissage isotrope	32
2.2	2.6	Adoucissement isotrope	36
2.2	2.7	Effets de la température sur le comportement du matériau	39
2.2	2.8	Formulation généralisée de la loi de comportement élastoplastique	45
2.3	Pro	CÉDURE D'IDENTIFICATION DES PARAMÈTRES DU MODÈLE	47
2.3	8.1	Réalisation des essais mécaniques	49
2.3	8.1	Méthode d'identification des paramètres physiques	49
2.3	8.2	Détermination des paramètres du potentiel de charge	53
2.3	8.3	Détermination des paramètres du potentiel d'écoulement plastique	56
2.3	8.4	Prise en compte du niveau de cuisson du matériau	57
CHAPITE	RE 3	INTÉGRATION DE LA LOI ET MISE EN ŒUVRE INFORMATIQUE	59
3.1	Gén	ÉRALITÉS	59
3.2	Réso	DLUTION DU PROBLÈME MÉCANIQUE PAR ÉLÉMENTS FINIS	60
3.2	2.1	Travail virtuel	60
3.2	2.2	Prise en compte des non-linéarités matérielles et géométriques	62
3.2	2.3	Calcul de la contrainte	64
3.2	2.4	Calcul de la matrice tangente élastoplastique	75
3.2	2.5	Calcul des gradients et du Hessien des différents potentiels	77
3.2	2.6	Algorithme de calcul	78
3.3	Réso	DLUTION DU PROBLÈME THERMOCHIMIQUE	81
3.3	8.1	Schéma explicite	81
3.3	8.2	Schéma implicite	82
3.4	Mise	E EN ŒUVRE INFORMATIQUE	86
3.4	1.1	Présentation de l'interface avec ANSYS [®] (UserMat)	86
3.4	1.2	Conception structurée de la loi de comportement	88
CHAPITRE 4		VALIDATION NUMÉRIQUE DE LA LOI DE COMPORTEMENT	95

4	.1	Géne	RALITÉS	95
4	.2	Logi	CIELS UTILISÉS	96
4	.3	Valii	DATION MÉCANIQUE	96
	4.3.	1	Modèle numérique	96
	4.3.	2	Simulation avec effort en compression	98
	4.3.	3	Simulation avec effort en traction	100
	4.3.	4	Poutre avec effort en flexion	102
	4.3.	5	Extension au cas de l'acier	105
4	.4	VALI	DATION THERMO-CHIMIO-MÉCANIQUE	113
	4.4.	1	Modèle numérique	113
	4.4.	2	Simulation d'une cuisson libre	114
	4.4.	3	Simulation d'une cuisson confinée	117
4	.5	En r	ŚUMÉ	118
СНА	PITR	E 5	VALIDATION THERMOMÉCANIQUE DU BANC D'ESSAI BERTA	120
5	.1	Mise	EN CONTEXTE	120
	5.1.	1	Historique	121
	5.1.	2	Spécification du banc d'essai	124
5	.2	Obje	CTIFS DE LA VALIDATION DU BANC D'ESSAI	127
5	.3	Mét	HODOLOGIE	127
	5.3.	1	Hypothèses de base et définition	128
5	.4	Retc	ur sur les tests mécaniques sur BERTA (2008)	130
	5.4.	1	Configuration de BERTA pour les tests	130
	5.4.	2	Résultats expérimentaux	131
	5.4.	3	Modèle analytique	132
	5.4.	4	Analyse des résultats	136
	5.4.	5	Analyse de sensibilité	139
	5.4.	6	Conclusions partielles	144
5	.5	Retc	ur sur les tests thermomécaniques sur BERTA (2009)	145
	5.5.	1	Configuration de BERTA pour les tests	145
	5.5.	2	Résultats expérimentaux	146

5.5.3		.3	Modèle analytique	152
5.5.4		.4	Analyse des résultats du modèle	157
	5.5	.5	Analyse de sensibilité	159
	5.5	.6	Conclusions partielles	164
	5.6	Nouv	/ELLE SÉRIE DE TESTS EXPÉRIMENTAUX	165
	5.6	.1	Généralités	165
	5.6.2		Tests de frottement à température ambiante	167
	5.6	.3	Tests thermomécaniques	168
	5.7	En ré	SUMÉ	177
	5.8	Mod	IFICATIONS PROPOSÉES À LA MÉTHODE DE MESURE	179
	5.9	Conc	CLUSION	180
Cł	IAPITE	RE 6	CONCLUSION	181
	6.1	Rétro	DSPECTIVE	181
	6.2	Reco	MMANDATIONS ET TRAVAUX FUTURS	182
RÉ	FÉREN	ICES		185
A	NNEXE	A INT	RODUCTION À LA THÉORIE DE LA PLASTICITÉ	191
	Introi	DUCTIO	Ν	191
	Invari	ANTS D	U TENSEUR DES CONTRAINTES	191
DÉFINITION ET FONC			FONCTION DE LA SURFACE DE CHARGE	193
	La règ	ile d'éc	OULEMENT	196
	Systèn	NE DE C	OORDONNÉES DE HAIGH-WESTERGAARD	198
AI	NNEXE	B DÉR	RIVÉES ANALYTIQUES DES ÉQUATIONS	202
	ÉQUAT	IONS DI	E BASE ET CONSTANTES	202
	Sys	tème (de coordonnées de Haigh Westergaard	202
	Со	nstant	es	202
	Dérivi	ÉES PREI	MIÈRES	203
	Sys	tème (de coordonnée de Haigh-Westergaard	203
Coordonnée polaire (Fonction de Willam & Warnke)			née polaire (Fonction de Willam & Warnke)	205
Surface de charge				206

ix

	Potentiel d'écoulement plastique	206
	Fonction d'écrouissage	207
	Fonction d'adoucissement	207
DÉRIVÉES SECONDES		208
	Système de coordonnée de Haigh-Westergaard	208
	Potentiel d'écoulement plastique	209

X_____X

LISTE DES FIGURES

FIGURE 1-1: PRODUCTION MONDIALE DE L'ALUMINIUM DE PREMIÈRE FUSION EN 2005 [2]
FIGURE 1-2: SCHÉMA D'UNE CUVE DE HALL-HÉROULT À ANODE PRÉCUITE [3]
FIGURE 1-3: SALLE DE CUVE UTILISANT LA TECHNOLOGIE P-155 [6]
FIGURE 1-4: VUE EN COUPE D'UNE CUVE D'ÉLECTROLYSE ET DE SES COMPOSANTES [7]
FIGURE 1-5: COURBE DE DILATOMÉTRIE SUR 3 ÉCHANTILLONS DE PÂTE MONOLITHIQUE [9]7
FIGURE 1-6: CROQUIS DE QUELQUES AGRÉGATS D'ANTHRACITE ENROBÉS DE LIANT [11]
FIGURE 1-7: SCHÉMA D'UNE CUVE D'ÉLECTROLYSE DE HALL-HÉROULT [7]10
FIGURE 1-8: RÉSISTANCE EN COMPRESSION (A) ET EN TENSION (B) D'UN ÉCHANTILLON EN FONCTION DE LEUR DENSITÉ INITIALE. LA
PARTIE OMBRAGÉE MONTRE LA ZONE OÙ LES AGRÉGATS SONT FRAGMENTÉS. [12]13
Figure 1-9: Courbe de thermogravimétrie de la pâte [7]15
Figure 2-1: Surface de charge du modèle élastoplastique dans le système de coordonnées de Haigh-Westergaard
FIGURE 2-2: DIRECTION DE L'ÉCOULEMENT POUR UN CHEMIN DE TRACTION TRIAXIALE
FIGURE 2-3: COMPARAISON ENTRE LA SURFACE DE ET LE POTENTIEL D'ÉCOULEMENT PLASTIQUE
Figure 2-4: Effet de l'exposant <i>n</i> sur l'évolution de paramètre de résistance <i>k</i>
Figure 2-5: courbe de ductilité dh de la pâte monolithique en fonction de la pression [7]35
FIGURE 2-6: MODES DE FISSURATION [18]
FIGURE 2-7: LISSAGE DES RÉSISTANCES EN COMPRESSION UNIAXIALE [7]

xii
FIGURE 2-8: COURBES DE THERMOGRAVIMÉTRIE DE LA PÂTE À DIFFÉRENTS TAUX DE CHAUFFE [7]
FIGURE 2-9: DÉFORMATION TOTALE D'UN ÉCHANTILLON LORS D'UN ESSAI DE DILATATION LIBRE [7]
Figure 2-10: Déformations d'origine thermique (gauche) et déformation d'origine chimique (droite) lors d'un essai de dilatation libre [7]
Figure 2-11: Courbe type d'un essai uniaxial. [1] limite élastique ($k=k0$); [2] état intermédiaire ($1>k>k0$);
[3] LIMITE ULTIME (K=1, C=1); [4] RUPTURE ($c \approx 0$)
FIGURE 2-12: MÉRIDIENS DE L'ENVELOPPE DE RUPTURE APRÈS UNE CERTAINE CUISSON [7]
FIGURE 3-1: LOCALISATION DES DIFFÉRENTS ÉTATS DE CONTRAINTES
FIGURE 3-2: REPRÉSENTATION GRAPHIQUE DU PROCESSUS ITÉRATIF
FIGURE 3-3: ALGORITHME GÉNÉRAL DE LA ROUTINE USERMAT
FIGURE 3-4: STRUCTURE DE LA SOUS-ROUTINE MATPROPERTIES (IMPORTATION, ÉVALUATION ET STOCKAGE DES PROPRIÉTÉS) 92
FIGURE 3-5: STRUCTURE DE LA SOUS-ROUTINE CSTVLAWELASTIC (LOI DE COMPORTEMENT ÉLASTIQUE)
FIGURE 3-6: STRUCTURE DE LA SOUS-ROUTINE CSTVLAWELASTOPLASTIC (LOI DE COMPORTEMENT ÉLASTOPLASTIQUE)94
Figure 4-1: Modèle numérique de poutre en porte-à-faux
FIGURE 4-2: COURBE CONTRAINTE-DÉFORMATION DE LA POUTRE EN COMPRESSION
Figure 4-3: Évolution du paramètre de résistance
FIGURE 4-4: ÉVOLUTION DE LA DÉFORMATION PLASTIQUE ÉQUIVALENTE
FIGURE 4-5: COURBE CONTRAINTE-DÉFORMATION DE LA POUTRE EN TRACTION
Figure 4-6: Comparaison des courbes contrainte-déformation de la poutre en tension et en compression 101
Figure 4-7: Courbe contrainte déformation de la poutre en flexion

Figure 4-8: Évolution des paramètres de résistance (k) et d'adoucissement (c) au cours de la simulation 103
FIGURE 4-9: COMPARAISON DES COURBES CONTRAINTE-DÉFORMATION DE LA POUTRE EN FLEXION ENTRE LES FIBRES EN COMPRESSION ET CELLES EN TENSION
FIGURE 4-10: PARAMÈTRE DE RÉSISTANCE DANS LA POUTRE À F=300 N104
FIGURE 4-11: COURBE CONTRAINTE-DÉFORMATION THÉORIQUE DE LA LOI DE COMPORTEMENT DE L'ACIER 105
FIGURE 4-12: COURBE CONTRAINTE-DÉFORMATION DE LA POUTRE EN COMPRESSION
FIGURE 4-13: ÉVOLUTION DU PARAMÈTRE DE RÉSISTANCE AU COURS DE LA SIMULATION108
FIGURE 4-14: COMPARAISON DES COURBES CONTRAINTE-DÉFORMATION DE LA POUTRE EN TENSION ET EN COMPRESSION 109
FIGURE 4-15: FLEXION D'UNE POUTRE EN ACIER
FIGURE 4-16 : ÉVOLUTION DES PARAMÈTRES DE RÉSISTANCE ET DE COHÉSION
FIGURE 4-17 : CONTRAINTE NORMALE DANS LA POUTRE À U=4 MM (RÉGIME ÉLASTIQUE, USERMAT)112
FIGURE 4-18 : CONTRAINTE NORMALE DANS LA POUTRE À U=10 MM (RÉGIME ÉLASTOPLASTIQUE, USERMAT)112
FIGURE 4-19: MODÈLE NUMÉRIQUE CUISSON DE LA PÂTE113
FIGURE 4-20: COMPARAISON DES RÉSULTATS DE CUISSON EN FONCTION DU TEMPS
FIGURE 4-21: COMPOSANTES DE DÉFORMATIONS AU CENTRE DU BLOC
FIGURE 4-22: PRESSION HYDROSTATIQUE AU CENTRE DU BLOC
FIGURE 4-23: COMPOSANTES DE DÉFORMATIONS AU CENTRE DU BLOC
FIGURE 4-24: PRESSION HYDROSTATIQUE AU CENTRE DU BLOC
FIGURE 5-1: MONTAGE ORIGINAL DU BANC D'ESSAI DE RÉSISTANCE MÉCANIQUE ALCAN (BERTA) [28]121

FIGURE 5-2: BANC D'ESSAI DE RÉSISTANCE MÉCANIQUE ALCAN (BERTA) [3]124
FIGURE 5-3: CELLULE DE CHARGE DE BERTA [29]125
Figure 5-4: Capot chauffant de BERTA [29]126
FIGURE 5-5: AGENCEMENT DE LVDT POSITIONNÉS AU CENTRE DE LA MÂCHOIRE MOBILE [31]
FIGURE 5-6: LVDT POSITIONNÉS DERRIÈRE LA MÂCHOIRE MOBILE
FIGURE 5-7: MONTAGE UTILISÉ POUR LES ESSAIS MÉCANIQUES DU CRDA
Figure 5-8: Résultats des tests mécaniques pour une poutre décentrée de 8 po vers le sud à partir du centre [29]
FIGURE 5-9: SCHÉMA DE LA CONFIGURATION DE BERTA POUR LE TEST
FIGURE 5-10: SENSIBILITÉ DU SYSTÈME PAR RAPPORT À LA FORCE APPLIQUÉE PAR LE VÉRIN
Figure 5-11: Sensibilité du système par rapport à l'excentricité du positionnement de la poutre par rapport à son axe central
Figure 5-12: Sensibilité du système par rapport à la rigidité de la cellule de charge interne (noté c)142
Figure 5-13: Sensibilité du système par rapport à la rigidité des cellules de charge externe (noté c)143
Figure 5-14: Sensibilité du système par rapport à la rigidité des mâchoires (noté c)
Figure 5-15: Photo du montage utilisé [31]
Figure 5-16: Résultats des tests thermomécaniques [31]147
Figure 5-17: Courbe de température obtenue à t=297 minutes148
FIGURE 5-18: SCHÉMA DE LA CONFIGURATION DE BERTA POUR LE TEST153
FIGURE 5-19: SENSIBILITÉ DU SYSTÈME PAR RAPPORT À L'EXCENTRICITÉ DE LA POSITION DE LA POUTRE



FIGURE 5-20: SENSIBILITÉ DU SYSTÈME PAR RAPPORT AU MOMENT DANS LA POUTRE	. 161
FIGURE 5-21: SENSIBILITÉ DU SYSTÈME PAR RAPPORT À LA RIGIDITÉ DES CELLULES DE CHARGE	. 162
FIGURE 5-22: SENSIBILITÉ DU SYSTÈME PAR RAPPORT À L'AUGMENTATION DE LA TEMPÉRATURE DES TIRANTS	. 163
FIGURE 5-23: SENSIBILITÉ DU SYSTÈME PAR RAPPORT À LA RIGIDITÉ DES MÂCHOIRES	. 164
FIGURE 5-24: MONTAGE UTILISÉ POUR LES ESSAIS DE FROTTEMENT	. 167
FIGURE 5-25: MONTAGE UTILISÉ POUR LES TESTS THERMOMÉCANIQUES À UNE CELLULE DE CHARGE	. 168
FIGURE 5-26: ISOLATION DE L'ENCEINTE DE BERTA LORS DES TESTS (SANS L'INSTALLATION DE LA CELLULE DE CHARGE INTE	erne)
	. 169
FIGURE 5-27: VARIATION DE TEMPÉRATURE MESURÉE SUR LA POUTRE À T=800 MIN	. 170
FIGURE 5-28: DISTRIBUTION DE TEMPÉRATURE SUR LA LONGUEUR DE LA TIGE D'ALUMINE À T=800 MIN	. 171
FIGURE 5-29: RÉSULTATS DES LVDT INSTALLÉS SUR LE MONTAGE À T=800 MIN (MOYENNES)	. 172
FIGURE 5-30: VALEURS DE DÉFORMATIONS MESURÉES ET CORRIGÉES SUR LA POUTRE À T=800 MIN	. 172
FIGURE 5-31: SCHÉMA DE LA CONFIGURATION DE BERTA POUR LE TEST	. 174

LISTE DES TABLEAUX

TABLEAU 1-1: LISTE DES MODÈLES DE MATÉRIAUX DISPONIBLES DANS LE LOGICIEL ANSYS® [14]
TABLEAU 2-1: SOMMAIRE DES PARAMÈTRES DE LA LOI DE COMPORTEMENT ÉLASTOPLASTIQUE
TABLEAU 2-2: MÉTHODE D'IDENTIFICATION DES PARAMÈTRES DE LA LOI ÉLASTOPLASTIQUE
TABLEAU 2-3: SPÉCIFICATIONS DES ESSAIS NÉCESSAIRES À L'IDENTIFICATION DES PARAMÈTRES DE LA LOI DE COMPORTEMENT 50
TABLEAU 3-1: PRINCIPAUX PARAMÈTRES D'ENTRÉE DE LA ROUTINE USERMAT 87
TABLEAU 3-2: PRINCIPAUX PARAMÈTRES D'ENTRÉE/SORTIE DE LA ROUTINE USERMAT 88
TABLEAU 3-3: PRINCIPAUX PARAMÈTRES DE SORTIE DE LA ROUTINE USERMAT 88
TABLEAU 3-4: LISTE DES LOIS DE COMPORTEMENT DISPONIBLE DANS L'OUTIL PRÉDICTIF 90
TABLEAU 3-5: OPTIONS DISPONIBLES POUR LES LOIS DE COMPORTEMENT 91
TABLEAU 5-1: HISTORIQUE DU BANC D'ESSAI BERTA
TABLEAU 5-2: DÉFINITION DES PARAMÈTRES DES MODÈLES ANALYTIQUES 129
TABLEAU 5-3: RÉSULTATS EXPÉRIMENTAUX À T=900S POUR L'ESSAI AVEC UNE POUTRE DÉCENTRÉE DE 8 PO VERS LE SUD 132
TABLEAU 5-4: COMPARAISON DES RÉSULTATS À T=900S POUR L'ESSAI AVEC UNE POUTRE DÉCENTRÉE DE 8 PO VERS LE SUD 137
TABLEAU 5-5: DÉPLACEMENTS CALCULÉS À PARTIR DU MODÈLE POUR L'ESSAI AVEC UNE POUTRE DÉCENTRÉ DE 8 PO VERS LE SUD
TABLEAU 5-6: ÉTAT DE LA POUTRE CALCULÉ À PARTIR DU MODÈLE POUR L'ESSAI AVEC UNE POUTRE DÉCENTRÉ DE 8 PO VERS LE SUD
TABLEAU 5-7: RÉSULTATS EXPÉRIMENTAUX À T=297 MIN POUR L'ESSAI THERMOMÉCANIQUE

xvii

TABLEAU 5-8: ÉTAT DE LA POUTRE CALCULÉ À PARTIR DES DONNÉES DE DÉFORMATIONS POUR L'ESSAI THERMOMÉCANIQUE	151
TABLEAU 5-9: CALCUL DE L'ÉTAT DE LA POUTRE POUR UN CAS COMPLÈTEMENT ENCASTRÉ	151
TABLEAU 5-10: COMPARAISON DES RÉSULTATS À T=297 MIN POUR L'ESSAI THERMOMÉCANIQUE	157
TABLEAU 5-11: RÉSULTATS DES TESTS DE FROTTEMENT À TEMPÉRATURE AMBIANTE	167
TABLEAU 5-12: RÉSULTATS EXPÉRIMENTAUX À T=800 MIN POUR L'ESSAI THERMOMÉCANIQUE À UNE CELLULE DE CHARGE	170
TABLEAU 5-13: VALEURS UTILISÉES POUR RÉSOUDRE L'ÉQUATION 5.28	176

LISTE DES SYMBOLES

Tenseurs d'ordre 0 (scalaires)

Symbole	Définition	Unités
A _x	Affinité chimique	[1/s]
$a_{c}, b_{c}, c_{c}, d_{c}, e_{c}, g_{c}, h_{c}, i_{c}, j_{c}, k_{c}$	Paramètres de l'équation de la déformation d'origine chimique	
a_e, c_e	Paramètres du rapport d'excentricité	-
a_f , b_f , $lpha_f$ et eta_f	Paramètres de la surface de charge -	
a_q , b_q , $lpha_q$ et eta_q	Paramètres du potentiel d'écoulement plastique -	
С	Paramètre de cohésion	-
d_h	Ductilité	[m/m]
E _a	Énergie d'activation	[J/mol]
e _r	Rapport d'excentricité	-
F	Surface de charge	-
f _c	Résistance en compression uniaxiale (valeur absolue)	[<i>Pa</i>]
$f_{c,\infty}$	Résistance en compression uniaxiale maximale	[<i>Pa</i>]
f_t	Résistance en traction uniaxiale	[<i>Pa</i>]
f _{tt}	Résistance en traction triaxiale	[<i>Pa</i>]
I ₁ , I ₂ , I ₃	Invariants du tenseur de contraintes	[<i>Pa</i>]
J ₁ , J ₂	Invariants du tenseur déviateur de contraintes	[<i>Pa</i>]
k	Paramètre de résistance normalisé	-
k ₀	Paramètre de résistance normalisé initial	-

l_c	Longueur caractéristique des agrégats	[m]
m _f	Rapport de résistance tension-compression	[Pa/Pa]
n	Exposant de la fonction d'écrouissage	-
N _f	Nombre de fissures formées lors de l'adoucissement	
N _{uc}	Nombre maximal de fissures en compression formées lors de l'adoucissement	-
Q	Potentiel d'écoulement plastique	-
r	Coordonnée polaire (fonction de Willam & Warnke)	-
R	Constante universelle des gaz parfaits	$[J/mol \cdot K]$
t	Temps	[secondes]
Т	Température	[°C]
W	Ouverture de fissure	
x	Indice de cuisson	-
<i>x</i> ₀	Indice de cuisson initial	-
x _{cr}	Indice de cuisson critique de la fonction de déformation d'origine chimique	-
α	Coefficient d'expansion thermique	$[K^{-1}]$
δ_s	constante de la rapidité de la décroissance de la fonction d'adoucissement	-
δW	Travail virtuel	-
ε	Déformation	[m/m]
ε	Déformation équivalente	[m/m]
ϵ_{f}	Déformation plastique équivalente en adoucissement	[m/m]
ϵ_p	Déformation plastique équivalente en écrouissage	[m/m]

φ	Résidu de l'indice de cuisson	-
σ	Contrainte	[<i>Pa</i>]
θ	Angle de Lode (Coordonnées de Haigh-Westergaard)	[rad]
λ	Multiplicateur plastique	-
ξ	Pression hydrostatique (Coordonnées de Haigh-Westergaard)	[<i>Pa</i>]
ρ	Contrainte déviatrice (Coordonnées de Haigh-Westergaard)	[<i>Pa</i>]
τ	Contrainte de cisaillement	[<i>Pa</i>]

Tenseur d'ordre 2

Symbole	Définition	Unités
fs	Tenseur des forces de surfaces	[<i>N</i>]
f_v	Tenseur des forces de volume [N]	
S	Tenseur déviateur des contraintes[Pa]	
δ u	Tenseur de déplacements virtuels	[<i>m</i>]
ε	Tenseur des déformations	[m/m]
έ	Tenseur des vitesses de déformations	$[m/m \cdot 1/s]$
ε_{ch}	Tenseur de déformation d'origine chimique	[m/m]
Ee	Tenseur de déformation d'origine élastique	[m/m]
έ _e	Tenseur des vitesses de déformation d'origine élastique	$[m/m \cdot 1/s]$
ε_m	Tenseur de déformation d'origine mécanique	[m/m]

ε _p	Tenseur de déformation d'origine plastique	[<i>m</i> / <i>m</i>]
έ _p	Tenseur des vitesses de déformation d'origine plastique $[m/m \cdot 1]$	
\mathcal{E}_{th}	Tenseur de déformation d'origine thermique	[m/m]
φ	Tenseur résidu des contraintes	[<i>Pa</i>]
σ	Tenseur des contraintes	[<i>Pa</i>]

Tenseur d'ordre 4

Symbole	Définition Un	
H _e	Tenseur de rigidité élastique	[1/Pa]
\mathbf{H}_{ep}	Tenseur de rigidité élastoplastique	[1/Pa]
Ι	Tenseur identité	-

LISTE DES OPÉRATEURS

Opérateurs

Symbole	Définition	
Δx	Incrément de x	
ż	Taux de variation de x	
x ^y	x évaluée à la valeur y	
<pre> < x ></pre>	Valeurs propres positives du tenseur x	
x	Norme tensorielle de x	
<i>x</i> : <i>y</i>	Produit matriciel contracté ($\mathbf{x}: \mathbf{y} = \mathbf{x}^T imes \mathbf{y}$)	
com X	Comatrice du tenseur X	
det X	Déterminant du tenseur X	
div X	Divergent du tenseur X	
tr X	Trace du tenseur X	



CHAPITRE 1 PRÉSENTATION DU PROJET DE RECHERCHE

1.1 GÉNÉRALITÉS SUR L'ALUMINIUM

L'aluminium est un élément métallique alliant profusion et qualité. Il est le troisième élément le plus abondant sur terre, après l'oxygène et la silice, avec 8% de la masse totale de la terre. Il n'est jamais retrouvé sous sa forme pure du fait de sa forte affinité chimique avec les autres éléments. Conséquemment, il est retrouvé sous forme d'environ 270 composés différents. Dans sa forme pure, l'aluminium possède de grandes qualités. Sa masse volumique faible ainsi que sa résistance à la corrosion en font un métal massivement utilisé dans des domaines comme l'aéronautique, le transport automobile ou encore dans la construction de bâtiments où ses caractéristiques l'avantagent par rapport à d'autres métaux. D'ailleurs, plus de 40 millions de tonnes d'aluminium en première fusion sont produites annuellement partout dans le monde (figure 1-1). Les trois plus grands pays producteurs sont, par ordre d'importance, la Chine (18 000 millions de tonnes), la Russie (4 000 millions de tonnes) et le Canada (2 970 millions de tonnes) [1]. Au Canada, la grande majorité de cette production se situe au Québec par l'entremise des usines d'Alcoa, d'Aluminerie Alouette Inc. et de Rio Tinto Alcan.



Figure 1-1: Production mondiale de l'aluminium de première fusion en 2005 [2]

Afin de pouvoir utiliser l'aluminium, il doit être extrait à partir de minerais, principalement la bauxite. Celle-ci est composée à plus de 50% d'oxyde d'aluminium (Al_2O_3), ce qui en fait un minerai de choix pour ce type d'extraction. Via le procédé Bayer, l'oxyde d'aluminium, également appelé alumine, est extraite du minerai de bauxite. Ce composé chimique est par la suite dissocié par électrolyse à haute température afin d'en extraire l'aluminium. En 1886, Paul Louis Toussaint Héroult et Charles Martin Hall ont développé indépendamment et simultanément cette méthode d'extraction de l'aluminium par électrolyse. Cette méthode porte aujourd'hui le nom de procédé Hall-Héroult. La quasi-totalité des producteurs d'aluminium dans le monde, dont Rio Tinto Alcan, utilise toujours ce procédé.

Dans le but d'assurer l'extraction de l'aluminium, l'alumine doit être dissoute dans un bain de cryolite fondu à haute température et soumis à un courant électrique de forte intensité. Dans le but de maintenir le procédé à la température nécessaire et de contenir le métal en fusion, la production est réalisée dans une enceinte appelée cuve d'électrolyse (figure 1-2). La cuve est composée d'un caisson en acier dans lequel sont disposés divers matériaux permettant de maintenir un équilibre thermomécanique favorable au procédé. L'un de ces matériaux, appelé



pâte monolithique est essentiellement utilisé dans le but d'assurer le scellement du plan cathodique et ainsi, d'empêcher les infiltrations de métal liquide à l'extérieur de la zone d'électrolyse durant la production d'aluminium. Il est considéré, par les producteurs d'aluminium, comme étant un matériau critique ayant une influence directe sur le bon fonctionnement ainsi que la durée de vie des cuves d'électrolyse.



Figure 1-2: Schéma d'une cuve de Hall-Héroult à anode précuite [3]

1.2 PROBLÉMATIQUE

L'industrie de l'aluminium fait aujourd'hui l'objet d'une compétition internationale féroce qui oblige tous les producteurs d'aluminium de première fusion à assurer le maintien d'un processus d'amélioration continue. La consommation des matériaux servant à la réduction de l'alumine ainsi que la perte de rendement énergétique des cellules d'électrolyse sont à l'origine de coûts comptant parmi les plus importants au niveau de la production de métal primaire. De plus, le nouveau système de plafonnement et d'échange de droits d'émission de gaz à effet de serre instauré par le gouvernement québécois [4] oblige les usines de production à réduire leurs émissions et leurs résidus. Dans ce contexte, l'industrie canadienne de l'aluminium, principalement située au Québec, ne peut se permettre aucun relâchement.

Dans l'optique d'améliorer le processus de production d'aluminium, l'augmentation de la durée de vie des cuves d'électrolyses joue un rôle clé. À lui seul, le remplacement d'une seule cuve demande des investissements de l'ordre de 80 000 \$ à 500 000 \$ selon la technologie utilisée. Une augmentation de leur durée de vie permet non seulement d'amortir cet investissement sur une période plus grande, mais également, de réduire les rejets à l'environnement conséquent de l'importante quantité de matériaux de cuve à traiter en fin de vie. On notera que chaque tonne d'aluminium produit environ 25 kg de brasques usées. Le Québec, à lui seul, produit actuellement près de 2.8 millions de tonnes d'aluminium, ce qui correspond à environ 70 000 tonnes de brasques à traiter.

La figure 1-3 montre une salle de cuve utilisant la technologie P-155, technologie encore utilisée notamment dans les usines Grande-Baie et Laterrière de la compagnie Rio Tinto Alcan. Ces cuves sont généralement constituées d'un agencement précis de plusieurs couches de matériaux isolants et réfractaires, tel que présenté à la figure 1-4. Ces matériaux se divisent en deux familles: les matériaux carbonés et les matériaux non carbonés. Les matériaux non carbonés (briques réfractaires, panneaux isolants, béton) sont utilisés afin de créer la couche d'isolation de la cuve d'électrolyse. Ces matériaux se retrouvent essentiellement sous le panneau cathodique ainsi que sur les murs de côté et de bout. Quant aux matériaux carbonés, ils comprennent les cathodes, une partie des blocs de côté et de bout ainsi que la pâte monolithique. Cette pâte assure le scellement des joints entre les cathodes ainsi que celui entre les cathodes et le mur de côté. De plus, elle fournit une couche structurelle capable de reprendre la déformation des différents matériaux composant la cuve durant le processus de démarrage [**5**].



Figure 1-3: Salle de cuve utilisant la technologie P-155 [6]



Figure 1-4: Vue en coupe d'une cuve d'électrolyse et de ses composantes [7]

Afin d'éviter d'importants chocs thermiques lors de la versée du bain, la cuve d'électrolyse doit préalablement être chauffée. Dans l'industrie, la méthode de préchauffage la plus largement utilisée est la méthode dite «résistive». Lors de ce processus, un lit de carbone est placé sur les blocs cathodiques et les anodes y sont déposées. Par la suite, la totalité ou une partie du courant de la ligne est forcée dans la cuve [8]. L'effet Joule génère de la chaleur dans les matériaux conducteurs et devient ainsi le principal moteur du préchauffage. Ce processus permet, entre

autres, d'éviter les fissures dans les blocs cathodiques, les chocs thermiques lors du versement du bain et la création d'interstices entre la pâte monolithique et la cathode **[3]**. En minimisant les facteurs responsables des infiltrations de bain et de métal, qui peuvent causer la mort technique¹ de la cuve, le préchauffage permet d'accroître sa durée de vie. Il est donc primordial d'effectuer un préchauffage adéquat, qui permettra au plan cathodique d'atteindre une température qui diminuera le gradient thermique lors de la versée du bain. L'assurance d'un scellement adéquat du plan cathodique, essentielle au bon fonctionnement de la cuve, passe donc nécessairement par une bonne connaissance du comportement de la pâte monolithique, matériau étant utilisé à cette fin.

La pâte monolithique est un matériau à base de carbone dont les agrégats sont liés par une huile goudronnée. C'est un matériau poreux ayant un comportement thermomécanique particulier. Étant thermoreactif, le processus de préchauffage influence directement son comportement. En effet, tout au long de cette étape, plusieurs changements au niveau de la microstructure de la pâte se produisent, et ce, de façon irréversible. Ces changements d'origine chimique ont une grande influence sur la réponse mécanique du matériau au niveau macroscopique. De plus, la pâte subit initialement une expansion d'origine thermochimique qui est suivie d'une contraction (figure 1-5). Toutes ces déformations de la pâte ne doivent cependant pas créer d'ouverture au niveau du plan cathodique. C'est pourquoi la compréhension de son comportement est essentielle à l'amélioration de la durée de vie des cuves d'électrolyse.

¹ i.e. : défaillance technique empêchant le fonctionnement normal de la cuve d'électrolyse et demandant son remplacement immédiat.



Figure 1-5: Courbe de dilatométrie sur 3 échantillons de pâte monolithique [9]

Dans cette optique, des études expérimentales ont été menées sur certains types de pâte, et ce, afin de caractériser son comportement et de proposer des lois de comportement utilisables dans les outils numériques. D'un point de vue numérique, il importe également de développer non seulement des modèles prédictifs du comportement de la pâte monolithique à l'échelle du laboratoire, mais également lorsque ce matériau est en service dans une cuve d'électrolyse. Quelques modèles ont été développés au cours des dernières années, mais ceux-ci demeurent indisponibles dans les logiciels de modélisation couramment utilisés en industrie.

Comme on peut le constater, la pâte monolithique est un matériau fort complexe et encore aujourd'hui mal compris. Conséquent du fait qu'il joue un rôle critique dans le comportement de la cuve d'électrolyse et donc, de sa durée de vie, il est donc prioritaire d'assurer le développement d'outils et de méthodologies qui permettront d'accroître notre niveau de connaissance de ce matériau.

1.3 OBJECTIFS

L'objectif principal de ce projet est donc de proposer un outil numérique prédictif permettant la bonne représentation du comportement thermomécanique de la pâte monolithique dans une plage d'efforts et de températures correspondant à son utilisation en service. Plus spécifiquement, ce projet devra permettre le développement ainsi que l'implémentation d'une loi de comportement représentative dans le logiciel ANSYS[®].

À plus long terme, les outils développés dans le cadre de ce projet devront permettre la réalisation d'études numériques plus fines du comportement des cuves d'électrolyse en phase de démarrage et donc, de l'optimisation de cette étape déterminant leur durée de vie.

1.4 ÉTAT DES CONNAISSANCES

1.4.1 Composition de la pâte monolithique

La pâte monolithique est un matériau poreux ayant une forte ressemblance, au niveau de sa texture lorsqu'elle est crue, avec l'asphalte utilisé sur nos routes. On parle d'un matériau poreux à l'échelle macroscopique composé de 85% d'agrégats d'anthracite calcinés et de 15% d'un liant à base de brai de goudron et d'huile carbochimique (figure 1-6). Plusieurs fabricants y ajoutent aussi quelques stabilisants [10]. On distingue 2 types de pâte : la pâte chaude et la pâte froide [8]. Une pâte froide peut être appliquée à température ambiante alors que la pâte chaude doit préalablement être chauffée et appliquée dans une cuve ayant une température plus élevée. Ceci s'explique par une température de ramollissement du brai plus élevée qui rend la manipulation du matériau difficile à température ambiante. Ainsi, pour une pâte chaude, la température de ramollissement se situe entre 140 à 180°C alors que pour une pâte froide, on parle de température de l'ordre de 10 à 40°C. Pour abaisser la température de ramollissement d'une pâte, un diluant est généralement ajouté au mélange.



Figure 1-6: Croquis de quelques agrégats d'anthracite enrobés de liant [11]

Les fragments d'anthracite représentent la partie solide de la pâte. C'est cet élément qui lui confère sa résistance mécanique et thermique. Le matériau étant thermoreactif, les propriétés des agrégats d'anthracite évoluent en fonction de la température d'utilisation et de l'état de cuisson du matériau. La modification du comportement de l'anthracite est cependant moins importante que celle engendrée par la cuisson de la partie visqueuse de la pâte à brasquer, le liant. Son rôle est de fixer les agrégats ensemble en mouillant et lubrifiant suffisamment ces derniers tout en remplissant les pores. Sa texture étant visqueuse, le liant permet donc à la pâte de garder une certaine consistance et un certain maintien de sa structure. D'ailleurs, l'existence de fissures non mouillées par le liant diminue la résistance mécanique de la pâte. Inversement, une quantité trop importante de liant affectera la résistance mécanique de celle-ci et sa capacité de reprendre les charges qu'elle subira lors de son utilisation. C'est pourquoi la quantité de liant composant la pâte est une donnée très importante, car elle influence le maintien structurel de la pâte monolithique. De plus, c'est cet élément de la pâte à brasquer qui se contracte au cours de la cuisson et qui modifie en grande partie le comportement thermomécanique de la pâte [7].

Dans les cuves Hall-Héroult, la pâte monolithique est compactée dans les joints entre les blocs cathodiques ainsi qu'autour de ceux-ci (en gris sur la figure 1-7). Le rôle principal de la pâte monolithique, autant dans les joints interstitiels que dans le joint périphérique, est d'assurer le scellement du plan cathodique et de contenir le métal en fusion sans que celui-ci ne pénètre plus profondément entre les cathodes. De plus, cette pâte fournit une couche de matériau capable de reprendre la déformation des différents matériaux de la cuve durant la phase de préchauffage de la cuve [5]. Le niveau de compaction utilisé pour compacter la pâte dans les joints a cependant une grande influence sur ses propriétés. Le niveau de compaction modifie la densité de la pâte et affecte ses propriétés thermomécaniques. Si celui-ci est trop élevé, les contraintes produites dans les particules solides d'anthracite peuvent dépasser la résistance de celles-ci et produire une rupture des particules solides. De nouvelles surfaces peuvent ainsi être créées dans la pâte sans qu'il y ait mouillage par le liant, ce qui réduit significativement la résistance de la pâte compactée [12]. Finalement, l'état de pression hydrostatique a une influence sur la résistance mécanique de la pâte monolithique en modifiant sa structure de façon permanente. À ce niveau, le comportement de la pâte monolithique peut être comparé à celui d'un béton jeune [7]. Finalement, il devient évident que la pâte monolithique est un matériau complexe jouant plusieurs rôles dans la cuve d'électrolyse et dont l'installation doit être menée avec soins afin de prolonger la vie utile de la cuve.



Figure 1-7: Schéma d'une cuve d'électrolyse de Hall-Héroult [7]

1.4.2 Caractérisation du comportement élastoplastique

Le comportement mécanique de la pâte monolithique en situation d'utilisation industrielle a longtemps été mal compris. Sørlie & Øye [5] furent les premier, vers la fin des années 80, à se pencher sur le sujet en effectuant une analyse sur l'ensemble des matériaux composant les cuves d'électrolyses afin de déterminer le rôle de chacun d'eux sur la durée de vie de celles-ci. Suite à ces études, les principales causes de défaillances des cuves ont été identifiées. Parmi celles-ci, deux points (3 et 4) visent la pâte en l'identifiant comme un facteur important pour la durée de vie de vie de celles durée de vie de celles-ci.

- 1. Une mauvaise balance des charges thermiques de la cuve;
- 2. Un mauvais design et installation des barres collectrices;
- 3. Une méthode de compaction de la pâte déficiente;
- Des déformations excessives de la pâte entre 500°C et 1000°C qui se contracte et crée ainsi des ouvertures au niveau du plan cathodique;
- 5. Une faible résistance au sodium des matériaux carbonés;
- 6. Une oxydation prononcée des blocs de côtés;
- 7. Des réactions entre les matériaux réfractaires et les fluorites;
- 8. Une résistance mécanique diminuée des caissons suite à leur utilisation répétée.

Ces problèmes récurrents dans les cuves d'électrolyse créent des fissures et des ouvertures du plan cathodique permettant ainsi au bain électrolytique de s'infiltrer dans la cuve. Éventuellement, l'étanchéité défaillante du plan cathodique entraînera inévitablement la mort technique prématurée de la cuve d'électrolyse.

Au niveau de la pâte monolithique, leurs études expérimentales ont ainsi permis une première approche des phénomènes d'expansion et de contraction de la pâte au cours de sa cuisson. Avec de telles conclusions, le rôle critique de la pâte monolithique au niveau de la durée de vie des cuves de Hall-Héroult a été constaté. Ces recherches ont initié un mouvement de la communauté scientifique qui s'est penchée plus intensivement sur le problème du comportement de la pâte monolithique. Leurs études n'ayant qu'effleuré le comportement de ce matériau, les mécanismes du comportement de la pâte ont dû être analysés un à un.

Des recherches plus poussées sur le sujet furent menées quelques années plus tard par Sørlie et Øye en collaboration avec Faaness et Gran [12]. Celles-ci avaient pour objectif de comprendre le comportement de la pâte durant le préchauffage de la cuve en concentrant les efforts sur le comportement de contraction de la pâte. Étant un matériau granulaire à basse température, elle cuit progressivement lors du préchauffage de la cuve jusqu'à atteindre un état solide comparable à un bloc de carbone graphitique à même température. En évoluant de la sorte, son comportement évolue dans le temps selon son degré de cuisson. Il est donc important de connaître le degré de cuisson de la pâte afin de caractériser son comportement. Les auteurs mentionnent aussi que le niveau de résistance de la pâte est fonction de son niveau de confinement et de la densité finale de compaction de la pâte. Si la pâte est trop compactée, des microfissures apparaissent et éventuellement, de nouvelles surfaces sont créées à l'intérieur de celles-ci. Ces surfaces ne sont pas baignées de liant et créent des chemins de chargement préférentiel pour la création de fissures lors d'efforts. Le niveau optimal de compaction est cependant une donnée propre à chaque type de pâte. Elle doit par contre être cuite à des températures avoisinant les 900°C afin de durcir et que ses propriétés mécaniques deviennent adéquates. La figure 1-8 montre d'ailleurs que pour un certain type de pâte, les agrégats sont détruits à partir d'un certain niveau de compaction, amenant une réduction de leur résistance en compression.





Figure 1-8: Résistance en compression (a) et en tension (b) d'un échantillon en fonction de leur densité initiale. La partie ombragée montre la zone où les agrégats sont fragmentés. [12]

Ces recherches ont aussi permis de mieux comprendre les phénomènes liés à la dégradation de la pâte lors de son utilisation. Les porosités, naturellement présentes dans la pâte, permettent d'absorber des éléments du bain de cryolite. Le bain remplit toutes les porosités de surface après quelques mois d'opération créant ainsi une barrière chimique qui ralentit les réactions pouvant altérer la cohésion de la pâte en surface. La compaction de la pâte ne doit donc pas être trop grande afin que cette barrière chimique puisse se développer et protéger adéquatement le plan cathodique. Cependant, ces études ne montrent aucune expérimentation sur la migration du sodium dans la pâte, ce qui aurait pu compléter la compréhension des phénomènes chimiques lors de l'opération normale d'une cuve. Finalement, ces recherches ont abouti en une série de recommandations concernant l'utilisation de la pâte afin d'améliorer la durée de vie des cuves d'électrolyse ainsi que la qualité des propriétés mécaniques du matériau :

- ne pas surcompacter la pâte monolithique lors de son installation. Une surcompaction de la pâte aura tendance à détruire les agrégats et ainsi diminuer la résistance mécanique de la pâte;
- des mesures de résistance mécanique ou de résistance électrique sur des échantillons pourraient être des indicateurs de la qualité de compaction;

- la contraction de la pâte devrait être mesurée tout au long de la cuisson afin de vérifier l'intégrité mécanique du plan cathodique;
- le joint périphérique devrait être fait plus étroit afin de réduire les effets de la contraction de la pâte durant la cuisson.

Ces recommandations donnent une idée générale sur la qualité de la compaction, mais restent vagues et imprécises. En outre, plusieurs facteurs autres que la compaction de la pâte influencent la résistance mécanique ou électrique ce qui ajoute une incertitude à ce genre de mesure. De plus, la construction de cuve avec un joint périphérique plus étroit réduira effectivement les effets de contraction de la pâte durant la cuisson, mais engendrera inévitablement une diminution des contraintes que celui-ci pourra reprendre suite à l'expansion du plan cathodique. Finalement, ces études ne font qu'effleurer les mécanismes les plus importants du comportement de la pâte à brasquer. Les résultats obtenus sont concentrés sur des essais de thermogravimétrie, de dilatométrie et des observations sur des cuves. Ainsi, uniquement une faible portion des divers comportements est étudiée, laissant beaucoup d'inconnus.

1.4.3 Comportement spécifique en cours de cuisson

Comme mentionné précédemment, la pâte est cuite au cours de la mise en marche de la cuve pour atteindre une température finale d'environ 960°C, correspondant à la température d'opération normale d'une cuve d'électrolyse. Lors du préchauffage de celle-ci, un lit de coke ou de graphite est placé sur les blocs cathodiques et les anodes y sont déposées. Par la suite, la totalité ou une partie du courant de la série est forcée dans la cuve [**3**] provoquant ainsi un important voltage. Ce courant induit une génération de chaleur par effet Joule au niveau du lit résistif assurant ainsi le préchauffage de la cuve jusqu'à des températures de l'ordre de 600°C. Par la suite, le versement du bain électrolytique assure la montée finale jusqu'à 960°C ainsi que le début du procédé d'électrolyse. Durant cette phase, la pâte subit une cuisson qui modifiera sa structure, et ce, de façon irréversible. Ces changements, d'origine chimique, ont une grande influence sur la réponse thermomécanique du matériau au niveau macroscopique. La perte de masse de la pâte au cours d'une augmentation de température monotone (figure 1-9) est une manifestation physique de ce phénomène de cuisson, causée directement par la modification de la structure du matériau et par le dégagement d'hydrocarbures légers et d'hydrogène.



Additionnellement, la pâte subira des déformations thermochimiques qui apparaîtront d'abord sous la forme d'une forte expansion en début de cuisson, suivie d'une contraction. L'expansion thermochimique initiale est généralement causée par la dilatation thermique du matériau, la relaxation de contraintes résiduelles ainsi que le dégagement de volatiles. Cette expansion est rapide et se produit généralement en début de cuisson, lorsque la pâte est la plus malléable. Par la suite, une contraction, principalement d'origine chimique, est causée par une réorganisation de la microstructure attribuable à la cokéfaction du liant (Richard, 2004). De plus, la résistance en compression du matériau subit une augmentation d'un ordre de grandeur lors de la cuisson jusqu'à 1000°C [**10**]. Les températures auxquelles se manifestent ces phénomènes varient

en fonction de la pâte utilisée. Cependant, cette transition est généralement observée à des températures situées entre 300°C et 500°C, suivant celle du brai de houille, liant utilisé dans le matériau. Lors de recherches sur le brai utilisé dans la technologie Söderberg, le comportement du liant lors de la cuisson de la pâte à brasquer a été résumé comme suit [**13**] :

1. Ramollissement du brai

Ce phénomène apparaît dans un intervalle de température allant de la température ambiante jusqu'à 100°C environ. La viscosité du brai diminue au cours de cette étape.

2. Distillation de l'huile

Entre 150 et 250°C, une partie de l'huile se volatilise, augmentant de ce fait la viscosité du liant. Comme le liant est responsable de la cohésion entre les agrégats, une huile plus lourde (possédant une valeur de carbonisation plus élevée) améliore cette cohésion.

3. Distillation du brai

Entre 200 et 500°C, les goudrons condensables du brai se volatilisent, modifiant la viscosité du liant.

4. Création d'un semi-coke

Entre 400 et 500°C, la composition du liant évolue ensuite par polymérisation et polycondensation. Le matériau tend à se solidifier pour former un semi-coke solide.

5. Carbonisation du semi-coke

À plus de 550°C, l'élimination de produits volatils plus légers comme le méthane et l'hydrogène continue et entraîne une modification de la microstructure du matériau.

Des études expérimentales ont démontré que la perte de masse de la phase liante durant la cuisson de la pâte est équivalente à une valeur variant de 30% à 60% de la masse originale du liant [**12**]. Le liant a donc un rôle important au niveau des propriétés et de la dilatation thermique du matériau. Conséquemment, trop de liant peut mener à une contraction extrême ainsi qu'à la création de fissures dues au dégagement des matières volatiles. À l'inverse, les propriétés mécaniques peuvent être mauvaises en raison d'un manque de liant causant la création de pores aux interfaces des agrégats [**7**].

Finalement, la présence de bain électrolytique dans la cuve fait apparaître une barrière chimique à la surface de la pâte qui se crée après quelques mois d'opération normale d'une cuve, et qui améliore le scellement du plan cathodique. Cette barrière, créée par des réactions lentes entre les composantes du bain et les matériaux réfractaires de la cuve, devrait arrêter ou du moins ralentir les dégradations du plan cathodique et de ses composantes [**12**]. C'est donc que ces réactions chimiques ont aussi des conséquences bénéfiques pour la cuve d'électrolyse.

1.4.4 Survol des modèles de comportement existants

Peu de lois ont, à ce jour, permis de représenter adéquatement le comportement élastoplastique de la pâte monolithique sous divers chargements. Au niveau des logiciels de simulation commerciaux, de nombreuses lois sont aujourd'hui offertes. le tableau 1-1 présente celles disponibles dans le logiciel ANSYS[®].

CATÉGORIE	NOM DU MODÈLE DE MATÉRIAU
	Isotropic
Floatio	Orthotropic
Elastic	Anisotropic
	Elastic Fluid
	Blatz-Ko Rubber
Nonlinear Elastic	Mooney-Rivlin Rubber
	Viscoelastic
	Bilinear Isotropique
	Temperature Dependent Bilinear Isotropic
	Transversely Anisotropic Elastic Plastic
	Transversely Anisotropic FLD
	Bilinear Kinematic
	Plastic Kinematic
	3-Parameter Barlat
Nonlinear Inelastic	Barlat Anisotropic Plasticity
Nonmear melastic	Rate Sensitive Power Law Plasticity
	Strain Rate Dependent Plasticity
	Piecewise Linear Plasticity (rate dependent)
	Modified Piecewise Linear Plasticity (rate dependent)
	Composite Damage
	Concrete Damage
	Power Law Plasticity
	Elastic Viscoplastic Thermal Model
Prossuro dopondont	Elastic-Plastic Hydrodynamic
Fressure dependent	Geological Cap

Tableau 1-1: Liste des modèles de matériaux disponibles dans le logiciel ANSYS® [14]

Parmi ces modèles, seul le modèle «Geological Cap», notamment utilisé pour représenter le comportement des bétons, pourrait être considéré pour la pâte, étant donné sa formulation fonction de la pression hydrostatique. Cependant, pour l'ensemble de ces modèles de matériaux, un aspect important du comportement de la pâte reste absent : la cuisson. En effet, aucun des modèles disponibles ne permet de calculer un état de cuisson du matériau pour ensuite évaluer les propriétés de celui-ci en fonction du niveau de cuisson atteint. Étant donné qu'il s'agit d'un concept clé du comportement de la pâte, les modèles disponibles à ce jour dans ANSYS® ne pourront être utilisés pour représenter le comportement thermo-chimio-mécanique (TCM) du matériau.

Dans la littérature, il n'existe qu'un seul modèle de matériau élastoplastique pour la pâte. Le modèle de D'Amours [**14**] utilise des enveloppes de rupture pour le béton adaptées pour la pâte. Ces enveloppes de rupture sont fonction de la pression hydrostatique et du niveau de cuisson du matériau, ce dernier étant calculé à partir d'une cinétique de type Arrhenius. Ce modèle permet de prendre en compte l'ensemble des caractéristiques du comportement de la pâte. Cependant, la complexité de sa formulation peut rendre son implémentation complexe. Néanmoins, celui-ci a déjà été implémenté dans l'outil FESh++, ce qui donne une base de comparaison pour valider le processus d'implémentation tant au niveau du code que des résultats.

1.5 Méthodologie

L'atteinte des objectifs de ce projet passe par une approche en deux volets. Tout d'abord, l'auteur propose d'effectuer la sélection puis l'implémentation d'une loi de comportement thermomécanique pour la pâte monolithique. Par la suite, une validation expérimentale de cette loi de comportement sera effectuée sur un banc d'essai grande échelle afin de s'assurer de la représentativité de cette loi dans un contexte industriel.
1.5.1 Sélection et implémentation de la loi de comportement

Grâce à la revue de la littérature, il sera possible d'identifier des lois constitutives représentatives du comportement de la pâte. Par la suite, le modèle sélectionné sera implémenté au sein du logiciel ANSYS[®] via une interface existante pour l'ajout de loi de comportement nommée UserMat. Finalement, la loi de comportement implantée sera validée sur des géométries simples afin d'en assurer la conformité.

Parallèlement, le noyau de calcul FESh++ sera utilisé afin de permettre une comparaison numérique avec les lois de comportement actuellement disponibles dans cet outil et qui sont, à ce jour, les plus représentatives pour l'ensemble des matériaux composant la cuve d'électrolyse.

1.5.2 Validation du banc d'essai pour validation expérimentale

Cette dernière étape vise à préparer le banc d'essai BERTA en vue d'essais de validation de la loi de comportement à plus grande échelle. Une série de tests sera effectuée avec une poutre de profilé simple fabriquée avec un matériau dont les propriétés sont connues. Ces essais nous permettront de valider la méthode d'acquisition de données et de définir une méthode expérimentale pour l'utilisation du banc d'essai BERTA. Une analyse théorique du montage sera réalisée afin de raffiner la méthode d'acquisition en identifiant les points faibles du banc d'essai. À plus long terme, ce banc d'essai sera utilisé par le CRDA afin de valider la modélisation du comportement de la pâte monolithique dans un contexte industriel et donc, à plus grande échelle. Des tests mécaniques et thermomécaniques pourront ainsi être effectués en reproduisant les conditions d'utilisation du matériau dans l'industrie.

1.6 ORGANISATION DU DOCUMENT

Le mémoire présenté se compose de 6 chapitres. Le chapitre 2 expose l'ensemble des équations du modèle constitutif choisi afin de représenter le comportement de la pâte monolithique ainsi que les raisons de son utilisation. De plus, une méthode d'identification des paramètres de la loi sera présentée. Le chapitre 3 introduit les équations et les algorithmes servant à évaluer la contrainte à un point matériel en accord avec la théorie des éléments finis. Les différents aspects inhérents à l'implémentation de la loi de comportement dans le logiciel ANSYS[®] sont aussi présentés. Le chapitre 4 présente les différentes étapes de validation du modèle à l'aide d'exemples simples, tant au niveau élastoplastique que thermoréactif. Le chapitre 5 est consacré à la validation expérimentale du banc d'essai BERTA qui pourra être utilisé par le promoteur du projet afin de valider la loi de comportement de façon expérimentale. Finalement, le chapitre 6 présente les conclusions de ce travail ainsi que les recommandations quant à la suite de celui-ci.

CHAPITRE 2 MODÈLE CONSTITUTIF ÉLASTOPLASTIQUE POUR LA PÂTE MONOLITHIQUE

2.1 Généralités

Ce chapitre présente l'ensemble des détails relatifs à la loi de comportement élastoplastique de la pâte, telle que développée pour l'implémentation dans le logiciel ANSYS[®]. Tout d'abord, le choix du modèle de comportement est présenté et justifié puis, les formulations de la surface de charge ainsi que du potentiel d'écoulement plastique sont définies. Le mécanisme d'écrouissage isotrope est ensuite introduit, suivi par celui d'adoucissement isotrope. Par la suite, la prise en compte de l'évolution chimique du matériau est discutée selon une approche visant à permettre l'évolution des propriétés du matériau au cours de la cuisson. Finalement, la méthode d'identification des paramètres de la loi est présentée. En addition, l'annexe A présente les éléments théoriques relatifs à la plasticité. Il est suggéré de s'y référer au besoin.

Rapport-gratuit.com Le numero 1 mondial du mémoires

2.2 DÉFINITION DU MODÈLE ÉLASTOPLASTIQUE AVEC ADOUCISSEMENT POUR LA PÂTE MONOLITHIQUE

2.2.1 Justification de la stratégie retenue

La revue bibliographique, telle que présentée à la section 1.4, a permis d'explorer l'état des connaissances sur la pâte monolithique, entre autres du côté de la modélisation de son comportement. La pâte monolithique possède un comportement particulier au niveau élastoplastique qui se doit d'être bien représenté par le modèle de comportement :

• Comportement fonction du niveau de pression hydrostatique

Un peu à la manière d'un béton, la pâte monolithique réagit différemment lorsqu'elle est confinée. Il s'agit d'un comportement habituellement rencontré avec les matériaux de type granulaires, le lien entre les différents agrégats n'étant pas aussi fort en traction qu'en compression.

Résistance en traction différente de celle en compression

Conséquent du comportement variable en fonction du niveau de pression, la pâte possède ainsi des limites en traction et en compression qui sont différentes.

• Existence d'une limite en traction triaxiale

La pâte étant un matériau granulaire, elle ne peut résister indéfiniment lorsqu'elle subit des efforts de traction, même si les trois composantes normales du vecteur de contraintes sont égales et les composantes de cisaillements nulles. Il s'agit d'un comportement fondamentalement différent des matériaux métalliques où pour un effort de traction triaxiale, le matériau n'atteindra jamais la rupture. Ceci s'explique par la fragilité du matériau en traction, causé par sa nature granulaire.

Écoulement plastique non-associé

Il a été démontré que pour les matériaux granulaires, l'écoulement plastique se produit dans une direction différente de la normale à la surface de charge. Ce même phénomène apparaît dans la pâte lors de son écrouissage.

• Écrouissage du matériau lors de la plastification

L'écrouissage d'un matériau apparaît lorsque des déformations plastiques apparaissent dans le matériau. À partir de ce moment, le modèle de comportement doit pouvoir s'ajuster pour prendre en compte l'effet de ces déformations permanentes sur le comportement déformationnel global du matériau. Au niveau de la pâte, l'intensité de ce phénomène varie en fonction du niveau de cuisson, le matériau passant par des phases de ramollissement et de durcissement en fonction de celui-ci. Ainsi, lorsque la pâte devient plus ductile/fluide, l'écrouissage du matériau sera plus aisé et déformera davantage sa structure.

Adoucissement du matériau lors de la fissuration

L'adoucissement d'un matériau apparaît lors celui-ci atteint sa limite ultime et que la fissuration débute. La résistance mécanique du matériau se dégradera alors jusqu'à mener à sa rupture définitive. Afin de modéliser l'ensemble des comportements déformationnel de la pâte, il est donc nécessaire de prendre en compte ce phénomène de fissuration.

Matériau thermoreactif

L'ensemble des propriétés de la pâte évolue au cours de la cuisson. Il est donc impératif que la loi de comportement prenne en compte cet aspect fondamental du comportement de la pâte. À ce jour, un seul modèle de comportement existe pour représenter spécifiquement le comportement de la pâte, celui de D'Amours [7]. La force de ce modèle réside dans sa définition complète prenant en compte l'ensemble des comportements mentionnés ci-haut. Cependant, cette loi de comportement n'a pu être totalement validée expérimentalement de façon satisfaisante, comme mentionné par D'Amours dans sa thèse. Alternativement, il se peut que d'autres lois de comportement puissent approximer le comportement complexe de la pâte de façon satisfaisante. Afin d'effectuer un choix final sur la stratégie à adopter, il est donc nécessaire d'exposer les différentes opportunités en regard de ces constatations :

- 1. Utiliser une loi de comportement déjà existante dans le logiciel ANSYS®;
- 2. Implémenter et utiliser la loi de comportement de la pâte de D'Amours [7];
- 3. Développer et implémenter un nouveau modèle, à partir de modèles de bétons.

L'utilisation du logiciel ANSYS[®] étant une exigence du partenaire de ce projet, il est d'abord nécessaire de vérifier les modèles de comportement existant dans celui-ci. Tel que montré au tableau 1-1, les modèles de comportement dans ANSYS[®] ne permettent pas de prendre en compte le caractère évolutif du matériau en fonction d'une cinétique telle que la cuisson. Étant donné qu'il s'agit d'une particularité très importante du comportement de la pâte monolithique, ce choix est donc écarté. Le deuxième choix, soit celui d'utiliser la loi de comportement proposée par D'Amours [7] demande un effort d'implémentation important, de par la complexité de sa définition. Par contre, une version de cette loi dans le logiciel FESh++ est déjà existante, ce qui représente une opportunité indéniable lors de la phase d'implémentation de la loi dans le logiciel ANSYS[®]. Finalement, le dernier choix, soit le développement d'un nouveau modèle, demande un travail beaucoup plus imposant, qui dépasserait le cadre d'un projet de maîtrise. Cela serait nécessaire si la loi proposée par D'Amours [7] n'avait pas été disponible. Étant donné que celle-ci est fonctionnelle et efficace, elle est donc choisie pour être implémentée.

2.2.2 Introduction du modèle

Le modèle constitutif de la pâte proposé par D'Amours [7] permet de représenter le comportement élastoplastique du matériau tout en prenant compte l'effet de la pression hydrostatique sur sa résistance. Cette loi de comportement élastoplastique se base essentiellement sur la fonction de charge développée par Etse et Willam [15] pour du béton. Celleci a par la suite été modifiée par D'Amours [7] afin de mieux représenter le comportement de la pâte. Des modifications supplémentaires ont par la suite été effectuées par l'auteur du présent travail afin d'en améliorer la versatilité et la représentativité.

Lorsque le critère de charge du matériau est violé, un processus d'écrouissage du matériau est enclenché, modifiant ainsi la surface de charge. À ce moment, une déformation plastique (permanente) apparaît dans le matériau et peut être calculée à l'aide du potentiel d'écoulement plastique. Lorsque le seuil de rupture est atteint, un mécanisme d'adoucissement permet de prendre en compte le processus de dégradation de la résistance mécanique du matériau engendré par l'apparition de fissures. Les hypothèses utilisées par le modèle sont détaillées dans la thèse de D'Amours [7].

2.2.3 Définition de la surface de charge

La surface de charge sert initialement à déterminer l'état de contrainte limite admissible audelà de laquelle des déformations permanentes apparaissent. Lorsque la surface de charge atteint sa forme finale, suite à l'écrouissage et l'adoucissement du matériau, celle-ci représente alors la limite de rupture du matériau. Puisque le comportement du matériau étudié est sensible à la pression hydrostatique, le modèle proposé se doit de pouvoir différencier un état de contrainte en tension d'un état de contrainte en compression, permettant ainsi l'utilisation d'une limite mécanique différente dans ces deux situations. De plus, la surface de charge doit posséder une limite en traction triaxiale permettant de reproduire les caractéristiques du comportement des matériaux granulaires. Pour ce faire, la surface de charge est définie en fonction du système de coordonnées de Haigh Westergaard (ξ, ρ, θ) où ξ représente la pression hydrostatique, ρ la contrainte déviatrice et θ , l'angle de Lode, tels que définis à l'annexe A. La figure 2-1 montre la surface de charge utilisée par le modèle. Au niveau sémantique, le potentiel de charge représente l'ensemble des états de contraintes, sous forme d'espace, pour lesquelles le potentiel F est négatif, alors que la surface de charge représente l'ensemble des états de contraintes, sous forme d'espace, pour lesquelles le potentiel F est négatif, alors que la surface de charge représente l'ensemble des états de contraintes, sous forme de surface, où la valeur du potentiel F est nulle.



Figure 2-1: Surface de charge du modèle élastoplastique dans le système de coordonnées de Haigh-Westergaard La forme générale de cette surface de charge est donc définie comme étant :

$$F(\xi,\rho,\theta) = 0 \tag{2.1}$$

L'équation utilisée pour définir cette surface de charge est tirée de Etse et Willam [15] et possède une forme parabolique fonction des coordonnées de Haigh-Westergaard. Elle est définie par :

$$F(\xi, \rho, r) = a_f \left[\frac{\rho r}{f_c} \right]^{\alpha_f} + \frac{m_f}{f_c} \left[\xi + \frac{\rho r}{b_f} \right] - 1 = 0$$
(2.2)

où r est la coordonnée polaire, f_c , la valeur absolue de la limite en compression uniaxiale, m_f , le rapport de résistance tension-compression et les paramètres a_f , b_f et α_f , des constantes de l'équation à identifier.

Plus spécifiquement, le paramètre m_f est donné par :

$$m_f = \frac{f_c}{f_{tt}} \tag{2.3}$$

Comme la valeur de la limite en traction triaxiale est difficilement identifiable expérimentalement, on peut la supposer égale à celle de la traction uniaxiale f_t , comme le propose le critère de rupture de Rankine. Ceci n'est cependant qu'une approximation grossière de cette limite mécanique du modèle et pourrait être identifié d'une manière plus exacte, si seulement la réalisation d'un test de traction triaxiale était possible sur ce type de matériau. Ainsi, le rapport m_f est approximé par :

$$m_f \cong \frac{f_c}{f_t} \tag{2.4}$$

La coordonnée polaire a été définie par Willam et Warnke [**16**] dans la définition de son critère de plasticité et est réutilisée dans sa forme originale dans le modèle de la pâte. Elle est exprimée selon l'équation :

$$r(\theta, e_r) = \frac{4(1 - e_r^2)\cos^2\theta + (2e_r - 1)^2}{2(1 - e_r^2)\cos\theta + (2e_r - 1)\sqrt{4(1 - e_r^2)\cos^2\theta + 5e_r^2 - 4e_r}}$$
(2.5)

où e_r est le rapport d'excentricité et été défini par Willam et Warnke [**16**] comme étant le rapport entre le méridien de traction sur le méridien de compression. Plus spécifiquement, on peut calculer sa valeur à l'aide de l'équation :

$$e_r = 1 - (1 - a_e) \frac{f_{tt} - c_e}{\xi - c_e}$$
(2.6)

où a_e et c_e sont deux constantes à identifier. Pour un rapport d'excentricité égal à $\frac{1}{2}$, la trace déviatrice de la surface de charge devient presque triangulaire, à la manière du critère de la contrainte maximale en traction de Rankine. Inversement, pour une valeur égale à 1, la trace déviatrice prend la forme d'un cercle approchant celle du critère de von Mises ou de Drucker-Prager. Ces deux cas représentent les limites du rapport d'excentricité.

Ainsi, la coordonnée polaire r permet à la surface de charge de changer de forme dans la région déviatrice en fonction de l'état de contrainte. L'angle de Lode (θ) donnant une information sur la localisation de l'état de contrainte par rapport au méridien de traction et de compression, la coordonnée polaire permet également à la loi de comportement de réagir différemment en traction et en compression.

2.2.4 Définition du potentiel d'écoulement plastique

Dans une définition associée du potentiel d'écoulement plastique, la direction d'écoulement est donnée par le gradient du potentiel de charge. Par exemple, si l'on suit le chemin de déformation d'un essai de traction triaxiale, l'état de contrainte suivra l'axe de pression hydrostatique. Lorsque celui-ci atteindra la limite de la surface de charge, la direction de la déformation d'origine plastique sera donc prédite par le gradient du potentiel de charge à cet état de contrainte. La figure 2-2 montre la direction prédite par ce gradient pour la surface de charge du modèle.



Figure 2-2: Direction de l'écoulement pour un chemin de traction triaxiale

Cependant, la réelle direction de l'écoulement plastique doit continuer de suivre l'axe hydrostatique, ce qui mène à une incompatibilité entre une définition associée du potentiel d'écoulement plastique et le comportement du matériau observé en laboratoire.

Ainsi, afin de permettre un meilleur contrôle de la direction et de la quantité de changement de volume du matériau, une formulation non-associée de la règle d'écoulement a été définie. Le potentiel d'écoulement plastique est alors établi en utilisant la même équation que la surface de charge, mais en utilisant des paramètres différents. Ainsi, les paramètres af, b_f et α_f sont remplacés par de nouveaux paramètres a_q , b_q et α_q qui devront être identifiés de façon à représenter adéquatement la direction d'écoulement. L'équation du potentiel d'écoulement plastique prend donc la forme :

$$Q(\xi, \rho, r) = a_q \left[\frac{\rho r}{f_c}\right]^{\alpha_q} + \frac{m_f}{f_c} \left[\xi + \frac{\rho r}{b_q}\right] - 1 = 0$$
(2.7)

Lors de l'utilisation de la loi de comportement dans le logiciel FESh++, il a été observé que la différence au niveau du changement de volume calculé est négligeable lorsque des sections circulaires (r = 1) sont utilisées. De plus, l'utilisation d'une telle définition simplifie grandement l'équation du potentiel d'écoulement plastique, tout en diminuant le temps nécessaire pour intégrer la loi de comportement, de par la simplification des dérivées du potentiel plastique. L'équation simplifiée est donnée par :

$$Q(\xi,\rho) = a_q \left[\frac{\rho}{f_c}\right]^{\alpha_q} + \frac{m_f}{f_c} \left[\xi + \frac{\rho}{b_q}\right] - 1 = 0$$
(2.8)

La figure 2-3 montre l'allure de la surface d'écoulement plastique ainsi que la direction d'écoulement prédite par le calcul du gradient de la fonction.



Figure 2-3: Comparaison entre la surface de et le potentiel d'écoulement plastique

Dans sa version originale, un algorithme de minimisation du potentiel d'écoulement plastique était présenté dans les travaux de D'Amours [7] et ce, afin de permettre une évaluation du gradient du potentiel à Q = 0. En effet, il était supposé que le calcul du gradient du potentiel d'écoulement plastique devait être effectué obligatoirement à un état de contrainte situé sur sa

surface, à Q = 0. Cet algorithme avait donc pour objectif l'identification d'un état de contrainte fictif respectant la condition Q = 0 et auquel le gradient était calculé.

Une revue exhaustive de la théorie de la plasticité ainsi que la discussion avec certains experts dans le domaine n'ont pas permis de confirmer l'exigence de cette condition, soit l'évaluation obligatoire du gradient de la fonction d'écoulement plastique sur sa surface. Le potentiel d'écoulement plastique fournis alors uniquement la direction de l'écoulement par le calcul de son gradient, peu importe la valeur numérique du potentiel. Cependant, cette recherche n'invalide pas complètement la méthode puisqu'aucune mention directe de cette condition n'a été identifiée dans les sources consultées. Dans cette optique, la formulation utilisée pour l'implémentation de la loi de comportement n'inclura pas cette étape de minimisation du potentiel plastique.

2.2.5 Écrouissage isotrope

Afin de permettre une évolution de la surface de charge et du potentiel d'écoulement plastique consistante avec la nature du matériau, il est nécessaire d'introduire un mécanisme d'écrouissage à la loi de comportement. Ce mécanisme est géré via le paramètre de résistance normalisé (k) qui indique le niveau d'écrouissage du matériau à un niveau de contrainte donné. Ce paramètre de résistance est calculé à l'aide d'une équation de forme radicale, telle que définie par Crouch et Tahar [**17**]:

$$k(\epsilon_p, d_h) = k_0 + (1 - k_0) \sqrt{\frac{\epsilon_p}{d_h} \left(2 - \frac{\epsilon_p}{d_h}\right)} \qquad \text{avec } 0 \le k \le 1$$
(2.9)

où k_0 représente la valeur initiale du paramètre de résistance k, ϵ_p est la déformation plastique équivalente accumulée et d_h , la ductilité du matériau. Cette fonction est définie de façon à ce que lorsque la déformation plastique équivalente devient égale à la ductilité du matériau, le paramètre de résistance atteigne sa valeur maximale. Inversement, lorsque la déformation plastique équivalente de résistance demeure égale à k_0 , indiquant qu'il n'y



a pas d'écrouissage. Afin de satisfaire la condition d'écrouissage maximal (k = 1), il est nécessaire que la déformation plastique équivalente ne dépasse pas la valeur de ductilité en un état de contrainte donné.

La forme radicale de l'équation 2.9 impose cependant un taux de changement fixe pour le paramètre d'écrouissage. La définition de cette forme d'équation a été déterminée par Crouch et Tahar [**17**] afin de représenter l'évolution de l'écrouissage du béton. Pour un matériau à base de carbone, rien n'indique que la vitesse d'évolution du paramètre de résistance suit celle d'un béton. Afin de permettre un meilleur contrôle de l'évolution du paramètre k, on propose la généralisation de l'équation 2.10 telle que :

$$k(\epsilon_p, d_h) = k_0 + (1 - k_0) \left[\frac{\epsilon_p}{d_h} \left(2 - \frac{\epsilon_p}{d_h}\right)\right]^n$$
(2.10)

où *n* est un paramètre qui contrôle la vitesse d'évolution du paramètre *k*. À la figure 2-4, on constate bien que la modification de la valeur de l'exposant n permet de passer d'une évolution rapide en début d'écrouissage (n = 1/2) à une évolution plus lente et monotone (n = 2). L'objectif de la généralisation est donc atteint, soit la possibilité d'ajuster la vitesse d'évolution de l'écrouissage. Pour ce qui est de l'approximation d'un von Mises, cette généralisation ne permet pas d'obtenir une courbe parfaitement droite. Ainsi, la loi de comportement de von Mises ne pourra qu'être approximée par la loi de la pâte, ce qui est favorable par rapport à la définition originale dans un contexte de validation numérique de la loi de comportement.



Figure 2-4: Effet de l'exposant *n* sur l'évolution de paramètre de résistance *k*

En mécanique des solides, la ductilité d'un matériau désigne sa capacité à se déformer plastiquement. Dans le cas d'un matériau à base de carbone, cette capacité varie en fonction de l'état de contrainte du matériau et en particulier, en fonction de la pression hydrostatique. En effet, la sensibilité du matériau à la pression hydrostatique mène à une déformation à la rupture différente selon l'état de contrainte imposé matériau, ou plus spécifiquement, au confinement appliqué. C'est pourquoi la ductilité utilisée dans le modèle élastoplastique se doit d'être définie en fonction de la pression. Il a d'ailleurs été observé que la ductilité de la pâte varie rapidement au voisinage d'une pression nulle et devient très faible en zone de tension. Une courbe typique utilisée pour la pâte monolithique est présentée à la figure 2-5.



Figure 2-5: courbe de ductilité d_h de la pâte monolithique en fonction de la pression [7]

Ainsi, la prise en compte de l'écrouissage du matériau est effectuée en permettant aux équations de surface de charge (2.2) et de potentiel d'écoulement plastique (2.8) d'évoluer en fonction du paramètre de résistance. Ces deux relations deviennent donc :

$$F(\xi,\rho,r,k) = \left\{ (1-k) \left[\frac{\xi}{f_c} + \frac{\rho r}{b_f f_c} \right]^2 + a_f^{\frac{1}{\alpha_f}} \frac{\rho r}{f_c} \right\}^{\alpha_f} + \frac{k^{\beta_f} m_f}{f_c} \left[\xi + \frac{\rho r}{b_f} \right] - k^{\beta_f} = 0$$
(2.11)

$$Q(\xi,\rho,k) = \left\{ (1-k) \left[\frac{\xi}{f_c} + \frac{\rho}{b_q f_c} \right]^2 + a_q^{\frac{1}{\alpha_q}} \frac{\rho}{f_c} \right\}^{\alpha_q} + \frac{k^{\beta_q} m_f}{f_c} \left[\xi + \frac{\rho}{b_q} \right] - k^{\beta_q} = 0$$
(2.12)

où β_f et β_q sont deux constantes contrôlant la vitesse d'évolution des deux potentiels en fonction du paramètre d'écrouissage. Ces fonctions ont d'abord été définies dans le modèle de béton de Etse et Willam [15] en utilisant $\beta_f = \beta_q = 2$. Elles ont par la suite été modifiées par D'Amours [7] en substituant l'exposant par les paramètres β_f et β_q . Cette modification de l'équation permet aux deux potentiels de mieux représenter l'écrouissage du matériau tant en traction qu'en compression et ce, en regard des observations expérimentales.

2.2.6 Adoucissement isotrope

Lorsque le paramètre de résistance atteint sa valeur maximale (k = 1), le matériau ne peut écrouir d'avantage. Celui-ci entre alors en phase de rupture durant laquelle sa résistance décroît peu à peu jusqu'à provoquer la défaillance complète du matériau. Cette décroissance de la résistance est généralement causée par l'apparition de fissures dans le matériau. La phase de rupture est irréversible et conditionne le niveau de détérioration du matériau.

La fissuration créant de nouvelles surfaces de contact à l'intérieur du matériau, sa prise en compte discrète au niveau numérique est complexe à réaliser. Dans ce contexte, D'Amours [7] propose l'utilisation d'un mécanisme d'adoucissement qui remplace la fissuration et l'endommagement afin d'alléger le calcul de l'état de contrainte lors de cette phase critique. Par la diminution de la surface de charge et du potentiel d'écoulement plastique, ce mécanisme simule l'affaiblissement du matériau en phase de fissuration.

Le mécanisme d'adoucissement se base sur l'énergie de rupture pour évaluer la dégradation de la résistance mécanique. Celui-ci est exprimé en termes de la fissuration en mode I, II et III, qui correspond respectivement à la fissuration par ouverture, par cisaillement et par vissage (figure 2-6).



Figure 2-6: Modes de fissuration [18]

L'évolution de l'adoucissement est calculée via le paramètre de cohésion, noté c, indiquant le niveau de cohésion du matériau tout en quantifiant son état d'endommagement. Durant l'écrouissage, le paramètre de cohésion reste égal à 1, indiquant une cohésion complète du matériau. Lorsque le matériau entre en phase d'adoucissement (k = 1), le paramètre de cohésion décroît jusqu'à atteindre une valeur nulle, indiquant que le matériau est définitivement en état de rupture et ne possède plus aucune résistance. Ce paramètre est calculé à l'aide de l'équation 2.13, telle que définie par Kang [**19**] :

$$c = e^{-\delta_s w^2} \qquad \text{avec } 0 \le c \le 1 \tag{2.13}$$

où δ_s est une constante contrôlant la rapidité de la décroissance de la fonction d'adoucissement et w, le déplacement d'ouverture de fissure, calculé selon la relation:

$$w = \frac{\epsilon_f \cdot l_c}{N_f} \tag{2.14}$$

où ϵ_f et l_c représentent respectivement la déformation plastique équivalente en fissuration et la longueur caractéristique de la fissuration du matériau. Selon Bažant et Pijaudier-Cabot [**20**], l_c peut être fixée comme étant 2,7 fois le diamètre moyen des plus gros agrégats de l'échantillon de pâte. Le paramètre N_f permet de prendre en compte l'effet de la fissuration en mode II et III en appliquant un facteur correctif au déplacement d'ouverture lorsque ces types de fissuration deviennent importants. Celui-ci a été défini par Crouch et Tahar [**17**] et est calculé à l'aide de la relation :

$$N_{f} = \begin{cases} \sqrt{2} \left(\frac{-\sqrt{3} \xi}{\rho} + \frac{1}{\sqrt{2}} \right) \left(1 - \cos\left(\theta + \frac{\pi}{6}\right) \right) \left(N_{uc} - 1 \right) + 1 & \text{si } \frac{\xi}{\rho} < \frac{1}{\sqrt{6}} \\ 1 & \text{autrement} \end{cases}$$
(2.15)

où N_{uc} est le nombre maximal de fissures apparaissant dans le matériau pour un test de compression uniaxial. Ainsi, lorsque l'effort subi par le matériau est principalement causé par la pression hydrostatique, le mode de fissuration dominant est l'ouverture. Le paramètre N_f est alors égal à 1, n'appliquant ainsi aucune correction à l'ouverture de fissure. Cependant, lorsque la contrainte déviatrice devient l'effort dominant, le calcul de N_f permettra d'ajuster la valeur d'ouverture de fissure.

Le paramètre N_f permets aussi de mettre en relation l'énergie de fissuration en mode l versus l'énergie de fissuration en mode mixte. Ainsi, on peut définir l'énergie de fissuration en mode d'ouverture G_{fI} via la relation suivante :

$$N_f G_{fI} = \int_0^\infty f_t \cdot e^{-\delta_s (N_f \cdot w)^2} dw$$
(2.16)

Pour un cas d'essai de traction uniaxial, N_f est égal à 1 et l'énergie de fissuration en mode I est directement déterminée avec l'aire sous la courbe contrainte-déplacement. Pour un essai de compression uniaxial, N_f est égal à N_{uc} et l'énergie de fissuration en mode mixte est donnée par l'aire sous la courbe contrainte-déplacement de cet essai.

À partir de l'ensemble de ces équations, l'état du mécanisme d'adoucissement pour un état de contrainte défini peut donc être calculé via le paramètre *c*. La prise en compte de l'adoucissement du matériau est alors prise en compte dans la loi de comportement en permettant aux équations de la surface de charge (2.2) et du potentiel plastique (2.8) de varier en fonction du paramètre de cohésion. L'équation de ces deux potentiels deviennent donc:

$$F(\xi,\rho,r,c) = a_f \left[\frac{\rho r}{f_c}\right]^{\alpha_f} + \frac{m_f}{f_c} \left[\xi + \frac{\rho r}{b_f}\right] - c = 0$$
(2.17)

$$Q(\xi, \rho, c) = a_q \left[\frac{\rho}{f_c}\right]^{a_q} + \frac{m_f}{f_c} \left[\xi + \frac{\rho}{b_q}\right] - c = 0$$
(2.18)

2.2.7 Effets de la température sur le comportement du matériau

Évolution des propriétés du matériau en cours de cuisson

La pâte monolithique étant un matériau grandement sensible aux changements de température, elle verra son comportement évoluer de façon significative en fonction du traitement thermique qu'elle aura subi. Lors de la phase de préchauffage d'une cuve d'électrolyse, la température à l'intérieur de l'enceinte peut atteindre des températures avoisinant les 1000°C. Lorsque soumis à de telles conditions, la structure même de la pâte évoluera ce qui engendrera une grande modification de son comportement. Le degré de cuisson de la pâte monolithique devient donc un facteur de première importance lors de la caractérisation de son comportement. C'est pourquoi le caractère évolutif des propriétés du matériau doit être pris en compte dans le modèle de comportement.

Pour ce faire, il est nécessaire d'utiliser un paramètre qui permet de suivre le niveau de cuisson du matériau. Cet indice doit évoluer tout au long de la cuisson de manière à refléter le changement de comportement non réversible du matériau. Le paramètre utilisé pour prendre en compte ce phénomène est appelé «indice de cuisson» et a été défini par D'Amours [7] tel que :

$$x = \frac{f_c}{f_{c,\infty}}$$
(2.19)

où $f_{c,\infty}$ est la valeur absolue de la résistance mécanique en compression uniaxiale d'un échantillon de pâte complètement cuit. Cet indice est défini ainsi puisque la résistance mécanique du matériau suit une évolution qui coïncide avec certains événements thermochimiques importants lors de la cuisson du matériau. En effet, l'augmentation de la résistance mécanique apparaît au moment même où l'huile et le brai se distillent (150 à 500°C) et cette résistance s'amplifie avec la polymérisation et la carbonisation du semi-coke (400 à 550°C et plus).

Les données expérimentales pour les tests de compression uniaxiale telles qu'obtenues par D'Amours sont montrées à la figure 2-7. Une partie de ces tests ont été effectués à température ambiante sur des échantillons préalablement cuits alors que certains échantillons ont été testés directement à leur température finale de cuisson. La première méthode a été nécessaire étant donné qu'il demeure complexe d'effectuer des tests mécaniques à chaud, considérant l'effet amplifié de l'oxydation du carbone à haute température et du dégagement de volatiles durant la cuisson. Certains tests ont cependant été réalisés à chaud afin de valider l'approche. Cependant, une grande différence apparaît entre les résultats à froid et à chaud pour des températures autour de 200°C à 300°C, ce qui semble indiquer que les deux méthodes ne sont pas directement comparables. On remarque également que les données expérimentales obtenues par D'Amours sont très variables en intensité pour une température de cuisson donnée, ce qui semble indiquer que le niveau de cuisson du matériau est influencé non seulement par la température, mais aussi par des paramètres supplémentaires.



La valeur de résistance maximale en compression obtenue pour un échantillon cuit jusqu'à 1000°C avec un taux de chauffe constant sert de référence au modèle étant donné que la pâte ne subira jamais de températures supérieures lors de sa vie utile dans la cuve. Le niveau de cuisson est alors calculé à partir des données de résistance mécanique en compression. Afin de permettre un lissage des données expérimentales de l'indice de cuisson, une équation basée sur la loi d'Arrhenius est utilisée :

$$\dot{x} = A_x(x) \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right)$$
(2.20)

où \dot{x} est le taux de variation de l'indice de cuisson à un instant t, A_x est l'affinité chimique, E_a est l'énergie d'activation, R est la constante universelle des gaz et T, la température. Ce type d'équation est généralement utilisé pour caractériser la constante de vitesse des réactions chimiques pour des évolutions thermiquement activées. Cependant, Hellmich et al. [21] ainsi que Richard et al. [10] ont utilisé cette équation pour représenter le taux d'évolution du degré de cuisson en fonction de la température respectivement pour un béton et la pâte monolithique. Dans ce contexte, l'affinité chimique et l'énergie d'activation sont utilisées comme simples paramètres de l'équation et sont ajustées pour que la courbe passe par les données expérimentales. L'équation 2.20 n'est cependant valide que pour un taux de chauffe constant. Afin de prendre en compte l'évolution des propriétés mécaniques dans la loi de comportement, cellesci doivent par la suite être définies en fonction de l'indice de cuisson calculé à l'aide de la loi d'Arrhenius. Ainsi, les propriétés pourront être calculées en fonction du niveau de cuisson du matériau lors de l'évaluation de la loi de comportement.

Un problème apparaît cependant avec la définition de l'indice de cuisson donnée par D'Amours. En effet, lors de la phase de préchauffage des cuves d'électrolyse, le taux de chauffe subit par les différentes composantes de la cuve n'est pas uniforme. De plus, la définition d'un indice de cuisson fonction de la résistance mécanique ne permet de prendre en compte la réelle évolution chimique du matériau que de façon indirecte. Une définition différente de l'indice de cuisson pourrait cependant posséder quelques avantages sur la méthode précédemment exposée.

En utilisant la méthode présentée par Kocaefe et *al.* [22], il deviendrait possible d'identifier les valeurs de l'affinité chimique (A_x) et de l'énergie d'activation (E_a) avec comme objectif l'utilisation de la loi d'Arrhenius en respect de sa formulation originale, soit la représentation de la vitesse de réaction d'un matériau. Ainsi, en se basant sur la perte de masse (figure 2-8) plutôt que sur la résistance mécanique en compression, un indice de cuisson plus représentatif de l'évolution chimique et permettant de prendre en compte la vitesse de chauffe serait défini. L'affinité chimique serait un paramètre uniquement fonction de l'indice de cuisson, comme précédemment défini, alors que l'énergie d'activation serait fonction du taux de chauffe, ce qui amène la prise en compte de celui-ci par la définition de l'indice de cuisson. Les propriétés mécaniques du matériau seraient alors définies en fonction de ce nouvel indice de cuisson, fonction de la température et du taux de chauffe.



Cette dernière méthode n'a cependant pas été étudiée davantage considérant l'ampleur du projet actuel.



Figure 2-8: Courbes de thermogravimétrie de la pâte à différents taux de chauffe [7]

Déformation d'origine chimique et thermique

La modification de la structure interne du matériau lors de sa cuisson entraîne un effet additionnel qui se doit d'être considéré. Outre la déformation thermique usuelle qui est de nature réversible, un gonflement suivi d'une contraction d'origine chimique apparaît tout au long de la cuisson du matériau induisant ainsi une nouvelle composante dans la déformation totale du matériau. Il est possible d'observer ce phénomène lors de la cuisson libre d'un échantillon de pâte (figure 2-9 et figure 2-10). Les deux mécanismes apparaissent ainsi lors d'une augmentation de température alors que seule la déformation d'origine thermique est récupérée lorsque la température est ramenée à la température de référence. Conséquent du caractère irréversible de la composante chimique, les deux types de déformations peuvent être déterminés expérimentalement en effectuant une cuisson d'un échantillon jusqu'à 1000°C suivie d'un refroidissement complet. Cette approche se base cependant sur l'hypothèse que le taux de chauffe subit lors de la cuisson de la pâte est suffisamment lent pour que l'ensemble des transformations irréversibles ait pris fin avant la phase de refroidissement. Ce taux de chauffe influence seulement la composante chimique de déformation.



Figure 2-9: déformation totale d'un échantillon lors d'un essai de dilatation libre [7]



Figure 2-10: Déformations d'origine thermique (gauche) et déformation d'origine chimique (droite) lors d'un essai de dilatation libre [7]

Dans le modèle de comportement, ces deux mécanismes de déformations doivent aussi être prises en compte afin de pouvoir évaluer le bilan de déformation d'un point matériel et ainsi, calculer la contrainte dans le matériau en respectant le caractère irréversible de la déformation d'origine chimique. La déformation d'origine thermique est d'abord calculée via l'expression de dilatation thermique, telle que :

$$\varepsilon_{th} = \alpha \, \Delta T \tag{2.21}$$

où α est le coefficient d'expansion thermique. Au niveau de la déformation d'origine chimique, une équation fonction de l'indice de cuisson a été utilisée. Tel que proposé par D'Amours [**7**], cette équation est définie en deux parties :

$$\varepsilon_{ch}(x) = \begin{cases} \frac{a_c}{(1 + e^{(b_c - c_c x)})^{1/d_c}} - e_c & 0 < x < x_{cr} \\ \frac{g_c + h_c x}{1 + i_c x + j_c x^2} - k_c & x_{cr} < x < 1 \end{cases}$$
(2.22)

où x_{cr} est la valeur d'indice de cuisson critique, paramètre permettant de scinder l'équation en deux parties et devant être identifié manuellement, et a_c , b_c , c_c , d_c , g_c , h_c , i_c , j_c et k_c sont des paramètres de l'équation à identifier. Ainsi, lorsque la température de l'échantillon diminue, la déformation d'origine thermique régresse alors que celle d'origine chimique persiste. Par l'utilisation des équations 2.21 et 2.22, il devient alors possible de calculer l'ensemble des déformations directement causées par l'augmentation de la température du matériau.

2.2.8 Formulation généralisée de la loi de comportement élastoplastique

En intégrant à la fois l'écrouissage et l'adoucissement aux formulations de potentiel de charge et de potentiel d'écoulement plastique, on obtient leurs formulations complètes. Les deux équations les décrivant prennent alors la forme:

$$F(\xi,\rho,r,k,c) = \left\{ (1-k) \left[\frac{\xi}{f_c} + \frac{\rho r}{b_f f_c} \right]^2 + a_f^{\frac{1}{\alpha_f}} \frac{\rho r}{f_c} \right\}^{\alpha_f} + \frac{k^{\beta_f} m_f}{f_c} \left[\xi + \frac{\rho r}{b_f} \right] - k^{\beta_f} c = 0$$
(2.23)

$$Q(\xi,\rho,k,c) = \left\{ (1-k) \left[\frac{\xi}{f_c} + \frac{\rho}{b_q f_c} \right]^2 + a_q^{\frac{1}{\alpha_q}} \frac{\rho}{f_c} \right\}^{\alpha_q} + \frac{k^{\beta_q} m_f}{f_c} \left[\xi + \frac{\rho}{b_q} \right] - k^{\beta_q} c = 0$$
(2.24)

Initialement, la surface de charge et le potentiel d'écoulement plastique utilisent des valeurs de $k = k_0$ et c = 1. Les équations retombent alors sur la formulation d'écrouissage isotrope présentée à la section 2.2.5 (équations 2.11 et 2.12). Le matériau passe par la suite en écrouissage où la surface de charge est modifiée en fonction de l'évolution paramètre de résistance normalisé k. Lorsque celle-ci atteint sa valeur maximale (k = 1), les équations de potentiels sont alors celles de la section 2.2.3 et 2.2.4 (équations 2.2 et 2.8). Finalement, le matériau passe en adoucissement où le paramètre de cohésion c contrôle l'évolution de la surface de charge et du potentiel d'écoulement plastique. Les deux équations qui représentent alors la surface de charge et le potentiel d'écoulement plastique sont celles de la section 2.2.6 (équations 2.17 et 2.18).

La loi de comportement se voit alors définie par plusieurs paramètres associés à la surface de charge, au potentiel d'écoulement plastique ainsi qu'aux mécanismes d'écrouissage et d'adoucissement. Le tableau 2-1 regroupe l'ensemble des paramètres à définir pour la loi de comportement.

Tableau 2-1. Sommane des parametres de la foi de comportement elastoplastique					
Paramètres		Comportement contrôlé	Total		
1	Ε,ν	Propriétés élastiques du matériau	2		
2	f_c, f_{tt}, m_f	Propriétés élastoplastiques du matériau 3			
3	$a_f, b_f, \alpha_f, \beta_f$	fonction de charge 4			
4	$a_q, b_q, \alpha_q, \beta_q$	potentiel d'écoulement plastique			
5	a_e, c_e	fonction de Willam et Warnke			
6	k_0, d_h, n	Écrouissage	3		
7	δ_s, l_c, N_{uc}	Adoucissement	3		
8	$E_a, A(x)$	Cuisson			
9	$a_{c}, b_{c}, c_{c}, d_{c}, e_{c}, g_{c}, h_{c}, i_{c}, j_{c}, k_{c}$	Déformation d'origine chimique	10		
Total			33		

Tableau 2-1: Sommaire des paramètres de la loi de comportement élastoplastique

2.3 PROCÉDURE D'IDENTIFICATION DES PARAMÈTRES DU MODÈLE

L'utilisation de la loi de comportement proposée pour des simulations numériques implique l'identification de 33 paramètres. Sans poser d'hypothèse particulière sur la sensibilité, 21 de ces paramètres peuvent additionnellement être fonction du niveau de cuisson du matériau, exigeant ainsi un programme expérimental d'envergure.

La procédure d'identification est tout d'abord présentée pour une caractérisation à un niveau de cuisson donné. Ainsi, les tests mécaniques nécessaires sont d'abord présentés puis la méthode d'identification des paramètres physiques est couverte. Par la suite, la méthode d'identification des paramètres de la surface de charge et du potentiel d'écoulement plastique sont présentés. Finalement, la prise en compte du niveau de cuisson dans les équations est discutée afin de permettre la caractérisation du comportement de matériaux thermoréactifs.

Le tableau 2-2 présente, de façon simplifiée, l'ensemble des étapes nécessaires à l'identification des paramètres définissant le modèle élastoplastique développé.

dentifié(s)	
L, V	
n _f	
- it	
$\delta_{s}, l_{c}, N_{uc}$	
a _e , c _e	
, , ,	
n	

Tableau 2-2: Méthode d'identification des paramètres de la loi élastoplastique

2.3.1 Réalisation des essais mécaniques

Le tableau 2-3 présente l'ensemble des tests mécaniques nécessaires pour l'identification des paramètres de la loi de comportement. Parmi ceux-ci, les tests de compression uniaxiale et de traction uniaxiale sont ceux qui permettront de définir les limites de la surface de charge pour des pressions hydrostatiques faibles ainsi que les divers paramètres établissant les limites mécaniques du matériau. Pour ce qui est des essais mécaniques confinés, ceux-ci permettront de définir la limite de la surface de charge ainsi que la ductilité du matériau, et ce, pour des pressions hydrostatiques plus élevées.

2.3.1 Méthode d'identification des paramètres physiques

À partir des essais mécaniques réalisés à un niveau de cuisson donné, l'identification de l'ensemble des paramètres de la loi de comportement s'effectue en trois étapes distinctes. La première consiste à identifier les paramètres physiques de la loi de comportement, identifiables directement à partir des résultats des différents essais de caractérisation. On décrit ici la méthode menant à l'identification de chacun d'entre eux.

Module de Young, E

Le module de Young est la pente de la courbe élastique d'un essai uniaxial. Elle peut être identifiée dans un essai de compression uniaxiale ou un essai de flexion trois-points. Cependant, c'est lors d'essais de compression uniaxiale que l'identification est la plus naturelle, de par la simplicité de réalisation et d'analyse de l'essai en question et par l'uniformité des contraintes dans le matériau. L'essai de compression doit être mené suivant la norme ASTM C 469-94 selon laquelle le module de Young est identifié comme la pente moyenne de la courbe du deuxième et troisième chargement sur un échantillon de carbone, le premier chargement étant utilisé afin de refermer les pores du matériau et de relaxer les contraintes résiduelles induites par la méthode de préparation de l'échantillon.



Tableau 2-3: Spécifications des essais nécessaires à l'identification des paramètres de la loi de comportement

Essai	Nb d'essai minimum	Spécifications			
	3	Norme ASTM C 469-94			
		 3 chargements successifs 			
Compression		• Application de la charge jusqu'à la rupture du			
uniaviale		matériau après le 3 ^{ème} chargement			
unuxiaic		Capture de la force appliquée			
		 Mesure de l'allongement axial de l'échantillon 			
		Mesure de l'allongement radial de l'échantillon			
	3	• Application de la charge jusqu'à la rupture du			
Traction		matériau			
uniaxiale		 Capture de la force appliquée 			
		 Mesure de l'allongement axial de l'échantillon 			
		Mesure de l'allongement radial de l'échantillon			
	3	 Application de la charge jusqu'à la rupture 			
Flexion trois-points		Capture de la force appliquée			
		 Mesure de la déflection de l'échantillon 			
	3 (par niveau de confinement)	 Application de la charge jusqu'à la rupture 			
		 Capture de la force appliquée 			
		 Capture du confinement appliqué 			
Compression		Mesure de l'allongement axial de l'échantillon			
uniaxiale confinee		Mesure des dimensions finales de l'échantillon			
		• Utiliser des niveaux de confinements			
		permettant de couvrir l'ensemble des niveaux			
		de contraintes estimes pour la pate en service			

50

Coefficient de Poisson, v

Le coefficient de poisson représente le rapport entre la déformation radiale et axiale d'un matériau en régime élastique. Ce paramètre peut être identifié lors des mêmes essais mécaniques que le module de Young, en s'assurant que la déformation radiale est adéquatement capturée. Le coefficient de poisson est alors calculé selon :

$$\nu = -\frac{\Delta \varepsilon_{radiale}}{\Delta \varepsilon_{axiale}}$$
(2.25)

Résistance en compression uniaxiale, f_c

La résistance mécanique en compression correspond à la valeur maximale de contrainte atteinte lors d'un essai en compression uniaxiale menant à la rupture. Selon la norme ASTM C 469-94, il est donc possible d'identifier cette valeur sur la courbe du troisième chargement, soit celui menant à la rupture du matériau.

Résistance mécanique en traction uniaxiale, f_t

L'identification de ce paramètre s'effectue en observant la contrainte maximale atteinte lors d'un essai de traction uniaxiale ou encore, en calculant la contrainte normale maximale atteinte lors d'un essai de flexion trois-points. La valeur obtenue lors d'un test de flexion n'est cependant pas aussi précise que celle obtenue par un test de traction, des efforts en cisaillement étant présents. Dans les deux cas, la rupture du matériau apparaîtra en tension et le calcul de la contrainte normale maximale subite donnera directement la valeur du paramètre f_t .

Rapport de résistance tension-compression, m_f

Suite à l'identification de la valeur de f_c et f_t , le rapport de résistance m_f est simplement calculé à l'aide de l'équation 2.4.

Ductilité, d_h

La ductilité du matériau est égale à la déformation plastique équivalente atteinte à la limite ultime du matériau. Cette valeur est cependant fonction de la pression pour les matériaux à base de carbone. Ainsi, ce paramètre demande plusieurs essais mécaniques à différents confinements. Entre autres, il est utile d'utiliser les essais de compression uniaxiale et de traction uniaxiale comme premières données et ensuite utiliser les essais de compression sous confinement, nécessaires à l'identification de l'enveloppe de rupture, comme données supplémentaires. En identifiant la déformation plastique équivalente atteinte pour la contrainte maximale atteinte durant l'essai, et ce, pour l'ensemble de ces tests mécanique, il est possible de déterminer une courbe fonction de la pression permettant de définir la ductilité du matériau.

Longueur caractéristique, l_c

La longueur caractéristique du matériau correspond à 2.7 fois la grosseur moyenne des agrégats de la pâte/carbone.

Rapidité de décroissance, δ_s

La constante de rapidité de décroissance est identifiée à l'aide de l'équation 2.16. Ainsi, on identifie d'abord la valeur d'énergie de fissuration en mode ouverture G_{fI} en calculant l'aire sous la courbe contrainte-déplacement de l'essai de traction uniaxiale, où la valeur du nombre maximal de fissures N_f est égale à 1. La constante δ_s est ensuite isolée dans l'équation 2.16 préalablement intégrée.



Nombre maximal de fissures en compression, N_{uc}

L'équation 2.16 permet également l'identification du paramètre N_{uc} . On doit d'abord calculer l'aire sous la courbe contrainte-déplacement d'un essai de compression uniaxiale, ce qui correspond à la valeur d'énergie de fissuration en mode ouverture G_{fI} . Étant donné la valeur connue de δ_s , on identifie alors la valeur numérique de N_{uc} via l'équation 2.16, qui correspond à la valeur du nombre maximal de fissures N_f pour un essai de compression uniaxial.

2.3.2 Détermination des paramètres du potentiel de charge

Suite à l'identification des paramètres physiques de la loi, la prochaine étape consiste à calibrer l'équation du potentiel de charge. Pour ce faire, on utilise trois états de contraintes caractéristiques de la surface de charge : la limite élastique ($k = k_0$), la limite ultime (k = 1, c = 1) ainsi qu'un état intermédiaire ($k_0 < k < 1$). Ces quatre états de contraintes caractéristiques sont présentés sur courbe typique d'essai uniaxial à la figure 2-11.



DéformationFigure 2-11: Courbe type d'un essai uniaxial.[1] limite élastique $(k = k_0)$;[2] état intermédiaire $(1 > k > k_0)$;[3] limite ultime (k=1, c=1);[4] rupture ($c \approx 0$).

Paramètres de la surface de charge, a_f , b_f et α_f

Le premier état de la surface de charge est défini lorsque celle-ci est à son état maximal et définit la limite ultime du matériau (k = 1, c = 1, point 3 sur la figure 2-11). En utilisant cette condition, on élimine la fonction d'écrouissage de l'équation du potentiel de charge ainsi que le paramètre β_f , permettant ainsi l'identification des autres paramètres de la fonction. La surface de charge représente alors la résistance ultime du matériau, identifié comme le point le plus haut atteint sur la courbe contrainte-déformation. En calculant l'état de contrainte maximal atteint à chacun des essais mécaniques de caractérisation en fonction des coordonnées de Haigh Westergaard, on obtient une série de points permettant de donner la forme la surface de charge lorsque k = 1 et c = 1. Les paramètres du potentiel de charge sont alors identifiés de façon à ce que la surface de charge (F = 0) passe directement par ces états de contrainte.

Paramètres du rapport d'excentricité, a_e et c_e

Les deux paramètres du rapport d'excentricité, tel que défini par Willam & Warnke [**16**], sont identifiés à la suite de l'identification des paramètres de la surface de charge à la limite ultime. Le paramètre a_e est identifié de façon à ce que le méridien de traction de la surface de charge $(\theta = 0^\circ)$ passe directement par la résistance en traction uniaxiale, telle que mesurée lors du test de traction uniaxiale ou encore, lors du test de flexion trois-points. La constante c_e est identifiée de façon à ce que la résistance en compression équibiaxiale ($\sigma_1 = \sigma_2 \neq 0, \sigma_3 = 0$) soit égale ou légèrement supérieure à la résistance uniaxiale en compression. Pour le béton, on parle d'une résistance en compression équibiaxiale de 15 à 20% plus élevée que celle en compression uniaxiale [**23**] [**24**]. Cependant, aucune donnée n'est disponible pour les matériaux granulaires à base de carbone. La figure 2-12 montre les méridiens de compression ($\theta = 60^\circ$) et de traction $(\theta = 0^\circ)$ pour la pâte tel qu'obtenus par D'Amours [**7**]



Figure 2-12: Méridiens de l'enveloppe de rupture après une certaine cuisson [7]

Paramètre β_f et valeur initiale du paramètre d'écrouissage, k_0

Le deuxième état de contrainte caractéristique de la surface de charge représente son état initial ($k = k_0$, point 1 sur la figure 2-11). On se trouve alors à la limite élastique du matériau. En posant les paramètres déjà identifiés comme constantes dans l'équation, et en remplaçant la valeur de k par sa valeur initiale (k_0) ainsi que la valeur de déformation plastique équivalente ϵ_p par 0, il devient possible de déterminer la valeur de β_f ainsi que la valeur initiale du paramètre de résistance k_0 .

Exposant de la fonction d'écrouissage, n

L'identification du dernier paramètre, l'exposant n, s'effectue en utilisant l'état de contrainte intermédiaire ($k_0 < k < 1$, point 2 sur la figure 2-11). Celui-ci permettra d'ajuster la vitesse d'évolution de la fonction d'écrouissage et de s'assurer de la représentativité de la phase d'écrouissage. L'utilisation d'un nombre plus élevé de points intermédiaires permettrait une meilleure précision pour l'identification du paramètre n.
2.3.3 Détermination des paramètres du potentiel d'écoulement plastique

La troisième et dernière étape de la méthode d'identification des paramètres de la loi de comportement vise le potentiel d'écoulement plastique (Q). Cette quantité est utilisée dans la règle d'écoulement afin de connaître la direction de l'écoulement plastique lors de la plastification. Ainsi, il est nécessaire de connaître la direction de l'écoulement plastique pour un nombre minimum d'états de contrainte dans le but d'identifier les paramètres de l'équation du potentiel d'écoulement plastique (a_q , b_q , α_q , β_q).

En premier lieu, l'analyse des données expérimentales est effectuée afin d'en retirer les données utiles à l'identification des paramètres de l'équation de potentiel d'écoulement plastique. Tout d'abord, le cas théorique de traction triaxiale permet d'obtenir un premier ensemble de données, la direction d'écoulement étant parallèle à l'axe hydrostatique. Les données expérimentales de déformation pour les essais de traction uniaxiale et de compression uniaxiale sont aussi utiles pour l'identification des paramètres, pourvu que la déformation radiale soit elle aussi mesurée. Ces données permettent de bien connaître l'allure des directions d'écoulement pour des pressions hydrostatiques faibles. Finalement, en mesurant les dimensions finales des échantillons testés sous chargements confinés, des données supplémentaires seront disponibles pour des pressions hydrostatiques élevées.

L'identification des paramètres du potentiel plastique est ensuite réalisée à partir d'une méthode en 4 étapes :

- 1. Extraire les courbes $\sigma \varepsilon_{axial}$ et $\sigma \varepsilon_{radial}$ pour l'ensemble des tests expérimentaux;
- 2. À l'aide des propriétés élastiques du matériau, déterminer les courbes $\sigma \varepsilon_{axial}^p$ et $\sigma - \varepsilon_{radial}^p$;
- 3. Construire des vecteurs de direction d'écoulement plastique pour un ensemble d'états de contrainte prédéterminés, et ce, à partir des courbes $\sigma \varepsilon_{axial}^{p}$ et $\sigma \varepsilon_{radial}^{p}$. Le

nombre de vecteurs de direction d'écoulement conditionne la précision de l'identification des paramètres du potentiel de charge;

4. Identification des paramètres du potentiel d'écoulement plastique à l'aide d'une méthode de lissage. Deux méthodes sont possibles : une optimisation sur la base de fonctions résidus construites pour chaque direction du tenseur de déformation, et ce, pour chaque état de contrainte ou encore, une optimisation sur la base d'une fonction objectif unique à chaque état de contrainte.

2.3.4 Prise en compte du niveau de cuisson du matériau

Lorsque la cuisson du matériau est prise en compte, le travail nécessaire à l'identification des paramètres de la loi élastoplastique augmente drastiquement. En effet, l'ensemble des paramètres mécaniques de la loi de comportement se doit d'être défini, et ce, pour tous les niveaux de cuisson.

Tout d'abord, les paramètres de la loi d'Arrhenius, équation permettant de calculer le niveau de cuisson du matériau, doivent être identifiés. Pour ce faire, une série de tests de compression uniaxiale doivent être effectués à des températures de cuisson différentes. En utilisant l'équation (2.19), le niveau de cuisson atteint pour chacun des essais est calculé. Par la suite, les résultats expérimentaux de niveaux de cuisson sont lissés à l'aide l'équation d'Arrhenius.

Afin de caractériser adéquatement l'évolution des propriétés élastoplastiques du matériau durant sa cuisson, un nombre suffisant de températures de cuisson doit donc être défini. Il est d'ailleurs suggéré de concentrer les différents niveaux de température dans la plage de températures où le matériau subit sa plus grande transformation. Pour une pâte monolithique, il s'agit de 200°C à 600°C. Pour chacun des niveaux de cuisson sélectionnés, les essais présentés au

tableau 2-3 doivent être effectués et l'ensemble des paramètres de la loi sont identifiés. Suite à ces tests et à l'identification des paramètres de la loi élastoplastique à chaque niveau de cuisson, un lissage est effectué pour chacun des paramètres afin d'obtenir une relation fonction du niveau de cuisson pour chacun d'entre eux.

Au niveau des tests mécaniques, deux méthodes différentes peuvent être employées. La première consiste à cuire initialement les échantillons jusqu'à un niveau de cuisson défini, de les refroidir et d'effectuer les tests par la suite. Il s'agit de la méthode «à froid». À l'inverse, on peut cuire les échantillons jusqu'à une température cible et effectuer immédiatement le test mécanique dès que la température cible est atteinte. On parle alors de la méthode «à chaud». Étant donné que l'historique de la température d'un échantillon affecte son niveau de cuisson, il est certain qu'un test à froid induit une erreur quant au niveau de cuisson réellement testé. Cependant, la méthode à chaude comporte elle aussi son lot de problème, principalement causé par la forte oxydation du carbone à haute température. Ainsi, le choix de la méthode de caractérisation mécanique dépend fortement des équipements disponibles. La méthode «à chaud» n'ayant pas encore été utilisée avec succès dans la littérature, il est donc recommandé d'utiliser la méthode «à froid» pour le moment.

CHAPITRE 3 INTÉGRATION DE LA LOI ET MISE EN ŒUVRE INFORMATIQUE

3.1 Généralités

Le chapitre précédent a permis de présenter les équations décrivant les divers mécanismes de la loi de comportement. L'implémentation de cette loi dans le logiciel commercial ANSYS[®] doit cependant se faire en accord avec la théorie des éléments finis. Ainsi, les équations du travail virtuel doivent être développées afin d'identifier les quantités devant être calculées par la loi de comportement pour résoudre le système d'équations. Par la suite, chacune de ces quantités doit être calculée en accord avec la loi de comportement développée. Ces différentes équations doivent par la suite être mises sous forme d'algorithme afin de permettre l'implémentation informatique.

Dans ce chapitre, l'ensemble des travaux relatifs à la mise en œuvre informatique est présenté. En premier lieu, la résolution du problème mécanique par la méthode des éléments finis est présentée. Par la suite, la résolution du problème thermochimique est abordée. La mise en œuvre informatique des équations et algorithmes développés est ensuite discutée, d'abord avec la présentation de l'interface avec le logiciel ANSYS[®], la routine UserMat, pour finir avec la description des sous-routines développées.

3.2 Résolution du problème mécanique par éléments finis

3.2.1 Travail virtuel

La méthode des éléments finis base son approche sur le principe de travail virtuel. L'énergie associée au travail virtuel est calculée pour un point matériel quelconque faisant partie d'un milieu continu soumis à certaines forces externes. Ainsi, à partir de la deuxième loi de Newton, on peut décrire l'équilibre statique de ce point matériel tel que :

La relation 3.1 peut être réécrite de façon à expliciter les forces internes, à savoir les contraintes (σ) présentes dans le matériau, et les forces externes appliquées sur le point matériel. On obtient alors l'équation différentielle décrivant l'équilibre local de celui-ci, tel que :

$$div \,\boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{f}_{v} = 0 \tag{3.2}$$

où f_v sont les forces de volumes agissant sur ladite particule et div l'opérateur de divergence. Le travail virtuel (δW) réalisé par cette particule est défini par la force appliquée sur celle-ci nécessaire pour produire un déplacement virtuel δu . Les forces étant à l'équilibre, l'équation du travail virtuel prend donc la forme :

$$\delta W = (\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{f}_{v}) \,\delta \boldsymbol{u} = 0 \qquad \forall \,\delta u \tag{3.3}$$

Il s'agit de la forme forte de l'expression du travail virtuel pour une particule matérielle. Dans un volume de contrôle, cette condition doit ainsi être respectée sur l'ensemble des particules élémentaires comprises à l'intérieur de celui-ci. On peut également imposer cette condition de

façon moyenne sur ce volume de contrôle, faisant ainsi apparaître la forme faible de l'équation du travail tel que:

$$\delta W = \int_{V} (div \,\boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{f}_{v}) \,\delta \boldsymbol{u} \, dV = 0 \tag{3.4}$$

L'intégration de la forme faible de l'équation d'énergie (3.4) permet d'abaisser l'ordre de la dérivée et ainsi, de permettre l'utilisation d'une approximation linéaire par morceau pour identifier la solution du problème. On obtient alors la forme variationnelle de l'énergie virtuelle du système tel que :

$$\delta W = \int_{V} \delta \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \boldsymbol{\sigma} \, dV - \int_{V} \delta \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{f}_{v} \, dV - \int_{S} \delta \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{f}_{s} \, dS = 0$$
(3.5)

Cette équation peut être présentée en deux composantes, soit les travaux virtuels internes et externes :

$$\delta W = \delta W_{int} - \delta W_{ext} = 0 \tag{3.6}$$

où :

$$\delta W_{int} = \int_{V} \delta \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \boldsymbol{\sigma} \, dV \tag{3.7}$$

$$\delta W_{ext} = \int_{V} \delta \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{f}_{v} \, dV + \int_{S} \delta \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{f}_{s} \, dS \tag{3.8}$$

3.2.2 Prise en compte des non-linéarités matérielles et géométriques

Dans le cadre d'une résolution numérique des équations par éléments finis, la solution instantanée de l'équation d'énergie est nécessite une linéarisation de son équation, telle que :

$$\delta W = \delta W^0 + \Delta \delta W = 0 \tag{3.9}$$

où δW^0 est le travail virtuel initial, forcément nul, et $\Delta \delta W$, l'incrément de travail virtuel. Cependant, un problème apparaît lorsque l'on utilise cette méthode de calcul dans notre cas actuel. En effet, la loi de comportement utilisée étant non-linéaire et le problème contenant des non-linéarités géométriques, la solution de l'équation d'énergie ne peut être calculée à l'aide d'une approximation linéaire. Il est donc impossible de linéariser cette équation sans provoquer l'apparition d'une erreur importante de calcul. L'utilisation d'un algorithme itératif permet de contourner ce problème par l'utilisation d'approximations linéaires successives. L'équation d'énergie devient donc :

$$\delta W^{i+1} = \delta W^i + \Delta \delta W^{i+1} = 0 \tag{3.10}$$

La condition de travail virtuel nul doit être respectée pour que la valeur calculée soit considérée comme étant convergée. Étant donné que le travail virtuel à l'itération précédente est toujours connu, la résolution de cette équation demande la connaissance de l'incrément de travail à chaque itération. On obtient cette relation en linéarisant l'équation 3.5 :



$$\Delta \delta W^{i+1} = \left[\int_{V} \Delta \delta \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \boldsymbol{\sigma} \, dV + \int_{V} \delta \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \Delta \boldsymbol{\sigma} \, dV \right] - \left[\int_{V} \Delta \delta \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \boldsymbol{f}_{v} \, dV + \int_{V} \delta \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \Delta \boldsymbol{f}_{v} \, dV \right] - \left[\int_{S} \Delta \delta \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \boldsymbol{f}_{s} \, dS + \int_{S} \delta \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \Delta \boldsymbol{f}_{s} \, dS \right]$$
(3.11)

où chacune des quantités est évaluée à l'itération i + 1. Cet incrément de travail virtuel peut également être divisé en deux expressions, soit l'incrément d'énergie interne et externe :

$$\Delta \delta W = \Delta \delta W_{int} - \Delta \delta W_{ext} = 0 \tag{3.12}$$

où :

$$\Delta \delta W_{int} = \int_{V} \Delta \delta \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \boldsymbol{\sigma} \, dV + \int_{V} \delta \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \Delta \boldsymbol{\sigma} \, dV \tag{3.13}$$

$$\Delta \delta W_{ext} = \left[\int_{V} \Delta \delta \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \boldsymbol{f}_{v} \, dV + \int_{V} \delta \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \Delta \boldsymbol{f}_{v} \, dV \right] \\ + \left[\int_{S} \Delta \delta \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \boldsymbol{f}_{s} \, dS + \int_{S} \delta \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \Delta \boldsymbol{f}_{s} \, dS \right]$$
(3.14)

Seul l'incrément d'énergie interne ne peut être résout étant donné que l'état de contrainte du matériau à l'itération courante est inconnu.

3.2.3 Calcul de la contrainte

L'énergie interne d'un point matériel dérive directement de son comportement mécanique et doit être calculée en fonction du comportement du matériau. Considérant l'équation 3.11, il est donc nécessaire de calculer la contrainte et son incrément via la loi de comportement afin de résoudre l'équation d'énergie. La contrainte mécanique à l'itération i + 1 est calculée de façon totale selon la loi de Hooke :

$$\boldsymbol{\sigma}^{i+1} = \mathbf{H}_e^{i+1} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_e^{i+1} \tag{3.15}$$

où ε_e représente le tenseur de déformation élastique et \mathbf{H}_e est le tenseur d'ordre 4 élastique, donné par :

$$\mathbf{H}_{e} = \frac{E}{(1+\nu)(1-2\nu)} \begin{bmatrix} 1-\nu & \nu & \nu & 0 & 0 & 0 \\ \nu & 1-\nu & \nu & 0 & 0 & 0 \\ \nu & \nu & 1-\nu & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2(1+\nu) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2(1+\nu) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2(1+\nu) \end{bmatrix}$$
(3.16)

La résolution de l'équation demande cependant la connaissance des composantes de déformations actuelles du point matériel étudié de manière à obtenir la déformation élastique à partir de la déformation totale, via l'hypothèse d'additivité des mécanismes de déformations, tel que :

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{e} = \boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_{p} - \boldsymbol{\varepsilon}_{th} - \boldsymbol{\varepsilon}_{ch} \tag{3.17}$$

où ε_{ch} et ε_{th} sont respectivement calculés en fonction du niveau de cuisson et de la température et donc, indépendant du comportement mécanique.

Pour ce qui est de l'incrément de contrainte, deux méthodes différentes peuvent être utilisées pour son calcul. La première consiste à utiliser la dérivée linéarisée de la contrainte :

$$\Delta \boldsymbol{\sigma}^{i+1} = \Delta \mathbf{H}_e^{i+1} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_e^{i+1} + \mathbf{H}_e^{i+1} \cdot \Delta \boldsymbol{\varepsilon}_e^{i+1}$$
(3.18)

Dans le cas présent, la variation du tenseur élastique est non-nulle puisque les propriétés du matériau (E et v) évoluent dans le temps, selon l'évolution du niveau de cuisson du matériau. Ainsi, le calcul de l'incrément de contrainte par l'équation 3.18 demande le suivi des modifications de \mathbf{H}_e , ce qui complique l'éventuelle implémentation informatique. La deuxième solution est de calculer l'incrément à partir des contraintes à l'itération courante et précédente. On a donc :

$$\Delta \boldsymbol{\sigma}^{i+1} = \boldsymbol{\sigma}^{i+1} - \boldsymbol{\sigma}^i \tag{3.19}$$

où les contraintes à l'itération i et i + 1 sont calculées à l'aide de l'équation 3.15. Cette deuxième méthode demande ainsi un effort de calcul moindre puisque l'évolution du tenseur élastique n'est pas prise en compte. De plus, le calcul de σ^{i+1} est déjà nécessaire pour le calcul de la solution par éléments finis, diminuant davantage l'effort de calcul nécessaire.

Ainsi, le calcul de l'énergie interne exige l'évaluation des contraintes à chaque itération. De plus, le calcul des différents mécanismes du tenseur de déformations est nécessaire afin de pouvoir identifier la valeur de la déformation élastique. Le calcul de la contrainte est ici réalisé via une approche prédiction-correction.

Étape 1 : Prédiction élastique

Si l'état de contrainte à l'itération i + 1 repose à l'intérieur de la surface de charge, aucune déformation permanente supplémentaire ne sera générée au cours de l'itération. Ainsi, on suppose que l'incrément de déformation mécanique est purement élastique :

$$\Delta \boldsymbol{\varepsilon}_m^{i+1} = \Delta \boldsymbol{\varepsilon}_e^{i+1} \tag{3.20}$$

La loi de Hooke est donc utilisée pour calculer la contrainte à partir de la valeur actuelle de déformation élastique. Celle-ci est obtenue en retirant l'ensemble des mécanismes de déformation de la déformation totale, selon l'équation 3.17. Considérant que l'incrément de déformation plastique à l'itération i + 1 est nul, l'état de contrainte étant supposé à l'intérieur de la surface de charge, la contrainte est finalement calculée avec l'équation :

$$\boldsymbol{\sigma}^{i+1} = \mathbf{H}_{e}^{i+1} \left(\boldsymbol{\varepsilon}^{i+1} - \boldsymbol{\varepsilon}_{p}^{i} - \boldsymbol{\varepsilon}_{ch}^{i+1} - \boldsymbol{\varepsilon}_{th}^{i+1} \right)$$
(3.21)

L'ensemble des quantités est alors connu et l'équation d'énergie peut être résolue pour l'itération actuelle.

Étape 2 : Correction plastique

Si l'état de contrainte à l'itération i + 1 va au-delà de la surface de charge, des déformations permanentes sont générées durant l'itération. Pour obtenir la valeur de la contrainte, on doit donc prendre en compte les mécanismes de plasticité introduits par la loi de comportement. Le calcul de la contrainte se fait de façon incrémentale :

$$\boldsymbol{\sigma}^{i+1} = \boldsymbol{\sigma}^i + \Delta \boldsymbol{\sigma}^{i+1} \tag{3.22}$$

L'équation est réarrangée pour expliciter les déformations en remplaçant l'incrément de contrainte par l'équation 3.18:

$$\boldsymbol{\sigma}^{i+1} = \boldsymbol{\sigma}^{i} + \left(\mathbf{H}_{e}^{i+1} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_{e}^{i+1} - \mathbf{H}_{e}^{i} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_{e}^{i}\right)$$
(3.23)

On peut développer davantage cette équation pour faire apparaître les différents mécanismes de déformations :

$$\boldsymbol{\sigma}^{i+1} = \boldsymbol{\sigma}^{i} + \begin{pmatrix} \mathbf{H}_{e}^{i+1} \cdot \left(\boldsymbol{\varepsilon}^{i+1} - \boldsymbol{\varepsilon}_{p}^{i+1} - \boldsymbol{\varepsilon}_{th}^{i+1} - \boldsymbol{\varepsilon}_{ch}^{i+1}\right) \\ -\mathbf{H}_{e}^{i} \cdot \left(\boldsymbol{\varepsilon}^{i} - \boldsymbol{\varepsilon}_{p}^{i} - \boldsymbol{\varepsilon}_{th}^{i} - \boldsymbol{\varepsilon}_{ch}^{i}\right) \end{pmatrix}$$
(3.24)

La dernière section de l'équation représente directement la contrainte à l'itération *i*. Simplifions alors l'équation :

$$\boldsymbol{\sigma}^{i+1} = \mathbf{H}_{e}^{i+1} \cdot \left(\boldsymbol{\varepsilon}^{i+1} - \boldsymbol{\varepsilon}_{p}^{i+1} - \boldsymbol{\varepsilon}_{th}^{i+1} - \boldsymbol{\varepsilon}_{ch}^{i+1}\right)$$
(3.25)

Il faut alors déterminer la valeur de la déformation plastique à l'itération i + 1. Celle-ci est donnée par son équation incrémentale :

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{p}^{i+1} = \boldsymbol{\varepsilon}_{p}^{i} + \Delta \boldsymbol{\varepsilon}_{p}^{i+1} \tag{3.26}$$

Si l'on insère l'équation 3.26 dans l'équation 3.25 et que l'on réarrange les termes, le calcul de la contrainte devient :

$$\boldsymbol{\sigma}^{i+\Delta i} = \mathbf{H}_{e}^{i+1} \cdot \left(\boldsymbol{\varepsilon}^{i+1} - \boldsymbol{\varepsilon}_{p}^{i} - \boldsymbol{\varepsilon}_{th}^{i+1} - \boldsymbol{\varepsilon}_{ch}^{i+1}\right) - \mathbf{H}_{e}^{i+1}\left(\Delta\boldsymbol{\varepsilon}_{p}^{i+1}\right)$$
(3.27)

Dans cette équation, le premier terme de droite représente la prédiction élastique, telle que présentée à l'équation 3.22. Par souci de clarté, introduisons une notation pour décrire les différents états de contrainte, basée sur l'ouvrage de Crisfield [**25**]. Ainsi, l'état de contrainte calculé au temps précédent est noté A, l'état de contrainte relatif à la prédiction élastique est noté B et l'état de contrainte corrigé convergé est noté C. Ces trois états de contrainte sont montrés sur la figure 3-1.



Figure 3-1: Localisation des différents états de contraintes

Ainsi, le calcul de la contrainte est exprimé sous la forme :

$$\boldsymbol{\sigma}_{C} = \boldsymbol{\sigma}_{B} - \mathbf{H}_{e}(\Delta \boldsymbol{\varepsilon}_{p}) \tag{3.28}$$

Dans cette équation, l'itération a été omise par souci de simplification, étant donné que toutes les valeurs sont évaluées en i + 1. Il faut cependant être en mesure de calculer l'incrément de déformation plastique afin de pouvoir déterminer la valeur de la contrainte. Remplaçons ainsi l'incrément de déformation par la règle d'écoulement (équation A.11). On obtient :

$$\boldsymbol{\sigma}_{C} = \boldsymbol{\sigma}_{B} - \mathbf{H}_{e} \cdot \Delta \lambda \cdot \frac{\partial Q}{\partial \boldsymbol{\sigma}}$$
(3.29)

où $\Delta\lambda$ est l'incrément du multiplicateur plastique dont la valeur est actuellement inconnue à l'incrément de temps actuel.

Le calcul de l'incrément du multiplicateur plastique doit se faire en accord avec les équations de la loi de comportement. Développons la valeur du potentiel de charge, quantité centrale du modèle de comportement utilisé, au point élastoplastique à partir de sa valeur à la prédiction élastique, et ce, à l'aide d'un développement en série de Taylor au premier ordre. L'utilisation d'un développement en série de Taylor du premier ordre permet d'obtenir une approximation linéaire de la solution, ce qui peut cependant diminuer la précision du résultat lorsque l'équation est non-linéaire.

$$F_{C} = F_{B} + \frac{\partial F}{\partial \sigma} : \Delta \sigma_{BC} + \frac{\partial F}{\partial \epsilon_{p}} \Delta \epsilon_{p} = 0$$
(3.30)

Dans cette équation, l'itération a également été omise par souci de simplification, étant donné que toutes les valeurs sont évaluées en i + 1. L'incrément de déformation plastique équivalente est calculé à l'aide de la règle d'écoulement (équation A.11) et est défini en fonction des deux différents mécanismes de la loi de comportement, soit l'écrouissage et l'adoucissement. Son équation prend la forme:



où h_p est le module plastique équivalent et est défini tel que :

$$h_{p} = \begin{cases} -\frac{\partial F}{\partial k} \frac{\partial k}{\partial \epsilon_{p}} \left\| \frac{\partial Q}{\partial \sigma} \right\| & \text{si } k > 1 \\ -\frac{\partial F}{\partial c} \frac{\partial c}{\partial w} \frac{\partial w}{\partial \epsilon_{f}} \left\| \langle \frac{\partial Q}{\partial \sigma} \rangle \right\| & \text{si } k = 1 \end{cases}$$
(3.33)

Étant donné que la série de Taylor est construite à partir de la prédiction élastique (B) vers la correction plastique (C), l'incrément de contrainte présent dans l'équation 3.32 est celui nécessaire pour passer entre ces deux points. Selon l'équation 3.29, l'incrément de contrainte est donc :

$$\Delta \boldsymbol{\sigma}_{BC} = -\mathbf{H}_{e} \cdot \Delta \lambda \cdot \frac{\partial Q}{\partial \boldsymbol{\sigma}}$$
(3.34)

En remplaçant cet incrément de contrainte dans l'équation 3.31, on obtient :

$$F_{C} = F_{B} - \frac{\partial F}{\partial \sigma} : \left(\Delta \lambda \cdot \mathbf{H}_{e} : \frac{\partial Q}{\partial \sigma} \right) - h_{p} \Delta \lambda = 0$$
(3.35)

En isolant l'incrément du multiplicateur plastique, on obtient:

$$\Delta \lambda = \frac{F_B}{\frac{\partial F}{\partial \sigma} : \mathbf{H}_e : \frac{\partial Q}{\partial \sigma} + h_p}$$
(3.36)

Comme mentionnée précédemment, l'obtention de l'équation de l'incrément du multiplicateur plastique a été effectuée avec l'utilisation d'une approximation par série de Taylor d'ordre 1. Cependant, l'équation du multiplicateur plastique est non-linéaire de par sa dépendance à l'état de contrainte. Son évaluation par linéarisation n'est donc qu'une approximation et doit plutôt faire l'objet d'un processus itératif. L'évaluation de la contrainte et du multiplicateur plastique via ces équations donnent ainsi une première évaluation de leurs valeurs qui devra par la suite faire l'objet d'un processus itératif.

Étape 3 : Processus itératif d'Euler implicite

Pour l'évaluation du multiplicateur plastique, un algorithme d'Euler implicite a été utilisé, étant donné sa bonne précision de calcul ainsi que sa vitesse de convergence. Il est d'abord nécessaire de poser les hypothèses relatives au calcul du multiplicateur plastique. Ainsi :

- La prédiction élastique mène à un état de contrainte à l'extérieur de la surface de charge (F > 0);
- 2. Le critère de charge *F* au point élastoplastique prédit doit être nul;

- La direction de l'écoulement plastique utilisée pour obtenir l'état de contrainte convergé doit être égal à la direction de l'écoulement plastique à ce même état de contrainte;
- Le passage de la prédiction élastique (point *B*) à l'état de contrainte corrigé convergé (point *C*) est purement plastique.

Une fonction résidu est d'abord définie. Celle-ci permet de quantifier l'écart entre deux états de contrainte prédits. La fonction utilisée pour définir les deux potentiels étant continue, la minimisation du résidu implique directement que les directions d'écoulement plastique utilisées seront bonnes. La fonction résidu φ est définie comme étant :

$$\boldsymbol{\varphi}^{j+1} = \Delta \boldsymbol{\sigma}^j - \Delta \boldsymbol{\sigma}^{j+1} = 0 \tag{3.37}$$

On remplace l'incrément de contrainte par son équation, telle que définie à l'équation 3.34 :

$$\boldsymbol{\varphi}^{j+1} = \left(-\Delta\lambda \cdot \boldsymbol{H}_e: \frac{\partial Q}{\partial\boldsymbol{\sigma}}\right)\Big|_{j+1} - \left(\boldsymbol{\sigma}_B - \boldsymbol{\sigma}_C^{j+1}\right) = 0$$
(3.38)

La valeur du résidu à l'itération j + 1 doit être réduite à 0 pour que la contrainte soit considérée comme convergée. Afin d'approximer sa valeur, on peut faire un développement en série de Taylor sur le résidu en sachant que la contrainte au point *B* est une valeur connue. Ainsi, pour un résidu à l'itération j + 1, on a :

$$\boldsymbol{\varphi}^{j+1} = \boldsymbol{\varphi}^{j} + \left(\frac{\partial \varphi}{\partial \boldsymbol{\sigma}} \cdot \Delta \boldsymbol{\sigma} + \frac{\partial \varphi}{\partial \Delta \lambda} \cdot \Delta (\Delta \lambda)\right) \bigg|_{j+1}$$
(3.39)

On peut développer davantage l'expression en dérivant les diverses expressions :



$$\boldsymbol{\varphi}^{j+1} = \boldsymbol{\varphi}^{j} + \left(\Delta \boldsymbol{\sigma} + \Delta \lambda \cdot \mathbf{H}_{e} : \frac{d^{2}Q}{d\boldsymbol{\sigma}^{2}} \cdot \Delta \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{H}_{e} : \frac{dQ}{d\boldsymbol{\sigma}} \cdot \Delta(\Delta \lambda) \right) \bigg|_{j+1}$$
(3.40)

Si l'on isole la valeur de l'incrément de contrainte, tout en posant la valeur du résidu à l'itération suivante (φ^{j+1}) comme étant nulle, on obtient :

$$\Delta \boldsymbol{\sigma} = \left[\mathbf{I} + \Delta \lambda \cdot \mathbf{H}_e : \frac{d^2 Q}{d\boldsymbol{\sigma}^2} \right]^{-1} \left(\boldsymbol{\varphi}_j + \Delta (\Delta \lambda) \cdot \mathbf{H}_e : \frac{dQ}{d\boldsymbol{\sigma}} \right)$$
(3.41)

où toutes les valeurs sont évaluées à l'itération j + 1, sauf le résidu. On doit donc connaître la valeur de l'incrément de $\Delta\lambda$ en sachant que :

$$\Delta \lambda^{j+1} = \Delta \lambda^j + \Delta(\Delta \lambda) \tag{3.42}$$

Afin de déterminer l'équation du multiplicateur plastique, on effectue le développement en série de Taylor de premier ordre du critère de charge F pour passer de l'itération j à l'itération j + 1, ce qui donne :

$$F_{C}^{j+1} = F_{C}^{j} + \left(\frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{\sigma}} : \Delta \boldsymbol{\sigma} + \frac{\partial F}{\partial \epsilon_{p}} \cdot \Delta \epsilon_{p}\right)\Big|_{j+1} = 0$$
(3.43)

On peut remplacer la deuxième dérivée partielle de l'équation 3.43 par le module plastique équivalent h_p , tel que défini à l'équation 3.33. L'équation devient :

$$F_{C}^{j+1} = F_{C}^{j} + \left(\frac{\partial F}{\partial \sigma} : \Delta \sigma - h_{p} \cdot \Delta(\Delta \lambda)\right)\Big|_{j+1} = 0$$
(3.44)

En remplaçant $\Delta \sigma$ par la relation développée en 3.41, et en posant $F_c^{j+1} = 0$, on obtient :

$$F_{C}^{j} + \frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{\sigma}} \left[\mathbf{I} + \Delta \lambda \cdot \mathbf{H}_{e} : \frac{\partial^{2} Q}{\partial \boldsymbol{\sigma}^{2}} \right]^{-1} \left(\boldsymbol{\varphi}^{j} + \Delta (\Delta \lambda) \cdot \mathbf{H}_{e} : \frac{\partial Q}{\partial \boldsymbol{\sigma}} \right) - h_{p} \cdot \Delta (\Delta \lambda) = 0$$
(3.45)

où toutes les quantités sont évaluées à l'itération j + 1, sauf indication contraire. L'équation permettant le calcul de l'incrément du multiplicateur plastique est identifiée en isolant sa valeur dans l'équation précédente :

$$\Delta(\Delta\lambda) = \frac{F_c^j - \frac{\partial F}{\partial \sigma} : \mathbf{X} : \boldsymbol{\varphi}^j}{\frac{\partial F}{\partial \sigma} : \mathbf{X} : \mathbf{H}_e : \frac{dQ}{d\sigma} + h_p}$$
(3.46)

avec :

$$\mathbf{X} = \mathbf{H}_e \left[\mathbf{I} + \Delta \lambda \cdot \mathbf{H}_e : \frac{d^2 Q}{d\sigma^2} \right]^{-1}$$
(3.47)

Les équations 3.41 et 3.47 doivent être résolues itérativement jusqu'à l'obtention d'un résidu (3.40) respectant une certaine tolérance ainsi qu'un potentiel de charge nul.

3.2.4 Calcul de la matrice tangente élastoplastique

La matrice tangente élastoplastique est le tenseur de 4^{ème} ordre permettant de relier le taux de déformation mécanique à celui de la contrainte. Ce tenseur est utilisé au niveau de l'équilibre global du système, tel que développé à l'équation 3.13. Afin de conserver le niveau de convergence quadratique offert par la méthode de Newton-Raphson, il est nécessaire de développer une relation pour la matrice tangente élastoplastique qui soit consistante avec l'écriture proposée pour la contrainte. Cela implique que l'ensemble des quantités nécessaire pour le calcul de cette matrice soit évalué au dernier état de contrainte connu, soit celui de la dernière itération de calcul.

La détermination de cette matrice tangente consistante se base sur la même approche que la section précédente. Ainsi, lorsque la contrainte est convergée, celle-ci est définie par l'équation 3.29. On développe d'abord le terme de la prédiction élastique :

$$\boldsymbol{\sigma}_{C} = \mathbf{H}_{e} \cdot (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_{th} - \boldsymbol{\varepsilon}_{ch}) - \mathbf{H}_{e} \cdot \Delta \lambda \cdot \frac{\partial Q}{\partial \boldsymbol{\sigma}}$$
(3.48)

Afin d'obtenir le taux de contrainte, on dérivée cette dernière équation tel que :

$$\dot{\boldsymbol{\sigma}}_{C} = \mathbf{H}_{e} \cdot \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{m} - \dot{\boldsymbol{\lambda}} \cdot \mathbf{H}_{e} \cdot \frac{\partial Q}{\partial \boldsymbol{\sigma}} - \mathbf{H}_{e} \cdot \Delta \boldsymbol{\lambda} \cdot \frac{\partial^{2} Q}{\partial \boldsymbol{\sigma}^{2}} \cdot \dot{\boldsymbol{\sigma}}$$
(3.49)

On réarrange les termes pour obtenir l'équation du taux de contrainte tel que :

$$\dot{\boldsymbol{\sigma}}_{c} = \mathbf{X} \left(\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{m} - \dot{\boldsymbol{\lambda}} \cdot \frac{\partial Q}{\partial \boldsymbol{\sigma}} \right)$$
(3.50)

avec **X**, le tenseur d'ordre 4 défini à l'équation 3.47 et où l'ensemble des quantités sont évaluées à l'état de contrainte convergé (C). L'état de contrainte convergé devant demeurer sur la surface de charge, le taux de changement du potentiel de charge à l'état de contrainte convergé doit être nul. On définit ce taux à l'aide d'une série de Taylor d'ordre 1 :

$$\dot{F}_{C} = \frac{\partial F}{\partial \sigma} : \dot{\sigma} + \frac{\partial F}{\partial \varepsilon_{p}} : \dot{\varepsilon}_{p} = 0$$
(3.51)

En utilisant le module plastique équivalent, on obtient :

$$\dot{F}_{C} = \frac{\partial F}{\partial \sigma} : \dot{\sigma} - h_{p} \dot{\lambda} = 0$$
(3.52)

En isolant la valeur du taux du multiplicateur plastique, on obtient :

$$\dot{\lambda} = \frac{\frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{\sigma}} : \mathbf{X} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_m}{\frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{\sigma}} : \mathbf{X} : \frac{\partial Q}{\partial \boldsymbol{\sigma}} + h_p} = 0$$
(3.53)

Cette dernière relation est utilisée afin de remplacer le taux du multiplicateur plastique dans l'équation 3.50. En réarrangent les termes, la matrice tangente élastoplastique devient :

$$\mathbf{H}_{ep} = \frac{\dot{\boldsymbol{\sigma}}}{\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{m}} = \mathbf{X} - \frac{\left(\mathbf{X}:\frac{\partial Q}{\partial \boldsymbol{\sigma}}\right):\left(\frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{\sigma}}:\mathbf{X}\right)}{\frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{\sigma}}:\mathbf{X}:\frac{\partial Q}{\partial \boldsymbol{\sigma}} + h_{p}}$$
(3.54)

Cette matrice utilise les mêmes approximations que l'algorithme de calcul présenté à la section suivante.

3.2.5 Calcul des gradients et du Hessien des différents potentiels

L'obtention des contraintes et de la matrice tangente consistante en $t + \Delta t$ nécessite le calcul des normales de la surface de charge et du potentiel d'écoulement plastique. Le calcul de leurs relations est effectué en utilisant la méthode de dérivation en chaîne. Puisque les deux potentiels sont fonction des coordonnées de Haigh Westergaard, qui sont directement fonction de l'état de contrainte, les potentiels doivent être dérivés par rapport à ce système de coordonnées. Cependant, en examinant les équations des deux potentiels, on remarque que les paramètres d'écrouissage et d'adoucissement sont eux aussi fonction de l'état de contrainte. Il est donc nécessaire d'en prendre compte lors de la dérivation. Les équations servant à calculer ces deux gradients sont ainsi définies par :

$$\frac{\partial F}{\partial \sigma} = \frac{\partial F}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial \sigma} + \frac{\partial F}{\partial \rho} \frac{\partial \rho}{\partial \sigma} + \frac{\partial F}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial \sigma} + \left[\frac{\partial F}{\partial k} \frac{\partial k}{\partial \sigma} + \frac{\partial F}{\partial c} \frac{\partial c}{\partial \sigma} \right]$$
(3.55)

$$\frac{\partial Q}{\partial \sigma} = \frac{\partial Q}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial \sigma} + \frac{\partial Q}{\partial \rho} \frac{\partial \rho}{\partial \sigma} + \left[\frac{\partial Q}{\partial k} \frac{\partial k}{\partial \sigma} + \frac{\partial Q}{\partial c} \frac{\partial c}{\partial \sigma} \right]$$
(3.56)

et où les composantes entre crochets sont les dérivées partielles ajoutées par rapport au développement de D'Amours [7]. L'ensemble des détails relatifs à l'évaluation des composantes des équations 3.48 et 3.49 se retrouve en Annexe B.

Le calcul du tenseur **X** demande également la connaissance d'une nouvelle quantité : le hessien du potentiel d'écoulement plastique ($\partial^2 Q / \partial \sigma^2$). Tout comme les deux gradients précédents, la méthode de dérivation en chaîne est utilisée, en accord avec les développements de D'Amours **[7]** :

$$\frac{\partial^2 Q}{\partial \sigma^2} = \frac{\partial \xi}{\partial \sigma} \left(\frac{\partial^2 Q}{\partial \xi^2} \frac{\partial \xi}{\partial \sigma} + \frac{\partial^2 Q}{\partial \rho \partial \xi} \frac{\partial \rho}{\partial \sigma} \right) + \left(\frac{\partial Q}{\partial \xi} \frac{\partial^2 \xi}{\partial \sigma^2} \right) + \frac{\partial \rho}{\partial \sigma} \left(\frac{\partial^2 Q}{\partial \rho \partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial \sigma} + \frac{\partial^2 Q}{\partial \rho^2} \frac{\partial \rho}{\partial \sigma} \right) + \left(\frac{\partial Q}{\partial \rho} \frac{\partial^2 \rho}{\partial \sigma^2} \right)$$
(3.57)

L'ensemble des équations analytiques des différentes dérivées partielles nécessaires à ce calcul est présenté en Annexe B. Contrairement aux équations utilisées pour évaluer les normales des potentiels, les dérivées partielles fonction des paramètres d'écrouissage et d'adoucissement n'ont pas été ajoutés dans cette équation. Étant donné que le développement et l'implémentation de telles équations analytiques demande un effort considérable tant au niveau mathématique qu'informatique, il est légitime de d'abord se demander si la prise en compte de ces composantes d'écrouissage/adoucissement peuvent influencer la précision du calcul ainsi que la vitesse de convergence du modèle. Pour ce faire, une comparaison numérique des résultats du hessien a été effectuée en comparant l'utilisation de l'équation 3.58 avec l'utilisation d'une technique numérique pour la dérivation du hessien. Les résultats présentent un écart négligeable, et ce, pour différentes conditions de plastification. Étant donné ces observations, l'équation 3.58 a donc été conservée telle que développée par D'Amours [7], soit sans les composantes fonctions de l'écrouissage et de l'adoucissement.

3.2.6 Algorithme de calcul

Afin de permettre l'implémentation de la loi de comportement via l'interface UserMat, le développement d'un algorithme de calcul clair est nécessaire. La figure 3-2 montre ce processus de calcul itératif d'un état de contrainte de façon plus visuelle.



Figure 3-2: Représentation graphique du processus itératif

Conséquent de l'existence d'un écoulement plastique, une déformation plastique sera générée, et ce, selon la direction de la normale du potentiel d'écoulement plastique à cet endroit. Un premier point, σ_{C_0} , est alors identifié sur la surface de charge non modifiée. Par la suite, la surface de charge est ajustée en fonction de l'écoulement plastique généré et la direction de l'écoulement plastique est recalculée, mais cette fois-ci, à partir du de l'état de contrainte en C_0 . Ainsi, chaque nouvelle itération de calcul de la contrainte est effectuée à partir de l'évaluation de la normale et de l'état de la surface de charge précédemment calculée. Additionnellement, afin d'obtenir une meilleure stabilité numérique du problème, le calcul de la nouvelle contrainte itérative a été effectué à partir de l'expression 3.29 au lieu de l'expression 3.41, contrairement aux développements de d'Amours [7]. On utilisera alors la valeur actualisée de l'incrément du multiplicateur plastique plutôt que sa variation.

L'algorithme 1 présente les étapes nécessaires pour le calcul de la contrainte ainsi que les équations associées.

Calcul de la matrice tangente élastique $\{H_e\}$	(3.16)
Calcul de la contrainte au point élastique B $\{ \pmb{\sigma}_B \}$	(3.21)
$IF\left[F > 0\right]$	
Calcul des tangentes des potentiels { $dF/d\sigma$, $dQ/d\sigma$ }	(3.56)(3.5
Calcul du module plastique { h_p }	(3.33)
Calcul initial du multiplicateur plastique $\{\Delta\lambda_0\}$	(3.36)
Prédiction initiale de la contrainte au point C $\{\sigma_{\mathcal{C}_0}\}$	(3.29)
Mise à jour des mécanismes de plastification $\{k, c\}$	(2.10)(2.2
Mise à jour de la déformation plastique équivalente $\{\epsilon_p\}$	(3.31)
Mise à jour du potentiel de charge au point C { F_{C_j} }	(2.23)
WHILE $[(F_C \neq 0) \& (\phi > 0)]$	
Calcul des tangentes { $dF/d\sigma$, $dQ/d\sigma$ }	(3.56)(3.5
Calcul du hessien { $d^2Q/d\sigma^2$ }	(3.58)
Calcul du module plastique { h_p }	(3.33)
Calcul du résidu $\{ oldsymbol{arphi} \}$	(3.38)
Correction de l'incrément du multiplicateur plastique { $\Delta(\Delta\lambda)$ }	(3.46)
Mise à jour des mécanismes de plastification $\{k, c\}$	(2.10)(2.2
Mise à jour de la déformation plastique équivalente $\{\epsilon_p\}$	(3.31)
Mise à jour du potentiel de charge $\{F_{C_j}\}$	(2.23)
END	
Calcul de la matrice tangente élastoplastique $\{\mathbf{H}_{ep}\}$	(3.55)

80

3.3 Résolution du problème thermochimique

L'intégration de la loi de cuisson du matériau doit permettre de calculer son état réactif à un certain temps. Cet aspect est important afin de définir l'évolution des propriétés du matériau à différents niveaux de cuisson. La cuisson du matériau est calculée à l'aide de la loi d'Arrhenius (équation 2.20). Cette équation doit être intégrée dans le temps afin de calculer la valeur de l'indice de cuisson au temps $t + \Delta t$. On remarque cependant que l'affinité chimique est fonction de l'indice de cuisson et doit être évaluée pour résoudre l'équation. Deux solutions s'offrent à nous :

- 1. Évaluer l'affinité chimique au temps t (schéma explicite);
- 2. Évaluer l'affinité chimique au temps $t + \Delta t$ (schéma implicite).

3.3.1 Schéma explicite

Définissons d'abord le premier cas présenté, qui représente un schéma d'Euler explicite. Celuici est défini de façon générale comme étant :

$$\dot{u}(x_t) = \frac{x_{t+\Delta t} - x_t}{\Delta t}$$
(3.58)

Ainsi, l'équation d'Arrhenius est évaluée au temps t :

$$\frac{x_{t+\Delta t} - x_t}{\Delta t} = A_x(x_t) \ e^{-\left(\frac{E_a}{RT}\right)}$$
(3.59)

On peut alors isoler la valeur de l'indice de cuisson au temps $t + \Delta t$:

$$x_{t+\Delta t} = x_t + \Delta t A_x(x_t) e^{-\left(\frac{E_a}{RT}\right)}$$
(3.60)

Ce schéma d'intégration possède une grande qualité : sa rapidité de calcul. En effet, aucun processus itératif n'est nécessaire puisque l'affinité chimique peut être évaluée explicitement. Cependant, la précision du résultat en est directement affectée. En effet, lorsque le changement de niveau de cuisson entre deux pas de temps est grand, la valeur calculée de l'affinité chimique sera fortement influencée puisqu'elle devrait être calculée au pas de temps actuel. C'est pourquoi cette méthode d'intégration n'est pas conseillée à moins d'utiliser un incrément de temps qui soit très petit en rapport à l'évolution thermochimique du matériau, situation qui demeure tout de même applicable dans le cadre de la cuisson de la pâte en raison de la grande rapidité de certaines réactions dans la pâte.

3.3.2 Schéma implicite

La deuxième solution présentée est celle d'évaluer l'affinité chimique au temps $t + \Delta t$. Pour ce faire, il est donc nécessaire de connaître le niveau de cuisson prédit afin d'évaluer l'affinité chimique, ce qui est impossible. L'utilisation d'une méthode itérative permettrait de résoudre ce problème.

Le schéma d'intégration implicite spécifie que l'affinité chimique est évaluée avec la valeur d'indice de cuisson du pas de temps actuel. Puisque cette valeur n'est pas connue, on doit donc utiliser quelques astuces mathématiques afin d'approximer sa valeur au temps $t + \Delta t$. Si l'on développe l'équation d'Arrhenius, on a :

$$\frac{x_{t+\Delta t} - x_t}{\Delta t} = A_x(x_{t+\Delta t}) \ e^{-\left(\frac{E_a}{RT}\right)}$$
(3.61)



On peut réarranger l'équation 3.62 tel que:

$$x_{t+\Delta t} = x_t + \Delta t A_x(x_{t+\Delta t}) e^{-\left(\frac{E_a}{RT}\right)}$$
(3.62)

Afin de pouvoir résoudre l'équation 3.63, on l'exprime sous la forme d'un résidu (φ) à minimiser, tel que :

$$\varphi = x_{t+\Delta t} - x_t - \Delta t A_x(x_{t+\Delta t}) e^{-\left(\frac{E_a}{RT}\right)}$$
(3.63)

Sachant qu'à une certaine itération *i*, le résidu est non nul, on exige que :

$$\varphi_{t+\Delta t}^{i+1} = \varphi_{t+\Delta t}^{i} + \Delta \varphi_{t+\Delta t}^{i+1} \cong 0$$
(3.64)

On peut développer davantage cette équation en identifiant des relations pour ces deux valeurs. Le résidu à l'itération i est alors directement calculé à partir de la définition du résidu :

$$\varphi_{t+\Delta t}^{i} = x_{t+\Delta t}^{i} - x_{t} - \Delta t A_{x} \left(x_{t+\Delta t}^{i} \right) e^{-\left(\frac{E_{a}}{RT}\right)}$$
(3.65)

Pour l'incrément, on doit différentier cette même équation :

$$\Delta \varphi_{t+\Delta t}^{i} = \frac{\partial \varphi_{t+\Delta t}^{i}}{\partial x} \Delta x = \left(1 - \Delta t \ e^{-\left(\frac{E_{a}}{RT}\right)} \ \frac{\partial A_{x}}{\partial x}\right) \Delta x \tag{3.66}$$

On peut alors remplacer la valeur du résidu et de son incrément dans l'équation 3.65:

$$\varphi_{t+\Delta t}^{i+1} = x_{t+\Delta t}^{i} - x_t - \Delta t A_x \left(x_{t+\Delta t}^{i} \right) e^{-\left(\frac{E_a}{RT}\right)} + \left(1 - \Delta t e^{-\left(\frac{E_a}{RT}\right)} \frac{\partial A_x}{\partial x} \right) \Delta x \approx 0$$
(3.67)

Finalement, on obtient la valeur de l'incrément de cuisson à l'instant $t + \Delta t$, ce qui permet de calculer sa valeur finale telle que :

$$\Delta x = \frac{x_{t+\Delta t}^{i} - x_{t} - \Delta t A_{x}(x_{t+\Delta t}^{i}) e^{-\left(\frac{E_{a}}{RT}\right)}}{\left(1 - \Delta t e^{-\left(\frac{E_{a}}{RT}\right)} \frac{\partial A_{x}}{\partial x}\right)}$$
(3.68)

....

Cette méthode d'intégration est inconditionnellement stable et permet d'obtenir un résultat beaucoup plus précis qu'un schéma explicite puisque l'affinité chimique est évaluée au bon état de cuisson. Cependant, le processus itératif nécessaire à son calcul augmente de façon significative le temps de calcul nécessaire à l'obtention de la solution. De plus, il devient nécessaire de connaître la valeur de la dérivée de l'affinité chimique, ce qui complexifie son implémentation.

Un schéma implicite différent peut être utilisé afin de contourner le besoin de connaître la valeur de la dérivée de l'affinité chimique. D'ailleurs, D'Amours [7] avait développé une méthode d'intégration utilisant la sécante de la vitesse de réaction pour calculer la valeur de l'indice de cuisson, permettant ainsi d'approximer la valeur numérique de la dérivée de l'affinité chimique. Cette méthode ne sera cependant pas discutée dans le présent travail.

À partir des équations développées, l'algorithme de calcul pour le niveau de cuisson est défini. Celui-ci est présenté à l'algorithme 2.

Algorithme 2: Calcul de la prédiction élastique

WHILE [$\varphi > tol$]

EN	DIF	(0.00)
	Calcul du résidu { ω }	(3.68)
	Calcul de l'incrément de l'indice de cuisson $\{\Delta x\}$	(3.69)
	Évaluation de la dérivée partielle de l'affinité chimique $\{\partial A_x/\partial x\}$	
	Évaluation de l'affinité chimique $\{A_x\}$	

3.4 MISE EN ŒUVRE INFORMATIQUE

Conséquent des exigences industrielles liées au projet, il a été déterminé que la loi de comportement développé devrait être implémentée à l'intérieur d'un outil numérique déjà disponible chez RTA. Ainsi, le logiciel ANSYS[®] a été utilisé afin d'atteindre nos objectifs.

ANSYS[®] est un logiciel commercial d'éléments finis créé en 1970 aux États-Unis. Largement utilisé dans le domaine du génie mécanique, celui-ci permet d'effectuer des simulations numériques multiphysiques grâce à la méthode des éléments finis. Le promoteur du projet utilisant depuis plusieurs années ce logiciel, il sera ainsi aisé pour leur personnel d'apprendre à utiliser l'outil numérique développé.

3.4.1 Présentation de l'interface avec ANSYS[®] (UserMat)

En guise d'option de personnalisation, ANSYS® possède une interface utilisateur pour les lois de comportement, nommée UserMat, permettant l'implémentation de modèle de matériaux différents de ceux présents dans le logiciel. Ladite interface a originalement été programmée en FORTRAN 77, un langage procédural datant des années 50 et par la suite enrichi jusqu'en 1977, qui reste toutefois très performant au niveau des opérations mathématiques et encore largement utilisé dans les logiciels d'éléments finis. Cette interface a été utilisée dans le cadre du projet afin d'y implémenter la loi élastoplastique de la pâte monolithique présentée au Chapitre 2. Additionnellement, de légères modifications ont été apportées aux outils de compilation afin de permettre l'utilisation du Fortran 90, une évolution directe du FORTRAN 77 qui permet l'utilisation d'un format plus libre pour l'écriture du code.

La routine UserMat permet d'utiliser une loi de comportement différente de celles déjà disponibles à l'intérieur du logiciel ANSYS[®]. Cette routine est alors appelée à chaque fois que le logiciel a besoin de calculer la contrainte ainsi que la matrice tangente mécanique et ce, conséquent d'un nouvel incrément de déformation, sur la base d'un point d'intégration.

Afin de permettre la communication des informations avec le logiciel ANSYS[®], la routine UserMat possède une interface spécifique comprenant un nombre élevé de paramètres. Ceux-ci se divisent en trois catégories. Tout d'abord, il y a les paramètres d'entrée, qui fournissent des informations utiles au calcul de la contrainte. Une liste de ces variables est présentée au tableau 3-1.

Nom de variable	Type ¹	Description		
matId	sc - int	Numéro d'identification du matériau		
alomTd	sc - int	Numéro d'identification de l'élément		
	SC - IIIt	Numéro d'identification du domaine du point d'intégration		
KDOMITHUPU	SC - IIIL	Numero a identification du domaine du point a integration		
kLayer	sc - int	Numéro d'identification de la couche		
kSectPt	sc - int	Numéro d'identification de la section du point d'intégration		
ldstep	sc - int	Numéro d'identification du pas de temps		
Isubst	sc - int	Numéro d'identification du sous pas de temps		
nDirect	sc - int	Nombre de contraintes normales		
nShear	sc - int	Nombre de contraintes en cisaillement		
ncomp	sc - int	Nombre total de composantes du vecteur de contraintes		
nstatev	sc - int	Grandeur du vecteur nstatev		
nprop	sc - int	Grandeur du vecteur prop		
Temp	sc - dp	Température au temps t		
dTemp	sc - dp	Incrément de température au temps t+dt		
Time	sc - dp	Temps t		
dTime	sc - dp	Incrément de temps dt		
Strain	ar(6) - dp	Déformation totale – déformation thermique au temps t		
dStrain	ar(6) - dp	Incrément de déformation totale – thermique au temps t+dt		
coords	ar(3) - dp	Coordonnées du point d'intégration		
prop	ar(*) - dp	Vecteur contenant les propriétés du matériau telles que		
		fournies par l'utilisateur		

Tableau 3-1: principaux paramètres d'entrée de la routine UserMat

¹ sc = scalaire ar = array int = Integer dp = Double Precision

Les paramètres de la deuxième catégorie représentent les informations dont ANSYS® veut recevoir des valeurs actualisées. Ainsi, leur valeur au temps t est fournie à l'appel de la routine et celles-ci doivent être actualisées à leur valeur au temps $t + \Delta t$ telle que calculée par la loi de comportement. Elles sont présentées au tableau 3-2.

Nom de variable	Туре	Description		
stress	ar(6) - dp	Contrainte au point d'intégration		
statev	ar(*) - dp	Variables d'état (spécifique à chaque point d'intégration)		
sedEl	sc - dp	Travail élastique		
sedP1	sc - dp	Travail plastique		
epseq	sc - dp	Déformation plastique équivalente		
tsstif	ar(2) - dp	Rigidité de cisaillement		
Var?	sc - dp	Variables de développement		

Tableau 3-2: principaux paramètres d'entrée/sortie de la routine UserMat

Finalement, les paramètres de sortie, dont les valeurs doivent être données à la fin de la simulation, sont des paramètres dont la valeur au temps t n'est pas importante et dont la routine n'a pas besoin de valeurs initiales. Ils sont présentés au tableau 3-3.

rabieau 5-5. principaux parametres de sortie de la routine Oseriviat					
Nom de variable	Туре	Description			
keycut	sc - int	Commande de bissection du chargement de la simulation			
dsdePl	ar - dp	Matrice tangente du matériau			
epsZZ	dp - sc	Déformation en z, pour les états de contrainte plans			

T - I- I 2 2. ۰. vouting lleas Mat

3.4.2 Conception structurée de la loi de comportement

La routine UserMat développée dans de ce projet a été conçue en utilisant un paradigme de programmation de type « procédural » dont le Fortran sait tirer avantage. Dans cette approche, le programme est structuré en diverses procédures de façon à assurer une certaine clarté du code tout en évitant les répétitions de texte. Cela amène un développement des différents éléments du programme de façon à diviser chacune des opérations complexes dans des procédures séparées. De plus, étant donné que la routine UserMat est appelée à chaque fois qu'ANSYS® veut connaître la valeur de l'état de contrainte à un point d'intégration, les opérations relatives à l'importation des paramètres doivent être effectuées à chaque appel, ces informations étant supprimées à chaque fois que la routine UserMat redonne la main à ANSYS[®].

Ainsi, le premier groupe de procédures permet d'identifier la nature du matériau modélisé et l'activation des parties du code qui seront utilisées pour le calcul de l'état de contrainte au point d'intégration. Par la suite, un second groupe de procédures permet la localisation et l'évaluation des propriétés du matériau. C'est à ce moment que le niveau de cuisson sera calculé, si l'utilisateur fournis des paramètres fonction de celui-ci. La troisième section du code réunit les lois de comportements, qui sont à leur tour divisées. La figure 3-3 montre l'algorithme général de la routine UserMat utilisant ces différentes sections du code.



Figure 3-3: Algorithme général de la routine UserMat

Détection de la loi de comportement

La loi de comportement élastoplastique de la pâte, de par ses différentes composantes, permet de représenter plusieurs matériaux différents. Tout d'abord, la loi de Hooke étant utilisée pour la prédiction élastique, il est possible de représenter des matériaux élastiques standards. En n'utilisant que la portion élastoplastique du modèle de comportement, on peut ainsi reproduire le comportement de différents matériaux à base de carbone. Enfin, en utilisant entièrement la loi de comportement, la pâte monolithique peut être modélisée, en accord avec les objectifs du projet.

Ainsi, le calcul effectué par la routine UserMat doit utiliser la loi de comportement appropriée, et ce, en fonction de ce que l'utilisateur désire modéliser. Afin de permettre cette adaptation, un système de notation par chiffre a été utilisé. Lors de l'entrée des paramètres du modèle dans ANSYS[®] via le vecteur prop, le premier paramètre devient alors un indicateur important permettant de déterminer quelle variante de la loi de comportement la routine doit utiliser. Le tableau 3-4 liste ces variantes ainsi que leur indicateur numérique.

#	Nom	Loi	Écrou.	Adou.	Cuisson
100	ELASTIC	Hooke	-	-	-
300	ELASTOPLASTIC_HRDN	Carbone	Х	-	-
400	ELASTOPLASTIC_HRDNSOFT	Carbone	Х	Х	-
500	CHIMIO_ELASTIC	Hooke	-	-	Х
700	CHIMIO_ELASTOPLASTIC_HRDN	Pâte	Х		Х
800	CHIMIO_ELASTOPLASTIC_HRDNSOFT	Pâte	Х	Х	Х

Tableau 3-4: Liste des lois de comportement disponible dans l'outil prédictif

Les variantes de la loi de comportement sont divisées en deux groupes distincts. Le premier regroupe les modèles purement mécaniques. Aucune cuisson du matériau ni déformation d'origine chimique n'est présente dans ces lois de comportement. Le deuxième regroupe les lois de comportements chimiomécaniques permettant l'évolution chimique de celui-ci.

Pour chacune de ces variantes, certaines options sont disponibles. Celles-ci visent essentiellement la définition des propriétés des matériaux. Le tableau 3-5 liste ces options. Afin de les activer, le nombre associé doit être additionné à celui de la loi de comportement. Par exemple, pour un modèle élastoplastique comprenant écrouissage et adoucissement dont les propriétés sont constantes, le premier paramètre à fournir à la routine UserMat sera 410. L'option contrôlant l'algorithme d'intégration de la loi d'Arrhenius n'est utilisée que si l'évaluation des propriétés en fonction de l'indice de cuisson est activée, étant donné que le calcul de l'indice de cuisson n'est pas utile dans le cas contraire.

#	Propriétés des matériaux		#	Algorithme d'intégration de la loi d'Arrhenius			
10	Constantes		0	Euler explicite			
20	Polynômes en fonction de l'indice de cuisson	\rightarrow	1	Euler implicite			
30	Polynômes en fonction de la température		2	Méthode de la sécante (Tiré de FESh++)			

Tableau 3-5: Ontions disponibles pour les lois de comportement

Le désavantage d'une telle méthode est que les propriétés du matériau doivent toutes être définies suivant la même option. En effet, en spécifiant une certaine méthode pour l'évaluation des propriétés du matériau, celle-ci sera utilisée dans l'entièreté du code. Cela demande donc une certaine consistance des équations développées pour les diverses propriétés du matériau.

Deux paramètres n'obéissent pas à cette règle générale. Premièrement, la ductilité doit toujours être fournie sous la forme d'un polynôme fonction de la pression. Cette particularité est nécessaire de par la forme particulière de cette quantité dans la loi de comportement ainsi que la forte dépendance du modèle à la pression. Deuxièmement, les tolérances sont toujours constantes, étant donné qu'il s'agit de valeur numérique de référence pour la résolution du problème. L'annexe C, donnant les paramètres de matériaux utilisés pour la validation numérique, comporte certains exemples de définition de paramètres suivant ces règles.

Importation, évaluation et stockage des paramètres du modèle

Les propriétés des matériaux sont passées à la routine UserMat via un vecteur nommé prop. Cependant, il est nécessaire de savoir ce que contient ce vecteur et de pouvoir en extraire l'information pertinente. C'est précisément l'objectif de la sous-routine MatProperties. La figure 3-4 montre cette sous-routine ainsi que ses principales procédures.

La sous-routine localise d'abord les propriétés en fonction de la variante de la loi de comportement choisie par l'utilisateur, telle que définie à l'aide du premier paramètre du vecteur
prop. La localisation des propriétés est alors stockée dans un vecteur indépendant qui est ensuite passé aux routines de matériaux (celles dont le nom commence par MatProp). Ces routines extraient alors les propriétés du vecteur prop pour ensuite les évaluer en fonction de la méthode choisie par l'utilisateur. Elles seront ensuite stockées à l'intérieur de la routine pour que les lois constitutives puissent y accéder.



Figure 3-4: Structure de la sous-routine MatProperties (importation, évaluation et stockage des propriétés)



Intégration de la loi de comportement

L'intégration de la loi de comportement peut être réalisée de différentes façons, tout dépendamment de la variante de la loi de comportement sélectionnée. Ainsi, deux sous-routines indépendantes ont étés développées afin de permettre la résolution du problème mécanique.

La première routine (CstvLawElastic) permet la résolution de la loi de Hooke. Les différents concepts de cette loi sont subdivisés en procédures, comme montrées à la figure 3-5. Ainsi développées, les différentes procédures peuvent alors être réutilisées lors de la résolution de la loi de comportement élastoplastique.



Figure 3-5: Structure de la sous-routine CstvLawElastic (Loi de comportement élastique)

La deuxième sous-routine (CstvLawElastoPlastic) ainsi que ses procédures est présentée à la figure 3-6. Celle-ci permet de résoudre la loi de comportement élastoplastique de la pâte à l'aide de l'algorithme d'Euler implicite présenté à la section 3.2.6. Le nombre de procédures associées à cette sous-routine augmente de façon importante, conséquent de la complexité de la loi de comportement élastoplastique. Les différentes procédures sont séparées en fonction des diverses quantités à calculer pour intégrer la loi de comportement.



Figure 3-6: Structure de la sous-routine CstvLawElastoPlastic (Loi de comportement élastoplastique)

CHAPITRE 4 VALIDATION NUMÉRIQUE DE LA LOI DE COMPORTEMENT

4.1 GÉNÉRALITÉS

L'implémentation informatique de la loi de comportement proposée exige une étape importante de validation. Une série de tests doit être effectuée afin de s'assurer du bon fonctionnement de l'ensemble des routines. Par exemple, la validation du modèle élastoplastique de la pâte doit être réalisée selon différents états de contrainte afin de bien tester la dépendance de la fonction de charge à la pression hydrostatique. De plus, les simulations doivent être effectuées jusqu'à la rupture afin que les mécanismes d'écrouissage et d'adoucissement soient enclenchés dans le matériau. Finalement, la cuisson du matériau ainsi que la dépendance des paramètres à cet état de cuisson doivent également être vérifiées.

Dans ce chapitre, l'ensemble de la phase de validation numérique de la loi de comportement est présenté. Tout d'abord, la validation mécanique est présentée, regroupant une simulation numérique en compression uniaxiale, en traction uniaxiale ainsi qu'en flexion, toutes simulées à l'aide de l'implémentation de la loi de comportement utilisant des paramètres pour le carbone. Une simulation supplémentaire en flexion, utilisant des paramètres permettant de représenter un comportement de type von Mises pour de l'acier, est présentée à la fin de cette sous-section. Par la suite, la validation TCM est présentée, en simulant la cuisson libre puis confinée d'un bloc de pâte monolithique. Un résumé de la validation numérique est finalement effectué à la fin du chapitre.

4.2 LOGICIELS UTILISÉS

La loi de comportement implémentée doit être validée numériquement en utilisant des logiciels possédant des capacités/fonctionnalités similaires à l'outil développé en termes de loi de comportement. C'est pourquoi la possibilité d'utilisation du logiciel d'analyse par éléments finis FESh++ est intéressante, celui-ci possédant une implémentation de la loi de comportement de la pâte telle que développée par D'Amours [**7**].

Ainsi, la validation de l'implémentation a été effectuée en comparant les résultats obtenus à l'aide de la routine UserMat et ceux obtenus à l'aide de FESh++. L'ensemble des résultats est comparé au niveau d'un point d'intégration afin de limiter le risque d'écarts causés par l'extrapolation des résultats vers les positions étudiées. Il est cependant nécessaire de noter que les modifications théoriques apportées à la loi de comportement, telles que décrites aux chapitres 2 et 3, ont également été apportées du côté FESh++, rendant l'algorithmie de ces deux logiciels équivalente. Plus spécifiquement, on parle de l'ajout de l'exposant *n* dans la fonction d'écrouissage, de retrait de l'algorithme de minimisation du potentiel d'écoulement plastique et de la modification des équations relatives au calcul des gradients des potentiels.

4.3 VALIDATION MÉCANIQUE

4.3.1 Modèle numérique

L'ensemble des simulations pour la validation mécanique utilise le même modèle numérique. Celui-ci représente une poutre courte de 400 mm de longueur ayant une section rectangulaire de 100 mm x 12 mm (figure 4-1). La poutre est divisée en 20 éléments sur sa longueur, 4 sur sa hauteur et 2 sur son épaisseur, pour un total de 140 éléments. Ceux-ci sont définis comme étant des éléments quadratiques à 20 nœuds (ANSYS[®] : SOLID186) et utilise une intégration complète à 14 points (ANSYS[®] : Full Integration method). Le type d'élément choisi ainsi que la méthode d'intégration se retrouvent dans les deux logiciels, permettant ainsi la validation directe des résultats au point d'intégration. Les différents déplacements et forces imposés sont appliqués sur l'ensemble de la face à l'extrémité de la poutre. Les données numériques sont comparées à un point d'intégration situé sur le dessus de la poutre, à 40mm de l'encastrement (X :0.04; Y :0.1; Z :0.006).



Figure 4-1: Modèle numérique de poutre en porte-à-faux

Afin de bien valider la loi de comportement élastoplastique implémentée dans la routine UserMat, le modèle numérique utilisé doit subir un ensemble de tests où chacun des aspects particuliers de la loi de comportement doit être vérifié. Un modèle de poutre soumis à une flexion permet d'atteindre ce but à l'aide d'un minimum de simulations et constitue ainsi un choix logique pour la validation du comportement élastoplastique du modèle. Une telle simulation permet d'abord d'obtenir des états de contrainte qui varient en intensité ainsi qu'en direction (tensioncompression), ce qui permet de constater l'existence de limites en résistance différentes en fonction de la pression hydrostatique. De plus, en utilisant une poutre dont la longueur est réduite, les efforts en cisaillement demeurent non-négligeables, permettant de vérifier l'impact de ces composantes du tenseur de contraintes sur l'évaluation du critère. Finalement, en poussant les efforts jusqu'à la limite mécanique du matériau, il devient possible d'observer et de valider les mécanismes d'écrouissage et d'adoucissement du matériau.

Sauf lorsque spécifié autrement, les simulations numériques ont étés réalisées en utilisant des paramètres de la loi de comportement ajustés pour représenter le comportement d'un carbone cathodique. Ces paramètres sont disponibles en annexe C.

4.3.2 Simulation avec effort en compression

La première simulation est celle de la poutre soumise à une force de compression. Ainsi, une pression de 30 MPa est appliquée sur l'extrémité de la poutre en 30 pas de temps égaux. La figure 4-2 montre la courbe contrainte-déformation obtenue. Celle-ci démontre que pour des états de contraintes unidirectionnels, la routine UserMat répond de la même façon que le logiciel FESh++. La portion élastique linéaire de cette courbe est d'ailleurs aussi importante que la section plastique, étant donné la grande capacité de déformation plastique du carbone en compression. Au niveau de l'évolution du paramètre de résistance, à la figure 4-3, les deux courbes sont identiques, prouvant encore une fois la validité de l'implémentation.



Finalement, la figure 4-4 montre l'évolution de la déformation plastique équivalente au cours de la simulation. Les résultats obtenus par les deux logiciels sont identiques, démontrant que le calcul de cette quantité est lui aussi valide. La loi de comportement est donc en mesure de calculer l'état de contrainte associé à un état de déformation simple.



4.3.3 Simulation avec effort en traction

La simulation est effectuée aussi en traction, là où le comportement du carbone est beaucoup plus fragile. La loi de comportement doit d'ailleurs être en mesure de prendre en compte cette différence de comportement afin d'être considérée représentative. La simulation applique graduellement une traction de 5 MPa en 50 pas de temps égaux. La courbe contraintedéformation de l'essai est montrée à la figure 4-5. On voit tout d'abord que les deux courbes coïncident en tout point, validant l'implémentation. De plus, la courbe élastique est, cette fois-ci, beaucoup plus importante que la portion plastique, ce qui est une caractéristique du comportement du carbone en traction.



Par ailleurs, il est aussi intéressant de comparer les courbes de contrainte-déformation obtenues pour une simulation en compression et en tension (figure 4-6). En effet, lorsque le matériau subit des états de déformations différents, sa limite mécanique change. C'est pourquoi sur la figure 4-6, la simulation en compression atteint un état de contrainte à la rupture beaucoup plus grand qu'en tension. Cela démontre que la loi de comportement permet de bien représenter la sensibilité à la pression hydrostatique des matériaux à base de carbone.



Figure 4-6: Comparaison des courbes contrainte-déformation de la poutre en tension et en compression

4.3.4 Poutre avec effort en flexion

Le comportement de la poutre a par la suite été simulé avec l'application d'un effort de flexion. Une force de 300 kN appliquée selon l'axe des y et positionnée à l'extrémité libre de la poutre est appliquée en deux étapes. L'application de la charge en deux temps permet de diminuer l'incrément de déformation lors du passage en adoucissement et permet le calcul de quelques états de contraintes en adoucissement. Ainsi, la force est graduellement appliquée en 23 pas de temps jusqu'à atteindre une valeur de 276 kN. Par la suite, cette force est augmentée jusqu'à 300 kN, mais cette fois-ci en 8 pas de temps.

La courbe de contrainte-déformation à la figure 4-7 ainsi que les courbes d'évolution des paramètres de résistance et de cohésion à la figure 4-8 montrent encore une fois la validité de notre implémentation. Il est cependant intéressant de constater que les deux logiciels ne peuvent calculer un état de contrainte pour un paramètre d'adoucissement inférieur à environ 0.98. Cela est certainement causé par l'intensité de la valeur de l'incrément de déformation qui devient trop grand dans les zones de tension rendant ainsi très difficile l'intégration de la loi. Dans un tel cas, il serait très intéressant que la loi de comportement possède un algorithme d'adaptation de l'incrément de déformation, facilitant ainsi le calcul d'état de contrainte dans les zones de tension.



Figure 4-7: Courbe contrainte déformation de la poutre en flexion



Si l'on compare les résultats obtenus sur le dessus de la poutre (tension) et le dessous de la poutre (compression), tel que présenté à la figure 4-9, on remarque que seul le dessus de la poutre subit une déformation plastique. On fait alors apparaître la particularité de la loi de comportement selon laquelle le matériau possède une limite en traction différente de celle en compression. Les résultats de la poutre en tension sont extraits du modèle à un point d'intégration également situé à 40 mm de l'extrémité encastrée de la poutre, mais dans sa partie inférieure.







Figure 4-9: Comparaison des courbes contrainte-déformation de la poutre en flexion entre les fibres en compression et celles en tension

Cette différence est également mise en évidence dans la figure 4-10 montrant la valeur du paramètre de résistance dans la poutre à la fin de la simulation. On voit très bien que la poutre écrouit uniquement dans sa partie supérieure, là où des efforts en tension apparaissent.



Figure 4-10: Paramètre de résistance dans la poutre à F=300 N

Cette première série de simulations comparant les résultats obtenus à l'aide de la routine UserMat ainsi que du logiciel FESh++ démontre donc que la loi de comportement implémentée dans le logiciel ANSYS® se comporte de la même façon que celle implémentée dans le logiciel FESh++.

4.3.5 Extension au cas de l'acier

Les simulations effectuées jusqu'à présent utilisent des paramètres pour le carbone. À ce stade du processus de validation, il peut être intéressant de valider le potentiel de la loi implémentée à reproduire un matériau répondant au critère de von Mises.

Comme mentionné au chapitre 1, aucune autre loi de comportement n'a été développée pour représenter le comportement TCM de matériaux à base de carbone. Pour ce faire, il est essentiel de se ramener à un modèle de matériau simple pouvant être reproduit à l'aide de la loi de comportement élastoplastique. Le critère de von Mises représente une simplification du modèle de comportement développé où l'adoucissement et la sensibilité à la pression hydrostatique sont inexistants. En ajustant les paramètres de la loi de comportement élastoplastique, il devrait théoriquement être possible de reproduire les résultats obtenus à l'aide d'un modèle de matériau simple tel qu'un acier. La loi de comportement doit cependant être adaptée pour reproduire ce genre de courbe de contrainte-déformation. La courbe contrainte-déformation d'un acier telle que montrée à la figure 4-11 est utilisée comme base pour l'identification des paramètres.



Figure 4-11: Courbe contrainte-déformation théorique de la loi de comportement de l'acier

Premièrement, le mécanisme d'adoucissement doit être désactivé, étant donné que ce concept n'existe pas dans le critère de von Mises. Ainsi, le matériau peut écrouir jusqu'à k = 1, mais pas au-delà de cette valeur. Deuxièmement, l'effet de la pression hydrostatique sur la surface de charge doit être éliminé dans la zone de contrainte testée. Pour ce faire, la ductilité a été fixée comme étant constante et la valeur limite en traction triaxiale multipliée par 10⁹, ce qui a pour effet d'éloigner la zone caractéristique de limite en traction triaxiale des états de contraintes à l'étude. Par cette technique, la loi de comportement est ainsi modifiée pour être indépendante de la pression hydrostatique pour les niveaux de contraintes subites par la poutre durant la simulation.

Les autres paramètres de la loi de comportement ont été identifiés à l'aide d'une application développée sous Maple permettant l'identification des paramètres par optimisation en suivant la méthode d'identification présentée au chapitre 2. Ceux-ci ont été optimisés pour reproduire le comportement présenté à la figure 4-11. Les valeurs numériques des paramètres sont montrées en Annexe D.

Simulation avec effort en compression

La simulation d'une poutre avec effort en compression est d'abord réalisée. Les résultats de la routine UserMat sont alors comparés à ceux obtenus à l'aide du logiciel ANSYS[®], utilisant une loi de comportement de type von Mises. Les résultats de cette simulation sont montrés aux figures 4-12 et 4-13.



L'utilisation de la loi de comportement du carbone pour représenter un acier standard demande l'utilisation de plusieurs hypothèses simplificatrices. Malgré cela, les résultats obtenus à l'aide de la routine UserMat sont près de ceux calculés par ANSYS[®], principalement dans la zone précédant la limite ultime du matériau. Cependant, l'écrouissage du matériau déforme de façon importante le matériau au-delà de cette limite et ainsi, les résultats s'éloignent à partir de ce point. Ces résultats montrent que la loi de comportement permet de représenter la limite élastique du matériau (200 MPa) ainsi que sa limite ultime (350 MPa) ainsi que le comportement du matériau à l'intérieur de ces limites.

Au niveau de l'écrouissage, la figure 4-13 montre l'évolution du paramètre de résistance au cours de la simulation au point de contrôle. On remarque d'abord que l'algorithme d'intégration de la pâte calcule trois états de contraintes avec un écrouissage maximal. De plus, la déformation maximale atteinte durant la simulation, tel que montré à la figure 4-12, est supérieure à la ductilité spécifiée, équivalente à une déformation normale de 0,004 pour un essai de compression uniaxial. Finalement, on constate que le premier point calculé à l'écrouissage maximal respecte à la fois la résistance en compression du matériau ainsi que sa ductilité. Cette analyse montre ainsi

que l'algorithme de la loi de comportement calcule le bon état de contrainte au premier point à écrouissage maximal et que c'est ce même point qui détermine à quel stade le matériau atteint sa limite. Les deux autres points présents sur la courbe sont une conséquence de la suppression du mécanisme d'adoucissement qui remplacerait le mécanisme d'écrouissage à partir du premier résultat à k = 1.

Finalement, ces deux figures montrent que l'équation contrôlant le niveau d'écrouissage (équation 2.9) utilisé par la routine UserMat ne peut suivre l'évolution linéaire d'une loi de type von Mises. Ceci est dû à la forme de l'équation d'écrouissage qui ne peut parfaitement représenter une évolution linéaire, comme montré à la figure 4-13. Ainsi, il reste difficile d'ajuster les paramètres de la loi de comportement pour un matériau ayant un comportement fondamentalement différent, surtout au niveau de la vitesse d'écrouissage.



Figure 4-13: Évolution du paramètre de résistance au cours de la simulation



Additionnellement, la figure 4-14 montre que pour une simulation en tension et en compression, les comportements sont sensiblement les mêmes. Ainsi, les hypothèses utilisées pour simplifier la loi de comportement atteignent leurs buts et permettent effectivement d'éliminer la sensibilité à la pression hydrostatique pour la zone de contrainte étudiée.

Simulation avec effort en flexion

Une dernière simulation mécanique a été effectuée cette fois-ci en créant un effort de flexion dans la poutre. Pour ce faire, un déplacement de 10 mm a été imposé à l'extrémité de la poutre, et ce, en 100 pas de temps. La simulation a été effectuée tour à tour avec ANSYS® utilisant une loi de comportement de type von Mises, ANSYS® utilisant la loi comportement de la pâte implémentée via l'interface UserMat et finalement FESh++ utilisant la loi de comportement de la pâte. Additionnellement, le mécanisme d'adoucissement a été activé pour ces simulations afin de montrer l'effet de ce mécanisme lors d'une simulation utilisant un modèle de comportement simple. Les paramètres utilisés pour cette simulation sont montrés à l'annexe C. La courbe contrainte-déformation résultante est montrée à la figure 4-15, telle que mesurée au même point de contrôle situé à 40mm de l'encastrement.



Contrairement aux simulations précédentes, les limites élastiques et ultimes ne sont pas strictement respectées pour cette simulation. Ceci est dû au fait que le critère de charge est également fonction des composantes en cisaillement du tenseur de contrainte. Ces composantes du tenseur étant non-nulles dans le cas étudié, la contrainte normale maximale atteinte est légèrement inférieure à la limite ultime du matériau. Cependant, la loi de comportement utilisée reproduit plus difficilement l'évolution linéaire de la contrainte lors de la plastification. C'est donc qu'il devient plus difficile d'adapter le modèle de comportement à un von Mises lorsque l'état de contrainte est plus complexe et comprend des composantes en cisaillement. La figure 4-16 montre d'ailleurs que l'évolution du paramètre d'écrouissage n'est pas linéaire, renforçant cette constatation. Par ailleurs, les résultats FESh++ et UserMat montrés à la figure 4-15 sont identiques, ce qui suggère que le problème vient des paramètres identifiés pour la loi de comportement ou encore des hypothèses utilisées pour permettre l'identification de ceux-ci.



Figure 4-16 : Évolution des paramètres de résistance et de cohésion

Les résultats obtenus par FESh++ et UserMat montrent cependant que la loi de comportement implémentée fonctionne comme anticipé. En effet, les courbes UserMat et FESh++ sont identiques que ce soit au niveau des contraintes-déformations ou au niveau des paramètres de résistance et de cohésion. Les figures 4-17 et 4-18 montrent bien que l'asymétrie des contraintes dans la poutre n'est pas présente avant la plastification de la poutre, mais bien visible à la fin de la simulation, tel que causé par l'adoucissement du matériau plus important en traction qu'en compression. De plus, le mécanisme d'adoucissement est bien calculé comme le montre la génération importante de déformation plastique et la réduction des contraintes dans le matériau à la Figure 4-18.



Figure 4-18 : Contrainte normale dans la poutre à U=10 mm (régime élastoplastique, UserMat)



4.4 VALIDATION THERMO-CHIMIO-MÉCANIQUE

La validation numérique du comportement thermo-chimio-mécanique est effectuée à l'aide d'un modèle simple dont les résultats peuvent être comparés dans la littérature. Un modèle numérique a donc été construit autour des travaux de D'Amours [7] avec comme objectif, la reproduction des résultats présentés dans sa thèse. Le modèle a cependant été reconstruit et résolu à nouveau avec la nouvelle version de FESh++, comprenant les dernières modifications apportées à la loi de comportement. La loi de comportement utilise les paramètres fournis à l'annexe C pour la pâte monolithique.

4.4.1 Modèle numérique

Le problème traité consiste à réaliser la cuisson d'un bloc de pâte, d'abord en dilatation libre, puis en dilatation confinée. Les dimensions totales du bloc sont 0.2 m x 0.2 m x 0.2 m, considérant les conditions de symétrie mécanique et thermique appliquées dans les trois plans, soit à x=0, y=0 et z=0. La surface extérieure du bloc est soumise à des conditions de chauffage par convection, avec un coefficient de transfert de chaleur de $10 W/m^2$ et une température de l'air passant de 20 à 1000°C en 40 heures de telle sorte que la température extérieure du bloc suive la même évolution que la température de l'air. Le modèle discret est montré à la figure 4-19.



Figure 4-19: Modèle numérique cuisson de la pâte

Le modèle numérique est discrétisé à l'aide de 125 éléments 3-D à 20 nœuds et une méthode d'intégration à 14 points (ANSYS[®]: Full Integration) est utilisée pour résoudre la simulation. Cette méthode est favorable à la comparaison des résultats puisque les deux logiciels possèdent cette technique d'intégration. Les équations de transfert de chaleur sont résolues en régime transitoire en 160 pas de temps de 15 minutes et la cuisson du matériau est prise en compte via l'indice de cuisson évalué selon une loi d'Arrhenius.

4.4.2 Simulation d'une cuisson libre

La première étude concerne la dilatation libre du bloc de pâte. Afin de valider l'implémentation, les résultats des simulations effectuées avec UserMat et FESh++ doivent être identiques. Cette comparaison est effectuée sur la base d'un même point d'intégration, situé au centre du bloc.

À la figure 4-20, les résultats du calcul de l'indice de cuisson au cours des 40 heures de chauffage sont présentés. Le graphique compare les résultats obtenus à l'aide de FESh++ avec ceux obtenus à l'aide de la routine UserMat. On remarque que les deux simulations donnent les mêmes résultats. Le niveau de cuisson est d'abord stable en début de simulation, puisqu'en dessous de 200°C, seul le brai se ramollit. La cuisson est plus rapide à partir de 10 heures, lorsque la volatilisation de l'huile et la distillation du brai débutent. Finalement, la pâte se durcit vers la fin de la simulation, sa vitesse de cuisson se stabilisant.



La comparaison des mécanismes de déformations est présentée à la figure 4-21. Cette figure montre que la déformation totale dans les deux simulations est identique. Que ce soit au niveau de la déformation d'origine thermique, chimique ou élastique, la valeur est identique, ce qui démontre que la communication avec l'interface d'ANSYS[®] s'effectue adéquatement.



Figure 4-21: Composantes de déformations au centre du bloc

Finalement, les résultats montrant l'évolution de la pression hydrostatique sont présentés à la figure 4-22. Les résultats sont également identiques, démontrant que les contraintes calculées sont les mêmes. Les pressions importantes générées au centre du bloc sont produites en raison de la non-uniformité des gradients de déformation produits par la cuisson qui progresse de l'extérieur vers l'intérieur du bloc. Ainsi, lorsque la déformation d'origine chimique est grande sur la surface extérieure du bloc, l'intérieur ne suit pas la même évolution. L'apparition de grands changements dans la pression hydrostatique se produit d'ailleurs au même moment que les grands changements de déformation d'origine chimique, ce qui démontre l'influence directe de ce mécanisme de déformation sur l'état de contrainte du bloc de pâte durant sa cuisson.





Cette simulation démontre donc que l'implémentation de la loi de comportement de la pâte monolithique a bel et bien été faite de façon rigoureuse et que l'outil développé est en mesure de reproduire les résultats de la cuisson d'un échantillon de pâte ainsi que le calcul de l'état de contrainte selon le modèle développé par D'Amours [7]. Par contre, l'identification des paramètres de la loi de comportement reste essentielle afin de permettre une représentation fidèle du comportement d'une pâte lors de son utilisation.

4.4.3 Simulation d'une cuisson confinée

Dans le problème précédent, aucune déformation plastique ne prend place en raison de la liberté du bloc à se déplacer et des dimensions réduites de l'échantillon. Afin de provoquer l'apparition de ce mécanisme de déformation, la pâte est confinée à l'aide de condition de déplacements nuls imposés sur toutes les faces du bloc. En addition, le plan x=0.1 m se voit imposé un déplacement de -1 mm afin de provoquer un changement de volume du matériau, devant être repris par les mécanismes en présence et plus particulièrement par la déformation plastique qui ne s'effectue pas à volume constant dans un matériau comme le carbone.

Les composantes de déformations obtenues à la suite de cette simulation sont montrées à la figure 4-23. Les résultats identiques pour les deux logiciels démontrent encore une fois que l'implémentation de la loi de comportement est bel et bien fonctionnelle et que l'ensemble des composantes de déformations est bien calculé.



Figure 4-23: Composantes de déformations au centre du bloc

Même chose au niveau de la pression hydrostatique où les contraintes calculées par les deux logiciels sont identiques, tel que montré à figure 4-24. L'apparition d'une pression hydrostatique significative survient au moment où l'indice de cuisson augmente rapidement, ce qui est entièrement logique. L'ensemble de ces résultats démontre que les différents modules de la routine UserMat communiquent bien ensemble et avec ANSYS[®], mettant un terme à la phase de validation de l'implémentation.



Figure 4-24: Pression hydrostatique au centre du bloc

4.5 EN RÉSUMÉ

Les simulations présentées dans ce chapitre montrent bien la validité des développements réalisés via l'interface UserMat du logiciel ANSYS[®]. Cette nouvelle routine permet ainsi de prendre en compte les différentes caractéristiques des matériaux à base de carbone ainsi que la thermoréactivité de ceux-ci. La validation mécanique a été réalisée par la simulation d'une poutre en tension, compression et en flexion, mettant en lumière l'ensemble des mécanismes élastoplastiques caractéristiques de la loi de comportement. La validation thermo-chimio-

mécanique a permis de valider l'impact de la cuisson sur le comportement mécanique du matériau en effectuant la cuisson libre et confinée d'un échantillon de pâte.

Cependant, un point reste en suspens, sois la capacité de la loi de comportement, tel que présenté au chapitre 2, à effectivement représenter le comportement de la pâte monolithique tel qu'observé dans les cuves d'électrolyse. Cet aspect devra être exploré à l'aide de mesures expérimentales en service afin de s'assurer de la représentativité du modèle.

CHAPITRE 5 VALIDATION THERMOMÉCANIQUE DU BANC D'ESSAI BERTA

5.1 MISE EN CONTEXTE

Une phase de validation expérimentale de la loi de comportement était initialement prévue dans la méthodologie du projet. Pour ce faire, le banc d'essai de résistance thermomécanique Alcan (BERTA) devait être utilisé pour suivre le comportement d'un échantillon de pâte monolithique lors de sa cuisson, tel que suggéré par le partenaire industriel. Cependant, les premières tentatives d'utilisation du banc d'essai n'ont pas permis un suivi précis du comportement déformationnel en régime thermomécanique d'un échantillon placé à l'intérieur de l'enceinte de BERTA.

Ainsi, afin de s'assurer que le banc d'essai BERTA est en mesure de suivre le comportement d'un échantillon lors de sa cuisson, une validation de son comportement thermomécanique a donc été proposée en remplacement de la campagne expérimentale de validation de la loi de comportement. L'objectif de cette validation est de s'assurer que le banc d'essai est bel et bien en mesure de suivre le comportement déformationnel d'un échantillon à base de carbone en phase de cuisson. Dans le cas où les conclusions de l'étude seraient négatives, des mesures correctrices devront être proposées afin de permettre au partenaire industriel de pouvoir utiliser le montage dans un avenir rapproché.

5.1.1 Historique

Le banc d'essai de résistance thermomécanique Alcan (BERTA) a été conçu par M. Claude Allaire à la fin des années 80 [26] [27] [28] dans le cadre de son projet de doctorat afin de permettre une validation expérimentale à grande échelle de la simulation des contraintes thermomécaniques induites sur différents assemblages cathodiques de cuves d'électrolyse (figure 5-1). Initialement fabriqué et opéré à l'école Polytechnique de Montréal, le montage a ensuite été transféré au Centre de recherche et développement d'Arvida (CRDA).



Figure 5-1: Montage original du banc d'essai de résistance mécanique Alcan (BERTA) [28]

De 2000 à 2004, BERTA a été utilisée au cours du projet de recherche START-Cuve [**3**]. Son utilisation devait permettre de valider les différentes lois de comportement développées au cours du projet, soient les lois de comportement du carbone, de la pâte monolithique ainsi que du béton réfractaire. Les essais ont été menés sur un assemblage de carbone / pâte / carbone / béton / carbone subissant une montée en température jusqu'à 930°C. Les résultats obtenus expérimentalement lors de ces tests n'ont cependant pu être validés numériquement à l'aide de

FESh++, ce qui implique que les lois de comportement développées au cours de ce projet n'ont pu être validées adéquatement.

En 2009, une volonté du CRDA d'utiliser BERTA dans le cadre d'un projet universitaire aura justifié sa remise en service. Dans le cadre de stage étudiant de premier cycle, des essais thermomécaniques sur un bloc de carbone ainsi que des tests mécaniques utilisant une poutre en acier ont été effectués. Les conclusions présentées dans le rapport de stage [**29**] avancent que la méthode d'instrumentation de BERTA n'est pas adéquate pour mesurer avec précision la force développée par un bloc de carbone, même si les tests mécaniques utilisant une poutre d'acier furent plus concluants.

Plus récemment, de nouveaux tests thermomécaniques ont été réalisés sur BERTA par l'équipe du CRDA, soit en novembre 2009. L'objectif de ceux-ci était de suivre le comportement d'un échantillon placé entre les mâchoires de BERTA lors d'une montée en température en utilisant une poutre en acier. Dans ce contexte, il fut impossible de relier la force lue par les cellules de charge aux déplacements mesurés.

Le tableau 5-1 résume une partie des activités réalisées sur BERTA depuis 1989.



Tableau 5-1: Historique du banc d'essai BERTA1989-1994Conception et fabrication du banc d'essai [26] [27] [28]

- Le banc d'essai a été conçu à l'école polytechnique de Montréal à la fin des années 80
- Transféré par la suite au CRDA où plusieurs modifications furent effectuées afin d'en améliorer la précision et la sécurité d'utilisation
- Utilisé dans le cadre d'expérimentations ayant comme objectif l'étude des contraintes thermomécaniques induites dans les assemblages cathodiques

2000-2004 Utilisation dans le cadre de START-Cuve [3] [6] [30]

- Utilisé pour l'étude des assemblages de matériaux dans la cuve d'électrolyse en lien avec le développement de lois de comportement pour les matériaux carbonés et non carbonés.
- Les modèles numériques n'ont pas étés en mesure de reproduire les résultats expérimentaux de BERTA.

2008 Remise en service du banc d'essai [29]

- Stage d'été effectué par Élodie Clerc ayant comme objectif la remise en service du banc d'essai, peu utilisé depuis 2004, dans l'optique de son utilisation dans le cadre d'un futur projet universitaire
- 3 essais expérimentaux avec le banc d'essai :
 - Essai thermomécanique avec bloc de graphite jusqu'à 1000°C
 - Essai thermomécanique avec bloc de graphite jusqu'à 800°C
 - Essai thermomécanique avec ensemble de bloc et pâte jusqu'à 900°C
- Suite à ces essais, un test mécanique avec une poutre en acier fut effectué afin de valider le comportement mécanique du montage.

2008-2009 Série d'essais mécanique et thermomécanique au CRDA [31]

- Série d'essais mécanique et thermomécanique sur une poutre en acier effectuée dans le but de comprendre le comportement déformationnel de BERTA
- De plus, ces essais pourront valider la lecture des cellules de charges
- Étude de l'effet du décentrage de l'échantillon dans l'enceinte de BERTA

5.1.2 Spécification du banc d'essai

BERTA est constitué de deux mâchoires en acier à l'intérieur desquelles peut être installé un échantillon ou un assemblage de matériaux afin de subir des tests de nature mécanique, thermique ou thermomécanique. BERTA est conçu de sorte qu'une des deux mâchoires soit fixe (Mâchoire ouest, à gauche sur la figure 5-2) et l'autre mobile (mâchoire est, à droite sur la figure 5-2). La mâchoire mobile repose sur des rails et une lubrification assure un frottement minimal entre les deux composantes. Cet aspect du montage a d'ailleurs été amélioré depuis sa création afin de diminuer davantage l'effet du frottement. Ces deux mâchoires sont appuyées sur des supports en acier, reliés entre eux à l'aide de tirants en acier permettant ainsi le transfert des efforts.



Figure 5-2: Banc d'essai de résistance mécanique Alcan (BERTA) [3]

Deux cellules de charge (figure 5-3) ayant individuellement une capacité de 50 000 lbf (222 kN) sont appuyées entre la mâchoire mobile et ses supports en acier. Celles-ci permettent ainsi de mesurer la force générée à l'intérieur de l'enceinte par un simple équilibre des forces, considérant le frottement négligeable entre la mâchoire mobile et les rails qui la supportent.



Figure 5-3: Cellule de charge de BERTA [29]

BERTA possède une fonction thermique assurée par un capot chauffant, tel que montré à la figure 5-4. Ce capot chauffant permet, à l'aide d'un dispositif radiatif, d'élever la température dans l'enceinte de BERTA jusqu'à 1100°C. La surface de chauffe, possédant une aire carrée de 3600 cm², repose sur le dessus de l'enceinte de test. Il est aussi possible de soumettre l'enceinte à une atmosphère inerte à l'argon afin de minimiser la réaction de l'échantillon avec l'air ambiant. En cas de défaillance de l'alimentation en argon, une alimentation secondaire à l'azote permet une sécurité à ce niveau. De plus, un système de ventilation permet de recueillir les gaz provenant des matériaux susceptibles de subir des transformations chimiques lors de l'essai.

Un ensemble de LVDT sont utilisés afin de mesurer le déplacement de diverses composantes du banc d'essai. Les figures 5-5 et 5-6 montrent l'arrangement de LVDT généralement utilisé pour mesurer le déplacement de la mâchoire mobile. D'autres LVDT peuvent être allongés à l'aide de tiges d'alumines instrumentées de thermocouples afin de suivre les déplacements de l'échantillon via des trous pratiqués dans la mâchoire mobile. Dans le cadre d'un essai thermique, une correction doit cependant être appliquée sur ces LVDT afin de compenser l'élongation thermique des tiges d'alumine.



Figure 5-4: Capot chauffant de BERTA [29]



Figure 5-5: Agencement de LVDT positionnés au centre de la mâchoire mobile [31]



Figure 5-6: LVDT positionnés derrière la mâchoire mobile

5.2 **OBJECTIFS DE LA VALIDATION DU BANC D'ESSAI**

L'objectif principal du volet « validation de BERTA » est la mise en place d'une méthode de mesure suffisamment précise pour valider la loi de comportement de la pâte. Pour ce faire, deux objectifs secondaires ont été définis. Plus spécifiquement, on vise une meilleure compréhension du comportement déformationnel de BERTA, tant en régime mécanique qu'en régime thermomécanique. Le second, la proposition d'éléments de solution qui permettraient de mieux évaluer la relation force-déplacement d'un échantillon dans BERTA.

5.3 Méthodologie

L'atteinte des objectifs de la validation passe par une approche en 5 étapes :

 Développer des modèles analytiques (mécaniques, thermomécaniques) basés sur les équations de la résistance des matériaux permettant l'analyse des essais précédemment effectués sur BERTA à l'aide d'un échantillon dont le comportement est
connu (poutre en acier). Les résultats de ces modèles seront comparés aux résultats expérimentaux obtenus;

- 2. Réaliser une étude de sensibilité afin d'identifier les paramètres sensibles de BERTA;
- Réaliser une campagne de mesure expérimentale sur une poutre en acier afin d'obtenir des données supplémentaires sur les déplacements de la structure de BERTA et sur son comportement thermomécanique;
- Comparer les résultats obtenus en 3. avec les modèles analytiques et ce, afin de confirmer la validité de ces derniers;
- 5. Proposer une méthode de mesure alternative pour l'établissement de la relation forcedéplacement d'un échantillon.

5.3.1 Hypothèses de base et définition

Avant de développer les modèles analytiques associés aux différents tests expérimentaux, il est nécessaire d'établir les hypothèses à utiliser. Afin de permettre une représentation mécanique simplifiée, mais toutefois représentative, les hypothèses posées sont :

- L'ensemble des composantes est uniquement sujet à une déformation axiale orientée dans l'axe principal des efforts;
- 2. Les différentes composantes ont un comportement linéaire, autant au niveau matériel que géométrique;
- 3. Les composantes considérées comme étant déformables sont :
 - l'échantillon (poutre en acier);
 - les briques réfractaires (entre l'échantillon et les mâchoires);
 - les tirants en acier;
 - les cellules de charges;
 - les mâchoires (via une rigidité axiale équivalente).
- 4. Le frottement est négligeable entre la mâchoire mobile et les rails;

- 5. L'excentricité entre l'axe longitudinal de la poutre et l'axe de chargement de BERTA est inconnue *a priori*;
- Un effort axial (principal) ainsi qu'un effort de flexion (parasite) peuvent apparaître dans la poutre.

En addition, un ensemble de paramètres ont été définis afin de simplifier la notation. Ainsi, tous les modèles analytiques développés utilisent les paramètres définis au tableau 5-2. Pour chacun de ces paramètres, une notation en indice sera ajoutée pour préciser l'élément auquel la quantité est reliée. Par exemple, pour la force dans la poutre, on utilisera le paramètre F_p alors que pour la force dans la cellule de charge, on utilisera F_{cc} .

Paramètre	Définition
F	Force dans la composante
М	Moment parasite dans la poutre
K	Rigidité de la composante
δ	Élongation de la composante
u	Déplacement d'un point
а	excentricité
α	Coefficient de dilatation thermique
Т	Température
T_r	Température de référence
Ε	Module de Young du matériau
Α	Aire de la section
L	Longueur de la composante
d	½ x la distance entre les cellules de charges

Tableau 5-2: définition des paramètres des modèles analytiques

5.4 RETOUR SUR LES TESTS MÉCANIQUES SUR BERTA (2008)

5.4.1 Configuration de BERTA pour les tests

La remise en service du banc d'essai a été initiée lors d'un stage chez RTA en 2008 [29]. Les conclusions de ce rapport portent sur le manque de précision de la méthode de mesure utilisée pour définir la relation force-déplacement d'un échantillon présent dans l'enceinte de test de BERTA. Ainsi, l'utilisation de BERTA pour l'analyse expérimentale du comportement de la pâte fut déconseillée dans son état actuel. C'est pourquoi quelques tests, purement mécaniques, ont été effectués par la suite par l'équipe du CRDA afin de corroborer l'analyse proposée lors de ce stage.

Le but spécifique de ces essais était de s'assurer que les cellules de charge externes étaient en mesure de capturer correctement la charge induite dans la poutre. C'est pourquoi une poutre en « I » en acier a été sélectionnée comme échantillon test étant donné que son comportement mécanique est bien connu. Afin de s'assurer de la précision des mesures des cellules de charge externes, positionnées derrière la mâchoire mobile, une cellule de charge a été installée à l'intérieur de l'enceinte de BERTA afin d'assurer une lecture directe de l'effort induit par un vérin hydraulique appuyé sur une poutre d'acier (figure 5-7). Les supports en acier situés derrière les mâchoires sont ensuite bloqués via les écrous situés aux extrémités des tirants afin d'empêcher le mouvement des mâchoires. En comparant la lecture de la cellule de charge interne avec la somme des lectures des cellules de charge externes, on doit pouvoir retrouver les mêmes valeurs. On fait ensuite varier la position nord-sud (haut-bas sur la figure 5-7) de la poutre afin de vérifier si le transfert des charges se fait correctement lorsque la poutre est désaxée par rapport à l'axe longitudinal de l'enceinte. Il importe d'indiquer qu'aucune donnée en déplacement n'a été recueillie lors de ces tests. Ces informations supplémentaires auraient été des plus enrichissantes.



Figure 5-7: montage utilisé pour les essais mécaniques du CRDA

5.4.2 Résultats expérimentaux

Les lectures des différentes cellules de charge lors d'un essai type sont montrées à la figure 5-8, et ce, pour la configuration avec la poutre décentrée de 203 mm (8 po) vers le sud à partir de l'axe central. On y constate que la somme des forces lues par les cellules de charge externes concorde avec la force lue par la cellule de charge interne. On peut donc conclure que pour ces tests mécaniques, le banc d'essai a réagi comme prévu. Cependant, rien n'est dit quant à l'exactitude de la proportion de force totale lue pour chacune des cellules de charge externe. Cette analyse doit être faite à partir d'un modèle analytique du problème.



Figure 5-8: Résultats des tests mécaniques pour une poutre décentrée de 8 po vers le sud à partir du centre [29]

Afin de permettre une comparaison numérique avec le modèle analytique développé par la suite, il est nécessaire d'identifier des résultats à un moment précis du test. Ainsi, le tableau 5-3 montre les résultats obtenus expérimentalement à 900 secondes.

Valeur	Résultat
Force dans le vérin	233.15 kN
Force dans la cellule de charge Nord	78.20 kN
Force dans la cellule de charge Sud	155.94 <i>kN</i>

Tableau 5-3: Résultats expérimentaux à t=900s pour l'essai avec une poutre décentrée de 8 po vers le sud

5.4.3 Modèle analytique

Suite à l'analyse de ces résultats, un modèle analytique simple a été développé pour analyser le comportement mécanique de BERTA lors de ces essais. Ainsi, le montage, tel que décrit à la section précédente, a été modélisé à l'aide des équations de la résistance des matériaux. Tout d'abord, des points de contrôle ont été définis, tel que montré à la figure 5-9. Les abréviations utilisées pour nommer chacune de ces composantes y sont aussi inscrites entre crochets.





Figure 5-9: Schéma de la configuration de BERTA pour le test

Premièrement, les relations forces-allongement pour chacune des composantes considérées déformables ont été définies comme suit :

Relations force-allongement				
Poutre :				
$F_p = K_p(\delta_p)$				
Cellule de charge interne :				
$F_{cci} = K_{cci}\delta_{cci}$				
Tirants (nord, sud) :				
$F_{tn} = K_t(\delta_{tn})$				
$F_{ts} = K_t(\delta_{ts})$				
Cellules de charge (nord, sud) :				
$F_{ccn} = K_{cc} \delta_{ccn}$				
$F_{ccs} = K_{cc}\delta_{ccs}$				
Machoires de BERTA (ouest, est) :				
$P_{mo} = K_{mo} O_{mo}$				
$\Gamma_{me} - \Lambda_{me} O_{me}$	8 équations, 16 inconnus			

avec la rigidité axiale de la poutre et des tirants donnée respectivement par:

$$K_p = \frac{E_p A_p}{L_p}$$

$$K_t = \frac{E_t(2A_t)}{L_t}$$

et considérant la rigidité des autres composantes comme étant des valeurs numériques connues. Par la suite, les relations allongement-déplacement sont développées. Toutes les variables ayant le symbole « ' » sont considérées comme des points de contrôle étant déplacés vers le nord, selon l'excentricité du positionnement de la poutre. Ainsi :

Relations allongement-déplacements		
Vérin:		
	$\delta_{v} = u_{C'} - u_{B'}$	
Poutre :		
	$\delta_p = u_{D'} - u_{C'}$	
Cellule de charge interne :		
	$\delta_{cci} = u_{E'} - u_{D'}$	
Tirants (nord, sud) :		
	$\delta_{tn} = u_{Gn} - u_{An}$	
	$\delta_{ts} = u_{Gs} - u_{As}$	
Cellules de charge (nord, sud) :	<u> </u>	
	$\delta_{ccn} = u_{Gn} - u_{Fn}$	
	$\delta_{ccs} = u_{Gs} - u_{Fs}$	
Macholres de BERTA (ouest, est) :	S	
	$o_{mo} = u_B - u_A$	
	$o_{me} - u_F - u_E$	8 équations, 14 inconnus

Pour ce qui est de la relation allongement-déplacements définie pour le vérin, celle-ci est indépendante du système, car la force est connue dans cette composante. On procède ensuite à la mise en équation de l'équilibre du système :



Ce qui nous amène à un total de 24 équations pour 32 inconnus. On peut supposer que les mâchoires auront une déformation faible et ainsi, simplifier le calcul des déplacements de chacune de leurs extrémités. On aura donc les équations de compatibilité géométrique suivantes :

Compatibilité géométrique		
Rotation rigide des mâchoires :		
	$u_A = \frac{u_{An} + u_{As}}{2}$ $u_F = \frac{u_{Fn} + u_{Fs}}{2}$ $u_{B'} = u_B + \frac{u_{An} - u_{As}}{2d} \cdot a$ $u_{E'} = u_E + \frac{u_{Fn} - u_{Fs}}{2d} \cdot a$	
	<u> 2</u> u	4 équations, 0 inconnus

Finalement, on fixe les conditions limites qui correspondent à certains paramètres du test, tels que l'excentricité, la force dans le vérin ainsi que le déplacement de la mâchoire :

Conditions limit	es
Excentricité de la poutre :	
$a = \overline{a}$	
Force dans le vérin :	
$F_{\nu} = \overline{F}_{\nu}$	
Déplacement de la structure :	
$u_{An} = \overline{u}_{An}$	
$u_{AS} = \overline{u}_{AS}$	
	4 équations, 0 inconnus

Au final, on obtient 32 équations pour 32 inconnus et donc, le système peut être résolu. Pour ce faire, le modèle analytique a été implémenté et résolu dans le logiciel Maple™.

5.4.4 Analyse des résultats

En utilisant les données obtenues expérimentalement lors de l'essai mécanique, on est en mesure de définir les valeurs numériques associées aux conditions limites du problème. Le déplacement nul de la mâchoire fixe est une hypothèse plausible étant donné que celle-ci est bloquée. Ainsi, les conditions limites du problème sont :

Conditions limites		
Excentricité de la poutre :		
	a = -203.2 mm (8'' vers le sud)	
Force dans le vérin :		
	$F_{v} = 223.14 \ kN$	
Déplacement de la structure :		
	$u_{An}=0$	
	$u_{AS} = 0$	

En considérant les mâchoires est et ouest comme infiniment rigides ($k_{mo} = k_{me} = \infty$), Les résultats obtenus par le modèle sont présentés au tableau 5-4. On y retrouve une coïncidence quasi parfaite entre les résultats expérimentaux et ceux calculés à partir du modèle. Ainsi, le modèle développé semble en mesure de représenter adéquatement le comportement de BERTA lors d'essais mécaniques au niveau de la répartition des forces sur la structure du banc d'essai.

Tableau 5-4: Comparaison des résultats à t=900s pour l'essai avec une poutre décentrée de 8 po vers le sud

Valeur	Expérimental	Modèle	Écart
Force dans la cellule de charge Nord	78.20 kN	77.98 kN	0.27%
Force dans la cellule de charge Sud	155.94 <i>kN</i>	145.16 kN	0.15%

Les tableaux 5-5 et 5-6 montrent des résultats supplémentaires calculés à partir du modèle aux fins d'analyse. On observe d'abord que le déplacement en B (mâchoire fixe, du côté de l'enceinte) est presque nul, dû à la forte rigidité imposée à la mâchoire. Il s'agit cependant d'une hypothèse du modèle qui ne représente pas forcément la réalité, aucune mesure expérimentale en déplacement n'ayant été recueillie.

Du côté de l'échantillon (poutre), on remarque que son allongement calculé est d'un ordre de grandeur inférieur aux déplacements de la structure. Ceci montre que l'échantillon possède une grande rigidité par rapport aux autres éléments du montage, ce qui met à rude épreuve la précision du montage.

Finalement, les valeurs de déplacements calculés au point F (nord, sud et axe central) montrent que le déplacement de la mâchoire mobile ne s'effectue pas de façon uniforme lorsque l'échantillon est positionné de façon excentrée. Un tel déplacement non uniforme pourrait engendrer un blocage des mâchoires, phénomène qui n'a par contre pas été observé lors des tests expérimentaux, car le bilan de force des cellules de charge externes est en équilibre avec la force lue par la cellule de charge interne.

Valeur	Modèle
Déplacement en B	$-2.23 \cdot 10^{-7} mm$
Déplacement en C'	1.77 mm
Déplacement en D'	1.59 mm
Déplacement en E	0.642 mm
Déplacement en F	
Nord :	0.449 mm
Sud :	0.835 mm
Axe central :	0.642 mm

Tableau 5-5: Déplacements calculés à partir du modèle pour l'essai avec une poutre décentré de 8 po vers le sud

Tableau 5-6: État de la poutre calculé à partir du modèle pour l'essai avec une poutre décentré de 8 po vers le sud

Valeur	Modèle
Allongement	-0.178 mm
Déformation	−255 με
Contrainte	-51.06 MPa

Grâce au modèle, on peut déterminer la relation entre l'allongement de la poutre et le déplacement des diverses composantes du banc d'essai. On pose d'abord que l'allongement de la poutre est égal au déplacement de chacune de ses deux extrémités :

$$\delta_P = u'_D - u'_C \tag{5.1}$$

Chacun des déplacements des extrémités de la poutre est fonction de la déformation des éléments du montage ainsi que des mesures de déplacement des mâchoires. Ainsi :

$$\delta_{P} = (u_{F'} + \delta_{me} + \delta_{cci}) - (u_{A'} + \delta_{mo} + \delta_{v})$$

$$= \left(u_{F} + \frac{u_{Fn} - u_{Fs}}{2d} \cdot a - \frac{F_{me}}{K_{me}} - \frac{F_{cci}}{K_{cci}}\right) - \left(u_{A} + \frac{u_{An} - u_{As}}{2d} \cdot a + \frac{F_{mo}}{K_{mo}} + \delta_{v}\right)$$
(5.2)

Si l'on pose l'excentricité comme étant nulle et les mâchoires comme étant rigide, on retombe sur une équation beaucoup plus simple, telle que :

$$\delta_p = u_F - u_A - \delta_v \tag{5.3}$$

Cette équation représente la méthode classique de mesure sur BERTA, soit la mesure des déplacements de ses mâchoires en faisant l'hypothèse qu'elles sont indéformables. En considérant le mouvement de la mâchoire fixe comme étant nul, l'allongement de la poutre peut donc être mesuré à l'aide de deux LVDT : un premier derrière la mâchoire mobile et un deuxième mesurant l'extension du vérin. Cependant, cette simplification soulève un questionnement : peut-on réellement supposer que l'excentricité du positionnement de la poutre est toujours nulle et que les mâchoires sont effectivement rigides? Sinon, quel est l'impact de ces hypothèses sur la précision du résultat? C'est à ces questions que tentera de répondre l'analyse de sensibilité.

5.4.5 Analyse de sensibilité

L'analyse de sensibilité sur le montage simplifié utilisant uniquement une poutre d'acier permet d'étudier plus aisément les relations entre certaines caractéristiques du montage sur les mesures obtenues, étant donné la connaissance du comportement de l'échantillon testé. Comme montré avec l'équation 5.1, plusieurs composantes du montage peuvent avoir un impact sur le calcul de l'allongement de la poutre. Il est donc nécessaire de quantifier l'impact des paramètres du montage sur la réponse de dernier. La sensibilité des différents paramètres du montage sera ainsi étudiée en fonction de la force mesurée par les cellules de charge, du déplacement des mâchoires, de l'élongation des tirants ainsi que de l'élongation de la poutre. On utilise les mêmes valeurs numériques que celles présentées à la section précédente pour les déplacements des éléments du banc d'essai ainsi que pour l'excentricité de la poutre. La figure 5-10 montre la sensibilité du système en fonction de la force dans le vérin.



L'observation de la sensibilité du système à la force appliquée par le vérin montre que les relations obtenues sont linéaires. C'est donc dire que l'évolution de la force dans le vérin affecte proportionnellement l'allongement de la poutre ainsi que le mouvement des composantes du montage, ce qui correspond au comportement attendu du système. La figure 5-10-a montre que les cellules de charges externes mesurent directement la même force que celle subite par l'échantillon, ce qui confirme une des hypothèses de base du montage. Il importe de noter que l'intensité des déplacements de la mâchoire (5-10-b) est 4 fois plus grande que celui de l'élongation de la poutre (5-10-d) ou des tirants (5-10-c) et ce, en réaction à la déformation des cellules de charges externes.

Pour ce qui est de la sensibilité du système à l'excentricité du positionnement de la poutre par rapport à son axe central (figure 5-11), la relation est également linéaire tout en montrant que l'équilibre des forces est en tous points respecté. Aucune influence n'est observée sur le déplacement total de la mâchoire mobile (figure 5-11-b), ce qui montre que ce paramètre influence seulement l'axe selon lequel la mâchoire mobile se déplacera. Il faut tout de même faire attention afin de ne pas causer de blocage dans la mâchoire en imposant une excentricité trop importante.





La sensibilité du système à la rigidité de la cellule de charge interne montre des informations tout aussi intéressantes. Il est à noter que les figures 5-12, 5-13 et 5-14 utilisent un paramètre multiplicatif c qui permet de faire varier l'intensité de la rigidité des mâchoires. On remarque dans ces figures que l'influence de la rigidité de la cellule de charge interne sur le mouvement de la mâchoire mobile (figure 5-12-a) est nulle alors qu'elle influence de façon exponentielle le déplacement des extrémités de la poutre (figure 5-12-b). C'est donc que la rigidité des éléments situés à l'intérieur des mâchoires de BERTA influence directement la lecture du mouvement de ces extrémités. Il devient alors très important de sélectionner la rigidité de la cellule de charge utilisée en fonction de l'intensité des déplacements à mesurer afin de ne pas nuire à la précision de la mesure. Ainsi, pour un matériau moins rigide, il serait avantageux de réduire la rigidité de la cellule de charge afin de permettre au matériau de mettre en mouvement la mâchoire mobile.



(a) Déplacement de la mâchoire mobile Figure 5-12: Sensibilité du système par rapport à la rigidité de la cellule de charge interne (noté c)

(b) Élongation de la poutre

Même constat au niveau des cellules de charges externes où leur influence sur le déplacement

des extrémités de la poutre est exponentielle en fonction de leurs rigidités. Il est cependant intéressant de remarquer que le déplacement de la mâchoire est également très sensible à la rigidité des cellules de charges, contrairement au cas de la cellule de charge interne. Ceci est toutefois logique puisque celles-ci sont placées derrière la mâchoire mobile et ainsi, influencent



sur son déplacement. Finalement, il est intéressant de remarquer que la mesure des extrémités de la poutre semble être légèrement plus sensible à la rigidité des cellules de charge externes (Figure 5-13) qu'à la rigidité de la cellule de charge interne (Figure 5-12). En effet, considérant une rigidité de référence identique pour les cellules de charge externes et interne, on obtient des déplacements plus grands avec une cellule de charge externe.





Finalement, l'analyse de l'effet de la rigidité des mâchoires sur l'élongation de la poutre, tel que montré à la figure 5-14-b, nous donne un résultat très intéressant. Effectivement, lorsque la rigidité de la mâchoire diminue, on observe une augmentation très rapide des valeurs de déplacements aux extrémités de la poutre. Il faut donc être très critique en regard de l'hypothèse selon laquelle les mâchoires de BERTA sont rigides étant donné que le système est extrêmement sensible à la variation de la rigidité de la mâchoire. De plus, la précision de la mesure de l'allongement de la poutre peut être diminuée dans un cas où la déformation des mâchoires est importante face à la valeur d'allongement de la poutre. Afin d'éviter cette situation, il serait pertinent de mesurer l'allongement de la poutre en mesurant directement le déplacement de ses extrémités.



Figure 5-14: Sensibilité du système par rapport à la rigidité des mâchoires (noté c)

5.4.6 Conclusions partielles

La comparaison des résultats provenant du modèle analytique avec les résultats expérimentaux a permis de valider l'approche adoptée pour le développement du modèle. L'analyse de la sensibilité des composantes a permis de confirmer l'hypothèse selon laquelle les cellules de charge externes sont bel et bien en mesure de calculer la force développée par un montage mécanique installé à l'intérieur de son enceinte. Cette analyse a également soulevé le fait que lors d'un test mécanique, l'utilisation d'une cellule de charge interne n'a que peu d'effet sur la précision du montage, les valeurs de forces mesurées par les deux systèmes de mesure de force étant très similaires. De plus, il a été soulevé que l'hypothèse selon laquelle les mâchoires de BERTA peuvent être considérées comme rigides peut amener une erreur importante au niveau du suivi de l'allongement d'un échantillon. Finalement, certains questionnements ont été soulevés quant à l'impact de la rigidité des cellules de charges et des mâchoires sur la réponse du montage. L'ensemble de ces observations doit cependant être vérifié lors d'un test thermomécanique afin de valider l'analyse effectuée.

5.5 RETOUR SUR LES TESTS THERMOMÉCANIQUES SUR BERTA (2009)

5.5.1 Configuration de BERTA pour les tests

Une deuxième série de tests a été effectuée en novembre 2009 par l'équipe du CRDA, en prévision du début du présent projet. Suite aux résultats positifs des essais mécaniques de 2008, la suite logique était d'effectuer un ensemble de tests thermomécanique en utilisant, encore une fois, une poutre en acier dont le comportement thermomécanique est bien connu. Trois tests avec des conditions identiques ont été effectués. Étant donné la similitude des résultats obtenus, une seule des trois expériences sera analysée dans cette section.

Le montage étant utilisé dans sa configuration originale, la force dans la poutre est mesurée à l'aide des deux cellules de charge localisées derrière la mâchoire mobile. Afin de suivre l'allongement de la poutre, une série de LVDT a été placée au centre de la mâchoire mobile, comme montré à la figure 5-6. L'utilisation de LVDT à cet endroit suppose que les mâchoires sont non-déformables et que la mâchoire fixe ne bougera pas et qu'ainsi, l'allongement de la poutre sera capturé via le mouvement de la mâchoire mobile. Cette hypothèse n'ayant pas encore été infirmée à ce moment, il était alors plausible d'effectuer la mesure du déplacement de l'échantillon en utilisant cette technique déjà utilisée par le passé.

Afin de provoquer l'expansion thermique de la poutre, le capot chauffant de BERTA est placé au-dessus de l'enceinte. Celui-ci est ensuite programmé pour atteindre 50 °C après 75 minutes, stabiliser sa température pendant 100 minutes et finalement, atteindre une température de 150°C après 200 minutes. Afin de minimiser l'impact de la montée en température sur les autres composantes de BERTA, l'enceinte de test est isolée à l'aide de panneaux isolants, tels que montrés à la figure 5-15.



Figure 5-15: Photo du montage utilisé [31]

La poutre est instrumentée à mi-longueur à l'aide de deux jauges de déformations situées sur les deux ailes, du côté nord et sud de la poutre, au niveau de la jonction avec l'âme. De plus, un total de 10 thermocouples a été fixé sur la partie supérieure de l'âme de la poutre à égale distance l'un de l'autre. Finalement, la poutre est installée sur l'axe central de BERTA, en utilisant deux briques réfractaires comme points d'appui sur les mâchoires.

5.5.2 Résultats expérimentaux

L'évolution de la force lue par les cellules de charge est montrée à la figure 5-16. De façon générale, les résultats obtenus par les deux cellules de charge externes indiquent que la poutre n'était pas parfaitement centrée sur l'axe central des mâchoires de BERTA, étant donné l'écart existant entre ces deux courbes. Il s'agit cependant de la seule observation que nous pouvons faire en ce moment.

Afin de permettre une analyse plus poussée des résultats, on s'attardera ici aux données recueillies à t=297 minutes. Il s'agit de mesures obtenues lors du deuxième plateau de température (150°C) alors que la température dans l'enceinte de BERTA était stabilisée. Le profil de température mesuré sur la poutre à ce moment est montré à la figure 5-17. À ce moment, la température au centre de la poutre est 13% plus élevée que la moyenne alors que la température

aux extrémités est 13% inférieure à cette même moyenne. Le profil thermique obtenu est ainsi symétrique suivant une variation quadratique, en accord avec la théorie du transfert de chaleur par conduction dans un solide. Cependant, la température dans l'enceinte pourrait être plus uniforme que ce qui a été observé et ainsi, il aurait été pertinent d'utiliser un temps de stabilisation plus long ou encore, une montée en température sur une plus grande période de temps. Il se pourrait également que la conduction thermique dans les briques réfractaires soit trop importante : un autre matériau possédant une conductivité thermique plus faible pourrait éventuellement être utilisé.



Figure 5-16: Résultats des tests thermomécaniques [31]



Figure 5-17: Courbe de température obtenue à t=297 minutes

Les lectures des différents instruments de mesure installés pour le test et ce, pour le temps de référence retenu, sont montrées au tableau 5-7. On constate alors que la déformation mesurée par les jauges de déformation semble plutôt petite, étant de l'ordre du $\mu \varepsilon$. Cela suppose donc que la poutre ne subit que de très faibles déformations durant le test alors que la mesure des déplacements de la mâchoire mobile montre une tendance contraire. Une comparaison des différentes valeurs doit donc être faite afin de déterminer si les mesures concordent entre elles.

Valeur	Résultat
Force dans les cellules de charges	60.89 kN
-Nord	26.02 kN
-Sud	34.87 kN
Déplacement de la mâchoire mobile	0.6015 mm
Déformation totale moyenne	−10.68 με
-Nord	8.14 με
-Sud	—29.50 με

Tableau 5-7: Résultats expérimentaux à t=297 min pour l'essai thermomécanique

Si l'on utilise les valeurs de déformations mesurées, on peut d'abord calculer l'allongement de la poutre (ΔL_P) tel que :

$$\varepsilon_{tot} = \frac{\Delta L_p}{L_p} \tag{5.4}$$

où L_p est la longueur de la poutre. On peut ensuite identifier la contrainte à l'intérieur de la poutre à l'aide de l'équation de Hooke :

$$\sigma = E \cdot \varepsilon_m \tag{5.5}$$

où la déformation d'origine mécanique est égale à la déformation totale moins la déformation d'origine thermique, selon le principe de sommation des déformations :

$$\varepsilon_m = \varepsilon_{tot} - \varepsilon_{th}$$
 (5.6)

La déformation totale est celle mesurée par les jauges de déformation. Dans le cas présent, une moyenne est calculée à partir des deux mesures disponibles. Au niveau de la déformation d'origine thermique, son calcul passe par l'intégration du profil de température sur la longueur de la poutre. Ainsi, la déformation d'origine mécanique à l'axe neutre de la poutre est déterminée à partir de la relation:

$$\varepsilon_{m,axe\ neutre} = \frac{\varepsilon_{nord} + \varepsilon_{sud}}{2} - \frac{\alpha}{L_P} \int_0^{L_P} (T(x) - T_0) \, dx \tag{5.7}$$

où T(x) est donné par la distribution présentée à la figure 5-17. Cette équation permet alors de connaître la contrainte associée à la déformation lue par les jauges de déformation, via l'équation 5.5. Il est aussi possible de calculer la valeur du moment fléchissant parasite causant la différence de déformation entre la jauge nord et la jauge sud par rapport à la déformation à l'axe neutre.

Ainsi, si l'on développe l'expression de la contrainte normale aux extrémités nord et sud de la poutre, on obtient :

$$\sigma_x = \sigma_{x,N} + \sigma_{x,M} \tag{5.8}$$

où $\sigma_{x,N}$ est la contrainte normale due à l'effort normal et $\sigma_{x,M}$ est la contrainte normale causée par le moment fléchissant. Le développement de cette équation mène à :

$$\sigma_{x,N} = E \cdot \varepsilon_{m,nord} = \frac{F}{A} + \frac{My}{EI}$$
(5.9)

L'effort normal est calculé à partir de l'équation suivante :

$$F = \frac{E \cdot \varepsilon_{m,axe \ neutre}}{A}$$
(5.10)

Et le moment fléchissant est calculé en isolant sa valeur dans l'équation 5.9 :

$$M = \frac{EI}{y} \left(E \cdot \varepsilon_{m,nord} - \frac{F}{A} \right)$$
(5.11)

Les résultats de ces calculs sont montrés au tableau 5-8, en considérant les propriétés géométriques de la poutre à l'étude.

150

Quantité calculée	Valeur
Allongement à l'axe neutre (eq. 5.3)	-0.0114 mm
Effort normal (eq. 5.10)	-1208 kN
Moment de flexion (eq 5.11)	$-0.539 kN \cdot m$
Contrainte normale à l'axe neutre	370 MPa
Contrainte normale minimale	366 MPa
Contrainte normale maximale	374 MPa

Tableau 5-8: État de la poutre calculé à partir des données de déformations pour l'essai thermomécanique

Le premier constat est que l'allongement de la poutre à l'axe neutre calculé représente une partie minuscule des mesures de déplacements de la mâchoire mobile mesurée par les LVDT, telle que présentés au tableau 5-7. De plus, l'existence d'une valeur non nulle de moment de flexion parasite implique que le transfert de force vers la poutre n'est pas parfaitement axial, comme mentionné suite à l'analyse de la figure 5-16. Ceci peut être causé par un alignement imparfait de la poutre dans l'enceinte lors de l'installation, à la dérive de certaines composantes du montage provoquant un désaxage de la mâchoire mobile ou encore un blocage partiel de cette dernière. Finalement, la contrainte calculée est supérieure à la limite élastique de l'acier, ce qui implique la plastification potentielle de la poutre. Afin de démontrer l'absurdité de ces résultats, on peut les comparer à ceux du cas extrême pouvant survenir dans un test thermomécanique soit celui d'une poutre étant parfaitement encastrée. Les résultats pour un tel cas ont été calculés à partir des mêmes équations et sont montrés au tableau 5-9.

Quantité calculée	Valeur
Déformation totale à l'axe neutre	0 με
Allongement à l'axe neutre (eq. 5.3)	0 <i>mm</i>
Effort normal (eq. 5.9)	$-1040 \ kN$
Moment de flexion (eq 5.10)	$0 kN \cdot m$
Contrainte normale à l'axe neutre	319 MPa
Contrainte normale minimale	319 MPa
Contrainte normale maximale	319 MPa

Tableau 5-9: Calcul de l'état de la poutre pour un cas complètement encastré

On observe alors que les déformations mesurées expérimentalement nous amènent au calcul d'un état de contrainte comparable à ceux d'une poutre parfaitement encastrée. Une combinaison de plusieurs facteurs peut expliquer ces résultats :

- Un blocage partiel ou total de la mâchoire mobile de BERTA;
- Une dilatation thermique non négligeable des mâchoires de BERTA;
- Une déformation mécanique des mâchoires de BERTA lors du chargement;
- Une lecture erronée au niveau des jauges de déformations.

Ces facteurs n'apparaissent cependant que lors de tests thermomécaniques, expliquant pourquoi l'écart entre les valeurs de déformation calculées et mesurées n'était pas présent lors des tests mécaniques de 2008. Afin de permettre une analyse plus poussée de ces phénomènes, l'ensemble de ces facteurs d'erreur sera donc étudié à l'aide d'un modèle analytique.

5.5.3 Modèle analytique

Le modèle analytique développé pour ce test possède certaines ressemblances avec celui développé pour les tests mécaniques de la section précédente. Cependant, la déformation d'origine thermique complique légèrement les équations. La figure 5-18 montre une représentation schématique de la configuration ainsi que les points de contrôle utilisés pour construire le modèle.





Figure 5-18: Schéma de la configuration de BERTA pour le test

Tout d'abord, les relations force-allongement ont été définies comme suit :

Poutre : $F_{p} = K_{p} \left(e_{p} - \alpha_{p} \int_{0}^{L_{p}} (T_{p} - T_{r}) dx \right)$ Briques : $F_{be} = K_{b} (\delta_{be} - \alpha_{b} L_{b} (T_{be} - T_{r}))$ $F_{bo} = K_{b} (\delta_{bo} - \alpha_{b} L_{b} (T_{bo} - T_{r}))$ Tirants (nord, sud) : $F_{tn} = K_{t} \left(e_{tn} - \alpha_{t} \int_{0}^{L_{t}} (T_{tn} - T_{r}) dx \right)$ $F_{ts} = K_{t} \left(e_{ts} - \alpha_{t} \int_{0}^{L_{t}} (T_{ts} - T_{r}) dx \right)$ Cellules de charge (nord, sud) :

$$F_{ccn} = K_{cc}\delta_{ccn}$$
$$F_{ccs} = K_{cc}\delta_{ccs}$$

Mâchoires de BERTA (ouest, est) :

 $F_{mo} = K_{mo}\delta_{mo}$ $F_{me} = K_{me}\delta_{me}$

9 équations, 18 inconnus

En définissant les rigidités des diverses composantes comme étant :

$$K_b = \frac{E_b A_b}{L_b}$$
$$K_p = \frac{E_p A_p}{L_p}$$
$$K_t = \frac{E_t (2A_t)}{L_t}$$

Les rigidités des autres composantes sont considérées comme des valeurs numériques connues. Au niveau des mâchoires, une rigidité axiale équivalente est utilisée afin de simplifier la relation. Par la suite, on développe les relations allongement-déplacement. Toutes les valeurs ayant le symbole « ' » sont considérées comme des points de contrôle étant déplacés vers le nord, selon l'excentricité du positionnement de la poutre. Ainsi :

Relations allongement-déplacement			
Poutre :			
	$\delta_p = u_{D'} - u_{C'}$		
Briques (ouest, est):			
	$\delta_{bo} = u_{C'} - u_{B'}$		
Tirants (pord sud) :	$\delta_{be} = u_{E'} - u_{D'}$		
Tirants (nord, sud) :	$\delta = u_{-} - u_{-}$		
	$\delta_{tn} = u_{Gn} u_{An}$ $\delta_{tc} = u_{Cc} - u_{Ac}$		
Cellules de charge (nord, sud) :			
	$\delta_{ccn} = u_{Gn} - u_{Fn}$		
	$\delta_{ccs} = u_{Gs} - u_{Fs}$		

Mâchoires de BERTA (ouest, est) :

$$\delta_{mo} = u_B - u_A$$

 $\delta_{me} = u_F - u_E$

9 équations, 14 inconnus

On procède ensuite à la mise en équation de l'équilibre du système :





Ce qui nous amène à un total de 30 équations pour 38 inconnus. En supposant une rotation rigide des mâchoires, on obtient les équations de compatibilité géométriques suivantes :

Compatibilité géométrique					
Rotation rigide des mâchoires :					
	$u_A = \frac{u_{An} + u_{As}}{2}$ $u_F = \frac{u_{Fn} + u_{Fs}}{2}$ $u_{B'} = u_B + \frac{u_{An} - u_{As}}{2d} \cdot a$ $u_{F'} = u_F + \frac{u_{Fn} - u_{Fs}}{2d} \cdot a$				
	2a	4 équations, 0 inconnus			

Finalement, on fixe les conditions limites telles que:

	Conditions limites	
Excentricité de la poutre :		
	$a = \overline{a}$	
Moment dans la poutre :		
	$M_p = \overline{M}_p$	
Déplacement de la structure :		
	$u_{An} = \overline{u}_{An}$	
	$u_{AS} = \overline{u}_{AS}$	-
		8 équations, 14 inconnus

Au final, on obtient 38 équations pour 38 inconnus et donc, le système peut être résolu. L'ensemble du modèle analytique a donc été implémenté et résolu dans le logiciel Maple[™].

5.5.4 Analyse des résultats du modèle

Il est supposé que la poutre a été minutieusement placée au centre de l'enceinte et ainsi, on peut considérer l'excentricité de la position de la poutre comme étant nulle. Les déplacements de la mâchoire fixe sont aussi fixés à 0 alors que le moment de flexion dans la poutre est fixé à la valeur calculée à partir des jauges de déformations.

Conditions limites			
Excentricité de la poutre :			
$\bar{a} =$	0 <i>mm</i>		
Moment dans la poutre :			
$M_p = -0$.539 $kN \cdot m$		
Déplacement de la structure :			
u_A	$n_{n} = 0$		
u _A	$s_s = 0$		

Les résultats obtenus par le modèle analytique sont présentés au tableau 5-10.

Valeur	Expérimental	Modèle	Écart		
Force dans les cellules de charges	60.89 kN	381.54 <i>kN</i>	526 %		
-Nord	26.02 kN	190.37 kN	850 %		
-Sud	34.87 <i>kN</i>	191.17 kN	448 %		
Déplacement de la mâchoire mobile	0.6015 mm	1.09 mm	82 %		
Allongement de la poutre à l'axe neutre (à partir des jauges de déformation)	-0.0114 mm	1.08 mm	9577 %		
Effort normal dans la poutre	-1208 kN	-381 kN	64 %		

D'un point de vue général, on remarque que les écarts entre les valeurs expérimentales et les valeurs du modèle sont très grands. Premièrement, les forces mesurées par les cellules de charges sont grandement différentes de celles calculées à l'aide du modèle. Il se pourrait qu'une partie de la force de la poutre soit transférée aux rails par l'entremise d'un blocage partiel ou total. Si l'on compare les déplacements de la mâchoire mobile à ceux de l'allongement de la poutre à l'axe neutre, le modèle analytique nous montre que la totalité du déplacement est transférée à la mâchoire mobile. Ceci est explicable par l'hypothèse initiale stipulant que la mâchoire mobile est

non déformable. Cependant, au niveau des résultats expérimentaux, la grande différence entre ces résultats laisse perplexe quant au comportement de cette mâchoire. En effet, le déplacement de la mâchoire mobile représente la moitié du déplacement calculé par le modèle alors que l'allongement de la poutre est presque nul et en sens inverse. La seule explication pouvant expliquer ce phénomène consiste à ce que la mâchoire mobile se soit dilatée thermiquement durant le test, bloquant son mouvement à partir d'un certain point. À partir de ce moment, la poutre ne pouvant plus prendre de l'expansion, un effort important en compression serait apparu de manière semblable à un cas de poutre encastrée. Cette analyse confirme l'hypothèse émise plus tôt selon laquelle la mâchoire mobile se serait bloquée durant le test.

Un dernier exercice consiste à utiliser le modèle analytique pour construire la relation forceallongement de la poutre. L'allongement de la poutre est calculé à partir du déplacement de ses extrémités :

$$\delta_p = u_{D'} - u_{C'} \tag{5.12}$$

Développons cette expression afin de voir apparaître les points de mesure du montage en A et en F :

$$\delta_p = (u_{F'} + \delta_{me} + \delta_{be}) - (u_{A'} + \delta_{mo} + \delta_{bo})$$
(5.13)

En utilisant les équations développées pour définir le modèle analytique du comportement de BERTA pour remplacer la valeur des déplacements des composantes, on définit la relation forcedéplacement de l'échantillon tel que :

$$\delta_P = \left(u_F + \frac{u_{Fn} - u_{Fs}}{2d} \cdot a + \frac{F_{me}}{K_{me}} + \delta_{be}\right) - \left(u_A + \frac{u_{An} - u_{As}}{2d} \cdot a + \frac{F_{mo}}{K_{mo}} + \delta_{bo}\right)$$
(5.14)

L'obtention de la relation 5.14 exige la connaissance de certains paramètres du système difficiles à obtenir, comme la rigidité des mâchoires fixes et mobiles ou encore la rigidité des briques d'alumine. De plus, le résultat sera grandement influencé par la rigidité des diverses composantes du système. Cette analyse porte à conclure qu'une solution possible afin d'améliorer la précision de la mesure consisterait à se rapprocher de l'échantillon et de mesurer le déplacement de ses deux extrémités le plus directement possible.

5.5.5 Analyse de sensibilité

Afin de déterminer l'impact de certains paramètres des équations du modèle analytique, une analyse de sensibilité a été effectuée. Additionnellement, la comparaison de cette analyse de sensibilité avec celle faite pour le montage mécanique pourra permettre de mieux comprendre le comportement du banc d'essai.

Premièrement, la figure 5-19 montre la sensibilité de divers paramètres à l'excentricité de la position de la poutre dans l'enceinte. Comme l'illustre l'ensemble des graphiques présentés, l'impact de l'excentricité sur l'ensemble des valeurs est exponentiel, ce qui pourrait mener à diminution de la précision de mesure si le positionnement de l'échantillon est imparfait. Cependant, au niveau du déplacement total de la mâchoire mobile ou encore au niveau de la force mesurée par les cellules de charge, on remarque qu'une petite excentricité, jusqu'à 50 mm, n'a que peu d'impact sur la réponse du système. Ainsi, l'installation de l'échantillon dans l'enceinte doit être faite avec une certaine précaution afin de s'assurer que celui-ci repose directement dans l'axe central des mâchoires de BERTA. Cependant, l'effet d'une faible excentricité, inévitable dans une telle situation, n'aura pas d'impact significatif sur le comportement du montage. Le modèle analytique n'est cependant pas en mesure de nous donner d'information sur l'effet de l'excentricité sur les possibilités de blocage de la mâchoire mobile, phénomène qui a semblé apparaître durant les tests.



Au niveau du moment de flexion dans la poutre (figure 5-20), son impact est négligeable sur la réponse du système. Cette analyse est concordante avec le modèle analytique puisque le moment parasite dans la poutre est causé par une excentricité de la position de l'échantillon par rapport à l'axe central des mâchoires.



Figure 5-20: Sensibilité du système par rapport au moment dans la poutre

L'analyse est toute autre pour ce qui est de l'impact de la rigidité des cellules de charge externes, tel que présenté à la figure 5-21. Cette figure montre que la variation de la rigidité des cellules de charges a un impact significatif sur la réponse du système. C'est au niveau de la force dans la poutre que l'impact semble le plus important alors que celle-ci passe de -375 kN à -250 kN lorsque la rigidité de la cellule de charge interne est diminuée de moitié. Une cellule de charge plus rigide aura pour effet de restreindre l'allongement de la poutre et par le fait même, de développer des efforts plus importants dans cette dernière. La sélection de la rigidité de la cellule de charge nura ainsi un grand impact sur le niveau de déformation de l'échantillon.



(a) Déplacement de la mâchoire mobile (b) Force dans la poutre Figure 5-21: Sensibilité du système par rapport à la rigidité des cellules de charge

Un autre paramètre du modèle fait ressortir un résultat étonnant lors de l'analyse des données en sensibilité. En effet, l'effet de l'accroissement de la température dans les tirants (figure 5-22) a montré un impact important sur le comportement de BERTA. À cet effet, la figure 5-22-c indique un effet de la température des tirants sur la force dans la poutre de 8.4 kN/°C. C'est donc dire que l'isolation de l'enceinte est primordiale lors de tests thermomécaniques et que la sensibilité du montage aux effets thermiques est de première importance. Ces résultats portent aussi à réflexion sur le niveau d'isolement utilisé pour les tests. Il se pourrait très bien que l'isolement thermique ait été trop faible pour contenir l'énergie thermique du montage et que les différentes composantes de BERTA aient réagi plus intensément que prévu lors de ces tests.





(a) Déplacement de la mâchoire mobile





(b) Élongation de la poutre



Finalement, la sensibilité du système vis-à-vis la rigidité axiale équivalente des mâchoires a été étudiée (figure 5-23). Cette analyse démontre l'effet considérable de la rigidité de cette composante sur le comportement du montage. Il semble clair que la déformation de ces mâchoires ne peut être négligée et qu'ainsi, la rigidité axiale équivalente de celles-ci devrait être quantifiée afin de pouvoir suivre le comportement d'un échantillon à l'intérieur de l'enceinte de
BERTA. De manière plus optimale, ce mécanisme important serait contourné lors de la prise de mesure en utilisant une méthode de mesure directe de l'échantillon, méthode déjà suggérée dans les sections précédentes. Ainsi, le suivi du comportement d'un échantillon s'affranchirait du comportement thermomécanique de BERTA.







Figure 5-23: Sensibilité du système par rapport à la rigidité des mâchoires

5.5.6 Conclusions partielles

L'analyse des tests thermomécanique a soulevé plusieurs questionnements fondamentaux sur le comportement de BERTA. Tout d'abord, il semblerait que la mâchoire mobile de BERTA se coince lors d'essai thermomécanique, comme l'a démontré la comparaison des mesures de jauges de déformations avec les déformations obtenues d'un cas théorique considérant un échantillon encastré. Les résultats du modèle analytique confirment cette hypothèse de par la grande différence avec les résultats expérimentaux. Il s'agit là d'une inquiétude maintes fois soulevée lors de tests antérieurs menés sur ce banc d'essai et qui semble être confirmée par l'analyse des résultats expérimentaux actuels. Il serait donc très important de connaître les causes exactes de ce blocage afin de l'éviter lors de campagnes expérimentales futures. L'effet de l'excentricité de la position de l'échantillon ainsi que l'effet d'un moment de flexion « parasite » a cependant été démontré comme étant négligeable par l'analyse des résultats du modèle. Ainsi, il demeure important d'installer minutieusement l'échantillon dans une position centrée à l'intérieur de l'enceinte afin d'être en mesure de négliger l'effet d'une faible excentricité qui sera néanmoins toujours présente. Finalement, l'impact de l'augmentation de température des diverses composantes du montage ainsi que de la rigidité des mâchoires sur l'ensemble des résultats a été démontré et tend à promouvoir l'utilisation d'une méthode plus directe pour la mesure de l'allongement de la poutre.

5.6 NOUVELLE SÉRIE DE TESTS EXPÉRIMENTAUX

5.6.1 Généralités

Afin de combler certaines lacunes des essais précédents, une campagne expérimentale importante sur le comportement de BERTA a été initiée dans ce projet. Cinq types d'essais ont été réalisés, et ce, sur une période de temps s'étalant sur 4 mois. Cette série de tests comprend :

• Tests de frottement sur la mâchoire mobile à température ambiante

Ces essais avaient pour objectifs de déterminer le niveau de frottement présent dans les rails de BERTA permettant à la mâchoire mobile de se déplacer.

2 tests mécaniques avec montage original de BERTA

Ces essais utilisent le montage de BERTA dans sa configuration usuelle comprenant deux cellules de charges externes positionnées derrière la mâchoire mobile. Des LVDT additionnels ont été ajoutés afin de suivre le déplacement de l'ensemble des composantes du montage.

• 5 tests mécaniques avec montage modifié de BERTA utilisant une seule cellule de charge interne

Ces essais ont permis de tester une configuration différente au niveau des cellules de charge en utilisant une seule cellule positionnée à l'intérieur de l'enceinte. L'ensemble des mesures a été effectué de façon à se rapprocher de l'échantillon le plus possible, et ce, avec un nombre important de LVDT.

• 2 tests thermomécaniques avec montage original de BERTA

Cette série de tests thermomécaniques utilise le montage classique de BERTA lors de tests thermomécaniques. Les deux cellules de charge externes sont utilisées et les déplacements des diverses composantes sont mesurés à partir de l'extérieur de l'enceinte. Encore une fois, un nombre de LVDT supérieur à la normale a été utilisé afin de permettre l'analyse complète du comportement du banc d'essai.

2 tests thermomécaniques avec montage modifié de BERTA utilisant une seule cellule de charge interne

Cette dernière série de tests utilise l'ensemble des connaissances recueillies lors des tests précédents afin d'instrumenter BERTA de la manière la plus optimale possible. Ainsi, une cellule de charge interne a été utilisée avec des LVDT qui mesuraient directement l'allongement de la poutre en passant au travers de la mâchoire mobile.

Pour des raisons de concision et de clarté, un nombre limité de tests sera présenté et analysé dans ce document. Ainsi, les résultats et l'analyse des tests de frottement à température ambiante seront d'abord présentés. Par la suite, les modifications effectuées sur le montage thermomécanique à une cellule de charge seront présentées. Les résultats de ces derniers tests permettront de tirer des conclusions sur l'ensemble de la méthode de mesure utilisée pour le montage de BERTA.

5.6.2 Tests de frottement à température ambiante

Les tests de frottement ont comme objectif spécifique de déterminer si la mâchoire mobile offre une résistance significative à sa mise en mouvement. Pour ce faire, un dynamomètre a été fixé à la mâchoire mobile pour ensuite être tiré (figure 5-24). L'appareil enregistre alors la valeur de la force maximale atteinte, ce qui correspond à la valeur nécessaire afin de vaincre les forces de frottement. Le tableau 5-11 présente les résultats de ces tests.



Figure 5-24: Montage utilisé pour les essais de frottement

Valeur	Résultat
Force moyenne pour déplacer la mâchoire	110.7 N
Masse de la mâchoire (théorique)	546 kg
Coefficient de friction statique moyen	0.02

Tableau 5-11: Résultats des tests de frottement à température ambiante

Les résultats nous indiquent que la friction est négligeable dans les rails de la mâchoire mobile de BERTA. La force de 110 N est beaucoup plus faible que ce qui a été enregistré au cours des tests précédents, comme ceux présentés à la figure 5-16. Cependant, ce test ne nous informe pas sur les risques de blocage du système lors d'essais thermomécaniques. Il serait intéressant de pouvoir effectuer un test semblable lorsque l'enceinte de BERTA est chauffée jusqu'à une certaine température afin de déterminer si les conditions thermiques du montage affectent la valeur de friction dans les rails de la mâchoire mobile. Ce type de test n'a cependant pas été réalisé, dû à des contraintes de temps.

5.6.3 Tests thermomécaniques

Configuration de BERTA pour les tests

Le test thermomécanique proposé lors de la campagne de validation du montage BERTA utilise certaines méthodes de mesures différentes par rapport au montage dit classique du banc d'essai. La figure 5-25 montre un schéma du montage utilisé.



Figure 5-25: Montage utilisé pour les tests thermomécaniques à une cellule de charge

Tout d'abord, une seule cellule de charge interne a été installée dans l'espace libre au centre de la mâchoire mobile. Par la suite, deux LVDT ont été installés de manière à mesurer directement le mouvement de l'extrémité est de la poutre. Pour ce faire, ceux-ci ont été allongés à l'aide de tiges d'alumines (en jaune sur la figure 5-25) passant au travers de la mâchoire mobile. Deux thermocouples par tiges ont été installés sur celle-ci afin de suivre l'évolution de leur température. D'autres LVDT ont été installés de façon à suivre le déplacement des mâchoires ainsi que des tirants. Finalement, une série de jauges de déformations et de thermocouples installés sur la

poutre ont permis de suivre l'évolution de l'état de déformation de celle-ci. L'enceinte a ensuite été isolée à l'aide de panneaux isolants placés autour de la poutre en acier.

Pour l'essai proprement dit, la poutre est chauffée via l'utilisation du capot chauffant jusqu'à une température de 100 °C, tout en passant par un plateau de température à 50 °C. L'enceinte est isolée thermiquement à l'aide de panneaux réfractaires, tel que montré à la figure 5-26. Les différentes mesures de déplacements et de température sont prises de façon continue, et ce, pendant tout le test dont la durée totale est de 12 heures.



Figure 5-26: Isolation de l'enceinte de BERTA lors des tests (sans l'installation de la cellule de charge interne)

Résultats expérimentaux

Afin de permettre l'analyse des résultats, les mesures obtenues à 800 minutes ont été extraites. Ces valeurs correspondent au plateau de 100°C atteint lors de l'expérience. Le tableau 5-12 montre un résumé des valeurs mesurées lors de cet essai.

Tableau 5-12: Résultats ex	périmentaux à t=800 min	pour l'essai thermomé	caniqu	ue à	une cellule de ch	arge
Tubicuu 5 IL. Nesultuts ex		pour ressurtmenne	curriq	uc u	une centrale de en	- BC

Valeur		Résultat
Force dans la cellule de charge		34.07 kN
Déplacement du point A		0.06 mm
Déplacement du point F		0.575 mm
Déformation thermique de la poutre (intégration de		865 με
l'équation de déformation sur la longueur de la poutre)		

On remarque que la force mesurée par la cellule de charge est faible lorsque comparée à l'essai thermomécanique de 2009 et que les déplacements des mâchoires sont également plus faibles. Ces mesures laissent donc supposer que la poutre est plus libre de se déformer thermiquement lorsque le montage utilise une seule cellule de charge. Au niveau du profil de température de la poutre (figure 5-27), une légère différence de température apparaît entre le dessus et le dessous de la poutre, pouvant provoquer une flexion parasite supplémentaire.



Figure 5-27: Variation de température mesurée sur la poutre à t=800 min

La distribution de température mesurée dans les tiges d'alumines est également montrée à la figure 5-28. Tout d'abord on observe que le nombre de thermocouples sur la tige d'alumine est insuffisant. En effet, le profil de chaleur dans une tige soumise à un transfert thermique par

conduction suit une évolution quadratique, ce qui demande la prise de mesure à au moins 3 points afin de bien capturer l'évolution.



Figure 5-28: Distribution de température sur la longueur de la tige d'alumine à t=800 min

La figure 5-29 montre les différentes mesures prises par les LVDT installés sur BERTA. Cette disposition permet de mieux visualiser le mouvement des différentes composantes du montage. Tout d'abord, on remarque que les deux mâchoires se déplacent peu lors du test, étant retenues par les tirants en acier. Cependant, si l'on compare l'évolution de la distance entre les mâchoires à ces mêmes mesures des déplacements des mâchoires, les mesures ne concordent pas. En effet, la variation de l'espacement entre les mâchoires est de 0.479 mm alors que les LVDT derrière les mâchoires ne mesurent qu'un mouvement combiné de 0.135 mm, donnant ainsi un manque à gagner de 0.344 mm. Il apparaît donc que les mâchoires de BERTA se déforment lors du test et absorbent une partie de l'allongement de l'échantillon. Ce résultat est donc une preuve tangible que l'hypothèse selon laquelle les mâchoires de BERTA peuvent être considérées comme étant rigides est erronée.



Figure 5-29: résultats des LVDT installés sur le montage à t=800 min (moyennes)

Finalement, les résultats obtenus à l'aide des jauges de déformations à 800 minutes sont montrés à la figure 5-30. Les mesures de déformation obtenues à l'aide des jauges ont d'abord été compensées thermiquement en ce qui a trait l'effet de leur dilatation thermique sur la mesure ainsi qu'à la variation du diamètre des fils. La méthode utilisée pour calculer la déformation compensée est décrite dans [32]. Ces résultats montrent qu'une flexion apparaît effectivement dans la poutre, et ce, dans les deux axes.





Figure 5-30: Valeurs de déformations mesurées et corrigées sur la poutre à t=800 min

On doit donc retirer l'effet de ces flexions parasites afin d'obtenir la valeur de force à l'axe neutre. Si l'on calcule la déformation totale compensée à l'axe neutre, on obtient :



$$\varepsilon_{AN} = \frac{1}{4} (\varepsilon_{nord} + \varepsilon_{sud} + \varepsilon_{haut} + \varepsilon_{bas}) = -4 \,\mu\varepsilon$$
(5.15)

Cette déformation est produite par la somme des effets mécaniques et thermiques, tel que :

$$\varepsilon_{AN} = \varepsilon_{AN}^m + \varepsilon_{AN}^{th} \rightarrow \varepsilon_{AN}^m = -4\mu\varepsilon - 865\mu\varepsilon = -869\,\mu\varepsilon$$
 (5.16)

À l'aide de l'équation 5,16, on peut calculer la contrainte à l'axe neutre :

$$\sigma_{AN} = E_p \cdot \varepsilon_{AN}^m = 200 \cdot 10^3 \cdot -869 \cdot 10^{-6} = -174 \ MPa \tag{5.17}$$

Et finalement, la force à l'intérieur de celle-ci :

$$F_p = \sigma_{AN} \cdot A_p = -174 \cdot 5084 = -884 \ kN \neq -34.07 \ kN \tag{5.18}$$

Cette valeur n'est pas en équilibre avec la valeur mesurée par la cellule de charge. On considère cependant que la cellule de charge indique la valeur la plus fiable étant donné que l'équilibre des forces du système oblige la cellule de charge à reprendre entièrement la charge produite par l'échantillon. Il y a donc un problème dans la méthode utilisée pour mesurer et/ou calculer la force dans la poutre à partir de mesures de déformations sur la poutre.

Utilisation du modèle analytique

Afin de valider l'analyse effectuée sur les résultats expérimentaux, le modèle analytique développé pour les essais précédents a été utilisé pour l'essai thermomécanique à une cellule de charge. La figure 5-31 montre une représentation schématique du montage avec la description des points de contrôle utilisé.



Le but est ici de mettre en équation le comportement déformationnel de la poutre. On utilise des relations semblables à ce qui a été décrit dans les sections précédentes. Ainsi, l'allongement de la poutre peut être décrit comme étant :

$$\delta_p = u_C - u_B \tag{5.19}$$

L'allongement de la tige d'alumine mesurant le déplacement du point C est défini comme étant :

$$\delta_t = \delta_t^m + \delta_t^{th} = u_F - u_C \tag{5.20}$$

Considérant que la tige d'alumine est libre de se déformer, l'équation devient :

$$\delta_t = \delta_t^{th} = u_F - u_C \tag{5.21}$$

Si l'on introduit cette relation dans l'équation 5.19, on obtient :

$$\delta_p = u_F - \delta_t^{th} - u_B \tag{5.22}$$

À l'autre extrémité, l'allongement de la mâchoire fixe peut être décrit par :

$$\delta_{mf} = u_B - u_A \tag{5.23}$$

En insérant 5.23 dans l'équation 5.22, on a :

$$\delta_p = u_F - \delta_t^{th} - \delta_{mf} - u_A \tag{5.24}$$

La déformation de la poutre peut être calculée en divisant l'équation de l'allongement par la longueur de la poutre :

$$\varepsilon_p = \frac{\delta_p}{L_p} = \frac{1}{L_p} \left(u_F - \delta_t^{th} - \delta_{mf} - u_A \right)$$
(5.25)

La déformation mécanique dans la poutre est donc :

$$\varepsilon_p = \varepsilon_p^m + \varepsilon_p^{th} \to \varepsilon_p^m = \frac{1}{L_p} \cdot \left(u_F - \delta_t^{th} - \delta_{mf} - u_A \right) - \varepsilon_p^{th}$$
(5.26)

La contrainte dans la poutre est donnée par l'équation :

$$\sigma_p = E_p \cdot \varepsilon_p^m = \frac{E_p}{L_p} \cdot \left(u_F - \delta_t^{th} - \delta_{mf} - u_A \right) - E_p \cdot \varepsilon_p^{th}$$
(5.27)

Et finalement, la force dans la poutre :

$$F_p = \sigma_p \cdot A_p = \frac{E_p A_p}{L_p} \left(u_F - \delta_t^{th} - \delta_{mf} - u_A \right) - E_p A_p \varepsilon_p^{th}$$
(5.28)

On remarque que chacun des déplacements mesurés sur la structure de BERTA apparaissant dans l'équation voit sa valeur amplifiée par la rigidité de l'échantillon, en l'occurrence la poutre en acier dans le cas présent. On peut utiliser cette relation afin de visualiser l'impact de la déformation des mâchoires sur l'étude du comportement d'un échantillon. En effet, lors du test, la valeur du déplacement de l'extrémité est de la poutre est directement mesurée à l'aide d'un LVDT. Du côté opposé, ce n'est malheureusement pas le cas alors que l'on utilise un LVDT positionné derrière la mâchoire fixe, ce qui suppose que pour obtenir la déformation de l'échantillon de façon précise, la mâchoire fixe doit être infiniment rigide.

Supposons alors que cette mâchoire n'est pas rigide et qu'une partie de l'expansion de l'échantillon est perdue par la déformation de la mâchoire fixe. On utilise alors l'équation 5.27 ainsi que les données du test nécessaires (tableau 5-13) afin d'identifier une relation entre la force dans l'échantillon et la déformation de la mâchoire fixe. On obtient :

Quantité	Valeur
E_p	200 GPa
A_P	$5084 \ mm^2$
L _P	860 mm
u_F	0.575 mm
δ^{th}_t	0.0129 mm
u_A	0.06 mm
$arepsilon_p^{th}$	865 με

Tableau 5-13: Valeurs utilisées pour résoudre l'équation 5.28

$$F_p = -144 \ kN - \frac{200 \cdot 10^3 \cdot 5084}{860} \delta_{mf}$$
(5.29)

En remplaçant F_P par la force mesurée par la cellule de charge, on obtient la valeur d'allongement de la mâchoire fixe nécessaire pour obtenir la valeur mesurée expérimentalement de la force. Le résultat obtenu est alors 0.0929 mm, valeur du même ordre de grandeur que le déplacement de la mâchoire mobile. Il est donc totalement réaliste de supposer que la mâchoire fixe se déforme et ainsi, provoque une erreur lors de la mesure de l'allongement de l'échantillon. Il s'agit donc d'un résultat important pour statuer sur la précision du banc d'essai BERTA.

5.7 EN RÉSUMÉ

Suite à l'ensemble des analyses présentées dans les sections précédentes, un nombre important de conclusions peuvent être tirées en rapport au comportement mécanique et thermomécanique de BERTA.

Tout d'abord, si l'on rassemble les conclusions globales des essais :

- Une force aussi faible que 150 N sur la mâchoire mobile permet d'initier son mouvement. Cette valeur est négligeable en rapport aux résultats en force généralement mesurés par les cellules de charge au cours des essais expérimentaux sur le banc d'essai;
- L'ensemble des composantes de BERTA se déforme lors de la mise en charge d'un échantillon. Ainsi, les mâchoires et les tirants ne peuvent être considérés comme des composantes rigides;
- La mesure du mouvement des mâchoires afin de prédire la déformation d'un échantillon dans l'enceinte de BERTA est une technique totalement inadéquate;

 L'excentricité de la position de la poutre par rapport à l'axe central de chargement des mâchoires de BERTA a une influence mineure sur les mesures du comportement de l'échantillon.

Au niveau des tests purement mécaniques, les conclusions suivantes peuvent être tirées :

- La force produite à l'intérieur de l'enceinte de BERTA à l'aide d'un vérin est adéquatement capturée par les instruments de mesure déjà en place, soit les deux cellules de charges positionnées derrière la mâchoire mobile;
- L'utilisation des écrous pour appliquer la charge mécanique mène cependant à un blocage de la mâchoire mobile et rend impossible la lecture de la charge appliquée;

Finalement, pour ce qui est des essais thermomécaniques, on conclut que :

- L'hypothèse utilisée dans les tests antérieurs selon laquelle la déformation totale de l'échantillon est nulle est erronée;
- L'utilisation de jauges de déformations sur l'échantillon ne permet pas de capturer adéquatement la déformation de celui-ci;
- Un blocage semble s'opérer au niveau de la glissière de la mâchoire mobile lors que le montage est soumis à un chargement thermique.

L'ensemble de ces conclusions amène donc à mettre en doute la capacité de BERTA à suivre le comportement d'un matériau à base de carbone jusqu'à des températures très élevées (800-900 °C) dans son mode d'utilisation actuel. Étant donné la sensibilité importante de certains éléments du montage à toutes contraintes thermiques, l'ampleur des déformations de la structure même du banc d'essai risque grandement de nuire à la précision des différentes prises de mesures. De plus, le suivi de l'allongement de la poutre via le mouvement des mâchoires de BERTA ne permet pas de suivre adéquatement le comportement d'un échantillon. Cependant, l'application de certaines recommandations pourrait régler une partie de ces problèmes et ainsi permettre de garder un certain espoir quant à la viabilité de tels essais.

5.8 MODIFICATIONS PROPOSÉES À LA MÉTHODE DE MESURE

Afin de permettre la réalisation des tests à haute température à l'aide du banc d'essai BERTA, un certain nombre de recommandations ont été émises:

- Il est impossible de se servir des lectures en déplacement de la paroi extérieure des mâchoires pour prédire le déplacement de la paroi intérieur. Ainsi, l'utilisation de LVDT connectés sur des tiges d'alumines appuyées directement sur l'échantillon sera nécessaire pour atteindre une précision de mesure suffisante, et ce, de chaque côté de celui-ci;
- Un minimum de 3 thermocouples doit être installé sur chacune des tiges d'alumine afin de mesurer l'expansion thermique de celles-ci.
- Les efforts dans la poutre doivent être transférés directement à une cellule de charge.
 La mâchoire mobile ne doit servir que de point d'appui à cette cellule de charge. Ainsi, l'utilisation d'une seule cellule de charge interne est nécessaire;
- 4. En régime thermomécanique, la capacité de la cellule de charge doit être établie en fonction de la nature de l'échantillon.
- Pour les échantillons thermoréactifs, prévoir de les contenir entre deux matériaux dont les propriétés thermomécaniques sont connues. Ceci évitera que les tiges d'alumine s'enfoncent dans l'échantillon lors de sa phase de ramollissement;
- 6. Un test de validation à haute température utilisant l'ensemble des précédentes recommandations doit être réalisé afin de s'assurer de la validité de la méthode proposée.

5.9 CONCLUSION

Le travail discuté dans ce chapitre aura demandé un effort considérable, beaucoup plus important que ce qui avait initialement prévu. En effet, il aura fallu analyser et modéliser un nombre impressionnant d'essais afin de comprendre réellement le comportement de BERTA lors d'un test mécanique ou thermomécanique. L'analyse de l'historique des tests sur BERTA aura cependant permis de statuer sur sa capacité à suivre le comportement d'un matériau à base de carbone lors de sa cuisson dans son mode d'utilisation actuel, question étant demeurée en suspens depuis plusieurs années. Des recommandations ont été présentées afin de permettre le suivi du comportement d'un échantillon et d'en améliorer la méthode de mesure. Cependant, ces améliorations devront d'abord être testées afin de valider l'efficacité du système avant une campagne de mesure plus exhaustive.

Suite aux conclusions de l'étude, il a été convenu avec le partenaire industriel de ne pas aller plus loin pour le moment. La validation de la loi de comportement développée dans ce mémoire n'a donc pu être complétée.

CHAPITRE 6 CONCLUSION

6.1 Rétrospective

L'objectif principal du volet modélisation du programme de recherche sur l'étude du comportement de la pâte à brasquer visait l'implémentation et la validation d'un outil prédictif dans ANSYS® pouvant reproduire le comportement complexe de la pâte monolithique. Pour ce faire, une recherche bibliographique exhaustive a été effectuée afin d'identifier les pistes de solution quant à la représentation numérique du comportement d'un matériau thermoreactif semi-fragile. Une loi de comportement adaptée a été sélectionnée, soit celle développée par D'Amours [7]. Une phase d'analyse de l'ensemble des équations aura permis de comprendre rigoureusement le fonctionnement des différents mécanismes et d'identifier les besoins au niveau informatique. Afin de permettre un meilleur contrôle de l'évolution de l'écrouissage du matériau, son équation a été généralisée avec l'ajout d'un nouveau paramètre.

L'implémentation de la loi de comportement a été effectuée dans le logiciel ANSYS® à l'aide de l'interface utilisateur UserMat permettant ce genre d'ajouts. Au cours de la phase d'implémentation, certaines erreurs théoriques présentes dans l'implémentation originale de FESh++ ont été identifiées et corrigées en accord avec certains principes fondamentaux de la théorie de la plasticité et des opérations tensorielles. Ainsi, les équations permettant l'évaluation des gradients du potentiel de charge et du potentiel d'écoulement plastique ont été corrigées alors que l'algorithme de minimisation du potentiel a été retiré. Certains algorithmes de résolution ont aussi été améliorés, notamment celui d'évaluation des paramètres de résistance et de cohésion du matériau. Une phase de validation a ensuite été menée avec succès en réalisant une comparaison des résultats numériques obtenus par notre modèle versus ceux de FESh++ et d'autres en provenance de la littérature.

Parallèlement, une méthode d'identification claire pour l'ensemble des paramètres de la loi a été développée afin de faciliter son utilisation. Cette méthode présente chacun des paramètres physiques associés à la loi de comportement ainsi que leur méthode d'identification caractéristique. De plus, la méthode d'identification des paramètres des surfaces de charge et d'écoulement plastique a été exposée.

Finalement, une validation du banc d'essai BERTA a été effectuée dans l'optique d'une utilisation future pour valider la représentativité de l'outil numérique développé. Ainsi, une méthode fiable de mesure de la relation force-déplacement d'un échantillon a été proposée pour des tests opérants dans un contexte thermomécanique. Il a d'ailleurs été identifié qu'il est impossible de se servir des lectures en déplacement de la paroi extérieure des mâchoires pour prédire le déplacement de la paroi intérieur. Cette conclusion importante quant à l'utilisation de BERTA pour le suivi du comportement d'un échantillon demandera une approche fondamentalement différente au niveau des mesures de déplacement. Les conclusions et recommandations exposées à la fin du chapitre 5 serviront à paver le chemin pour d'éventuels essais expérimentaux utilisant ce banc d'essai.

6.2 **Recommandations et travaux futurs**

Le développement d'un outil numérique permettant la simulation thermo-chimio-mécanique du comportement de la pâte monolithique représente un pas en avant au niveau de la simulation des cuves d'électrolyse. Afin de s'assurer de son utilisation chez le partenaire industriel, il est essentiel qu'un transfert technologique soit effectué tant au niveau technique que scientifique. Ainsi une formation du personnel utilisateur de l'outil numérique chez le promoteur du projet, Rio



Tinto Alcan, devra être effectuée afin de permettre aux futurs utilisateurs de l'outil numérique de bien maîtriser l'ensemble de ses possibilités et ainsi, d'assurer une continuité au projet. Il est également prévu que les développements informatiques associés au projet fassent l'objet de publications scientifiques de par leur contribution au problème historique qu'est la représentation adéquate du comportement des matériaux à base de carbone.

Cependant, dans le but d'améliorer la robustesse de l'outil numérique, il est recommandé d'ajouter une méthode de subincrémentation à la routine. En effet, lors du passage en adoucissement, il est habituel d'observer une augmentation drastique de l'incrément de déformation, ce qui rend difficile la convergence du calcul. L'utilisation d'une méthode de subincrémentation, implémentée au niveau local de la loi de comportement, permettrait à celle-ci de diviser l'incrément de déformation en morceaux plus facilement intégrables. Cette méthode pourra faire l'objet d'une future amélioration de la loi de comportement.

Un autre aspect de la loi de comportement devra être couvert, soit sa représentativité. À ce jour, aucune validation expérimentale complète du modèle de comportement présenté dans ce mémoire n'a été menée à terme. Il est donc recommandé d'effectuer une campagne de mesure *in situ* qui permettra, à l'aide d'un modèle numérique conséquent, de valider l'approche utilisée par la loi de comportement. Ces expérimentations permettront de s'assurer de la validité de l'outil et des designs qui seront éprouvés grâce à l'outil numérique. Une campagne de mesure préalable sera toutefois nécessaire afin de d'identifier les paramètres de la loi à utiliser pour représenter le comportement des matériaux utilisés dans les designs actuels des cuves d'électrolyse.

Malgré le travail effectué pour améliorer la précision de la méthode d'identification des paramètres de la loi de comportement, la méthode reste complexe. Afin de faciliter son utilisation, le développement d'une application spécifique permettant l'optimisation des paramètres du modèle en fonction du comportement réel du matériau serait très intéressant.. Finalement, la mise en œuvre des recommandations au sujet de BERTA est aussi un aspect crucial de la vie future du projet. Avec la méthode proposée au chapitre 5, RTA a entre les mains toutes les informations nécessaires pour modifier la méthode de mesure du banc d'essai et ainsi, assurer une validation expérimentale de la loi de comportement, point qui, à ce jour, n'a pas été complété.

RÉFÉRENCES

- [1] U.S. Geological Survey. (2012, Janvier) Mineral Commodity Survey. [Online]. http://minerals.usgs.gov/minerals/pubs/commodity/aluminum/mcs-2012-alumi.pdf
- [2] Wikipedia (En). (2014, Aout) Aluminium. [Online]. http://en.wikipedia.org/wiki/Aluminium
- [3] D. Richard, Aspects thermomécaniques de la modélisation par éléments finis du préchauffage électrique d'une cuve de Hall-Héroult: Lois constitutives, conception orientéeobjet et validation. Québec, Qc: Faculté des Sciences et de Génie de l'Université Laval, 2004.
- [4] Gouvernement du Québec. Le marché du carbone. [Online]. http://www.mddefp.gouv.qc.ca/changements/carbone/index.htm
- [5] M. Sørlie and H.A. Øye, "Evaluation of cathode materials preperties relevant to life of Hall-Heroult Cells," *Journal of applied electriochemestry*, vol. 19, 1989.
- [6] P. Goulet, Modélisation du comportement thermo-électro-mécanique des interfaces de contact du cuve de Hall-Héroult. Québec,Qc: Faculté des Sciences et de Génie de l'Université Laval, 2004.
- [7] G. D'Amours, Développement de loi constitutives thermomécaniques pour les matériaux à base de carbone lors du préchauffage d'une cuve d'électrolyse. Québec, Qc: Faculté des Sciences et de Génie de l'Université Laval, 2004.

- [8] M. Sørlie and H. A. Øye, Cathodes in alumnium electrolysis. Aluminium-Verlag, Düsseldorf, Germany: Deuxième édition, 1994.
- [9] F. Hiltmann and K.-H. Meulemann, "Ramming paste properties and cell performance," Light Metals, pp. 405-411, 2000.
- [10] D. Richard, G. D'Amours, M. Fafard, A. Gakwaya, and M. Désilets, "Development and validation of a thermo-chemo-mechanical model of the baking of ramming paste," *Light Metals*, pp. 733-738, 2005.
- [11] K.L. Hulse, "Anode Manufacture: Raw materials, formulation and processing parameters," 2000.
- [12] B. M Faaness, H. Gran, M.n Sorlle, and H. A. Øye, "Ramming paste related failure in cathode linnings," *Light Metal*, pp. 633-639, 1989.
- [13] N. Bouchard, Pyrolyse de divers brais utilisés dans la technologie söderberg et analyse des matières volatiles. Chicoutimi: Université du Québec à Chicoutimi, 1998.
- [14] ANSYS. (2010) ANSYS 13.0 Help.
- [15] G. Etse and K. Willam, "Fracture energy formulation for inelastic behavior of plain concrete," *Journal of enginering mechanics*, vol. 120, no. 9, pp. 1983-2011, 1994.
- [16] K. J. Willam and E. P. Warnke, "Constitutive model for the triaxial behaviour of

concrete," *Proceedings of the International Assoc. for Bridge and Structural Engineering*, vol. 19, pp. 1-30, 1974.

- [17] R. S. Crouch and B. Tahar, "Application of a stress return algorithm for elasto-plastic hardening-softening models with high yield surface curvature," in *European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering*, Barcelone, Septembre 2000.
- [18] Wikipedia (Fr). (2014, aout) Mécanique de la rupture. [Online]. <u>http://fr.wikipedia.org/wiki/mécanique de la rupture</u>
- [19] H. D. Kang, *Triaxial constitutive model for plain and reinforced concrete behavior*.
 Colorado, États-Unis: Thèse de doctorat de l'Université du Colorado, 1997.
- [20] Z P Bažant and G Pijaudier-Cabot, "Measurements of Characteristic Length of Nonlocal Continuum," *Journal of Engineering Mechanics, ACSE*, vol. 115(4), pp. 755-767, 1989.
- [21] C. Hellmich, F.-J. Ulm, and H. A. Mang, "Multisurface Chemoplasticity I: Material Model for Shotcrete," *Journal of Engineering Mechanics*, vol. 125, no. 6, pp. 692-701, 1999.
- [22] D Kocaefe, A Charette, J Ferland, P. Couderc, and J. L. Saint-Romain, "A kinetic study of pyrolysis in pitch impregnated electrodes," *The canadian journal of chemical engineering*, vol. 68, no. December, pp. 988-996, 1990.
- [23] H.D. Kang and K.J. Willam, "Localisation characteristics of triaxial concrete model," *Journal of engineering mechanics*, vol. 125, no. 8, 1999.

- [24] J. G. M. Van Mier, *Fracture process of concrete: assesment of material parameters for fracture models*, CRC, Ed. New-York, 1997.
- [25] M.A. Crisfield, *Non-linear finite element analysis of solids and structures, Vol.* 1.: Wiley, 1991.
- [26] C. Allaire, "Effect of collector bars and monolithic mix on thermomechanical stresses induced in the cathode blocks of aluminum reduction cells," in *Light Metals*, 1993, pp. 401-406.
- [27] C. Allaire, "Effect of the piers rigidity on the state of thermomechanical stresses induced in the cathode blocks of alumina electrolytic cells," in *Symposium on Production, Refining, Fabrication, and Recycling of Light Metals*, vol. 19, Hamilton, Ontario, 1990, pp. 18-28.
- [28] C. Allaire, "Effect of the type of brick and mortar on the resistance to deflection of the flue walls in horizontal flue carbon baking furnace," in *Light Metals*, 1994, pp. 101-106.
- [29] E Clerc, "Validation du dispositif expérimental de thermomécanique BERTA Rapport Confidentiel," Saguenay, Canada, N° d'activité 6505, Mars 2009.
- [30] D Even, Modélisation thermo-mécanique du banc d'essai BERTA et identification de paramètres par la méthode des éléments finis. Québec, Canada: Rap. tech., Université Laval, 2003.
- [31] L. Hacini, "Test de chargement thermique sur BERTA réalisés le 25 novembre 2009 au

CRDA," Centre de recherche et développement d'Arvida (CRDA-RTA), Rapport interne (confidentiel) 2009.

- [32] Vishay Precision Group, Strain gage thermal output and gage factor variation with temperature, Micro-Measurements; Tech Note, TN-504-1.
- [33] R. de Borst, M. A., Remmers, J. C.C. Cristfeild, and C. V. Verhoosel, *Non-Linear Finite Element Analusis of Solids and Structures*, 2nd ed.: John Wiley & Sons Ltd, 2012.
- [34] W-F. Chen, *Plasticity in Reinforced Concrete*.: McGraw-Hill Book Company, 1982.
- [35] Y Selzner. (2014, Février) Notes sur les pratiques techniques. [Online]. http://notech.franceserv.com/materiau-acier.html
- [36] Daniel Marceau, Patrice Goulet, Daniel Richard, and Mario Fafard, "FESh++, une nouvelle approche orientée objet pour la simulation par éléments finis des problèmes multiphysiques," in 7ème colloque national en calcul des structures, Giens, 2007.
- [37] Mauro Zarelli, Ivana K. Partridge, and A D'amore, "Warpage induced in bi-material specimens: coefficient of thermal expansion, chemical shrinkage and viscoelastic modulus evolution during cure," *Composites: Part A*, 2006.
- [38] F.B. Andersen, M.A. Stam, and D. Eisma, "A laboratory evaluation of ramming paste for aluminium electrolysis cells," *Light Metals*, 2005.

- [39] G. Vergazova, "High swelling cold ramming paste for aluminium reduction cell," *Light Metals*, 2008.
- [40] François Tremblay and André Charette, "Cinétique de dégagement des matières volatiles lors de la pyrolyse d'électrodes de carbone industrielles," *the canadian journal of chemical engineering*, vol. 66, no. February, pp. 86-96, 1988.
- [41] Wikipedia (En). (2012, Novembre) Von Mises yeild criterion. [Online]. <u>http://en.wikipedia.org/wiki/Von Mises yield criterion#Comparison with Tresca yield criterion</u>
- [42] D. Richard, P. Goulet, M. Dupuis, and M. Fafard, "Thermo-chemo-mechanical modeling of a Hall-Heroult cell thermal bake-out," *Light Metals*, 2006.

). (2012, Nover .<mark>org/wiki/Von_Mise</mark> pulet, M. Dupuis, a l thermal bake-out,

ANNEXE A INTRODUCTION À LA THÉORIE DE LA PLASTICITÉ

INTRODUCTION

Le domaine plastique d'un matériau est une notion peu abordée lors de la formation d'ingénieur. Dans la plupart des cas, la conception d'ouvrages se restreint au domaine élastique en utilisant la limite élastique comme condition ultime. Cependant, lorsque le domaine plastique devient une composante plus importante du comportement d'un matériau, il devient nécessaire d'en prendre compte dans les équations définissant son comportement.

Dans ce chapitre, les bases de la théorie de la plasticité permettant de modéliser le comportement élastoplastique d'un matériau sont exposées. La première section couvre la notion d'invariants de contraintes. Le principe de surface de charge est ensuite abordé puis, la règle d'écoulement est présentée. Finalement, un nouveau système de coordonnées, plus adapté au matériau à l'étude, est introduit. Pour une revue plus complète de cette théorie, le lecteur peut se référer aux volumes de Crisfeild **[25]**, de Borst **[33]** et Chen. **[34]**

INVARIANTS DU TENSEUR DES CONTRAINTES

Afin de simplifier son application, un modèle de comportement de matériau se doit d'être indépendant du système de coordonnée utilisé. Ainsi, peu importe le système de coordonnées utilisé pour construire le modèle numérique, l'état de contrainte pourra être calculé par la loi de comportement en utilisant toujours la même référence. L'utilisation des invariants de contraintes

dans la mise en équation d'une loi de comportement permet de contourner ce problème. De plus, ceux-ci possèdent une signification physique bien particulière, utile à la définition d'une loi de comportement.

Tout tenseur d'ordre deux symétrique possède des valeurs propres réelles. Ainsi, on peut déterminer les valeurs propres du tenseur des contraintes, qui sont aussi appelés invariants de contraintes. Définissons tout d'abord le tenseur de contrainte, tel que défini par Cauchy :

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_x & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \sigma_y & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \sigma_z \end{bmatrix}$$
(A.1)

Cet état de contrainte particulier est défini pour un système de coordonnées cartésien ayant une orientation quelconque. Un premier ensemble d'invariants de contraintes peut être déterminé à partir des valeurs propres de tenseur. On pose d'abord qu'il existe une orientation du système de coordonnée qui mènera à l'obtention d'un tenseur de contraintes dont les cisaillements seront nuls. Les contraintes normales de ce tenseur seront alors les invariants du tenseur de contraintes. L'hypothèse de cisaillement nul permet alors d'écrire une équation caractéristique où les invariants du tenseur de contraintes sont mises en évidence:

$$\boldsymbol{\sigma}^3 - l_1 \boldsymbol{\sigma}^2 + l_2 \boldsymbol{\sigma} - l_3 = 0 \tag{A.2}$$

Les trois invariants du tenseur de contraintes (I_1 , I_2 et I_3) sont calculées en identifiant les racines de cette équation caractéristique. Leurs solutions sont définies par :

$$I_1 = tr(\boldsymbol{\sigma}) \tag{A.3}$$

$$I_2 = tr(com(\boldsymbol{\sigma})) \tag{A.4}$$

$$I_3 = \det(\boldsymbol{\sigma}) \tag{A.5}$$



DÉFINITION ET FONCTION DE LA SURFACE DE CHARGE

La base de la théorie de la plasticité repose sur un concept central : définir le moment aulequel des déformations permanentes commencent à apparaître. L'apparition de ces déformations permanentes, aussi appelées déformations d'origine plastique, est conditionnelle à ce que le matériau ait épuisé sa réserve d'élasticité. La limite d'écoulement élastique est donc une quantité essentielle au développement d'un modèle élastoplastique et doit être identifiée pour chaque matériau. Expérimentalement, cette limite, appelée limite d'écoulement, est représentée par la quantité S_y qui correspond à la contrainte à laquelle la courbe contrainte-déformation n'est plus linéaire. Étant donné la difficulté à identifier précisément cette valeur expérimentalement, on la fixe habituellement à la contrainte atteinte lorsque la déformation permanente atteint une valeur de 0,002. La figure A-1 montre les courbes contraintes-déformations standards obtenues pour différents type d'acier ainsi que la limite élastique expérimentale de 0,2% de déformation permanentes.



Figure A-1 : Courbe contrainte-déformation pour différents aciers [35]

Cette limite élastique est cependant définie pour un seul cas de figure, soit un test de traction uniaxiale où les contraintes développées sont produites uniquement dans une direction. Ainsi, il faut pouvoir mettre en relation cette limite élastique uniaxiale avec l'état de contrainte réel dans le matériau. On utilise pour cela le principe de critère de charge, aussi appelée critère de plasticité ou encore, critère d'écoulement plastique.

Le critère de charge est une fonction qui indique si un état de contrainte donné peut encore être uniquement représenté à l'aide d'une de comportement élastique. Généralement, la définition d'un critère propose que le comportement du matériau est purement élastique si le résultat de son équation est inférieur ou égal à 0 ($F \le 0$). La représentation de la limite du critère, soit lorsque celui-ci est nul (F = 0), est appelé la surface de charge. Le critère de Tresca ainsi que le critère de von Mises (figure A-2) sont deux exemples de critères de charges définis pour des matériaux dont la limite du comportement élastique ne dépend pas de la pression hydrostatique.



Figure A-2 : Exemples de critères de plasticité

Le critère de Tresca stipule simplement que la limite élastique du matériau est définie comme une limite en cisaillement à ne pas atteindre. Sa surface de charge est donc définie comme :

$$f(\sigma) = \frac{1}{2}(\sigma_1 - \sigma_3) - \tau_{max} = 0$$
 (A.6)

Pour ce qui est du critère de von Mises, celui-ci stipule que l'énergie de déformation du matériau ne peut dépasser la valeur de limite d'écoulement S_y . L'équation de sa surface de charge est donc définie comme étant :

$$f(\sigma) = \sqrt{\frac{1}{2}[(\sigma_1 - \sigma_2)^2 + (\sigma_2 - \sigma_3)^2 + (\sigma_3 - \sigma_1)^2] - S_y} = 0$$
 (A.7)

Les deux surfaces de charge permettent de représenter simplement la limite élastique d'un acier. Pour les deux critères, un point matériel dont l'état de contrainte se situe à l'extérieur de la surface de charge (F > 0) devra se déformer plastiquement jusqu'à ce que l'état de contrainte revienne sur la limite de la surface de charge. Si l'état de contrainte ne peut être ramené à l'intérieur de la surface de charge suite à sa modification, le point matériel sera considéré comme étant défaillant. Par exemple, dans la figure A-2, si un état de contrainte se situe à l'intérieur de la zone verte, les critères de plasticité de Tresca et de von Mises considèreront l'état comme étant possible et répondant à la loi de Hooke. Cependant, un état de contrainte dans la zone bleue sera considéré comme impossible par le critère de Tresca alors que pour le critère de von Mises, il sera admissible.

Les deux critères présentés plus haut ne sont que deux exemples de critères de plasticité définis dans la littérature. Il existe une multitude d'autres critères de charge, variant grandement en fonction des propriétés du matériau à modéliser. Le principe reste cependant le même, seule les équations diffèrent.

LA RÈGLE D'ÉCOULEMENT

Lorsqu'un état de contrainte se situe à l'extérieur de la surface de charge définie pour représenter la limite élastique d'un matériau, deux choix sont possibles. Le premier consiste à simplement déterminer que l'état de contrainte est impossible et mènera à la rupture du matériau. On parle alors d'un modèle élastique parfaitement plastique, souvent utilisée pour représenter le comportement des matériaux fragiles. Le deuxième consiste à permettre au matériau de se déformer plastiquement, ce qui aura comme résultat de réduire le niveau de contrainte subit par le matériau tout en modifiant la position de la surface de charge dans l'espace des contraintes. On parle alors d'un modèle élastoplastique, qui demande une adaptation de la formulation de la surface de charge ainsi que l'apparition d'une nouvelle notion : la règle d'écoulement.

Un modèle élastoplastique demande la prise en compte de la déformation d'origine plastique du matériau afin de représenter le comportement complet du matériau modélisé. Celle-ci peut être définie à l'aide d'une loi additive. Par cette hypothèse, on assume que les différentes sources de déformations sont indépendantes l'une de l'autre et s'additionnent pour former la déformation totale.

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}_e + \boldsymbol{\varepsilon}_p$$
 (A.8)

On assume que la loi additive est tout aussi valide au niveau incrémental:

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}} = \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_e + \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_p$$
 (A.9)

Chacun de ces tenseurs possède une loi constitutive soit au niveau total ou incrémental permettant d'évaluer sa valeur à un moment défini. Par exemple, la déformation d'origine élastique peut être calculée à l'aide de la loi de Hooke généralisée.

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{H}_{\mathbf{e}}: (\varepsilon_{\boldsymbol{e}}) \tag{A.10}$$

Au niveau de l'incrément de déformation d'origine plastique, c'est la règle d'écoulement plastique qui permet de calculer sa valeur incrémentale :

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\boldsymbol{p}} = \dot{\boldsymbol{\lambda}} \frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{\sigma}} \tag{A.11}$$

où λ représente un coefficient de proportionnalité que l'on appelle multiplicateur plastique. Sachant que le gradient du potentiel de charge, donnant la normale de la surface de charge à un état de contrainte donné, donne la direction de l'écoulement plastique, le multiplicateur plastique est donc une quantité représentant l'amplitude de la déformation produite.

La forme de l'équation présentée à l'équation (A.11) est appelée plasticité associée. Dans un cas similaire, on assume alors que la direction de l'écoulement plastique est perpendiculaire à la surface de charge. Cette hypothèse est généralement valide pour les métaux. Cependant, ce n'est pas le cas pour les solides non-métalliques. Dans un tel cas, la loi d'écoulement plastique ne peut être définie à l'aide du gradient de la surface de charge. On doit alors définir une deuxième surface, appelé potentiel d'écoulement plastique (Q), qui définira la direction de l'écoulement plastique et ce, indépendamment de la surface de charge. La règle d'écoulement devient :

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\boldsymbol{p}} = \dot{\lambda} \frac{\partial Q}{\partial \boldsymbol{\sigma}} \tag{A.12}$$

Cette approche est généralement adoptée dans le cas des matériaux granulaires, la plasticité associée ne permettant pas de prédire de façon précise la direction de l'écoulement plastique de ce genre de matériau.

Système de coordonnées de Haigh-Westergaard

La modélisation de matériaux de types granulaires demande un effort supplémentaire au niveau des équations, une de leur propriété étant particulièrement contraignante. En effet, la sensibilité du comportement élastoplastique à la pression hydrostatique demande une adaptation de la formulation des équations pour prendre en compte ce phénomène. Une des solutions proposées dans la littérature est d'utiliser un système de coordonnées différent qui intègre la pression hydrostatique directement dans sa définition.

Afin de développer ce système de coordonnées, on doit d'abord modifier l'approche concernant les invariants de contrainte. En effet, pour que la pression hydrostatique soit évidente au niveau des invariants de contrainte, on divise d'abord le tenseur de contrainte en deux parties distinctes : la pression hydrostatique (p) et le tenseur déviateur, qui représente la déviation du tenseur de contrainte par rapport à l'état de contrainte hydrostatique. Le tenseur de contrainte est donc réécrit en fonction de ces deux quantités :

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{I} + \boldsymbol{S} \tag{A.13}$$

où la pression hydrostatique et le tenseur déviateur sont définies par :

$$p = \frac{1}{3}tr(\boldsymbol{\sigma}) \tag{A.14}$$

$$\boldsymbol{s} = \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{I} \cdot \boldsymbol{p} \tag{A.15}$$

On identifie alors les valeurs propres associées à chacune des deux parties du tenseur des contraintes. Pour la pression hydrostatique, les trois invariants de contraintes I_1 , I_2 et I_3 sont :

$$I_1 = tr(\boldsymbol{I} \cdot \boldsymbol{p}) = 3\boldsymbol{p} \tag{A.16}$$

$$I_2 = tr(com(\boldsymbol{I} \cdot \boldsymbol{p})) = 3p^2 \tag{A.17}$$

$$I_3 = \det(\boldsymbol{I} \cdot \boldsymbol{p}) = \boldsymbol{p}^3 \tag{A.18}$$

L'équation A.16 peut, entre autres, être remaniée en remplaçant p par son équation mathématique, telle que définie à l'équation A.14, pour donner :

$$(I_1)_p = 3\left(\frac{1}{3}tr(\boldsymbol{\sigma})\right) = (I_1)_{\boldsymbol{\sigma}}$$
(A.19)

On voit donc que le premier invariant du tenseur de contrainte est identique au premier invariant du tenseur de pression hydrostatique. De plus, l'ensemble des invariants de contraintes sont fonction de la pression, ce qui rend leur définition redondante. Pour ce qui est du tenseur déviateur de contrainte, les invariants de contraintes J_1 , J_2 et J_3 sont défini par :

$$J_1 = tr(\mathbf{s}) = 0 \tag{A.20}$$

$$J_2 = tr(com(s)) \tag{A.21}$$

$$J_3 = \frac{1}{3}\det(s) \tag{A.22}$$

Le calcul du deuxième invariant du tenseur déviateur de contrainte est d'ailleurs équivalent au calcul de l'énergie de déformation du critère de plasticité de von Mises, d'où son appellation «critère de plasticité J_2 ». On peut alors construire un nouveau système de coordonnées basé sur
ces deux séries d'invariants. Le système de coordonnées de Haigh-Westergaard a précisément été construit avec cette définition d'invariants de contraintes avec comme objectif son utilisation pour la modélisation du comportement de matériaux sensibles à la pression hydrostatique.

Le système de coordonnées de Haigh-Westergaard comprend trois composantes : la première est bien évidemment la pression hydrostatique qui représente la contrainte normale moyenne pour un point de l'espace. Cette quantité est essentielle pour bien définir tout matériau sensible au confinement. Elle est définie comme étant :

(A.23)

La deuxième composante est définie comme étant la contrainte déviatrice ρ . Cette quantité dérive du concept de contrainte équivalente amenée par le critère de plasticité de von Mises. Elle est donc basée directement sur la définition du second invariant du tenseur déviateur de contrainte. Cette contrainte déviatrice représente ainsi une contrainte moyenne en cisaillement et est définie par l'équation A.24.

$$\rho = \sqrt{2 \cdot J_2} \tag{A.24}$$

Finalement, la dernière composante est l'angle polaire, aussi appelé angle de Lode, représentant la direction de la contrainte octaédrale en cisaillement. Cette quantité est définie par la relation suivante:

$$\cos\theta = \frac{\sqrt{3}}{2} \frac{J_3}{J_2^{3/2}}$$
(A.25)

Cet angle permet de situer l'état de contraintes par rapport aux méridiens de traction ($\theta = 0^{\circ}$) et de compression ($\theta = 60^{\circ}$) en localisant la contrainte principale intermédiaire (σ_2) par rapport aux contraintes principales maximale (σ_1) et minimale (σ_3). En effet, lorsque l'angle de Lode est égal à 60° et se situe sur le méridien de compression, σ_2 devient égal à σ_3 . Inversement, lorsque l'angle se rapproche de 0° et du méridien de traction, σ_2 s'approche de σ_1 .

Au niveau des contraintes principales, ce système de coordonnées permet de simplifier la mise en équation de leur solution. Ainsi, leurs valeurs peuvent être identifiées avec l'équation suivante :

$$\begin{bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \end{bmatrix} = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} \xi \\ \xi \\ \xi \end{bmatrix} + \sqrt{\frac{2}{3}} \rho \cdot \begin{bmatrix} \cos \theta \\ \cos \left(\theta - \frac{2\pi}{3} \right) \\ \cos \left(\theta + \frac{2\pi}{3} \right) \end{bmatrix}$$
(A.26)

ANNEXE B

DÉRIVÉES ANALYTIQUES DES ÉQUATIONS

ÉQUATIONS DE BASE ET CONSTANTES

Système de coordonnées de Haigh Westergaard

$$\xi = \frac{I_1}{3}$$

$$\rho = \sqrt{2J_2}$$

$$\cos \theta = \frac{\sqrt{3}}{2} \frac{J_3}{J_2^{3/2}}$$

$$I_1 = \sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33}$$

$$J_2 = 1/6((\sigma_{11} - \sigma_{22})^2 + (\sigma_{22} - \sigma_{33})^2 + (\sigma_{33} - \sigma_{11})^2) + \sigma_{12}^2 + \sigma_{23}^2 + \sigma_{13}^2$$

 $J_{3} = \frac{4}{9}(\sigma_{11} \sigma_{22} \sigma_{33})$ $-\frac{1}{9}(\sigma_{11} \sigma_{22}^{2} + \sigma_{22} \sigma_{11}^{2} + \sigma_{22} \sigma_{33}^{2} + \sigma_{33} \sigma_{22}^{2} + \sigma_{33} \sigma_{11}^{2} + \sigma_{11} \sigma_{33}^{2})$ $+\frac{2}{27}(\sigma_{11}^{3} + \sigma_{22}^{3} + \sigma_{33}^{3})$ $+\frac{1}{3}(\sigma_{11} \sigma_{12}^{2} + \sigma_{22} \sigma_{12}^{2} + \sigma_{22} \sigma_{23}^{2} + \sigma_{33} \sigma_{23}^{2} + \sigma_{11} \sigma_{13}^{2} + \sigma_{33} \sigma_{13}^{2})$ $+2(\sigma_{12} \sigma_{23} \sigma_{31})$

Constantes



$$\begin{split} & C_1 = 6(\sigma_{11}^2 - \sigma_{11}\sigma_{22} + \sigma_{22}^2 - \sigma_{22}\sigma_{33} + \sigma_{33}^2 - \sigma_{33}\sigma_{11} + 3\sigma_{12}^2 + 3\sigma_{23}^2 + 3\sigma_{13}^2) \\ & C_2 = (1 - k)\left(\frac{\xi}{f_c} + \frac{\rho r}{b_f f_c}\right)^2 + \frac{a_f^{1/\alpha_f}\rho r}{f_c} \\ & C_3 = (1 - k)\left(\frac{\xi}{f_c} + \frac{\rho}{b_f f_c}\right)^2 + \frac{a_f^{1/\alpha_f}\rho}{f_c} \\ & C_4 = 6(\sigma_{11}^2 + \sigma_{22}^2 + \sigma_{33}^2) - 6(\sigma_{11}\sigma_{22} - \sigma_{22}\sigma_{33} - \sigma_{33}\sigma_{11}) + 18(\sigma_{12}^2 + \sigma_{23}^2 + \sigma_{31}^2) \\ & C_5 = -6(\sigma_{11} + \sigma_{22} - 2\sigma_{33}) \\ & C_6 = -6(\sigma_{11} - 2\sigma_{22} + \sigma_{33}) \\ & C_7 = -6(-2\sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33}) \\ & C_8 = \frac{2(1 - k)}{b_f f_c} \left(\frac{\xi}{f_c} + \frac{\rho}{b_f f_c}\right) + \frac{a_f^{1/\alpha_f}}{f_c} \end{split}$$

DÉRIVÉES PREMIÈRES

Système de coordonnée de Haigh-Westergaard

$\frac{\partial \xi}{\partial \sigma} = \begin{cases} 1/3\\ 1/3\\ 1/3\\ 0\\ 0\\ 0 \\ 0 \end{cases}$

$$\frac{\partial \rho}{\partial \sigma} = \begin{cases} 1/6 \frac{(12\sigma_{11} - 6\sigma_{22} - 6\sigma_{33})}{\sqrt{C_1}} \\ 1/6 \frac{(-6\sigma_{11} + 12\sigma_{22} - 6\sigma_{33})}{\sqrt{C_1}} \\ 1/6 \frac{(-6\sigma_{11} - 6\sigma_{22} + 12\sigma_{33})}{\sqrt{C_1}} \\ \frac{6\sigma_{23}}{\sqrt{C_1}} \\ 6\frac{\sigma_{13}}{\sqrt{C_1}} \\ 6\frac{\sigma_{12}}{\sqrt{C_1}} \\ \frac{6\sigma_{12}}{\sqrt{C_1}} \\ \frac{\sigma_{12}}{\sqrt{C_1}} \\ \frac{\partial \theta}{\partial \sigma} = \frac{\partial \theta}{\partial J_2} \frac{\partial J_2}{\partial \sigma} + \frac{\partial \theta}{\partial J_3} \frac{\partial J_3}{\partial \sigma} \end{cases} pour C_1 > 0$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial J_2} = \frac{3}{2\sqrt{3}} \frac{J_3}{J_2^{\frac{5}{2}} \sqrt{4 - \frac{27J_3^2}{J_2^3}}}$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial J_3} = \frac{\sqrt{3}}{J_2^{\frac{3}{2}} \sqrt{4 - \frac{27J_3^2}{J_2^3}}}$$

$$\frac{\partial J_2}{\partial \sigma} = \begin{cases} -1/3(-2\sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33})) \\ -1/3(\sigma_{11} - 2\sigma_{22} + \sigma_{33}) \\ -1/3(\sigma_{11} + \sigma_{22} - 2\sigma_{33}) \\ 2\sigma_{12} \\ 2\sigma_{23} \\ 2\sigma_{13} \\ \end{pmatrix}$$

$$\frac{\partial J_3}{\partial \sigma} = \begin{cases} 1/9(4\sigma_{22}\sigma_{33} + 2\sigma_{11}^2 - 2\sigma_{22}\sigma_{11} - \sigma_{22}^2 - 2\sigma_{11}\sigma_{33} - \sigma_{33}^2) + 1/3(\sigma_{12}^2 - 2\sigma_{23}^2 + \sigma_{13}^2) \\ 1/9(-\sigma_{22}\sigma_{33} - \sigma_{11}^2 + 4\sigma_{22}\sigma_{11} + 2\sigma_{22}^2 - 2\sigma_{11}\sigma_{33} - \sigma_{33}^2) + 1/3(\sigma_{12}^2 + \sigma_{23}^2 - 2\sigma_{13}^2) \\ 1/9(-\sigma_{22}\sigma_{33} + 2\sigma_{11}^2 - 2\sigma_{22}\sigma_{11} - \sigma_{22}^2 + 4\sigma_{11}\sigma_{33} + 2\sigma_{33}^2) + 1/3(-2\sigma_{12}^2 + \sigma_{23}^2 - 2\sigma_{13}^2) \\ 2\sigma_{13}\sigma_{23} + 1/3(2\sigma_{12}\sigma_{11} + 2\sigma_{12}\sigma_{22} - 4\sigma_{12}\sigma_{33}) \\ 2\sigma_{13}\sigma_{23} + 1/3(-4\sigma_{23}\sigma_{11} + 2\sigma_{23}\sigma_{22} + 2\sigma_{23}\sigma_{33}) \\ 2\sigma_{13}\sigma_{23} + 1/3(2\sigma_{13}\sigma_{11} - 4\sigma_{13}\sigma_{22} + 2\sigma_{13}\sigma_{33}) \end{cases} \right\}$$

Coordonnée polaire (Fonction de Willam & Warnke)

$$\frac{\partial r}{\partial \sigma} = \frac{\partial r}{\partial e_r} \frac{\partial e_r}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial \sigma} + \frac{\partial r}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial \sigma}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial r}{\partial \theta} &= \frac{(4-4e_r^2)\cos\theta\sin\theta}{(2-2e_r^2)\cos\theta + (2e_r-1)\sqrt{(4-4e_r^2)\cos^2\theta + 5e_r^2 - 4e_r}} \\ &- ((4-4e_r^2)\cos^2\theta + (2e_r-1)^2) \left(-(2-2e_r^2)\sin\theta - \frac{(2e_r-1)(4-4e_r^2)\cos\theta\sin\theta}{\sqrt{(4-4e_r^2)\cos^2\theta + 5e_r^2 - 4e_r}} \right) \\ &\left((2-2e_r^2)\cos\theta + (2e_r-1)\sqrt{(4-4e_r^2)\cos^2\theta + 5e_r^2 - 4e_r} \right)^{-2} \end{aligned}$$

$$\frac{\partial r}{\partial e_r} = \frac{-8e_r \cos^2 \theta + 8e_r - 4}{(2 - 2e_r^2) \cos \theta + (2e_r - 1)\sqrt{(4 - 4e_r^2) \cos^2 \theta + 5e_r^2 - 4e_r}} -((4 - 4e_r^2) \cos^2 \theta + (2e_r - 1)^2) \\ \left(-4e_r \cos \theta + 2\sqrt{(4 - 4e_r^2) \cos^2 \theta + 5e_r^2 - 4e_r}\right) + \left(\frac{(2e_r - 1)(-8e_r \cos^2 \theta + 10e_r - 4)}{2\sqrt{(4 - 4e_r^2) \cos^2 \theta + 5e_r^2 - 4e_r}}\right) \\ \left((2 - 2e_r^2) \cos \theta + (2e_r - 1)\sqrt{(4 - 4e_r^2) \cos^2 \theta + 5e_r^2 - 4e_r}\right)^{-2}$$

$$\frac{\partial e_r}{\partial \xi} = \frac{1}{2} \left(\frac{f_{tt}}{f_c} - c_e \right) \left(\frac{\xi}{f_c} - c_e \right)^{-2} f_c^{-1}$$

Surface de charge

Г

$$\frac{\partial F}{\partial \sigma} = \frac{\partial F}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial \sigma} + \frac{\partial F}{\partial \rho} \frac{\partial \rho}{\partial \sigma} + \frac{\partial F}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial \sigma} + \frac{\partial F}{\partial k} \frac{\partial k}{\partial \sigma} + \frac{\partial F}{\partial c} \frac{dc}{d\sigma}$$

$$\frac{dF}{d\xi} = 2C_2^{\alpha_f} \alpha_f (1-k) \left(\frac{\xi}{f_c} + \frac{\rho r}{b_f f_c}\right) \frac{1}{f_c C_2} + \frac{k^2 m_f}{f_c}$$

$$\frac{dF}{d\rho} = \frac{2C_2^{\alpha_f} \alpha_f}{C_2} \left(2(1-k) \left(\frac{\xi}{f_c} + \frac{\rho r}{b_f f_c}\right) \frac{\rho}{b_f f_c} + \frac{a_f^{1/\alpha_f} r}{f_c}\right) + \frac{k^2 m_f r}{b_f f_c}$$

$$\frac{\partial F}{\partial r} = \frac{2C_2^{\alpha_f} \alpha_f}{C_2} \left(2(1-k) \left(\frac{\xi}{f_c} + \frac{\rho r}{b_f f_c}\right) \frac{\rho}{b_f f_c} + \frac{a_f^{1/\alpha_f} \rho}{f_c}\right) + \frac{k^2 m_f \rho}{b_f f_c}$$

$$\frac{\partial F}{\partial k} = -\frac{C_2^{\alpha_f} \alpha_f}{C_2} \left(\frac{\xi}{f_c} + \frac{\rho r}{b_f f_c}\right)^2 + \frac{2km_f}{f_c \left(\frac{\xi}{\xi} + \frac{\rho r}{b_f}\right)} + 2kc$$

$$\frac{\partial F}{\partial c} = -1$$

Potentiel d'écoulement plastique

$$\frac{\partial Q}{\partial \sigma} = \frac{\partial Q}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial \sigma} + \frac{\partial Q}{\partial \rho} \frac{\partial \rho}{\partial \sigma} + \frac{\partial Q}{\partial k} \frac{\partial k}{\partial \sigma} + \frac{\partial Q}{\partial c} \frac{\partial c}{\partial \sigma}$$

 $\frac{dQ}{d\xi} = 2C_3^{\alpha_f} \alpha_f (1-k) \left(\frac{\xi}{f_c} + \frac{\rho}{b_f f_c}\right) \frac{1}{f_c C_3} + \frac{k^2 m_f}{f_c}$

$$\frac{dQ}{d\rho} = \frac{2C_3^{\alpha_f}\alpha_f}{C_3} \left(2(1-k)\left(\frac{\xi}{f_c} + \frac{\rho}{b_f f_c}\right) \frac{1}{b_f f_c} + \frac{a_f^{1/\alpha_f}}{f_c} \right) + \frac{k^2 m_f}{b_f f_c}$$
$$\frac{\partial Q}{\partial k} = -\frac{C_3^{\alpha_f}\alpha_f}{C_3} \left(\frac{\xi}{f_c} + \frac{\rho}{b_f f_c}\right)^2 + \frac{2km_f}{f_c \left(\xi + \frac{\rho}{b_f}\right)} + 2kc$$

 $\frac{\partial Q}{\partial c} = -1$

Fonction d'écrouissage

$$\frac{\partial k}{\partial \sigma} = \frac{\partial k}{\partial d_h} \frac{\partial d_h}{\partial \sigma}$$
$$\frac{\partial k}{\partial d_h} = 2n(k_0 - 1) \left(\epsilon_p * \frac{2d_h - \epsilon_p}{d_h^2}\right)^n \left(\frac{d_h - \epsilon_p}{d_h(2d_h - \epsilon_p)}\right)$$

$$\frac{\partial d_h}{\partial \sigma} = \frac{\partial d_h}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial \sigma}$$

Fonction d'adoucissement

$$\frac{\partial c}{\partial \sigma} = \frac{\partial c}{\partial w} \frac{\partial w}{\partial N_f}$$

$$\begin{split} \frac{\partial c}{\partial w} &= -\frac{2}{e^{\delta_s w^2}} \delta_s w \\ \frac{\partial w}{\partial N_f} &= -\frac{l_c \epsilon_f}{N_f^2} \\ \frac{\partial N_f}{\partial \sigma} &= \frac{\partial N_f}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial \sigma} + \frac{\partial N_f}{\partial \rho} \frac{\partial \rho}{\partial \sigma} + \frac{\partial N_f}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial \sigma} \quad pour \frac{\xi}{\rho} \leq \frac{1}{\sqrt{6}} \end{split}$$

$$\frac{\partial N_f}{\partial \xi} = -\sqrt{6} \left(1 - \cos\left(\theta + \frac{\pi}{6}\right) \right) \frac{(N_{uc} - 1)}{\rho}$$
$$\frac{\partial N_f}{\partial \rho} = \sqrt{6} \,\xi \left(1 - \cos\left(\theta + \frac{\pi}{6}\right) \right) \frac{(N_{uc} - 1)}{\rho^2}$$
$$\frac{\partial N_f}{\partial \theta} = -\sqrt{6} \,\xi \left(\sin\left(\theta + \frac{\pi}{6}\right) \right) \frac{(N_{uc} - 1)}{\rho^2}$$

DÉRIVÉES SECONDES

Système de coordonnée de Haigh-Westergaard

$$\frac{\partial^2 \xi}{\partial \sigma^2} = [\mathbf{0}]_{6x6}$$

$$\frac{\partial^2 \rho}{\partial \sigma^2} = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 \rho}{\partial \sigma^2}_{1,1} & \frac{\partial^2 \rho}{\partial \sigma^2}_{1,2} \\ \frac{\partial^2 \rho}{\partial \sigma^2}_{2,1} & \frac{\partial^2 \rho}{\partial \sigma^2}_{2,2} \end{bmatrix}$$

$$\frac{\partial^2 \theta}{\partial \sigma^2} = \frac{\partial}{\partial \sigma} \left(\frac{\partial \theta}{\partial \sigma}\right)^*$$
* Calcul effectué par dérivée numérique

$$\frac{\partial^2 \rho}{\partial \sigma^2_{1,1}} = -\begin{bmatrix} \frac{C_7^2}{12C_4^{3/2}} - \frac{2}{\sqrt{C_4}} & \frac{C_7C_4}{12C_4^{3/2}} + \frac{1}{\sqrt{C_4}} & \frac{C_7C_5}{12C_4^{3/2}} + \frac{1}{\sqrt{C_4}} \\ \frac{C_7C_6}{12C_4^{3/2}} + \frac{1}{\sqrt{C_4}} & \frac{C_6^2}{12C_4^{3/2}} - \frac{2}{\sqrt{C_4}} & \frac{C_6C_5}{12C_4^{3/2}} + \frac{1}{\sqrt{C_4}} \\ \frac{C_7C_5}{12C_4^{3/2}} + \frac{1}{\sqrt{C_4}} & \frac{C_6C_5}{12C_4^{3/2}} + \frac{1}{\sqrt{C_4}} & \frac{C_5^2}{12C_4^{3/2}} - \frac{2}{\sqrt{C_4}} \end{bmatrix}$$

$$\frac{\partial^2 \rho}{\partial \sigma^2_{2,1}} = \frac{\partial^2 \rho}{\partial \sigma^2_{1,2}} = -\begin{bmatrix} \frac{3C_7 \sigma_{12}}{C_4^{3/2}} & \frac{3C_6 \sigma_{12}}{C_4^{3/2}} & \frac{3C_5 \sigma_{12}}{C_4^{3/2}} \\ \frac{3C_7 \sigma_{23}}{C_4^{3/2}} & \frac{3C_6 \sigma_{23}}{C_4^{3/2}} & \frac{3C_5 \sigma_{23}}{C_4^{3/2}} \\ \frac{3C_7 \sigma_{13}}{C_4^{3/2}} & \frac{3C_6 \sigma_{13}}{C_4^{3/2}} & \frac{3C_5 \sigma_{13}}{C_4^{3/2}} \end{bmatrix}$$

$$\frac{\partial^2 \rho}{\partial \sigma^2_{1,1}} = -\begin{bmatrix} \frac{108\sigma_{12}^2}{12C_4^{3/2}} - \frac{6}{\sqrt{C_4}} & \frac{108\sigma_{12}\sigma_{23}}{12C_4^{3/2}} & \frac{108\sigma_{12}\sigma_{13}}{12C_4^{3/2}} \\ \frac{108\sigma_{12}\sigma_{23}}{12C_4^{3/2}} & \frac{108\sigma_{23}^2}{12C_4^{3/2}} - \frac{6}{\sqrt{C_4}} & \frac{108\sigma_{23}\sigma_{13}}{12C_4^{3/2}} \\ \frac{108\sigma_{12}\sigma_{13}}{12C_4^{3/2}} & \frac{108\sigma_{23}\sigma_{13}}{12C_4^{3/2}} & \frac{108\sigma_{13}^2}{12C_4^{3/2}} - \frac{6}{\sqrt{C_4}} \end{bmatrix}$$

Potentiel d'écoulement plastique

$$\frac{d^2Q}{d\sigma^2} = \frac{d\xi}{d\sigma} \left(\frac{d^2Q}{d\xi^2} \frac{d\xi}{d\sigma} + \frac{d^2Q}{d\rho d\xi} \frac{d\rho}{d\sigma} \right) + \frac{d\rho}{d\sigma} \left(\frac{d^2Q}{d\xi d\rho} \frac{d\xi}{d\sigma} + \frac{d^2Q}{d\rho^2} \frac{d\rho}{d\sigma} \right) + \left(\frac{dQ}{d\rho} \frac{d^2\rho}{d\sigma^2} \right)$$

$$\frac{d^2Q}{d\xi^2} = \frac{4C_1^{\alpha_f}\alpha_f^2}{f_c^2 C_1^2} (1-k)^2 \left(\frac{\xi}{f_c} + \frac{\rho}{b_f f_c}\right)^2 + \frac{2C_1^{\alpha_f}\alpha_f}{f_c^2 C_1} (1-k) - \frac{4C_1^{\alpha_f}\alpha_f^2}{f_c^2 C_1^2} (1-k)^2 \left(\frac{\xi}{f_c} + \frac{\rho}{b_f f_c}\right)^2$$

$$\frac{d^2Q}{d\rho d\xi} = \frac{2C_1^{\alpha_f} \alpha_f^2 C_8}{f_c C_1^2} (1-k) \left(\frac{\xi}{f_c} + \frac{\rho}{b_f f_c}\right) + \frac{2C_1^{\alpha_f} \alpha_f}{b_f f_c^2 C_1} (1-k) - \frac{2C_1^{\alpha_f} \alpha_f C_8}{f_c C_1^2} (1-k) \left(\frac{\xi}{f_c} + \frac{\rho}{b_f f_c}\right)$$

$$\frac{d^2Q}{d\xi d\rho} = \frac{2C_1^{\alpha_f} \alpha_f^2 C_8}{f_c C_1^2} (1-k) \left(\frac{\xi}{f_c} + \frac{\rho}{b_f f_c}\right) + \frac{2C_1^{\alpha_f} \alpha_f}{b_f f_c^2 C_1} (1-k) - \frac{2C_1^{\alpha_f} \alpha_f C_8}{f_c C_1^2} (1-k) \left(\frac{\xi}{f_c} + \frac{\rho}{b_f f_c}\right)$$

$$\frac{d^2Q}{d\rho^2} = \frac{C_1^{\alpha_f} \alpha_f^2 C_8^2}{C_1} + \frac{2C_1^{\alpha_f} \alpha_f}{b_f^2 f_c^2 C_1} (1-k) - \frac{C_1^{\alpha_f} \alpha_f C_8^2}{C_1^2}$$

Root chains