

DANIEL RICHARD

**ASPECTS THERMOMÉCANIQUES DE LA MODÉLISATION PAR
ÉLÉMENTS FINIS DU PRÉCHAUFFAGE ÉLECTRIQUE D'UNE
CUVE DE HALL-HÉROULT : LOIS CONSTITUTIVES,
CONCEPTION ORIENTÉE-OBJET ET VALIDATION.**

Thèse présentée
à la Faculté des études supérieures de l'Université Laval
dans le cadre du programme de doctorat en génie civil
pour l'obtention du grade de Philosophiæ Doctor (Ph. D.)

FACULTÉ DES SCIENCES ET DE GÉNIE
UNIVERSITÉ LAVAL
QUÉBEC

SEPTEMBRE 2004



Library and
Archives Canada

Bibliothèque et
Archives Canada

Published Heritage
Branch

Direction du
Patrimoine de l'édition

395 Wellington Street
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

395, rue Wellington
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

Your file *Votre référence*

ISBN: 0-612-95087-5

Our file *Notre référence*

ISBN: 0-612-95087-5

The author has granted a non-exclusive license allowing the Library and Archives Canada to reproduce, loan, distribute or sell copies of this thesis in microform, paper or electronic formats.

L'auteur a accordé une licence non exclusive permettant à la Bibliothèque et Archives Canada de reproduire, prêter, distribuer ou vendre des copies de cette thèse sous la forme de microfiche/film, de reproduction sur papier ou sur format électronique.

The author retains ownership of the copyright in this thesis. Neither the thesis nor substantial extracts from it may be printed or otherwise reproduced without the author's permission.

L'auteur conserve la propriété du droit d'auteur qui protège cette thèse. Ni la thèse ni des extraits substantiels de celle-ci ne doivent être imprimés ou autrement reproduits sans son autorisation.

In compliance with the Canadian Privacy Act some supporting forms may have been removed from this thesis.

Conformément à la loi canadienne sur la protection de la vie privée, quelques formulaires secondaires ont été enlevés de cette thèse.

While these forms may be included in the document page count, their removal does not represent any loss of content from the thesis.

Bien que ces formulaires aient inclus dans la pagination, il n'y aura aucun contenu manquant.

Canada

Résumé court

La modélisation mécanique d'une cuve de Hall-Héroult, servant à la production d'aluminium, pose de grands défis. Cette thèse s'inscrit dans un projet plus vaste, nommé **START-CUVE**, visant la simulation numérique des phénomènes thermiques, électriques et mécaniques lors du préchauffage électrique d'une cuve, dans le but d'en prolonger la vie et d'améliorer sa performance.

Les aspects traités ici touchent plus particulièrement la modélisation du comportement thermo-mécanique des matériaux non carbonés, ainsi que sa mise en oeuvre numérique et informatique dans un logiciel de calcul par éléments finis, FESh++.

Ainsi, des lois de comportement adéquates seront proposées pour différents matériaux ; les formes variationnelles discrétisées et linéarisées des problèmes thermo-chimiques et mécaniques seront présentées ; la conception Orientée-Objet originale de bibliothèques de gestion des variables internes, des matériaux et des lois constitutives sera détaillée ; finalement, un exercice de validation sur un montage à petite échelle sera étudié.

Résumé

La production d'aluminium à partir de son oxyde est un vaste champ d'étude posant de grands défis. En effet, dans le procédé *Hall-Héroult* utilisé à l'échelle industrielle dans les cuves, les aspects thermiques, électriques, mécaniques, chimiques, magnétiques et de mécanique des fluides interagissent fortement. De plus, la mise en opération des cuves est une procédure délicate, dont le préchauffage en est la première étape. Le projet **START-CUVE**, dans lequel s'inscrit cette thèse, vise donc à simuler numériquement les phénomènes thermiques, électriques et mécaniques lors du préchauffage électrique d'une cuve, dans le but d'en prolonger la vie et d'en améliorer la performance.

Les aspects thermomécaniques des matériaux non carbonés seront traités ici plus particulièrement. À cette fin, une loi de comportement mécanique adéquate sera proposée ou adaptée pour différents matériaux ; dans le cas du béton réfractaire, une loi thermo-chimio-mécanique sera développée à partir de la thermodynamique des processus irréversibles et de la mécanique des milieux poreux réactifs. Les résultats numériques seront systématiquement comparés aux résultats expérimentaux, ce qui mettra en lumière la zone de validité des lois proposées.

Un chapitre sera ensuite consacré aux formes variationnelles discrétisées et linéarisées pour les problèmes thermo-chimiques et mécaniques. Les algorithmes d'intégration des lois constitutives ainsi que les opérateurs tangents consistants seront quant à eux détaillés en annexe.

Par ailleurs, la mise en oeuvre informatique de la résolution de problèmes multichamps, multiformulations, multimatériaux et comprenant des couplages entre phénomènes par le biais de variables internes est traditionnellement difficile. La conception Orientée-Objet originale de bibliothèques de gestion des variables internes, des matériaux et des lois constitutives ainsi que leur implémentation dans le logiciel d'analyse par éléments finis FESh++ sera donc présentée. Des exemples éloquentes de la flexibilité des structures développées seront montrés.

Finalement, un exemple de validation thermo-chimio-mécanique transitoire sur un montage à petite échelle, néanmoins représentatif des conditions rencontrées en préchauffage dans une cuve, sera analysé.

Abstract

The study of the aluminium extraction from its oxide is a vast and challenging field. The industrial *Hall-Héroult* process involves complex interactions between thermal, electrical, mechanical, magnetic and fluid mechanics phenomena within the *cells*. Accordingly, their start-up is a delicate procedure. This thesis was conducted within the context of the **START-CUVE** project, aiming at simulating the thermal, electrical and mechanical phenomena taking place during the electrical preheating of a cell – the first stage of the start-up. The underlying goal is to improve the cell life and performance.

Specifically, this thesis deals with the thermomechanical aspects of non carbonaceous materials. Hence, an adequate constitutive law will be proposed or adapted for different materials ; for refractory concrete, a thermo-chemo-mechanical law will even be developed from principles of thermodynamics of irreversible processes and mechanics of reactive porous continua. Numerical simulation results will systematically be compared to experimental data in order to assess the validity of the proposed laws.

A chapter will be entirely devoted to the discretisation and the linearisation of the variational forms for the thermochemical and mechanical problems. The constitutive laws numerical integration algorithms and consistent tangent operators will be derived in the appendices.

The coupled-field nature of the problem, with several different material behaviours, several different parameter sets as well as couplings between phenomena through internal variables, makes it difficult to solve using traditional procedural softwares. Therefore, original Object-Oriented libraries were developed in the in-house finite element toolbox *FESh++* to manage internal variables, materials and constitutive laws. Striking examples will be presented as to how these new flexible structures quickly make possible the construction of complex material behaviour models.

Finally, a thermo-chemo-mechanical small scale set-up, nevertheless representative of the cell condition during preheating, will be analysed in the transient regime for validation purposes.

Avant-propos

Ce travail de recherche a été réalisé au sein du département de génie civil de l'Université Laval, sous la direction du professeur Mario Fafard, et en étroite collaboration avec le Centre de Recherche et de Développement Arvida (CRDA) d'Alcan International Limitée, entre autres par la co-direction du Dr. Martin Désilets. Il est important de noter que ce travail a aussi été rendu possible grâce au soutien financier du Fonds Québécois de la Recherche sur la Nature et les Technologies (FQRNT), du Conseil de Recherche en Sciences Naturelles et en Génie du Canada (CRSNG) et de la compagnie Alcan.

Cette thèse s'inscrit aussi dans le cadre du programme de recherche **START-CUVE**, développé conjointement par Alcan, l'Université Laval et l'Université du Québec à Chicoutimi (UQAC). Je souhaite sincèrement souligner l'esprit de camaraderie et d'entraide qui s'est installé avec mes collègues étudiants – Habib Akande, Guillaume D'Amours, Patrice Goulet, Carl Laberge, Mathieu Rouleau et Annie Pomerleau – et qui, à mon humble avis, nous a tous permis d'être meilleurs.

Tous mes remerciements vont également à tous ceux qui ont réalisé des travaux expérimentaux pour alimenter ma thèse, particulièrement Yvon Brassard (Alcan, CRDA), Nathalie Genois (Alcan, CRDA) et Habib Akande (Laval), ainsi que les stagiaires qui m'ont aidé lors de leur passage dans **START-CUVE**, soit Josie-Anne Parent (2001), Grégory Huet (2002), Yannick Rasmussen (2003) et David Even (2003).

J'exprime ma profonde gratitude à mon directeur, le professeur Mario Fafard, qui par sa grande expertise, ses conseils judicieux et son appui moral, a su me guider tout en préservant mon autonomie. Je tiens aussi à remercier mon co-directeur le Dr. Martin Désilets, qui fut notre seul point d'ancrage chez Alcan, et dont la sagesse m'a permis de terminer ce projet avec autant d'enthousiasme que je l'avais commencé. Sans ces deux leaders, **START-CUVE** n'aurait pu connaître le succès qu'on lui reconnaît maintenant.

J'adresse aussi mes remerciements à mon ami Daniel Marceau, dont la combinaison rare de talents informatiques, scientifiques et cynégétiques, a été à la fois un formidable exemple et une source d'apprentissage concentrée. Je tiens à remercier du fond du coeur Marc Dupuis et Claude Fradet, qui m'ont initié au monde fascinant des cuves de Hall-Hérault, pour leur grande générosité intellectuelle et leur soutien indéfectible.

Finalement, rien de tout ceci n'aurait de sens sans mon centre de gravité, mon amour Sylvie, ou sans mes racines, mes parents Claire et Martin, et mes proches.

Table des matières

Résumé court	i
Résumé	ii
Abstract	iii
Avant-propos	iv
Table des matières	v
Liste des figures	xii
Liste des tableaux	xvi
Liste des algorithmes	xvii
1 Introduction	1
1.1 Généralités	1
1.2 Contexte	2
1.3 Procédé de Hall-Hérault	2
1.4 État actuel des connaissances	6
1.4.1 Préchauffage d'une cuve de Hall-Hérault	7
1.4.1.1 Mécanismes de détérioration du revêtement	7

1.4.1.2	Objectifs du préchauffage	10
1.4.1.3	Types de préchauffage	10
1.4.1.4	Aspects thermomécaniques du préchauffage électrique	13
1.4.2	Travaux antérieurs sur la modélisation du préchauffage	15
1.4.2.1	Préchauffage électrique de cuves de Hall-Héroult	15
1.4.2.2	Travaux connexes	16
1.4.2.3	Synthèse	19
1.5	Problématique et objectifs	20
1.6	Aspects originaux	21
1.7	Conventions	21
2	Matériaux non carbonés	22
2.1	Généralités	22
2.2	Béton réfractaire	22
2.2.1	Comportement thermomécanique	22
2.2.2	Travaux antérieurs	27
2.2.2.1	Aspects mécaniques	27
2.2.2.2	Aspects thermomécaniques	28
2.2.3	Modèle de comportement	29
2.2.3.1	Aspects thermodynamiques	29
2.2.3.2	Degré d'hydratation	32
2.2.3.3	Évaporation de l'eau libre	34
2.2.3.4	Frittage	35
2.2.3.5	Bilan d'énergie	36
2.2.3.6	Contraintes	37
2.2.3.7	Fluage primaire	39
2.2.3.8	Écrouissage	41

2.2.3.9	Élastoplasticité	42
2.2.4	Validation du modèle de comportement	43
2.2.4.1	Hydratation	43
2.2.4.2	Déshydratation et frittage	47
2.2.4.3	Élastoplasticité	48
2.2.4.4	Dilatométrie	52
2.2.4.5	Fluage	55
2.3	Isolants poreux cellulaires	57
2.3.1	Comportement thermomécanique	57
2.3.2	Travaux antérieurs	59
2.3.3	Modèle de comportement	59
2.3.4	Validation du modèle de comportement	60
2.4	Autres matériaux	61
2.4.1	Réfractaires d'aluminosilicates	61
2.4.1.1	Comportement thermomécanique	61
2.4.1.2	Travaux antérieurs	62
2.4.1.3	Modèle de comportement probable	63
2.4.2	Acier	63
2.4.2.1	Comportement thermomécanique	63
2.4.2.2	Modèle de comportement probable	63
2.4.3	Fonte	64
2.4.3.1	Comportement thermomécanique	64
2.4.3.2	Modèle de comportement probable	64
2.4.4	Cuivre	64
2.4.5	Carbure de silicium	65
2.4.5.1	Comportement thermomécanique	65
2.4.5.2	Modèle de comportement probable	65
2.5	Conclusion	65

3	Formes variationnelles et discrétisation	67
3.1	Généralités	67
3.2	Problème thermochimique	68
3.2.1	Forme faible	68
3.2.2	Discrétisation	69
3.2.3	Intégration locale des variables internes	71
3.2.4	Linéarisation	71
3.3	Problème mécanique	73
3.3.1	Formulation variationnelle incrémentale	73
3.3.2	Linéarisation	75
3.3.3	Discrétisation	76
3.4	Conclusion	77
4	Aspects numériques et logiciels	78
4.1	Généralités	78
4.2	État actuel des connaissances	79
4.3	Concepts et structures	81
4.4	Variables internes et d'état	84
4.5	Cinétiques	85
4.6	Lois constitutives	86
4.6.1	Structure de base	86
4.6.2	Lois scalaires	87
4.6.3	Lois tensorielles	87
4.6.3.1	Aspects temporels	89
4.6.3.2	Outils élastoplastiques	92
4.7	Matériaux	98
4.7.1	Structure de base	98

4.7.2	Spécialisation	99
4.7.3	Couplage par variables internes	100
4.8	Conclusion	102
5	Validation du modèle numérique	103
5.1	Généralités	103
5.2	Présentation du montage de validation	104
5.2.1	Banc d'essai BERTA	104
5.2.2	Enceinte d'essais	105
5.2.3	Modèle élément fini	107
5.2.4	Description de l'essai	109
5.2.5	Pertinence de l'exercice	109
5.3	Stratégie de simulation	110
5.3.1	Précharge	110
5.3.2	Chauffage uniquement	113
5.3.3	Comportement de la pâte à brasquer	119
5.3.4	Simulation thermomécanique complète	120
5.4	Conclusion	123
6	Conclusion	124
6.1	Rétrospective et conclusions	124
6.2	Recommandations et pistes de recherche	127
	Bibliographie	131
A	Modèles élastoplastiques	144
A.1	Invariants des tenseurs de second ordre	144
A.2	Élastoplasticité classique	145

A.2.1	Généralités	145
A.2.2	Intégration de Euler implicite	147
A.2.3	Opérateur tangent consistant	149
A.3	Métaux	152
A.3.1	Potentiel plastique	152
A.3.2	Écrouissage	152
A.3.3	Dérivées	152
A.3.4	Retour radial	153
A.4	Matériaux quasifragiles	155
A.4.1	Potentiels plastiques	155
A.4.2	Écrouissage	156
A.4.3	Dérivées	157
A.5	Isolants poreux cellulaires	161
A.5.1	Potentiels plastiques	161
A.5.2	Écrouissage	162
A.5.3	Dérivées	163
B	Modèles visqueux	166
B.1	Maxwell	166
B.1.1	Modèle	166
B.1.2	Discrétisation et linéarisation	167
B.1.3	Exemples	169
B.2	Burger	173
B.2.1	Modèle	173
B.2.2	Discrétisation et linéarisation	174
B.2.3	Exemples	176

C Convection naturelle équivalente	180
C.1 Convection naturelle	180
C.2 Rayonnement	182
C.3 Convection équivalente	182

Liste des figures

1.1	Salle de cuves P-155 à l'usine Grande-Baie (Alcan, La Baie, Qc.)	3
1.2	Schéma d'une cuve de Hall-Héroult à anodes précuites	4
1.3	Importance relative des facteurs affectant la durée de vie des cuves selon Hale (1989)	6
1.4	Schéma d'une cuve de Hall-Héroult à anodes précuites en préchauffage électrique . .	12
1.5	Schéma du revêtement d'une cuve P-155, reconstruit à partir de Dupuis et Tabsh (1994b)	14
1.6	Schéma d'une poche de coulée pour l'industrie de l'acier, tiré de Schacht (1984) . . .	17
2.1	Montage d'hydratation du béton, images tirées de Parent (2001)	23
2.2	Fissures internes dans le béton du montage d'hydratation, tiré de Parent (2001) . . .	24
2.3	Essai de thermogravimétrie à 13°C à l'heure	25
2.4	Représentation rhéologique du modèle de fluage de Burger généralisé	40
2.5	Montage de calorimétrie quasi-adiabatique	44
2.6	Évolution de la température dans un montage de calorimétrie quasi-adiabatique . . .	45
2.7	Discrétisation d'un montage représentatif d'hydratation du béton	46
2.8	Évolution de la température au centre du béton dans un montage représentatif d'hydratation du béton	47
2.9	Comparaison des résultats expérimentaux tirés de Akande (2003b) et des résultats numériques de l'état d'hydratation du béton	48
2.10	Comparaison des résultats expérimentaux tirés de Akande (2003b) et des résultats numériques de la résistance en compression uniaxiale	48

2.11	Surfaces de charge obtenues des essais triaxiaux de Akande (2003b)	49
2.12	Comparaison des résultats expérimentaux tirés de Akande (2003b) et des résultats numériques de compression uniaxiale	51
2.13	Comparaison des résultats expérimentaux tirés de Akande (2003b) et des résultats numériques d'un essai de dilatométrie jusqu'à 110°C pour le béton	53
2.14	Comparaison des résultats expérimentaux tirés de Akande (2003b) et des résultats numériques d'essais de dilatométrie jusqu'à 500°C et 600°C pour le béton	54
2.15	Comparaison des résultats numériques et expérimentaux de la composante temporelle normalisée d'essais de fluage pour le béton	56
2.16	Structure d'une mousse réfractaire à cellules ouvertes	57
2.17	Comportement en compression de mousses fragiles	58
2.18	Enveloppe de rupture des mousses fragiles dans le plan hydrostatique-cisaillement selon Triantafillou et Gibson (1990b)	59
2.19	Écoulement non associé pour le modèle Cone-Cap dans le plan pression-cisaillement	60
2.20	Simulation d'un essai de compression uniaxiale d'un isolant poreux cellulaire	60
2.21	Comportement en compression uniaxiale typique d'une brique réfractaire d'alumino-silicate à faible alumine, selon Schacht (1995)	62
4.1	Structure des objets de gestion des variables internes et d'état	84
4.2	Intégration d'une variable interne scalaire par une cinétique d'Arrhénius, cas isotherme tiré de Hellmich <i>et coll.</i> (1999)	86
4.3	Structure de base des lois constitutives	86
4.4	Diagramme de classe du gestionnaire de composantes de déformation	88
4.5	Diagramme de classe de l'intégrateur de contraintes	89
4.6	Diagramme de classe des forces d'écrouissage (tronqué)	93
4.7	Diagramme de classe des potentiels plastiques (tronqué)	93
4.8	Diagramme de classe de la loi élastoplastique standard	94
4.9	Diagramme de classe de la loi élastoplastique en J2	96
4.10	Structure de base des matériaux	98
4.11	Matériau thermoélastique	99

4.12	Matériau thermoréactif standard	100
5.1	Banc d'essai BERTA , vue d'ensemble tirée de Even (2003)	104
5.2	Banc d'essai BERTA , schéma cinématique tiré de Even (2003)	104
5.3	Montage de validation dans l'enceinte de BERTA	105
5.4	Isolation dans l'enceinte de BERTA	106
5.5	Positionnement des thermocouples dans le montage de validation, vue du dessus . . .	106
5.6	Maillage de la structure du banc BERTA , tiré de Even (2003)	107
5.7	Maillage de l'enceinte du banc BERTA pour le montage de validation	108
5.8	Conditions aux frontières mécaniques du maillage de l'enceinte du banc BERTA . .	110
5.9	Courbe de précharge simulée de l'enceinte du banc BERTA	111
5.10	Comparaison des courbes de précharge simulées de l'enceinte du banc BERTA selon le mode de pilotage	111
5.11	Déplacement le long du demi-poussoir mobile à la fin de la simulation de précharge de l'enceinte du banc BERTA	112
5.12	Résultats obtenus au contact carbone/pâte à la fin de la simulation de précharge de l'enceinte du banc BERTA	112
5.13	Maillage complet du banc BERTA	113
5.14	Température de l'environnement du banc BERTA	113
5.15	Évolution de la température lors de l'essai de validation, carbone gauche C1	114
5.16	Évolution de la température lors de l'essai de validation, pâte à brasquer P	115
5.17	Évolution de la température lors de l'essai de validation, carbone central C2	116
5.18	Évolution de la température lors de l'essai de validation, béton B	117
5.19	Évolution de la température lors de l'essai de validation, carbone droit C3	118
5.20	Évolution de la température lors de l'essai de validation, revêtement du banc BERTA	118
5.21	Déformation chimique irréversible normalisée de la pâte à brasquer selon D'Amours (2004)	119
5.22	Évolution de l'index de cuisson de la pâte à brasquer lors de l'essai de chauffage . .	120

5.23	Évolution de la charge lors de l'essai de validation, sans les aspects visqueux	121
5.24	Évolution de la charge lors de l'essai de validation, avec les aspects visqueux : Béton VEP, Pâte EP, Carbone E	121
5.25	Évolution de la charge lors de l'essai de validation, avec les aspects visqueux : Béton E, Pâte VEP, Carbone E	122
6.1	Comportement hors du plan d'un mur de maçonnerie, tiré de Yokel <i>et coll.</i> (1971)	129
A.1	Concept de prédiction/correction pour un point d'essai élastique, tel qu'illustré par Crisfield (1997)	147
A.2	Potentiels plastiques pour un matériau quasifragile, tirés de D'Amours <i>et coll.</i> (2003a)	156
A.3	Écoulement non associé pour le modèle Cone-Cap dans le plan pression-cisaillement	161
A.4	Évolution de l'angle de friction interne du cône	163
B.1	Représentation rhéologique du modèle de fluage de Maxwell généralisé	166
B.2	Évolution des composantes de déformation lors d'une simulation de fluage (modèle de Maxwell)	170
B.3	Évolution de la déformation visqueuse lors d'une simulation de fluage pour différents pas de temps (modèle de Maxwell)	171
B.4	Évolution des composantes de déformation lors d'une simulation de compression uni- axiale avec précharge (modèle de Maxwell)	172
B.5	Représentation rhéologique du modèle de fluage de Burger généralisé	173
B.6	Évolution des composantes de déformation lors d'une simulation de fluage (modèle de Burger)	177
B.7	Norme de convergence relative globale pour le premier pas d'une simulation de fluage (modèle de Burger)	179
B.8	Évolution des composantes de déformation lors d'une simulation de compression uni- axiale avec précharge (modèle de Burger)	179

Liste des tableaux

1.1	Avantages et inconvénients des différentes méthodes de préchauffage	11
2.1	Réactions chimiques lors d'un essai de thermogravimétrie	25
2.2	Variables considérées dans la loi de comportement	32
2.3	Contraintes appliquées lors d'essais de fluage pour le béton	55
B.1	Propriétés matérielles pour une simulation de fluage (modèle de Maxwell)	169
B.2	Normes de convergence d'un pas visco-élastoplastique pour un modèle de Maxwell .	170
B.3	Normes de convergence locales pour un modèle de Maxwell	171
B.4	Propriétés matérielles pour une simulation de fluage (modèle de Burger)	176
B.5	Propriétés matérielles pour une simulation de fluage (modèle de Burger, suite)	177
B.6	Normes de convergence locales pour un modèle de Burger	178
C.1	Coefficients pour les corrélations de convection naturelle	182

Liste des algorithmes

4.1	Algorithme de calcul de la contribution d'une formulation	83
4.2	Algorithme d'intégration des déformations visqueuses permanentes et réversibles de la classe <code>FEShCstvLawViscousBurger</code>	91
4.3	Algorithme d'intégration d'Euler implicite dans <code>FEShCstvLawElastoPlasticStd</code> .	95
4.4	Algorithme d'intégration par Retour Radial dans <code>FEShCstvLawElastoPlasticJ2</code> .	97

Chapitre 1

Introduction

1.1 Généralités

La production d'aluminium à partir de son oxyde, l'alumine, est un vaste champ d'étude posant de grands défis. En effet, dans le procédé utilisé à l'échelle industrielle, le procédé *Hall-Héroult*, les aspects thermiques, électriques, mécaniques, chimiques, magnétiques et de mécanique des fluides interagissent fortement. Depuis longtemps, les ingénieurs ont fait appel à la simulation numérique, essentiellement la méthode des éléments finis, pour analyser et concevoir les *cuves d'électrolyse*, lesquelles mettent en oeuvre le procédé. Les phénomènes ont d'abord été traités séparément, mais depuis quelques années, la démocratisation de la puissance informatique a amené les producteurs à tenter de tenir compte des couplages. Cependant, le comportement mécanique du revêtement n'a pas été étudié en détail jusqu'à maintenant.

De plus, la résolution de problèmes multichamps, multiphysiques et multimatériaux pose certaines difficultés de génie logiciel, difficiles à traiter dans un code classique de type FORTRAN ou C. Le paradigme orienté-objet offre une alternative intéressante, peu explorée jusqu'ici.

Aussi, les nouvelles exigences environnementales et de rentabilité économique poussent les alumineries à tenter de prolonger la vie utile de leurs cuves. Suivant l'axe de recherche en émergence dans le monde du génie civil, la mécanique de la durabilité ("durability mechanics"), on cherche à prédire la performance, la détérioration et la vie utile des cuves. Leur mise en opération a un impact certain sur ces aspects, en raison des transformations des matériaux du revêtement et des déformations mécaniques engendrées par l'augmentation de la température.

Après avoir succinctement présenté le contexte dans lequel s'est déroulée cette thèse, nous détaillerons donc le procédé de Hall-Héroult et la construction des cuves d'électrolyse. Par la suite, une revue de littérature exhaustive sur leur mise en opération permettra de bien camper notre problématique et

d'établir clairement nos objectifs. De plus, nous justifierons par une revue de littérature les développements informatiques présentés dans cette thèse. Finalement, les aspects originaux de la thèse seront mis en évidence.

1.2 Contexte

La compagnie Alcan, l'Université Laval et l'Université du Québec à Chicoutimi ont mis sur pied un programme de recherche, désigné par l'acronyme **START-CUVE**, financé dans le cadre du programme *CRSNG Université-Industrie*. Participent à ce projet les centres de recherche et les départements suivants :

- Centre de recherche et de développement d'Arvida (CRDA), Alcan, Jonquière ;
- Départements de génie chimique, civil et mécanique de l'Université Laval ;
- Département des sciences appliquées de l'Université du Québec à Chicoutimi (UQAC).

Un tel regroupement d'expertise est nécessaire en raison de la complexité du problème à résoudre. En effet, les procédures de mise en opération d'une cuve de Hall-Héroult sont, jusqu'à un certain point, conçues par essais-erreurs en usine. Le programme de recherche **START-CUVE** vise à développer les connaissances nécessaires à la conception rationnelle d'un mode opératoire de mise en régime d'une cuve de Hall-Héroult.

Dans un premier effort, **START-CUVE** vise à moyen terme (4 ans) l'amélioration des connaissances concernant les phénomènes thermiques, électriques et mécaniques prenant place durant le préchauffage électrique d'une cuve. L'objectif technologique consiste à développer un modèle numérique prédictif, ce qui permettra de réaliser des analyses paramétriques et de développer des scénarios de préchauffage de cuves. Un nouveau logiciel d'analyse par éléments finis, FESh++, basé sur le paradigme Orienté-Objet, a été développé à cette fin.

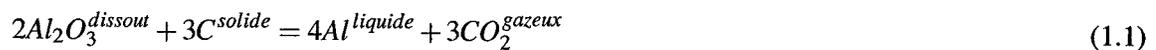
Cette thèse portant sur les aspects thermomécaniques des matériaux non carbonés s'inscrit donc dans ce programme de recherche.

1.3 Procédé de Hall-Héroult

Représentant près de 8.1 % de sa masse, l'aluminium est le métal le plus abondant dans la croûte terrestre. Pourtant, il fut considéré jusqu'au XIX^e siècle comme un métal plus précieux que l'or. En effet, présent sous forme d'oxydes ou de silicates dans la *bauxite*, il ne put être produit commercialement qu'à partir du milieu de ce siècle, par un coûteux procédé de réduction thermique de chlorure d'aluminium sodique par du sodium métallique. Il aura fallu attendre que Paul Héroult et Charles Martin Hall développent simultanément (et séparément) en 1886 le procédé maintenant connu sous le nom de *Hall-Héroult* pour voir son prix chuter à un niveau plus raisonnable. Perfectionné au cours

des années, ce procédé est toujours le seul utilisé à l'échelle industrielle et n'a pas vraiment de compétiteur sérieux en vue.

L'extraction de l'aluminium se fait à partir de l'alumine (Al_2O_3) à l'aide d'un procédé électrolytique : un courant électrique de forte intensité passe dans le bain (cryolithe fondue - Na_3AlF_6 - avec du fluorure d'aluminium en excès - AlF_3 - et certains autres additifs) où de l'alumine est en solution. L'anode est faite de carbone et la surface de la nappe d'aluminium liquide sur laquelle flotte le bain constitue la cathode électrochimique. L'alumine est décomposée en aluminium liquide et l'oxygène ainsi libéré oxyde le carbone de l'anode selon l'équation en (1.1).



L'application industrielle de ce procédé se fait dans les cuves d'électrolyse, aussi appelées cuves de Hall-Héroult, dont plusieurs dizaines sont connectées en série et opèrent à haut ampérage et à bas voltage. Une série de cuves moderne comprend généralement de 264 à 288 cuves, réparties en deux salles. Le courant voyage par un réseau de barres omnibus qui le récolte à la sortie des barres collectrices d'une cuve et le concentre pour l'amener aux montées positives de la cuve suivante. Les montées positives alimentent le cadre anodique sur lequel sont connectées les anodes. La conception du réseau de barres omnibus est très importante pour la stabilité magnéto-hydro-dynamique des cuves. L'arrangement de cuves côte à côte visible à la figure 1.1 est typique des usines modernes.

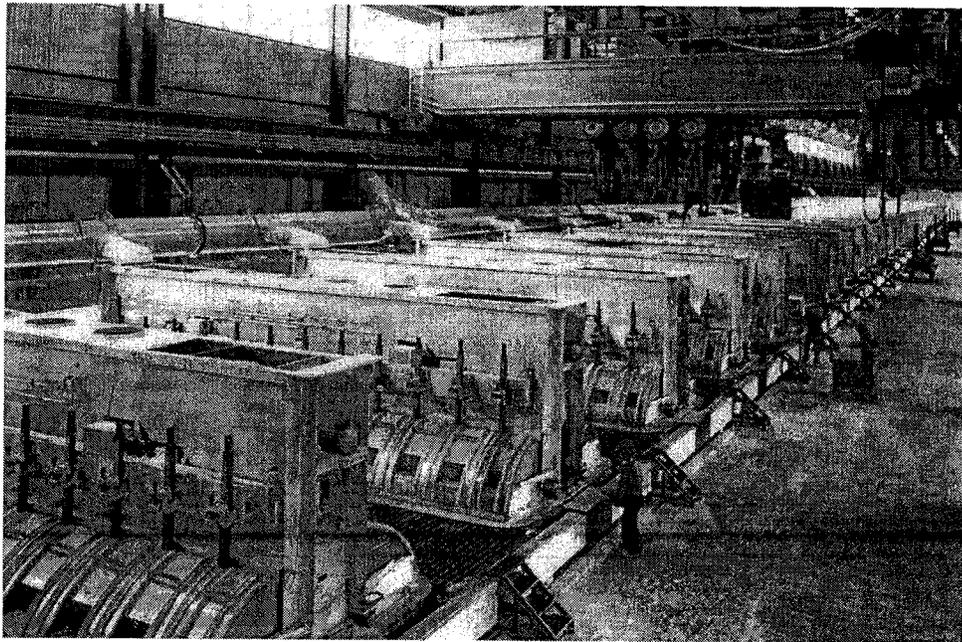


Figure 1.1: Salle de cuves P-155 à l'usine Grande-Baie (Alcan, La Baie, Qc.)

Une littérature abondante existe sur le procédé de Hall-Héroult ; on consultera par exemple le livre de Grjotheim et Kvanve (1993) pour une introduction générale au procédé.

Toutes les cuves modernes à anodes précuites partagent certaines caractéristiques, montrées à la figure 1.2.

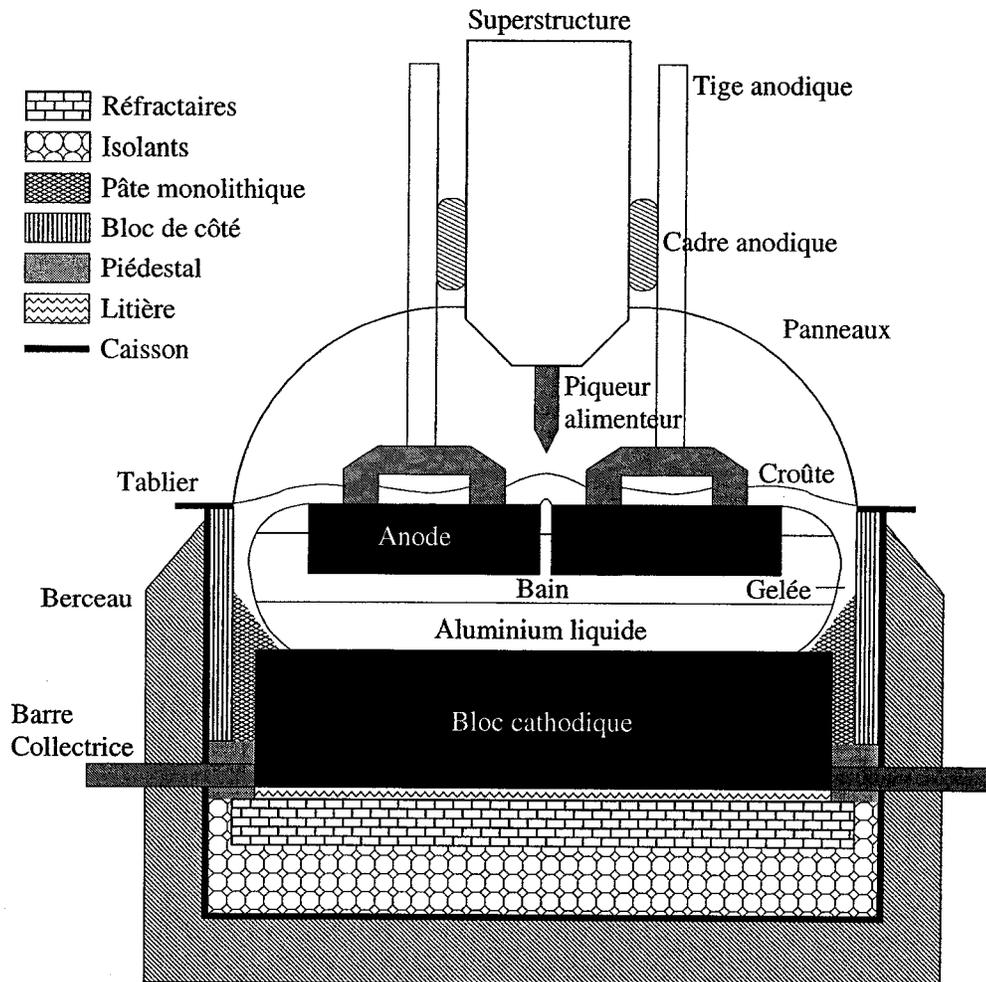


Figure 1.2: Schéma d'une cuve de Hall-Héroult à anodes précuites

En effet, elles sont toutes construites dans un *caisson* d'acier renforcé de *berceaux* (raidisseurs) qui contient le revêtement. Ce dernier sert à contenir l'aluminium liquide et le bain d'électrolyse qui sont à près de 960°C. Les anodes, partiellement plongées dans le bain, sont recouvertes d'une *croûte* - un mélange de bain et d'alumine solide - servant d'isolant thermique et de barrière à l'évaporation des composés fluorés du bain. Le caisson est surmonté d'une *superstructure* contenant les trémies d'alumine, de fluorure de sodium et de bain broyé, ainsi que les systèmes d'alimentation correspondants : les *piqueurs-alimenteurs*. Ces équipements pneumatiques cassent la croûte puis versent une dose de

la substance requise dans le bain. La superstructure supporte aussi le *cadre anodique* sur lequel sont fixées les anodes.

La conception du revêtement est dictée par les exigences du procédé ; ainsi, les *blocs cathodiques* sont à base de carbone, qui résiste bien à l'aluminium liquide en plus de bien conduire le courant. Les *blocs de côté* sont constitués de carbone, de graphite, ou plus récemment, de carbure de silicium ; ces matériaux conduisent bien la chaleur, puisqu'il est primordial d'évacuer suffisamment de chaleur par les côtés pour qu'une *gelée* de bain solidifié se forme. En effet, jusqu'à ce jour, aucun matériau n'a pu résister à l'attaque chimique du bain liquide - sauf le bain lui-même. C'est pourquoi l'équilibre thermique de la cuve est d'une importance capitale. Le reste du revêtement est constitué de divers réfractaires et isolants choisis et disposés de façon à préserver cet équilibre.

Les composantes du revêtement des cuves sont pour la plupart *déposées* les unes sur les autres, et cela constitue une caractéristique fondamentale des cuves. En effet, afin de s'assurer de l'étanchéité du revêtement, il faut maintenir les matériaux en compression, sans toutefois les fissurer. Il est important de noter que les joints entre les blocs cathodiques de carbone pré-cuits de même qu'entre ces blocs et le mur de côté sont faits de *pâte à brasquer* - ou *pâte monolithique*. Cette pâte est en fait verte (crue) et sera cuite en place dans la cuve. Il faut aussi savoir que la pâte crue est plutôt visco-élastoplastique (un peu comme l'asphalte chaude), et qu'elle subit un retrait volumétrique lors de sa cuisson, tout en dégageant des volatiles ; une fois cuite, ses propriétés sont similaires à celles des cathodes. La qualité de la pâte cuite dépend de sa structure et de sa porosité, donc de l'évolution des volatiles, qui dépend du taux de chauffe et de la température maximale de cuisson. On consultera l'ouvrage de Sørliet et Øye (1994) à ce sujet. Il s'agit là du maillon le plus faible dans la cuve : comme l'adhésion chimique entre la pâte et les autres matériaux risque d'être faible, ces joints sont susceptibles de permettre l'infiltration de liquide dans le revêtement.

Il faut aussi noter que le revêtement subira des transformations chimiques pendant la vie de la cuve résultant de la migration d'espèces sodiques et fluorées provenant du bain. Les réfractaires sont particulièrement agressés, et doivent donc être consciencieusement choisis. Encore une fois, il existe une abondante littérature sur l'aspect thermo-chimique du revêtement des cuves ; l'article synthèse de Tabereaux (1992), l'article sur les aluminosilicates de Brunk (1994), l'article de Johansson (1995) sur des analyses d'échantillons de réfractaires dégradés provenant d'autopsies de cuves, l'article de Schønning *et coll.* (1999) ou celui de Allaire (1992) sur les mécanismes de détérioration chimique des réfractaires pourront être consultés.

Alcan utilise plusieurs technologies, certaines anciennes et d'autres, ultra-modernes. La cuve étudiée dans le cadre de **START-CUVE** est la **P-155**, une cuve à anodes pré-cuites conçue par Alcoa ; cette cuve est relativement ancienne et a été conçue pour opérer à 155 kA, mais Alcan a pu augmenter l'ampérage à plus de 185 kA. Cette cuve a été choisie comme base d'étude par Alcan, notamment en raison de l'importante fraction de la capacité de production de la compagnie qui est issue de cette technologie, soit environ 30 % (en 2001). Elle sera donc la cuve de référence pour cette thèse.

Malheureusement, la P-155 peut être considérée comme l'une des cuves les plus difficiles à simuler. En effet, sa géométrie est plus compliquée que celle des cuves plus récentes, son revêtement comporte beaucoup de matériaux différents, dont certains ont un comportement mécanique complexe, comme par exemple le béton réfractaire isolant ou encore des panneaux d'une mousse céramique.

1.4 État actuel des connaissances

Tel qu'expliqué dans la *Carte Routière Technologique de l'Industrie Canadienne de l'Aluminium* (Réseau Trans-Al et Gouvernement du Canada, 2000), l'industrie de production d'aluminium primaire doit viser les trois objectifs suivants :

1. Abaisser ses coûts de production ;
2. Réduire ses impacts environnementaux ;
3. Abaisser sa consommation énergétique.

L'amélioration de la performance et de la durée de vie d'une cuve sont des facteurs cruciaux pour l'atteinte de ces objectifs. En effet, la performance d'une cuve conditionne sa consommation d'énergie, ce qui se traduit directement en coût de production ; une cuve plus performante donnera aussi la latitude nécessaire à la diminution de sa consommation nette de carbone et de sa production de composés fluorés. Aussi, une longue vie de cuve implique une quantité réduite de brasques usées, qui sont des déchets toxiques très coûteux à traiter. De plus, le coût de construction d'une cuve étant de l'ordre de 80 000 à 350 000\$ selon les technologies, Alcan dépense plusieurs dizaines de millions de dollars annuellement pour remplacer ses cuves usées ; il est donc facile de comprendre pourquoi l'industrie cherche à opérer des cuves performantes qui vivent longtemps.

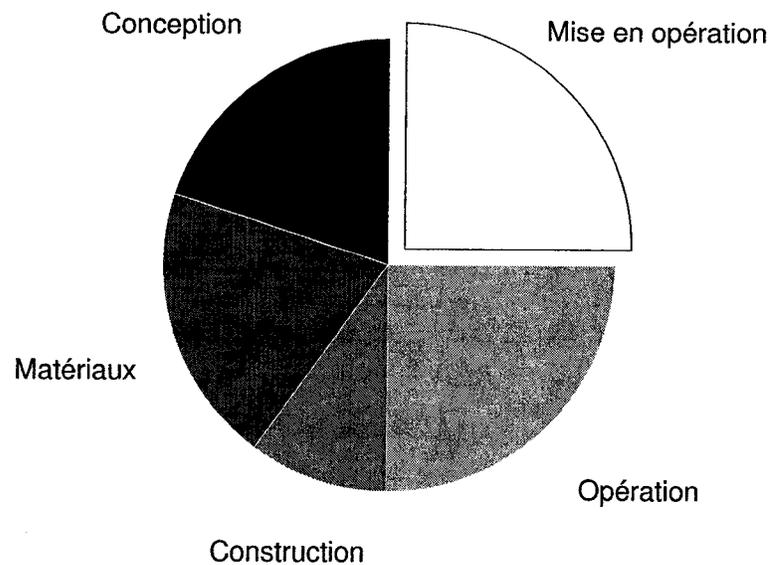


Figure 1.3: Importance relative des facteurs affectant la durée de vie des cuves selon Hale (1989)

Hale (1989) résume habilement les facteurs affectant la durée de vie d'une cuve ; selon lui, la répartition montrée à la figure 1.3 se rapproche de la réalité industrielle.

Au cours des années, la longévité des cuves s'est accrue, passant d'environ 600 jours en 1960, à 1200 jours en 1970, pour atteindre 2500 à 3000 jours dans les années 1990. Le passage d'un revêtement cathodique de pâte monolithique à un revêtement de blocs précurés, l'augmentation de la rigidité du caisson par l'utilisation de berceaux de renfort, l'utilisation de blocs cathodiques à contenu partiellement ou complètement graphitisé, l'amélioration de l'équilibre thermique de la cuve et l'utilisation de meilleures pratiques d'opération et de contrôle sont quelques exemples de l'évolution du procédé de Hall-Héroult. On pourra consulter entre autres l'article de Maharaj *et coll.* (1991) sur les effets de la sur-isolation et d'un mauvais démarrage, l'article de Peyneau (1989) sur la conception d'une cuve fiable et plusieurs articles sur la conception du caisson (Voir par exemple Toia et Soletta, 1979; Concas *et coll.*, 1989; Youhei et Shihuan, 1991; Dupuis *et coll.*, 1991; Megahed *et coll.*, 1996), ou encore l'article synthèse Homsy *et coll.* (2000) sur le contrôle du procédé.

Par contre, bien que tous les chercheurs s'entendent sur l'importance de la mise en opération d'une cuve sur sa performance et sur sa vie, il n'existe toujours pas de consensus dans l'industrie sur la façon de concevoir cette délicate opération. En fait, elle est plutôt violente : initialement à température ambiante, l'ensemble des matériaux doit d'abord être préchauffé avant que le bain, dont la température est d'environ 960°C, ne soit versé dans la cuve et que l'électrolyse ne commence. Plusieurs heures plus tard, du métal liquide sera versé dans la cuve afin d'en stabiliser l'opération. On peut donc distinguer trois étapes principales dans la mise en opération :

1. Le préchauffage ;
2. Le versement du bain ;
3. Le versement du métal.

À moyen terme, soit dans le cadre de cette thèse, **START-CUVE** s'attaque d'abord à la compréhension des phénomènes thermiques, électriques et mécaniques prenant place lors du préchauffage électrique. Le simulateur de préchauffage permettra donc de qualifier l'état initial de la seconde étape, le versement du bain.

1.4.1 Préchauffage d'une cuve de Hall-Héroult

1.4.1.1 Mécanismes de détérioration du revêtement

Les comptables considèrent le temps de préchauffage comme une perte de production et ses coûts, comme une dépense. Pour l'ingénieur, il est plutôt une étape cruciale de la mise en opération de la cuve : c'est un investissement. En effet, il vise à minimiser les dommages causés à la cuve par sa mise en opération et à lui donner une bonne espérance de vie. Ainsi, comme le font remarquer Sørli et Øye (1982), le point de vue du comptable a prévalu jusqu'à récemment. Par contre, depuis quelques années, l'accroissement des coûts associés au traitement ou à l'entreposage des brasques usées, conséquence de normes environnementales plus sévères, a rendu économiquement attrayant l'augmentation de la vie des cuves. De plus, les cuves soumises à une mise en opération "douce"

tendent à être plus performantes et à demander moins de soins des opérateurs. Ainsi, l'industrie s'est mise en quête de la meilleure méthode de préchauffage, soit celle qui représente le compromis le plus rentable entre les aspects techniques et financiers.

La littérature technique à ce sujet est particulièrement intéressante. L'expérience de l'industrie avec des cuves à revêtement de pâte monolithique des années 1960 montre que des cuves apparemment similaires ont des longévités très différentes ; l'analyse de données *in situ* par Johnson (1971) a permis de découvrir que la cuisson de la pâte était un élément déterminant. En effet, les endroits subissant un taux de chauffe rapide et des températures élevées étaient généralement ceux où s'initiait la ruine de la cuve. Ainsi, les fissures dans le bloc cathodique, l'endommagement du revêtement ou des barres collectrices diminuent sérieusement la vie de la cuve.

Les travaux de Clelland *et coll.* (1982) sur des cuves à blocs cathodiques précurts des années 1970 indiquent que le préchauffage et le démarrage affectent grandement la longévité de ces cuves. Des gradients thermiques trop importants peuvent créer des fissures dans les blocs cathodiques, tel que montré par Guilliatt et Chandler (1977), ce qui en diminue la durée de vie. De plus, si la température du bloc cathodique n'est pas suffisante lors du versement du bain, il peut subir un violent choc thermique risquant de le fissurer. Ils rapportent aussi que leurs murs de côté de pâte monolithique ne sont pas complètement cuits à la fin du préchauffage, ce qui peut causer une cuisson très rapide de la pâte, et entraîne donc de mauvaises propriétés, lorsque le bain est versé. Ils insistent sur l'importance d'un bon support du caisson pour maintenir les matériaux en compression et ainsi prévenir les infiltrations de liquide dans le revêtement. Rickards *et coll.* (1983) rapportent quant à eux qu'il n'est pas rare d'avoir des zones très chaudes lors du préchauffage alors que d'autres sont froides et que la pâte monolithique n'y est pas du tout cuite.

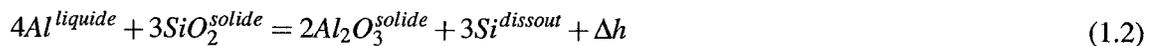
Ces observations méritent d'être confrontées aux articles de Dell (1985) et Sørliet et Øye (1982), à l'article synthèse de Sørliet *et coll.* (1993) et à l'ouvrage de Sørliet et Øye (1994), qui mettent en relief les mécanismes de destruction du revêtement. À l'aide d'analyses de plusieurs autopsies de cuves, Sørliet *et coll.* montrent qu'une part importante des dommages au revêtement se produit lors de la mise en opération, bien que les effets n'en seront visibles que beaucoup plus tard.

En effet, les fissures dans les blocs cathodiques de même que les espaces entre les blocs et la pâte monolithique permettent une pénétration rapide de bain ou de métal dans le revêtement. Une grande quantité de bain en contact avec les réfractaires produit des réactions chimiques incontrôlées qui peuvent transformer complètement les briques et même permettre l'attaque des isolants sous-jacents ; lorsque cela se produit, leur conductivité thermique augmente dramatiquement, et l'équilibre thermique de la cuve en est gravement perturbée. De la même façon, toute pénétration de métal dans le revêtement dérange l'équilibre thermique de la cuve en agissant comme une "mise à la terre thermique". S'en suivront des difficultés d'opération dues à un bloc cathodique froid, donc un moins bon rendement et un entretien accru. Pire encore, les réactions prenant place dans le revêtement continueront lentement, refroidissant de plus en plus le bloc cathodique, ce qui pourrait mener au gel de sels fluorés en son sein. Ces sels, prenant de l'expansion en se solidifiant, poussent le carbone perpendiculairement au front de gel, parfois jusqu'à fissuration. Le métal pourrait alors s'infiltrer davantage et venir en contact avec les barres collectrices, les dissolvant et causant la mort de la cuve.

Toujours selon Sørliet *et coll.*, même si le bloc cathodique demeurerait suffisamment chaud pour

éviter le gel des sels fluorés, il est possible que du carbure d'aluminium puisse se former en grande quantité sous le bloc cathodique si un apport suffisant d'aluminium et de fluorures est maintenu. Le carbure d'aluminium pousse le bloc cathodique vers le haut, avec les mêmes conséquences que pour la solidification des sels fluorés. Ces phénomènes, dits de "bottom heaving", une fois enclenchés, sont autogènes. Ils sont activés lorsque le caisson n'est pas suffisamment rigide : dans ce cas, ce dernier se déforme en flexion, ce qui ouvre des espaces entre les blocs cathodiques et les joints latéraux de pâte monolithique, permettant à plus de bain et de métal de pénétrer dans le revêtement. Par contre, si le caisson est trop rigide, les blocs seront mis en flexion et ils pourraient fissurer. Ces phénomènes peuvent être rapides ou plutôt lents, selon le taux d'infiltration, mais ils finiront par entraîner la mort de la cuve un jour ou l'autre.

Une pénétration massive de métal dans le revêtement peut aussi mener à une violente réaction aluminothermique toute aussi massive, c'est-à-dire la conversion exothermique et autogène de l'aluminium liquide en alumine par réaction avec la silice, selon la réaction décrite à l'équation (1.2).



Dans ce cas, l'isolation est complètement détruite, sa conductivité thermique augmentant d'un facteur d'environ 500, et la cuve devient vite inopérable. Sørli *et coll.* (1995) rapportent une vie de seulement 5 jours pour une cuve ayant subi un tel phénomène.

Selon Bentzen *et coll.* (1991), il est impossible d'éviter complètement les petites fissures ou les petits espaces entre les matériaux lors de la mise en opération d'une cuve. Par conséquent, il est judicieux de considérer que le revêtement de carbone ne forme en aucun cas une barrière imperméable aux liquides. Ce constat doit être gardé en tête lors de la conception d'une procédure de démarrage d'une cuve.

Il faut aussi éviter que le bloc cathodique ne soit assez froid pour faire geler le bain lors de son versement. Dans ce cas, le passage du courant devient difficile et très localisé, ce qui peut gravement endommager les blocs cathodiques. De plus, il est possible que la surface du bloc cathodique s'effrite sous l'action de la pénétration de vapeurs de sodium dans le bloc cathodique. Tel qu'expliqué par Sørli et Øye (1994, p.329–34), ce phénomène est plus marqué avec les blocs anthracitiques ayant un faible contenu graphitisé, en raison de leur expansion sodique plus élevée ; le phénomène consiste en la microfissuration puis la macrofissuration du carbone sous l'action de l'expansion locale, causée par l'intercalation du sodium, et catalysée aux températures inférieures à l'opération normale. Des éclats et même des galettes jusqu'à 4 cm d'épaisseur peuvent être détachés au front de gel du bain sur le bloc cathodique. À mesure que le bain redeviendra liquide, le front d'effritement progressera avec lui. Une quantité importante de carbone peut ainsi être perdue. Le problème se pose par contre rarement avec des blocs cathodiques graphitisés.

Ainsi, un préchauffage désastreux peut entraîner la mort de la cuve après seulement quelques jours, voire quelques heures. Un mauvais préchauffage, moins spectaculaire, pourrait tout aussi bien priver la cuve de plusieurs années de vie.

1.4.1.2 Objectifs du préchauffage

En regard des mécanismes de détérioration des cuves présentés plus tôt, et bien que les opinions divergent sur la façon de s'y prendre, la plupart des chercheurs s'entendent sur les objectifs techniques d'un "bon préchauffage". Tel que résumé par Bentzen *et coll.* (1991), ils sont les suivants :

1. Éviter les fissures dans les blocs cathodiques en limitant les gradients thermiques ;
2. Éviter les chocs thermiques lors du versement du bain ;
3. Éviter la pyrolyse éclair de la pâte monolithique ;
4. Éviter que le bain ne gèle sur le bloc cathodique ;
5. Éviter les espaces entre la pâte monolithique et les autres matériaux dus à leurs mouvements ou leurs déformations au moment de verser le bain ;
6. Avoir une température de bloc cathodique suffisamment basse pour permettre au bain de sceller les fissures et les espaces mineurs en gelant.

Il faudrait aussi ajouter qu'il est important d'éviter que la pâte ne soit complètement cuite au moment de verser le bain, afin de lui permettre d'absorber une partie de l'expansion thermique des blocs cathodiques. Ceci permettra d'empêcher la mise en flexion des blocs, qui peut causer des fissures.

1.4.1.3 Types de préchauffage

Il existe plusieurs approches dans l'industrie pour mener à bien l'opération de préchauffage, bien résumées dans l'ouvrage de Sørliet et Øye (1994) :

<i>"Crash Start"</i>	Le bain liquide est versé directement dans la cuve. Il n'y a aucun préchauffage.
<i>Métal liquide</i>	De l'aluminium liquide est versé dans la cuve, puis les anodes sont ajustées afin d'être presque en contact avec le métal ; le taux de chauffe est ajusté en variant la position des anodes.
<i>Thermique</i>	Des brûleurs au gaz ou à l'huile sont utilisés pour chauffer les blocs cathodiques.
<i>Résistif</i>	Un lit de carbone est placé sur le bloc cathodique et les anodes y sont déposées ; la totalité ou une partie du courant de la série est forcée dans la cuve.

La méthode sans préchauffage n'est plus guère utilisée de nos jours, sauf pour des petites cuves Söderberg. Les autres méthodes ont des avantages et des inconvénients. Encore une fois, l'ouvrage de Sørliet et Øye (1994) est très éclairant à ce sujet, et le tableau 1.1 en résume les principales conclusions.

Tableau 1.1: Avantages et inconvénients des différentes méthodes de préchauffage

Méthode	Avantages	Inconvénients
“CRASH START”	Mise en opération très rapide	Au départ, important gradient thermique dans le bloc cathodique et la pâte Risques de pyrolyse éclair de la pâte Solidification du bain sur le bloc cathodique dans les grandes cuves Vie de cuve réduite
MÉTAL LIQUIDE	Température finale du bloc cathodique assez uniforme Gradients finaux faibles dans le bloc cathodique Oxydation réduite du carbone Émissions de HAP réduites Peu de main d'oeuvre nécessaire	Au départ, important gradient thermique dans le bloc cathodique et la pâte Risques de pyrolyse éclair de la pâte Mauvaise distribution de courant anodique : dommage aux blocs cathodiques Pénétration de métal dans le revêtement Vie de cuve réduite
THERMIQUE	Température finale du bloc cathodique assez uniforme Gradients finaux faibles dans le bloc cathodique Facile à préparer	Mise en circuit de la cuve plus difficile Effet d'anode plus important au versement du bain Préchauffage plus long Oxydation du carbone Aspect santé-sécurité : carburant près des cuves Équipement spécialisé nécessaire
ÉLECTRIQUE	Préchauffage court Mise en circuit facile Contrôle facile (avec “Shunts”)	Augmentation rapide et locale de la température du bloc cathodique Forts gradients de température dans le bloc cathodique et points chauds Température finale du bloc cathodique peu uniforme

Le préchauffage résistif (ou électrique) est le plus utilisé dans l'industrie, malgré les problèmes inhérents à cette méthode. L'utilisation de résistances parallèles ("shunts") permet de contrôler la fraction du courant de la série forcée dans la cuve. Ainsi, au cours du préchauffage, les résistances parallèles sont enlevées les unes après les autres selon une courbe précise de montée en régime.

Le préchauffage électrique est la seule méthode utilisée par l'Alcan pour le démarrage de la P-155 ; par conséquent, elle sera aussi la seule analysée dans le cadre de cette thèse. On peut en voir la configuration classique à la figure 1.4.

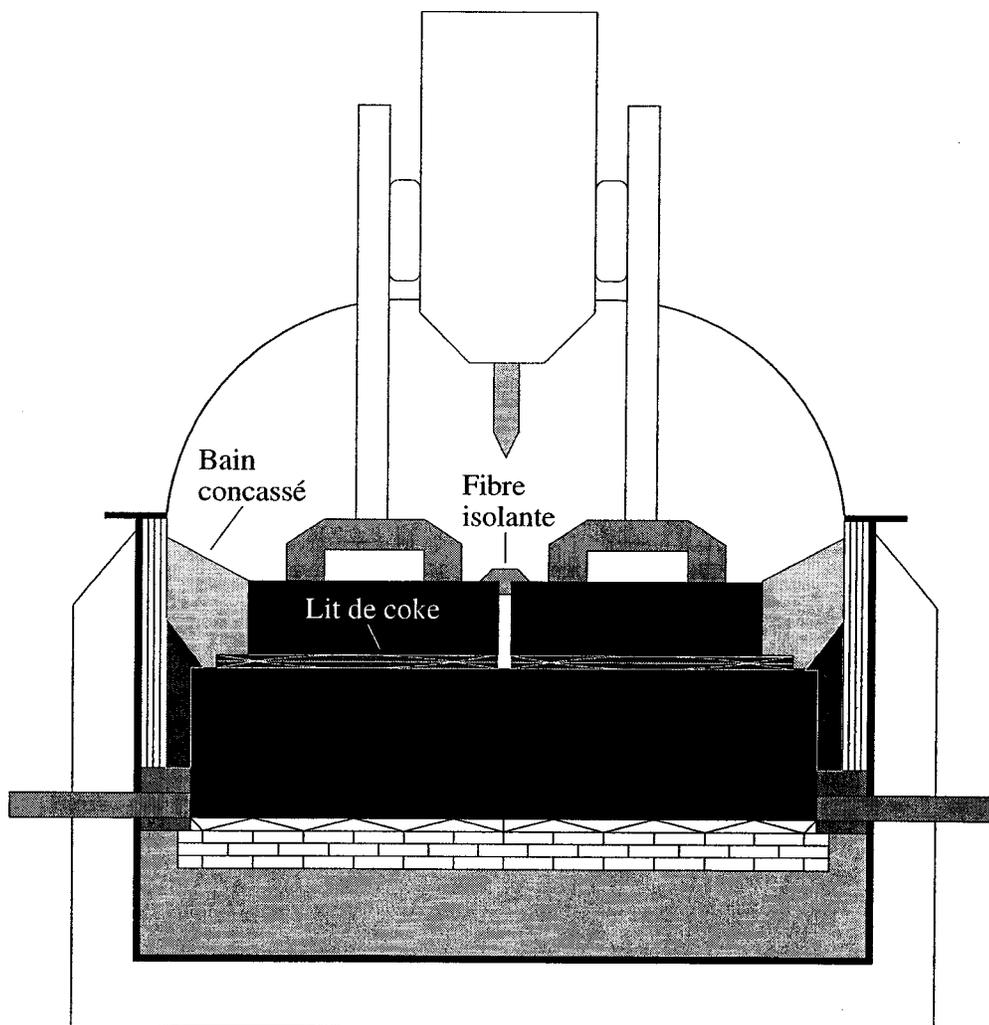


Figure 1.4: Schéma d'une cuve de Hall-Héroult à anodes préchauffées en préchauffage électrique

1.4.1.4 Aspects thermomécaniques du préchauffage électrique

La simulation d'un préchauffage électrique implique le passage du courant entre les électrodes de carbone et les conducteurs d'acier ; dans l'industrie, le contact entre l'acier et le carbone est généralement assuré par de la fonte. Tel que montré par Richard *et coll.* (2000, 2001, 2003b), il s'agit en réalité d'un problème thermo-électro-mécanique couplé faiblement, *i.e.* les champs de température, de potentiel électrique et de déplacement doivent être résolus ensemble, ou recouplés par itération. On consultera le mémoire de maîtrise de Richard (2000) et la thèse de Goulet (2004) pour de plus amples détails.

Les principales caractéristiques thermomécaniques de la P-155, dont on peut voir un schéma du revêtement à la figure 1.5, sont les suivantes :

- Le revêtement est composé de plusieurs matériaux au comportement très différent. On retrouve par exemple :
 - des isolants poreux ;
 - des réfractaires denses d'aluminosilicate ;
 - du carbure de silicium ;
 - un béton réfractaire isolant ;
 - des produits carbonés précurés : blocs cathodiques, blocs d'antracite et anodes ;
 - un produit carboné vert : la pâte monolithique ;
 - de la fonte de scellement pour les anodes et les blocs cathodiques ;
 - de l'acier pour les barres collectrices et les rondins anodiques ;
 - du cuivre pour la tige anodique.
- Les matériaux du revêtement sont déposés les uns sur les autres ; le revêtement est en contact avec le caisson.
- Certains joints sont faits de mortier, d'autres sont secs. Certains pourraient même être cohésifs.
- Il existe un espace d'air entre le carbone et la fonte dans les anodes et les blocs cathodiques à température ambiante.
- Le caisson d'acier n'est pas soudé aux berceaux sur la P-155 ; à température ambiante, ils ne sont pas en contact.
- Le poids de la superstructure repose par quatre appuis sur le caisson.
- Lors du préchauffage, les anodes sont déposées directement sur le lit de coke.

Le comportement thermomécanique des matériaux carbonés est très complexe, et les travaux de D'Amours (2004) à ce sujet seront pris pour acquis (voir aussi D'Amours *et coll.* (2003b)).

Les seuls chargements "mécaniques" sont donc le poids propre des anodes sur le bloc cathodique et le poids de la superstructure. Les autres chargements sont principalement d'origine thermochimique.

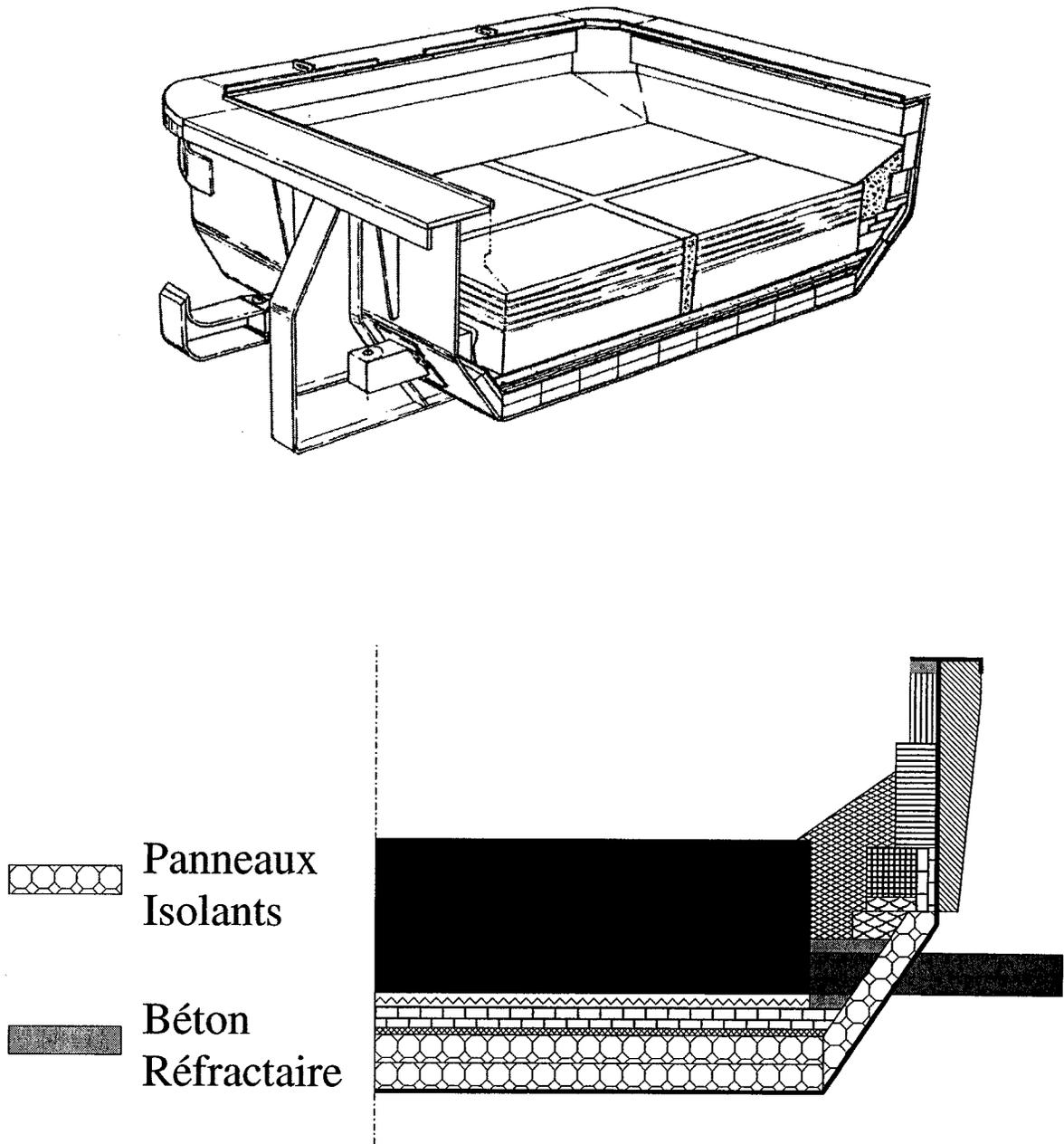


Figure 1.5: Schéma du revêtement d'une cuve P-155, reconstruit à partir de Dupuis et Tabsh (1994b)

1.4.2 Travaux antérieurs sur la modélisation du préchauffage

1.4.2.1 Préchauffage électrique de cuves de Hall-Héroult

Les travaux sur la modélisation du préchauffage électrique d'une cuve de Hall-Héroult sont peu nombreux, et ceux sur l'aspect thermomécanique, presque inexistant.

Dupuis *et coll.* (1993) font office de pionniers, ayant d'abord bâti un modèle thermoélectrique tridimensionnel transitoire d'un quart de cuve. Puis, Dupuis et Tabsh (1994a) ont utilisé le champ de température obtenu du modèle thermoélectrique comme chargement pour un modèle thermomécanique. Leur approche du problème mécanique est très simplifiée ; en dépit de la reconnaissance du caractère incrémental de la solution mécanique dû aux non-linéarités matérielles, leur modèle est quasi-stationnaire, donc le retrait volumique de la pâte en cuisson a été négligé. En effet, le code commercial ANSYS 4.4A utilisé comme plateforme de développement n'offrait pas cette possibilité. Aussi, seuls la pâte et les blocs cathodiques ont été analysés mécaniquement ; des conditions aux frontières ont été posées pour remplacer les interactions avec les autres matériaux, malgré l'affirmation des auteurs de la nécessité d'utiliser des éléments de contact aux interfaces. De plus, la loi de comportement du carbone semble être linéaire élastique, ce qui est clairement inadéquat, tel que montré par Richard (2000), D'Amours *et coll.* (2003b) et D'Amours (2004). Ainsi, le modèle ne peut donner que des bornes peu fiables sur les contraintes dans les blocs cathodiques ; il ne peut renseigner ni sur les décollements possibles entre la pâte et les autres matériaux, ni sur l'interaction du revêtement avec le caisson, ni sur l'impact du comportement des autres matériaux sur les blocs, en particulier celui du béton réfractaire isolant. Il faut noter l'absence de validation expérimentale du modèle thermomécanique.

Plus tard, Mohammed *et coll.* (1997) de même que Dunn et Galadari (1997) ont développé un modèle thermoélectrique bidimensionnel du préchauffage électrique. Dupuis (2001) montre par la suite que des modèles thermoélectriques tridimensionnels d'un quart de cuve peuvent maintenant être résolus sur un Pentium II à l'aide de ANSYS 5.3, par opposition aux années 1993-1994 où des super-ordinateurs devaient être utilisés.

Les travaux de Cross *et coll.* (2000) sur la modélisation multi-physique d'une cuve de Hall-Héroult, basée sur la méthode des volumes finis, n'attaquent pas la simulation du préchauffage en tant que tel. Cependant, leur code thermo-électro-magnéto-hydro-dynamique forme la base d'un noyau de calcul auquel ils souhaitent ajouter l'analyse mécanique. Ils soulignent la nature élasto-viscoplastique de plusieurs matériaux et l'importance des interfaces de contact sur la réponse thermomécanique.

Arkhipov et Pingin (2001) quant à eux, montrent des résultats de simulations thermomécaniques stationnaires d'une cuve Söderberg basées sur le code commercial COSMOS/M 2.0. Il ne semble pas y avoir de couplage entre la solution thermoélectrique et la solution thermomécanique : le gradient de température dans les blocs est imposé. Les interfaces de contact sont liées par un matériau "équivalent" qui bizarrement peut être fortement mis en traction. Aussi, aucune validation expérimentale n'est présentée pour valider les hypothèses du modèle.

Sun *et coll.* (2003) ont développé un modèle thermo-chimio-mécanique bidimensionnel dans le code commercial ANSYS, en tenant compte de la diffusion du sodium dans le carbone et de ses effets mécaniques. Les deux cents premiers jours de la vie de la cuve sont ainsi simulés. Cependant, le comportement des matériaux est linéaire élastique, et le préchauffage est représenté en imposant la température de la surface du bloc cathodique. La comparaison entre les résultats numériques et la mesure expérimentale du déplacement d'un point sur un berceau semble indiquer que le revêtement est beaucoup trop rigide dans le modèle ; en effet, la simulation prédit près du double de la valeur mesurée lors du préchauffage. Ceci est évidemment la conséquence de l'hypothèse d'élasticité des matériaux du côté de la cuve. Ce modèle a été étendu au cas tridimensionnel par Sun *et coll.* (2004) ; bien que les auteurs reconnaissent l'importance du fluage dans le carbone, il n'est pas inclus dans leur simulation, ce qui donne à certains moments des contraintes de l'ordre de 40 MPa dans le carbone – bien au-delà de la limite de rupture en compression, soit généralement de 25 à 30 MPa selon Sørli et Øye (1994).

Finalement, les travaux de Hiltmann et Meulemann (2000) semblent les plus intéressants du point de vue mécanique. En effet, les températures obtenues d'un modèle thermique tridimensionnel transitoire d'un quart de cuve calé sur des mesures expérimentales, sont appliquées comme un chargement à un modèle thermomécanique. On remarque l'absence de couplage thermoélectrique et le modèle thermique rudimentaire. Il semble que les interfaces de contact soient jointes ; en effet, les auteurs définissent les zones de danger d'infiltration comme celles où la pâte n'est pas en compression à la fin du préchauffage. De plus, aucun résultat concernant les autres matériaux n'est présenté. Par contre, les propriétés de la pâte semblent avoir été adéquatement prises en compte. La validation expérimentale du modèle semble incomplète ; en effet, seule une mesure de la force globale exercée sur les berceaux est comparée aux simulations, et la correspondance est loin d'être parfaite.

1.4.2.2 Travaux connexes

Poches de coulée pour l'industrie de l'acier. Les nouvelles exigences des manufacturiers, en particulier ceux oeuvrant dans les transports, ont forcé les aciéries à produire de l'acier plus propre ("Clean Steel"), c'est-à-dire avec moins d'inclusions, moins de défauts de surface et moins de carbone, de soufre, d'oxygène, de phosphore et d'hydrogène. Les aciéries ont donc mis en place des pratiques permettant d'atteindre ces objectifs, entre autres en réalisant des opérations secondaires alors que l'acier en fusion repose dans les poches de coulées. Ces poches (ou creusets) sont essentiellement des caissons cylindriques d'acier dans lesquels sont disposés des isolants et des réfractaires ; un schéma d'une poche de coulée typique est montré à la figure 1.6.

Ces creusets sont soumis à des températures élevées – plus de 1500°C pendant une vingtaine d'heures selon Boggs *et coll.* (1992) – et par conséquent subissent des contraintes thermomécaniques sévères, ce qui en diminue la vie utile. Certaines opérations sont ainsi devenues critiques ; par exemple, l'acier en fusion étant coulé à près de 1600°C, un bon préchauffage de la poche est nécessaire afin d'éviter les chocs thermiques. On note que des modèles numériques purement thermiques visant à prédire les pertes thermiques et la diminution de la température du métal ont fait l'objet de plusieurs

publications (voir par exemple Saha *et coll.*, 1991; Mohanty et Satayayut, 1992; Fredman et Saxén, 1998).

Les effets thermomécaniques ayant une grande importance pour la durée de vie du revêtement des poches de coulée, ils ont par conséquent été étudiés dès les années 1980 (voir entre autres Schacht, 1984; Wei, 1986; Schacht, 1987; Boggs *et coll.*, 1992; Schacht, 1993; Russell *et coll.*, 1993; Schacht, 1997). Les travaux de Schacht (1993) et Russell *et coll.* (1993) seront examinés plus particulièrement. D'après ces auteurs, une grande partie des dommages au revêtement apparaît lors des opérations où de forts gradients thermiques sont ressentis, par exemple lors du préchauffage des poches.

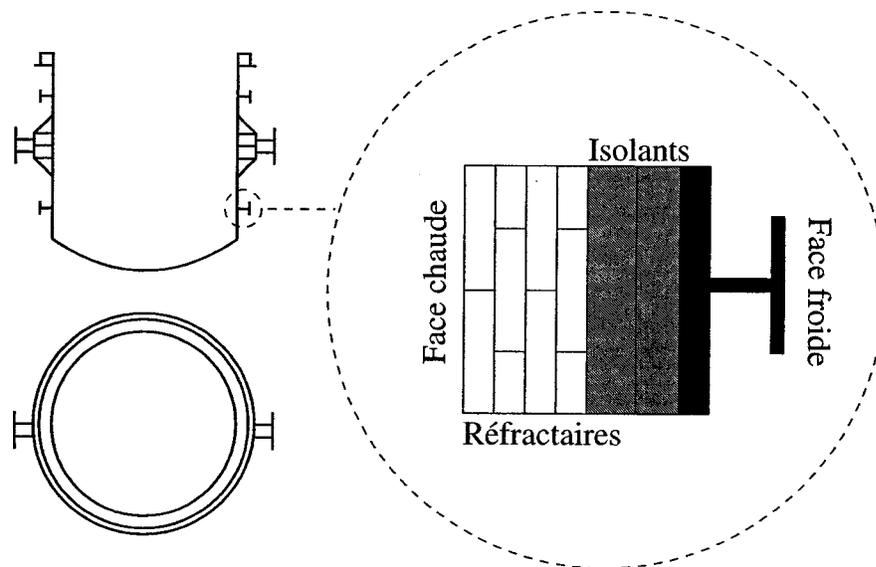


Figure 1.6: Schéma d'une poche de coulée pour l'industrie de l'acier, tiré de Schacht (1984)

Russell *et coll.* (1993) ont construit deux modèles d'éléments finis thermomécaniques transitoires : un axisymétrique (vertical), et un bidimensionnel en déformations planes (horizontal). Ces modèles comprenaient des éléments de contact noeud à noeud ("gap") pour tenir compte de la possibilité de décollement entre les couches d'isolants et de réfractaires et entre les briques réfractaires elles-mêmes. Par contre, le mortier des joints a été négligé. Les déformations permanentes du revêtement semblent aussi avoir été négligées ; cependant, les paramètres élastiques dépendent de la température. De plus, le fluage à haute température a été considéré. Les résultats des simulations indiquent que le fluage des réfractaires cause l'ouverture des joints entre les briques lors du refroidissement, permettant les infiltrations de métal ; aussi, l'expansion thermique des réfractaires (chauds) étant plus importante que celle des isolants (froids), les premiers sont poussés vers l'intérieur de la poche, causant le décollement des deux couches. Les auteurs montrent ensuite qu'un taux de chauffe plus faible réduit les dommages au revêtement.

Schacht (1993) a quant à lui comparé les résultats d'un modèle d'éléments finis tridimensionnel d'un secteur ("pointe de tarte") représentatif avec des mesures de déformations *in situ* provenant d'une poche de coulée instrumentée en préchauffage, d'une durée d'environ 16 heures. Les réfractaires ont été modélisés par une loi de comportement élastoplastique ; le fluage a été négligé, puisque la durée du préchauffage était trop courte pour qu'il soit suffisamment important. Les analyses de l'auteur montrent que l'utilisation du module élastique mesuré par une méthode ultrasonique menait clairement à des résultats farfelus. Par contre, en utilisant le module de Young provenant de mesures de compression statique, les résultats sont sensiblement meilleurs. De plus, l'auteur attribue la différence entre les mesures expérimentales et les simulations numériques à l'effet des joints de mortier, qui avaient été négligés dans le modèle. En effet, l'auteur rapporte que des mesures effectuées sur des échantillons de briques jointes par du mortier ont montré une réduction de la rigidité "équivalente" d'environ 30%.

Réacteurs de gazification du charbon. L'augmentation des besoins énergétiques a rendu plus attrayante la gazification du charbon dans les années 1980, ce qui a entraîné la recherche d'un procédé de production de masse. Les réacteurs développés devaient pouvoir opérer entre 800 et 1600°C et à haute pression. Essentiellement des caissons d'acier contenant un revêtement de bétons isolants et de réfractaires, ils s'apparentent donc aux poches de coulées mentionnées plus haut. Le modèle thermique en différences finies bâti par Buyukozturk et Tseng (1983) nous apprend que l'effet isolant des fissures perpendiculaires au flux de chaleur, soit celles causées par un choc thermique ¹, devait être pris en compte afin de reproduire les mesures *in situ*. Les auteurs affirment qu'en réalité, il s'agit d'un problème thermomécanique fortement couplé, donc que le coefficient de transfert de chaleur devrait être réajusté selon les résultats de la simulation mécanique, au lieu d'être calé *a posteriori* comme ils avaient dû le faire.

Chen et Buyukozturk (1985a,b) ont par la suite construit un modèle thermomécanique, basé sur la méthode des éléments finis, d'un réacteur de gazification du charbon ; cette fois, le revêtement était constitué de briques jointes par un mortier. L'effet de la température sur les propriétés des matériaux, le fluage à haute température et la dépendance à l'histoire des chargements ont dû être considérés. Un modèle constitutif avec endommagement couplé à de la viscoélasticité (basé sur un modèle rhéologique simple) a été utilisé pour les milieux continus. Le comportement des joints de mortier a été approché par une enveloppe de rupture de Drucker-Prager. Leurs conclusions permettent d'affirmer que les contraintes dans le revêtement proviennent à la fois des gradients thermiques et de l'effet de confinement du caisson. Par conséquent, les coefficients d'expansion thermique influencent fortement l'état de contrainte. D'ailleurs, ils montrent que l'utilisation d'une couche compressible permet de réduire considérablement les niveaux de contraintes dans les réfractaires de la face chaude. De plus, les auteurs montrent que le taux de chauffe lors du préchauffage du réacteur détermine en grande partie l'étendue des dommages pouvant être causés au revêtement. Finalement, l'expansion thermique du caisson peut entraîner le décollement du revêtement, de même que les gradients de température peuvent causer le décollement des réfractaires denses et des isolants, ce qui dans les deux cas est catastrophique pour la dissipation thermique.

¹ Voir Schacht (1997) pour une bonne explication de ce phénomène.

1.4.2.3 Synthèse

Les points suivants méritent d'être retenus des travaux existants, discutés à la section 1.4.2.1 :

- Au minimum, un quart de cuve doit être simulé ;
- La simulation doit être transitoire ;
- Une approche de résolution incrémentale doit être prise ;
- Les interfaces de contact doivent être correctement prises en compte ;
- L'ensemble des matériaux doit être simulé afin de lever le problème des conditions aux limites "équivalentes" ;
- Le caisson et les berceaux doivent être simulés ;
- Le caractère visco-élastoplastique de certains matériaux doit être correctement simulé ;
- Une validation du modèle numérique sur des mesures expérimentales doit être réalisée ;
- La loi de comportement thermomécanique des matériaux doit être adéquate.

De plus, les travaux connexes présentés dans la section 1.4.2.2 nous fournissent les pistes suivantes :

- Les chargements mécaniques sont principalement d'origine thermique : d'une part les contraintes dues aux gradients thermiques locaux, et d'autre part, les contraintes dues au confinement du revêtement par le caisson d'acier ;
- L'expansion thermique est une propriété critique et fondamentale pour la simulation thermomécanique ;
- Le taux de chauffe lors du préchauffage influence grandement les contraintes dans les matériaux ;
- Le module de Young statique doit être utilisé ;
- Les couches de matériaux peuvent se décoller lors du préchauffage ;
- Les joints entre matériaux semblables doivent être pris en compte, puisqu'ils peuvent avoir une influence majeure sur la rigidité de l'assemblage ;
- Les déformations permanentes doivent être prises en compte, qu'elles soient d'origine visqueuse (fluage) ou dues au chargement mécanique (pseudo-élastoplasticité) ;
- L'effet thermique des fissures perpendiculaires au flux de chaleur peut être suffisamment important pour qu'il soit nécessaire de résoudre un problème thermomécanique fortement couplé.

Ces pistes serviront maintenant à cerner plus précisément la problématique traitée dans cette thèse.

1.5 Problématique et objectifs

Cette thèse s'inscrit dans un programme de recherche plus large, le projet **START-CUVE**. Les aspects suivants de la problématique générale du projet constituent les objectifs principaux de cette thèse :

- Choix ou développement de lois de comportement thermomécaniques adéquates pour les matériaux non carbonés ;
- Implémentation et intégration de toutes les lois de comportement dans un code d'éléments finis, FESh++ ;
- Identification des paramètres des lois de comportement thermomécaniques à l'aide de la littérature ou de résultats de laboratoire pour les matériaux non carbonés ;
- Validation du simulateur thermomécanique à l'aide de résultats expérimentaux.

Par représentation adéquate de la loi de comportement thermomécanique de tous les matériaux, il faut entendre une représentation suffisante pour capturer l'essentiel du comportement du matériau en contexte de préchauffage. Il est capital de comprendre que les matériaux du revêtement sont contraints par le caisson et les berceaux essentiellement de façon latérale. En effet, rien n'empêche le revêtement de bouger vers le haut, hormis le poids propre des matériaux. Un rapide calcul nous apprend qu'une pression maximale de l'ordre de 0.2 MPa sera appliquée sur le fond du caisson par gravité, ce qui est très négligeable par rapport aux efforts développés par les autres phénomènes.

Par conséquent, afin de bien cerner les efforts transmis aux blocs cathodiques, il faut caractériser précisément le comportement des matériaux du côté de la cuve, en particulier ceux faisant directement face aux blocs cathodiques. Les matériaux sous la cathode sont beaucoup moins importants du point de vue mécanique. Ainsi, chacun des matériaux non carbonés présent dans une cuve P-155 (voir la figure 1.5) sera passé en revue au chapitre 2, son comportement analysé, et des hypothèses simplificatrices raisonnables seront posées.

Du point de vue informatique, cela implique aussi la conception et la mise en oeuvre d'un cadre informatique permettant l'implémentation aisée de lois de comportement variées et complexes, la gestion adéquate de nombreux matériaux, la gestion efficace des variables internes, mais surtout, la prise en compte des couplages entre les phénomènes. Ces aspects seront détaillés au chapitre 4.

Finalement, la validation du modèle numérique sera présentée au chapitre 5, où des résultats de simulation sont comparés à des résultats expérimentaux.

1.6 Aspects originaux

Tel que montré précédemment, l'aspect thermomécanique du préchauffage d'une cuve de Hall-Héroult n'a été que peu étudié. Les aspects originaux de cette thèse seront donc les suivants :

1. Représentation adéquate de la loi de comportement thermomécanique de tous les matériaux non carbonés :
 - Prise en compte des effets macroscopiques de changements microstructuraux irréversibles ;
 - Prise en compte des effets cinétiques des changements microstructuraux ;
 - Prise en compte des déformations permanentes induites par l'histoire de chargement (fluage, plasticité, etc.).
2. Représentation adéquate de l'assemblage des matériaux ;
3. Solution non linéaire incrémentale, tenant compte de l'histoire du préchauffage :
 - Prise en compte des non-linéarités géométriques et matérielles ;
 - Prise en compte des couplages indirects entre phénomènes ;
 - Intégration implicite des lois de comportement.
4. Intégration de tous ces aspects dans un même code d'éléments finis ;
5. Mise en oeuvre numérique efficace, basée sur des concepts modernes de l'élastoplasticité ;
6. Conception et implémentation informatique orientée-objet dans un contexte multiphysique :
 - Basée sur les concepts de la thermodynamique ;
 - Gestion des variables internes ;
 - Gestion des matériaux ;
 - Gestion des lois de comportement.
7. Validation expérimentale adéquate du simulateur thermomécanique.

1.7 Conventions

Voici une liste des conventions utilisées dans ce document :

- Les variables sont dénotées ainsi :

<i>scalaires</i>	a, A	<i>vecteurs</i>	\tilde{a}
<i>tenseurs de 2^e ordre</i>	\mathbf{A}	<i>tenseurs de 4^e ordre</i>	\mathcal{A}

- Le tenseur identité de deuxième ordre (delta de Kronecker) est dénoté $\mathbf{1}$, alors que le tenseur identité de quatrième ordre est dénoté I ;
- La température est représentée par T et le temps, par t ;
- Le tenseur des contraintes de Cauchy est dénoté par σ , et celui des petites déformations, par ε ;
- Le tenseur des contraintes de Piola-Kirchhoff de seconde espèce (PK2) est dénoté par \mathbf{S} , et celui des déformations de Green-Lagrange, par \mathbf{E} ;
- Les invariants des tenseurs de second ordre sont définis à l'annexe A.1.

Chapitre 2

Matériaux non carbonés

2.1 Généralités

Tel qu'exposé à la section 1.4.1.4, les matériaux du côté de la cuve – dans la ligne d'action de l'expansion des blocs cathodiques – sont les plus importants à bien caractériser. En se référant à la figure 1.5, on identifie les matériaux non carbonés suivants qui feront l'objet d'une attention spéciale :

- Béton réfractaire isolant ;
- Isolants poreux cellulaires.

Les autres matériaux seront traités brièvement à la section 2.4.

2.2 Béton réfractaire

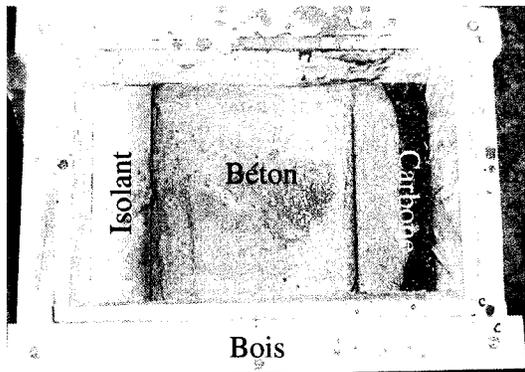
2.2.1 Comportement thermomécanique

Un béton est un mélange composé d'un liant et de granulats. Dans le cas des bétons réfractaires ordinaires, les granulats sont un mélange de silice (SiO_2) et d'alumine (Al_2O_3), et le liant, du ciment alumineux (aluminates de calcium). Tel que mentionné par Bray *et coll.* (1982), les bétons réfractaires sont des matériaux complexes qui ne répondent pas toujours aux théories "classiques" sur les matériaux cimentaires.

Néanmoins, comme pour tous les matériaux de ce type, ils passent d'un fluide très visqueux à un solide par des réactions exothermiques d'hydratation. La température d'hydratation détermine aussi

les espèces d'hydrates qui seront formées. Il est connu que les propriétés mécaniques de ces matériaux croissent avec leur degré d'hydratation. Cervera *et coll.* (1999a) soulignent que malgré 100 ans d'étude, ces réactions – ou plutôt cette compétition de réactions thermoactivées – ne sont pas encore très bien comprises. Ainsi, il est d'usage de considérer une réaction d'hydratation "équivalente" pour les applications d'ingénierie. Plusieurs modèles de maturation se retrouvent dans la littérature (notons entre autres Cervera *et coll.*, 1999a,b; Ulm et Coussy, 1995; de Schutter et Taerwe, 1996).

La recette de béton réfractaire étudiée est fortement sursaturée en eau, puisque le rapport eau sur solide est de 60%, ce qui se traduit par un rapport eau sur ciment supérieur à 2. Dans une cuve d'électrolyse, le béton réfractaire aux agrégats fins est mis en place à température ambiante, séché à l'air pendant huit heures, puis recouvert de pâte à brasquer vibrocompactée en place. Environ une semaine plus tard, la cuve est mise en préchauffage. Le béton repose sur de l'alumine granulaire, entre le carbone des blocs cathodiques, des isolants poreux cellulaires et des briques isolantes d'aluminosilicates. Une partie de l'eau contenue dans le béton lors de sa mise en place migre vers les matériaux isolants, modifiant ses conditions d'hydratation. La figure 2.1 illustre bien ce propos. Ce phénomène semble être moins important du côté du carbone.



(a) Montage d'hydratation



(b) Interface isolant poreux cellulaire - béton

Figure 2.1: Montage d'hydratation du béton, images tirées de Parent (2001)

Selon Cervera *et coll.* (1999b), un béton normal peut prendre de 5 à 7 jours pour atteindre son hydratation maximale en conditions adiabatiques, et jusqu'à 90 jours en conditions isothermes. Dans le cas du béton réfractaire, la prise est beaucoup plus rapide ; on peut normalement considérer qu'il est complètement hydraté après une semaine. Par contre, dans une cuve, étant donné les conditions d'hydratation complexe, on peut supposer que le béton présentera une distribution non homogène de propriétés.

Il faut aussi noter que le béton prend du retrait lors de l'hydratation, ce qui fait apparaître un espace d'air entre les matériaux, visible à la figure 2.1(b). Cet espace a une grande importance quant aux charges et à la chaleur transmises au caisson par le carbone des blocs cathodiques.

De plus, les analyses de Buyukozturk et Tseng (1983) montrent que l'effet des fissures perpendiculaires au flux de chaleur doit être pris en compte afin de reproduire les mesures de température *in situ* dans une fournaise de gasification du charbon. Ce type de fissures apparaît lorsqu'il y a un gradient thermique important entre la face chaude et la face froide du revêtement, par exemple lors du préchauffage ou du refroidissement de la fournaise. Un couplage thermomécanique fort pourrait donc exister pour ce matériau. Les essais sur le béton réalisés par Parent (2001) ont aussi montré que des fissures importantes sont déjà présentes au coeur du béton, tel que l'illustre la figure 2.2.

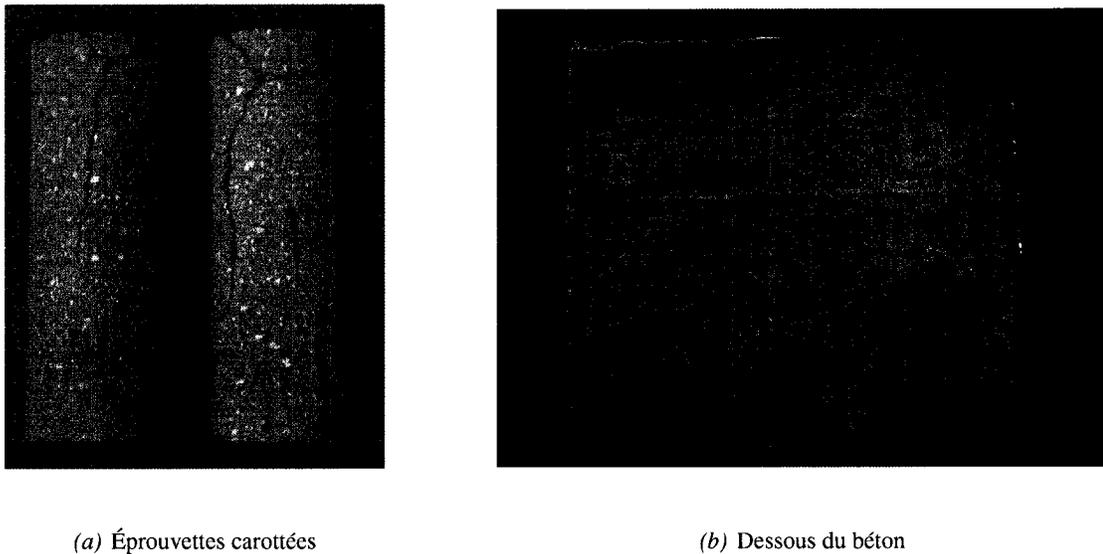


Figure 2.2: Fissures internes dans le béton du montage d'hydratation, tiré de Parent (2001)

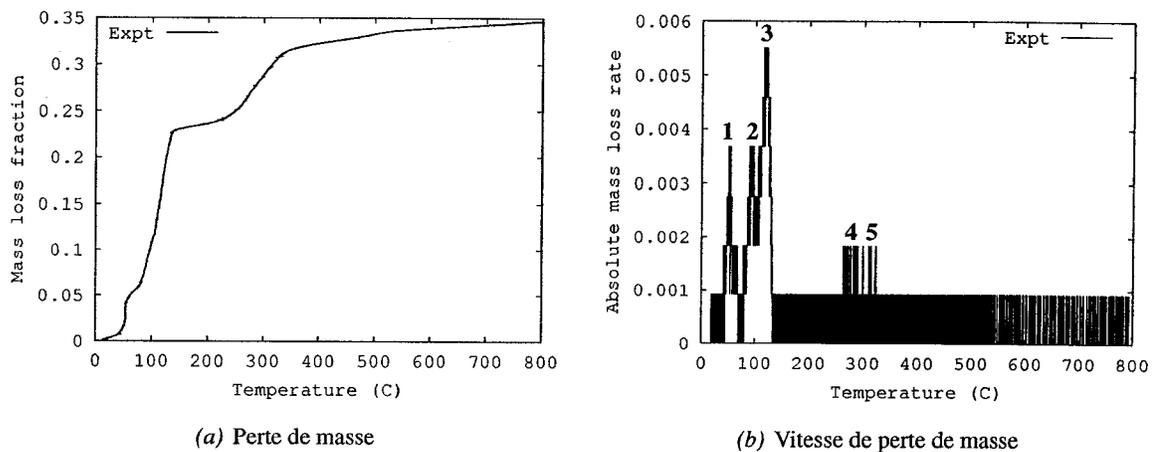
En cours de préchauffage, la température du béton augmente graduellement. L'eau libre dans les pores du béton se vaporise lorsque le béton est chauffé au-delà de son point d'ébullition, puis en continuant de chauffer, c'est la microstructure même du béton qui se modifie de façon irréversible (voir entre autres Gajda et McGee, 1997; Nonnet *et coll.*, 1999). Par exemple, entre 200°C et 350°C, presque toute l'eau liée (hydratée) est déliée, puis vaporisée. Les différentes espèces d'hydrates se décomposent suivant une cinétique précise. D'après Schmitt *et coll.* (2000), on peut les identifier par les crêtes de vitesse de perte de masse lors d'un essai de thermogravimétrie ; les résultats d'un tel essai réalisé par Akande (2003b) sur un échantillon de béton réfractaire isolant sont montrés à la figure 2.3. La figure 2.3(b) nous permet d'identifier cinq de ces crêtes. D'après la littérature (voir par exemple Das *et coll.*, 1996), et en utilisant la notation suivante, soit

A pour Al_2O_3 , H pour H_2O , C pour CaO et X pour $C_{12}A_7 + CA + CA_2 + CA_7 + A$,

elles s'expliquent selon les réactions montrées au tableau 2.1.

Tableau 2.1: Réactions chimiques lors d'un essai de thermogravimétrie

fig 2.3(b) (1)	Décomposition d'hydrates métastables	$C_2AH_8 \longrightarrow AH_3 + C_3AH_6$ $CAH_{10} \longrightarrow AH_3 + C_3AH_6$
fig 2.3(b) (2)	Évaporation de l'eau libre	
fig 2.3(b) (3)	Déshydratation de AH_3	$AH_3 \longrightarrow AH + 2H$
fig 2.3(b) (4)	Déshydratation de $C_{12}AH_6$	$C_{12}AH_6 + CH \longrightarrow X + 1.5H$
fig 2.3(b) (5)	Déshydratation de AH	$AH \longrightarrow A + H$

**Figure 2.3:** Essai de thermogravimétrie à 13°C à l'heure

Contrairement aux bétons traditionnels, d'autres réactions prennent place dans les bétons réfractaires chauffés à de hautes températures, outre la déshydratation : ils forment des liens réfractaires. Les résultats de compression à chaud de Akande (2003b) indiquent une remontée de la résistance en compression au-delà de 350°C, ce qui ne peut évidemment pas être la conséquence de la déshydratation. Le taux de vitesse de perte de masse obtenu lors des essais de thermogravimétrie, dont un exemple est donné à la figure 2.3(b), montre qu'il n'y a effectivement plus de réaction impliquant de l'eau dépassé les 350°C. De plus, les essais de dilatométrie libre réalisés par Akande (2003b) montrent que l'échantillon continue sa contraction au-delà de 350°C, alors que la déshydratation est pratiquement complétée. Par conséquent, il est probable que d'autres changements microstructuraux sans perte de masse soient subis par le matériau. En dépit du manque d'analyse microstructurale, ces changements seront attribués au frittage, dans une optique phénoménologique.

Du point de vue mécanique, la déshydratation du béton entraîne la diminution de rigidité et de sa résistance mécanique ainsi qu'un retrait volumique irréversible, tel que montré par les travaux de Buyukozturk et Tseng (1982). De plus, comme le rapportent Khoury *et coll.* (1985b,a), l'expansion thermique du béton ordinaire lors de la première chauffe semble être partiellement - ou même complètement - empêchée par l'application d'une charge. Selon les auteurs, il semble que la pâte de ciment ordinaire chauffée flue énormément et très rapidement ; cette déformation accrue est par ailleurs irréversible. L'expansion thermique sous contrainte du béton réfractaire n'a pu être trouvée dans la littérature. Des essais réalisés par Akande (2003a) permettront d'analyser ce comportement pour le béton réfractaire isolant.

De plus, il est connu que le béton est un matériau qui flue. Par contre, cela se produit sur une longue période de temps aux températures habituelles. Dans le cas de bétons réfractaires à des hautes températures, Buyukozturk et Tseng (1982) et Buyukozturk et Sarwar Shareef (1985) considèrent qu'il doit être inclus dans la simulation. Des essais réalisés par Akande (2003a) sur le béton réfractaire isolant confirment ce fait.

En lui-même, le comportement mécanique du béton ordinaire isotherme est passablement complexe (voir par exemple Feenstra et de Borst, 1996; Caner et Bažant, 2000). D'abord, sa limite élastique en traction est beaucoup plus faible que celle en compression. Lorsque chargé en traction, il montre une courbe d'adoucissement après la limite élastique. Ensuite, en compression uniaxiale, il montre aussi une dégradation au-delà de la limite élastique, en plus de subir une plastification volumétrique ; en effet, pour des chargements en compression au-delà de la limite élastique, il y a d'abord apparition de microfissures, puis coalescence en macrofissures. L'état de contrainte triaxial influence aussi sa limite de rupture. La limite de rupture en cisaillement est donc dépendante de l'état de contrainte hydrostatique.

En résumé, les aspects suivants du comportement thermomécanique du béton réfractaire mis en place dans une cuve P-155 doivent être considérés :

- Distribution non homogène des propriétés au début du préchauffage ;
 - Distribution de rigidité et de résistance mécanique ;
 - Distribution de teneur en eau libre ;
 - Retrait d'hydratation irréversible (décollement des autres matériaux et contraintes résiduelles) ;
 - Fissures internes au début du préchauffage.
 - Distribution de propriétés thermophysiques.
- Modification irréversible de la microstructure lors du chauffage par décomposition d'hydrates, déshydratation et frittage ;
 - Évolution de la rigidité et de la résistance mécanique ;
 - Retrait volumique irréversible ;
 - Perte de masse importante ;
 - Évolution des propriétés thermophysiques.
- Fluage "instantané" irréversible selon la température et l'état de contrainte ;
- Micro et macro-fissuration (endommagement) ;
 - Évolution de la rigidité et de la résistance mécanique ;
 - Déformations irréversibles ;

- Évolution des propriétés thermophysiques.
- Fluage et relaxation.

Devant une telle complexité, il apparaît évident que des hypothèses simplificatrices devront être posées, tout en gardant à l'esprit qu'il faut pouvoir représenter adéquatement les phénomènes physiques importants.

2.2.2 Travaux antérieurs

2.2.2.1 Aspects mécaniques

Tel que l'explique Jirásek (2001), le comportement mécanique des matériaux quasifragiles soumis à de fortes sollicitations se caractérise par la localisation des contraintes et des déformations au sein de zones restreintes (microfissures), puis par le développement graduel de surfaces libres (macrofissures). Au cours des vingt dernières années, la recherche a mené à trois grandes familles de modèles de comportement de ces matériaux, basées sur leur représentation du champ de déplacement, soit :

Discontinue Les fissures sont discrètes ;

- Mécanique de la fissuration linéaire ("Linear Fracture Mechanics").
- Fissures ou zones cohésives ("Cohesive Crack").

Continue par morceaux Les fissures sont distribuées dans un volume représentatif. La loi de comportement est respectée d'une façon forte, *i.e.* en tous points ;

- Fissuration diffuse ("Smearred Crack").
- Pseudo-élastoplasticité.

Continue Les fissures sont distribuées dans un volume représentatif ;

- Fissuration non locale ("Non-local, Gradient-Dependent, Cosserat Continuum"). La loi de comportement est respectée d'une façon faible, *i.e.* globalement.
- Microplans ("Microplane"). La loi de comportement est formulée en termes de vecteurs selon des plans arbitraires, et l'intégration de la contribution de chacun des plans doit donner le tenseur "local".

Outre pour l'analyse d'énormes structures, comme un barrage par exemple, la mécanique de la fissuration linéaire n'est pas appropriée pour les matériaux quasi-fragiles. De plus, l'utilisation d'un champ de déplacement discontinu au sein d'un matériau nécessite l'utilisation d'éléments de contact et d'une loi de comportement d'interface. De façon générale, les endroits d'initiation et le chemin de propagation des fissures ne sont pas connus ; par conséquent, un remaillage doit être fait continuellement, ce qui explique pourquoi les modèles de fissures ou de zones cohésives sont difficiles à mettre en oeuvre dans un code d'éléments finis.

D'un autre côté, afin de s'assurer de la continuité du champ de déplacement, un milieu continu "enrichi" doit être utilisé, c'est-à-dire que des degrés de liberté supplémentaires doivent être inclus

dans la simulation. De nombreux travaux ont déjà été publiés sur l'application de ce concept à la modélisation du béton (notons entre autres les travaux de de Borst et Mühlhaus, 1992; de Borst et Pamin, 1996; de Borst *et coll.*, 1999). Cependant, tel que montré par Jirásek (2001), des formulations spéciales doivent être utilisées afin d'éviter des oscillations dans la solution des contraintes et des déformations, et le maillage doit être suffisamment raffiné pour saisir le développement de l'endommagement. Les développements de ce type de modèles sont encore loin d'être stabilisés.

Les modèles micropans, tel que le M4 de Bažant *et coll.* (Bažant *et coll.*, 2000c; Caner et Bažant, 2000; Bažant *et coll.*, 2000b,a), ceux de Brocca (1999), ou celui de Kuhl *et coll.* (2000), présentent des caractéristiques intéressantes. Entre autres, la loi de comportement est formulée en terme de vecteurs, ce qui évite l'expression des enveloppes d'écoulement et de rupture en termes des invariants des tenseurs ; cela garantit l'objectivité de la loi de comportement, en plus de faciliter l'implémentation de l'adoucissement avec la déformation. De plus, la combinaison de la réponse de plusieurs plans permet de représenter adéquatement le comportement du matériau, même si la loi de comportement sur un plan est linéaire. Par contre, le prix à payer est l'augmentation du temps de calcul des contributions élémentaires et de stockage d'au moins un ordre de grandeur.

L'approche par fissuration diffuse consiste à répartir l'effet de la fissuration sur une bande de matière de taille h . La microfissuration en compression est toutefois généralement modélisée par de la pseudo-élastoplasticité. Notons l'article de de Borst (1987) sur la combinaison de la fissuration diffuse avec d'autres non-linéarités. Cette méthode a toutefois tendance à rendre la solution dépendante du maillage utilisé, même si une normalisation par l'énergie de fissuration est mise en place ; une formulation spéciale d'élément peut cependant résoudre ce problème (Jirásek, 2001). Par contre, en chargement biaxial, soit lorsque la pseudo-élastoplasticité et la fissuration diffuse sont actives en même temps, des problèmes de convergence numérique apparaissent. L'approche en pseudo-élastoplasticité (voir par exemple Feenstra et de Borst, 1995, 1996; Etse et Willam, 1996; Kang et Willam, 1999) permet d'éviter ces difficultés, en plus de rendre les algorithmes beaucoup plus robustes.

2.2.2.2 Aspects thermomécaniques

Lorsque les effets thermomécaniques s'ajoutent à un modèle mécanique essentiellement isotherme, les choses sont loin d'être simples.

Les travaux de Buyukozturk et Tseng (1982) et Buyukozturk et Sarwar Shareef (1985) sur la modélisation des bétons réfractaires utilisent entre autres une loi de comportement hypoélastique orthotrope modifiée ; selon les auteurs, la précision de la loi est limitée dans le cas de chargements non proportionnels. Les déformations permanentes et l'effet de l'endommagement sont modélisés par une logique qui détermine la courbe à suivre selon le chargement ou le déchargement. Le fluage est modélisé par un élément de Maxwell. Le "fluage instantané" de l'expansion thermique sous contrainte n'est pas pris en compte. Par contre, le retrait volumétrique est pris en compte par une expansion thermique modifiée. Les propriétés du béton sont fournies comme des fonctions explicites de la température. L'implémentation numérique de tous ces phénomènes semble complexe, et la cohérence thermodynamique du modèle n'est pas démontrée.

Afin de prendre en compte le “fluage instantané” de l’expansion thermique sous contrainte, les travaux de Thelandersson (1987) tentent d’exprimer l’expansion thermique (réversible) comme dépendant à la fois de la température et de l’état de contrainte. Cependant, cette approche ne reproduit que partiellement les résultats expérimentaux, et néglige le caractère irréversible de ce phénomène.

Ensuite, les travaux de de Borst et Peeters (1989) tentent d’ajouter le “fluage instantané” de l’expansion thermique sous contrainte et l’expansion thermique classique à un modèle de fissuration diffuse. Ils reprennent à cette fin la formulation de Thelandersson (1987). Tel qu’ils le mentionnent, l’approche de fissuration diffuse classique ne peut fonctionner, puisqu’elle ne peut être combinée à d’autres non-linéarités. Ils proposent donc une nouvelle formulation de fissuration diffuse négligeant la déformation plastique en compression, donc valide uniquement à des sollicitations modérées. Le retrait volumétrique irréversible est par ailleurs négligé. Les propriétés du béton sont fournies comme des fonctions explicites de la température. Leur modèle semble reproduire adéquatement les résultats expérimentaux de Thelandersson (1987).

Dans le cadre de l’analyse de l’incendie du 18 novembre 1996 dans le tunnel sous la Manche, Ulm *et coll.* (1999b,a) présentent une formulation radicalement différente. En effet, ils considèrent le comportement du béton ordinaire soumis à de hautes températures comme étant le phénomène inverse de l’hydratation du béton jeune, qu’ils avaient traité comme un problème thermo-chimio-mécanique (Ulm et Coussy, 1995, 1996); en hydratation, le développement de la résistance et de la rigidité avec le degré d’hydratation est traité comme un écrouissage chimioplastique. Ainsi, la déshydratation devient un *adoucissement* chimioplastique. Leur modèle a été développé dans le cadre de la thermodynamique des milieux poreux réactifs fermés tel que posé par Coussy (1995). Ainsi, dans l’analyse de l’incendie du tunnel, le béton se déshydrate avec l’augmentation de la température. La formulation permet d’inclure l’expansion thermique réversible, les retraits irréversibles ainsi que l’évolution de la rigidité et de la résistance mécanique. Par contre, ni l’endommagement purement mécanique ni le fluage “instantané” de l’expansion thermique sous contrainte n’ont été inclus dans leur modèle.

2.2.3 Modèle de comportement

2.2.3.1 Aspects thermodynamiques

Ainsi, aucune formulation existante ne semble pouvoir reproduire tous les phénomènes rapportés dans la littérature. Nous proposons un modèle dérivant d’un potentiel thermodynamique défini par une énergie libre. Certaines hypothèses de base sont posées.

H 1 Le milieu est isotrope ;

H 2 Les déformations sont petites ;

H 3 Le tenseur de Green-Lagrange (\mathbf{E}) est utilisé comme mesure de déformation ;

H 4 Les déformations sont additives ;

- H 5** Les réactions d'hydratation sont représentées par une réaction équivalente ;
- H 6** Les réactions de frittage sont représentées par une réaction équivalente et instantanée ;
- H 7** Le frittage est une réaction irréversible. Selon les données fournies par le manufacturier, la résistance en compression est maximale autour de 750°C, puis redescend à plus haute température ; cette hypothèse limite donc la plage à un maximum d'environ 800°C ;
- H 8** Les réactions d'hydratation n'entraînent pas de retrait d'auto-dessiccation, le béton étant fortement sursaturé en eau ;
- H 9** Les réactions de déshydratation sont représentées par une réaction équivalente ;
- H 10** Il y a une teneur en eau libre massique, évaporable et chimiquement inerte en tout point de la matière ;
- H 11** Le transport de l'eau libre sous un gradient thermique et/ou un gradient de concentration est négligeable, l'eau se vaporise localement ;
- H 12** La structure poreuse est telle que l'eau déliée par la déshydratation et l'eau libre vaporisée s'évacuent sans causer de pression dans les pores ;
- H 13** La chaleur latente de déshydratation comprend la chaleur latente de vaporisation de l'eau déliée ;
- H 14** La déshydratation, la vaporisation de l'eau libre initiale et le frittage sont des phénomènes mutuellement exclusifs ;
- H 15** L'aspect mécanique n'influence pas les réactions de vaporisation de l'eau libre, d'hydratation, de déshydratation et de frittage ;
- H 16** Le flux de chaleur suit la loi de Fourier, soit $\tilde{q} = -\mathbf{K} \text{grad}[T]$;
- H 17** L'endommagement et la localisation de la fissuration sont négligés ;
- H 18** Les déformations permanentes mécaniques sont traitées par l'élastoplasticité classique.

Les développements suivants se basent sur les principes de thermodynamique des processus irréversibles et de la mécanique des milieux poreux continus, tel que posé par Coussy (1995). Ainsi, en se basant sur les explications de Khoury *et coll.* (1985a) sur le fluage "instantané", sur les travaux de Ulm et Coussy (1995, 1996) et de Ulm *et coll.* (1999b) à propos de la déshydratation du béton et sur ceux de Sercombe *et coll.* (2000a,b) sur le fluage du béton projeté, il est proposé de définir la déformation selon l'équation (2.1).

$$\begin{aligned}
 \mathbf{E} = & \overbrace{\mathbf{E}^e}^{\text{élastique}} + \overbrace{\mathbf{E}^P}^{\text{pseudo-plastique}} + \overbrace{\mathbf{E}^{th}}^{\text{thermique}} + \overbrace{\mathbf{E}^{ch}}^{\text{chimique}} + \overbrace{\mathbf{E}^{dess}}^{\text{séchage}} + \\
 & \overbrace{\mathbf{E}^{frit}}^{\text{frittage}} + \overbrace{\mathbf{E}^v}^{\text{fluage primaire irréversible}} + \overbrace{\mathbf{E}^a}^{\text{fluage primaire réversible}}
 \end{aligned} \tag{2.1}$$

Une déformation réduite \mathbf{E}^* est définie suivant l'équation (2.2).

$$\mathbf{E}^* = \mathbf{E} - \mathbf{E}^P - \mathbf{E}^v - \mathbf{E}^a \tag{2.2}$$

Deux hypothèses supplémentaires sont faites quant à l'écrouissage.

H 19 Il existe une énergie liée à l'écrouissage qui n'est ni dissipée en chaleur ni récupérable lors d'un déchargement ;

H 20 L'énergie d'écrouissage n'est dépendante que du degré d'hydratation ξ , du degré de frittage ϕ et de l'écrouissage mécanique $\tilde{\chi}$;

On peut donc écrire une énergie libre d'Helmholtz Ψ selon l'équation (2.3).

$$\begin{aligned}
 \Psi(T, \mathbf{E}, \mathbf{E}^P, \mathbf{E}^v, \mathbf{E}^a, \xi, w, \phi, \tilde{\chi}) &= \overbrace{\Psi^*(T, \mathbf{E} - \mathbf{E}^P - \mathbf{E}^v - \mathbf{E}^a, \xi, w, \phi)}^{\text{énergie libre}} + \overbrace{U(\xi, \phi, \tilde{\chi})}^{\text{énergie bloquée}} \\
 &= \Psi^*(T, \mathbf{E}^*, \xi, w, \phi) + U(\xi, \phi, \tilde{\chi})
 \end{aligned} \tag{2.3}$$

Il faut noter qu'une transformée de Legendre-Fenchel permet d'exprimer ce potentiel Ψ en fonction des forces thermodynamiques conjuguées ; ce potentiel complémentaire se dénote maintenant ψ et permet d'associer les contraintes \mathbf{S} aux déformations plastiques \mathbf{E}^P et aux déformations visqueuses \mathbf{E}^v et \mathbf{E}^a .

Il est important de comprendre que des lois d'évolution complémentaires devront être fournies pour les variables internes ; de plus, la loi de comportement sera développée dans le cadre des couplages linéaires entre les phénomènes, ce qui se traduit par les symétries de Maxwell et les relations de réciprocité d'Onsager-Casimir (voir Haase, 1990).

Les variables considérées sont résumées au tableau 2.2.

Tableau 2.2: Variables considérées dans la loi de comportement

VARIABLE	SYMBOLE	NATURE	FORCE THERMODYNAMIQUE CONJUGUÉE
Déformation totale	\mathbf{E}	Observable	Contraintes de PKII, \mathbf{S}
Déformation plastique	\mathbf{E}^p	Interne	Contraintes de PKII, \mathbf{S}
Déformation visqueuse permanente	\mathbf{E}^v	Interne	Contraintes de PKII, \mathbf{S}
Déformation visqueuse réversible	\mathbf{E}^a	Interne	Contraintes de PKII, \mathbf{S}
Écrouissage	$\tilde{\chi}$	Interne	Force d'écrouissage, $\tilde{\zeta}$
Température	T	Observable	Entropie, s
Degré d'hydratation	ξ	Interne	Affinité chimique, A_ξ
Degré de frittage	ϕ	Interne	Affinité chimique, A_ϕ
Teneur en eau libre inerte	w	Interne	Affinité chimique, A_w

2.2.3.2 Degré d'hydratation

L'affinité chimique A_ξ est la force thermodynamique poussant les réactions d'hydratation et de déshydratation ; sa forme incrémentale est montrée à l'équation (2.4).

$$dA_\xi = \underbrace{-\mathbf{B}}_{\frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial \xi \partial \mathbf{E}}} : (d\mathbf{E}^*) - \underbrace{\frac{L_\xi}{T_0}}_{\frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial \xi \partial T}} dT - \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \xi^2} d\xi - \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \xi \partial \phi} d\phi - \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial \xi \partial w} dw - \frac{\partial^2 U}{\partial \xi \partial \tilde{\chi}} d\tilde{\chi} \quad (2.4)$$

Par l'hypothèse **H 15**, le terme $\frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial \xi \partial \mathbf{E}} : (d\mathbf{E}^*)$, ce qui est valable si et seulement si les déformations sont petites (**H 2**) ; aussi, par les hypothèses **H 15** et **H 17**, $\frac{\partial^2 U}{\partial \xi \partial \tilde{\chi}} d\tilde{\chi}$. De même, par l'hypothèse

H 14 les termes $\frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial \xi \partial w} dw$ et $\frac{\partial^2 \Psi}{\partial \xi \partial \phi} d\phi$.

En introduisant ces hypothèses dans l'équation (2.4), on obtient l'équation (2.5).

$$dA_\xi = -\frac{\partial^2 \Psi}{\partial \xi^2} d\xi + \frac{L_\xi}{T_0} dT \quad (2.5)$$

Il faut maintenant poser une équation d'évolution complémentaire pour relier le degré d'hydratation et sa force thermodynamique, soit exprimer ξ comme dépendant de A_ξ . Une évolution linéaire est postulée, tel que montré à l'équation (2.6).

$$\eta_\xi \xi = A_\xi \exp \left[-\frac{E_{a,\xi}}{RT} \right] \quad (2.6)$$

Il faut maintenant pouvoir faire évoluer le degré d'hydratation pour représenter à la fois l'hydratation et la déshydratation du béton. Il faudra donc poser deux régimes cinétiques.

Selon Ulm et Coussy (1996), l'effet de la température sur l'affinité d'hydratation peut être négligé en première approximation ; l'effet de l'eau libre sera aussi négligé, le mélange de béton réfractaire étant visiblement sursaturé.

H 21 L'effet de la température sur l'affinité d'hydratation est négligeable ;

H 22 L'effet de la teneur en eau libre sur l'hydratation est négligeable, le béton étant fortement sursaturé en eau ;

En introduisant ces deux hypothèses dans la cinétique de réaction d'hydratation (équation (2.6)), on obtient l'équation (2.7).

$$\xi = \bar{A}_\xi^{\text{Hyd}} \exp \left[-\frac{E_{a,\xi,\text{Hyd}}}{RT} \right] \quad (2.7)$$

Une forme légèrement modifiée de l'équation présentée par Hellmich *et coll.* (1999) et montrée à l'équation (2.8) sera retenue pour l'affinité chimique en hydratation.

$$\bar{A}_\xi^{\text{Hyd}} = a_A \frac{1 - \exp[-b_A(\xi - \xi_0)]}{1 + c_A \xi^{d_A}} \quad (2.8)$$

Les paramètres a_A , b_A , c_A , d_A et ξ_0 pourront être identifiés à l'aide de la simulation d'un essai de calorimétrie quasi-adiabatique.

En se basant sur les estimations de Ulm *et coll.* (1999b), l'échelle de temps de microdiffusion de l'eau déliée est de l'ordre de la seconde à 100°C, du dixième de seconde à 300°C et de la microseconde à 700°C ; dans un cas où le taux de chauffe est suffisamment lent – où son échelle de temps est beaucoup plus grande que celle de la microdiffusion – on peut considérer que la déshydratation est essentiellement *instantanée*. Une hypothèse supplémentaire est donc faite.

H 23 La déshydratation est un phénomène instantané ;

De cette manière, la cinétique de déshydratation se réduit à l'équation (2.9), où T^{\max} est la température maximale atteinte localement.

$$\xi = \xi(T^{\max}) \quad (2.9)$$

Cette fonction pourra être identifiée à partir des essais de compression uniaxiale à haute température. La transition entre les deux régimes se fera lorsqu'une température critique – à identifier – aura été atteinte.

2.2.3.3 Évaporation de l'eau libre

L'affinité chimique doit représenter l'évaporation de l'eau libre et sa vaporisation lorsque la température du squelette solide atteint son point d'ébullition. Il est implicite ici que la température de l'eau libre est la même que celle du squelette. Après dérivation, cette force thermodynamique s'exprime selon l'équation (2.10).

$$dA_w = \underbrace{-C}_{\frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial w \partial E}} : (dE^*) - \underbrace{\frac{L_w}{T_0}}_{\frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial w \partial T}} dT - \frac{\partial^2 \Psi}{\partial w \partial \xi} d\xi - \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial w^2} dw - \frac{\partial^2 \Psi}{\partial w \partial \phi} d\phi \quad (2.10)$$

L'hypothèse **H 15** implique que $C : (dE^*) \rightarrow 0$, alors que l'hypothèse **H 14** entraîne $\frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial w \partial \xi} d\xi \rightarrow 0$ et $\frac{\partial^2 \Psi}{\partial w \partial \phi} d\phi \rightarrow 0$. En effectuant ces simplifications dans (2.10), on obtient l'équation (2.11).

$$dA_w = \frac{L_w}{T_0} dT - \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial w^2} dw \quad (2.11)$$

On peut maintenant poser une cinétique linéaire en w selon l'équation en (2.12).

$$\dot{w} = \frac{A_w}{\eta_w} \exp \left[-\frac{E_{a,w}}{RT} \right] \quad (2.12)$$

En première approximation, la relation (2.13) est proposée pour l'affinité chimique.

$$\frac{A_w}{\eta_w} = -w\bar{A}_w(T) \quad (2.13)$$

La forme particulière de l'équation (2.14) est posée.

$$\bar{A}_w(T) = a_w + b_w(T - T_0)^3 \quad (2.14)$$

La cinétique devient donc telle que montrée à l'équation (2.15).

$$\dot{w} = -w \left(a_w + b_w(T - T_0)^3 \right) \exp \left[-\frac{E_{a,w}}{RT} \right] \quad (2.15)$$

En réalité, le taux de vaporisation de l'eau libre ne devrait pas dépendre de sa teneur si on pose l'hypothèse que le taux d'humidité dans les pores est constant. Par contre, d'un point de vue numérique, il est plus facile de considérer une cinétique telle qu'en (2.15) qui évite un brusque changement de régime lorsque w tend vers zéro.

Les constantes a_w et b_w ainsi que l'énergie d'activation $E_{a,w}$ sont à identifier.

2.2.3.4 Frittage

L'affinité chimique doit représenter l'évolution du frittage avec la température ; la force thermodynamique A_ϕ s'exprime selon l'équation (2.16).

$$dA_\phi = \underbrace{-\mathbf{D}}_{\frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial \phi \partial E}} : (d\mathbf{E}^*) - \underbrace{\frac{L_\phi}{T_0}}_{\frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial \phi \partial T}} dT - \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \phi \partial \xi} d\xi - \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \phi^2} d\phi - \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial \phi \partial w} dw \quad (2.16)$$

L'hypothèse **H 15** implique que $\mathbf{D} : (d\mathbf{E}^*) \rightarrow 0$, alors que l'hypothèse **H 14** entraîne $\frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial \phi \partial \xi} d\xi \rightarrow 0$ et $\frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial \phi \partial w} dw \rightarrow 0$. En effectuant ces simplifications dans (2.16), on obtient l'équation (2.17).

$$dA_\phi = \frac{L_\phi}{T_0} dT - \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \phi^2} d\phi \quad (2.17)$$

La réaction de frittage ayant été posée instantanée (par l'hypothèse **H 6**), la cinétique de frittage se réduit à l'équation (2.18), où T^{\max} est la température maximale atteinte localement.

$$\phi = \phi(T^{\max}) \tag{2.18}$$

Cette fonction pourra être identifiée à partir des essais de compression uniaxiale à haute température. De manière phénoménologique, la différence entre la résistance mécanique expérimentale et celle prédite par la déshydratation du matériau sera attribuée au frittage.

2.2.3.5 Bilan d'énergie

Après avoir introduit la dérivée du potentiel montré à l'équation (2.3) et la loi de Fourier (**H 16**) dans le bilan d'énergie, on obtient l'équation en (2.19).

$$\underbrace{-T_0 \frac{\rho C_p}{\partial T^2} \dot{T}}_{\text{source volumique}} - \underbrace{T_0 \frac{L_\xi}{\partial T \partial \xi} \dot{\xi}} - \underbrace{\rho T_0 \frac{L_w}{\partial T \partial w} \dot{w}} - \underbrace{T_0 \frac{L_\phi}{\partial T \partial \phi} \dot{\phi}} - \underbrace{\frac{L_{E^*}}{\partial T \partial E} (\dot{E}^*)}_{\text{source volumique}} = -\text{div} [-\mathbf{K} \text{grad}[T]] + \mathbf{S} : \dot{\mathbf{E}}^p + \mathbf{S} : \dot{\mathbf{E}}^v + \mathbf{S} : \dot{\mathbf{E}}^a + \tilde{\zeta} \tilde{\chi} + A_\xi \dot{\xi} + A_w \dot{w} + A_\phi \dot{\phi} \tag{2.19}$$

Des hypothèses supplémentaires sont faites quant à l'importance relative de chacun des termes :

- H 24 Les taux de déformation sont faibles, *i.e.* $\mathbf{S} : \dot{\mathbf{E}}^p \rightarrow 0$, $\mathbf{S} : \dot{\mathbf{E}}^v \rightarrow 0$, $\mathbf{S} : \dot{\mathbf{E}}^a \rightarrow 0$, $\frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial T \partial E} (\dot{E}^*) \rightarrow 0$;
- H 25 Les dissipations causées par l'hydratation, la déshydratation, et l'évaporation de l'eau sont négligeables par rapport à leur chaleur latente L_ξ et L_w , *i.e.* $A_\xi \dot{\xi} \rightarrow 0$, $A_w \dot{w} \rightarrow 0$;
- H 26 La dissipation due au frittage est négligeable, *i.e.* $A_\phi \dot{\phi} \rightarrow 0$;
- H 27 La chaleur latente de frittage est négligeable, *i.e.* $T_0 \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial T \partial \phi} \dot{\phi} \rightarrow 0$;
- H 28 La dissipation due à l'érouissage est faible, *i.e.* $\tilde{\zeta} \tilde{\chi} \rightarrow 0$;
- H 29 Il n'y a pas de source de chaleur autre que celles déjà incluses, *i.e.* $r \rightarrow 0$;

En posant les hypothèses **H 24** à **H 29** dans l'équation (2.19), le bilan d'entropie s'exprime maintenant selon l'équation (2.20).

$$\underbrace{\rho C_p \dot{T}}_{\text{Accumulation}} - \underbrace{L_\xi \dot{\xi}}_{\text{Hydratation/déshydratation}} - \underbrace{\rho L_w \dot{w}}_{\text{Vaporisation de l'eau libre}} + \underbrace{\text{div}[-\mathbf{K} \text{grad}[T]]}_{\text{Diffusion}} = 0 \quad (2.20)$$

Suivant Ulm *et coll.* (1999b), la capacité calorifique C_p du béton sec peut être considérée comme pratiquement constante. En effet, bien que sa capacité apparente change avec la température, il s'agirait plutôt d'une conséquence de la chaleur absorbée par la réaction de déshydratation et de l'évaporation de l'eau libre. Aussi, les chaleurs latentes L_w et L_ξ peuvent être considérées comme constantes.

Cependant, l'effet de la teneur en eau libre n'est pas négligeable sur la densité apparente et la capacité calorifique du béton humide. Par conséquent, la forme montrée à l'équation (2.21) est proposée.

$$\rho C_p = \underbrace{\rho C_{p,sk}}_{\text{béton sec}} + \underbrace{\rho w C_{p,w}}_{\text{eau libre}} \quad (2.21)$$

Par contre, le cas de la conductivité thermique s'avère plus complexe. En cours d'hydratation, lorsque le béton est saturé d'eau libre, sa conductivité s'approche de celle de l'eau. Une fois l'eau libre évaporée, sa conductivité est celle du squelette hydraté. De plus, les microfissures apparaissant au coeur du matériau ne peuvent être négligées, ce qui induit une anisotropie locale. Ainsi, *a priori*, il faut penser le tenseur \mathbf{K} comme étant $\mathbf{K}(T, w, \mathbf{E}^P, \xi, \phi)$.

2.2.3.6 Contraintes

En posant les hypothèses **H 1** à **H 3** ainsi que **H 12**, la forme incrémentale de l'équation des contraintes s'exprime par l'équation (2.22).

$$d\mathbf{S} = \frac{\mathcal{H}}{\partial \mathbf{E}^2} : (d\mathbf{E} - d\mathbf{E}^P - d\mathbf{E}^v - d\mathbf{E}^a) + \frac{-\mathbf{A}}{\partial \mathbf{E} \partial T} dT + \frac{-\mathbf{B}}{\partial \mathbf{E} \partial \xi} d\xi + \frac{-\mathbf{C}}{\partial \mathbf{E} \partial w} dw + \frac{-\mathbf{D}}{\partial \mathbf{E} \partial \phi} d\phi \quad (2.22)$$

En isolant les déformations \mathbf{E} dans (2.22), on obtient l'équation (2.23).

$$d\mathbf{E} = \mathcal{H}^{-1} : d\mathbf{S} + \underbrace{\mathcal{H}^{-1} \mathbf{A}}_{\mathbf{a}} dT + \underbrace{\mathcal{H}^{-1} \mathbf{B}}_{\mathbf{b}} d\xi + \underbrace{\mathcal{H}^{-1} \mathbf{C}}_{\mathbf{c}} dw + \underbrace{\mathcal{H}^{-1} \mathbf{D}}_{\mathbf{d}} d\phi + d\mathbf{E}^P + d\mathbf{E}^v + d\mathbf{E}^a \quad (2.23)$$

L'équation (2.23) peut se réécrire selon (2.24).

$$\begin{aligned}
 d\mathbf{E} = & \underbrace{\mathcal{H}^{-1} : d\mathbf{S}}_{\text{déformation élastique, } d\mathbf{E}^e} + \underbrace{\mathbf{a} dT}_{\text{expansion thermique, } d\mathbf{E}^{th}} + \underbrace{\mathbf{b} d\xi}_{\text{expansion de déshydratation, } d\mathbf{E}^{ch}} + \underbrace{\mathbf{c} dw}_{\text{expansion de séchage, } d\mathbf{E}^{\text{dess}}} \\
 & + \underbrace{\mathbf{d} d\phi}_{\text{expansion de frittage, } d\mathbf{E}^{\text{frit}}} + \underbrace{d\mathbf{E}^P}_{\text{déformation plastique}} + \underbrace{d\mathbf{E}^v}_{\text{déformation visqueuse permanente}} + \underbrace{d\mathbf{E}^a}_{\text{déformation visqueuse réversible}}
 \end{aligned} \tag{2.24}$$

On remarque que l'expansion thermique, l'expansion de déshydratation, l'expansion de séchage (dessiccation) et l'expansion de frittage sont représentées par le produit d'un tenseur de deuxième ordre et d'un scalaire. D'un point de vue physique, cela ne peut être vrai que si ces phénomènes sont *sphériques*, c'est-à-dire s'ils sont reliés au changement de volume de matériau.

L'expansion thermique se distingue des autres retraits/expansions par son caractère réversible ; elle doit aussi être séparée de ces autres déformations lors de l'analyse d'un essai de dilatométrie. Ainsi, la forme montrée à l'équation (2.25) est proposée.

$$\mathbf{a} = \alpha(\xi)\mathbf{1} \tag{2.25}$$

Le tenseur \mathbf{b} représente le retrait d'hydratation et de déshydratation du béton ; étant donné le changement de régime cinétique, les formes montrées à l'équation (2.26) sont proposées.

$$\mathbf{b} = \begin{cases} \beta_h(\xi)\mathbf{1} & \text{en hydratation} \\ \beta_d(\xi - \xi_{d,0})\mathbf{1} & \text{en déshydratation} \end{cases} \tag{2.26}$$

Notez que $\xi_{d,0}$ est l'état d'hydratation au moment où la déshydratation s'amorce.

Le tenseur \mathbf{c} représente quant à lui le retrait de dessiccation du béton ; la forme montrée à l'équation (2.27) est proposée.

$$\mathbf{c} = -\gamma(w)\mathbf{1} \tag{2.27}$$

Le tenseur \mathbf{d} représente de son côté le retrait de frittage du béton ; la forme montrée à l'équation (2.28) est proposée.

$$\mathbf{d} = -\varphi(\phi)\mathbf{1} \tag{2.28}$$

Les fonctions $\alpha(\xi)$, $\beta_h(\xi)$, $\beta_d(\xi - \xi_{d,0})$, $\gamma(w)$ et $\varphi(\phi)$ sont à identifier à l'aide d'essais de dilatométrie libre.

Le tenseur \mathcal{H} représente le tenseur d'élasticité de quatrième ordre classique ; dans le cas isotrope (hypothèse **H 1**), et en posant qu'il ne dépend que de l'état d'hydratation, il se réduit à l'expression en (2.29).

$$\mathcal{H}(\xi, \phi) = \kappa(\xi, \phi) \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} + 2G(\xi, \phi) \left(I - \frac{1}{3} \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} \right) \quad (2.29)$$

Notez que κ est le module de compressibilité défini par (2.30) et que G est le module de cisaillement défini par (2.31).

$$\kappa = \frac{E}{3(1-2\nu)} \quad (2.30)$$

$$G = \frac{E}{2(1+\nu)} \quad (2.31)$$

Les quantités E et ν sont respectivement le module de Young et le coefficient de Poisson ; les fonctions $E(\xi, \phi)$ et $\nu(\xi, \phi)$ sont donc à déterminer. D'après Ulm *et coll.* (1999b), la rigidité du béton est directement proportionnelle au volume d'hydrates au-delà d'un certain seuil de percolation ; une relation linéaire avec le degré de frittage est aussi postulée. On peut donc poser les formes montrées en (2.32) et (2.33).

$$E(\xi, \phi) = E_\xi(\xi) + E_\phi(\phi) \quad (2.32)$$

$$\nu(\xi, \phi) = \nu_0 \quad (2.33)$$

Les fonction $E_\xi(\xi)$ et $E_\phi(\phi)$ et le coefficient de Poisson constant ν_0 sont à identifier.

2.2.3.7 Fluage primaire

Les déformations visqueuses \mathbf{E}^a et \mathbf{E}^v sont poussées par la même force thermodynamique \mathbf{S} – les contraintes de Piola-Kirchoff de seconde espèce. Ces deux déformations visqueuses sont donc couplées ; leur évolution est donnée par deux équations différentielles ordinaires en temps. Il existe une infinité de manières de coupler ces déformations. La manière la plus populaire est d'utiliser une analogie avec un modèle rhéologique, construit en combinant des ressorts et des pots visqueux.

Cependant, ces modèles sont uniaxiaux, ce qui pose un problème dans le calcul des déformations transverses. Par conséquent, un modèle de type Burger généralisé *tensoriel*, tiré de Fafard *et coll.* (2001) et détaillé à l'annexe B.2, est adopté. Le système d'équations résultant est donné à l'équation (2.34).

$$\begin{aligned}\mathcal{G}^{-1,a} : \dot{\mathbf{E}}^a + \mathcal{H}^a : \mathbf{E}^a &= \mathbf{S} \\ \mathcal{G}^{-1,v} : \dot{\mathbf{E}}^v &= \mathbf{S}\end{aligned}\tag{2.34}$$

Notez que \mathcal{G}^a , \mathcal{H}^a et \mathcal{G}^v sont des tenseurs de quatrième ordre définis positifs. La figure 2.4 en illustre schématiquement l'équivalent rhéologique.

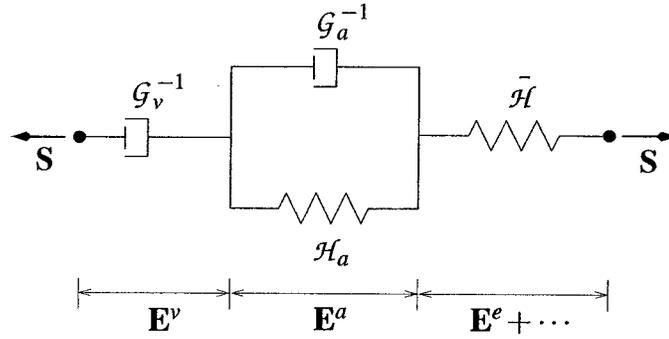


Figure 2.4: Représentation rhéologique du modèle de fluage de Burger généralisé

On pose l'hypothèse en **H 30**.

H 30 Les tenseurs $\mathcal{G}^{a,-1}$, \mathcal{H}^a et $\mathcal{G}^{v,-1}$ ont la même forme que le tenseur d'élasticité \mathcal{H} ;

Les comportements sphérique et déviateur peuvent ainsi être dissociés, tel que le montre l'équation (2.35).

$$\begin{aligned}\mathcal{G}(\xi, \phi, T)^{a,-1} &= \kappa_{va}(\xi, \phi, T) \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} + 2G_{va}(\xi, \phi, T) \left(I - \frac{1}{3} \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} \right) \\ \mathcal{H}(\xi, \phi, T)^a &= \kappa_a(\xi, \phi, T) \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} + 2G_a(\xi, \phi, T) \left(I - \frac{1}{3} \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} \right) \\ \mathcal{G}(\xi, \phi, T)^{v,-1} &= \kappa_v(\xi, \phi, T) \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} + 2G_v(\xi, \phi, T) \left(I - \frac{1}{3} \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} \right)\end{aligned}\tag{2.35}$$

Les modules de "compressibilité visqueuse" κ_v et κ_a et de "cisaillement visqueux" G_v et G_a sont définis respectivement par les équations (2.36) et (2.37).

$$\kappa_{va} = \frac{E_{va}}{3(1-2\nu_{va})} \quad ; \quad \kappa_a = \frac{E_a}{3(1-2\nu_a)} \quad ; \quad \kappa_v = \frac{E_v}{3(1-2\nu_v)} \quad (2.36)$$

$$G_{va} = \frac{E_{va}}{2(1+\nu_{va})} \quad ; \quad G_a = \frac{E_a}{2(1+\nu_a)} \quad ; \quad G_v = \frac{E_v}{2(1+\nu_v)} \quad (2.37)$$

Les coefficients E_{va} , E_v et E_a – les modules de Young visqueux – et ν_{va} , ν_v et ν_a – les coefficients de Poisson visqueux – sont des paramètres à identifier par des essais de fluage ou de relaxation. *A priori*, ils peuvent varier selon le degré d'hydratation, le degré de frittage et la température.

L'intégration numérique de ces déformations temporelles sera traitée au chapitre 4 et à l'annexe B.2.

2.2.3.8 Écrouissage

La force thermodynamique d'écrouissage ne dépend que de l'énergie bloquée U , tel que montré à l'équation (2.38).

$$d\tilde{\zeta} = - \underbrace{\frac{\partial \tilde{\zeta}}{\partial \tilde{\chi}}}_{\frac{\partial^2 U}{\partial \tilde{\chi}^2}} d\tilde{\chi} - \underbrace{\frac{\partial \tilde{\zeta}}{\partial \xi}}_{\frac{\partial^2 U}{\partial \tilde{\chi} \partial \xi}} d\xi - \underbrace{\frac{\partial \tilde{\zeta}}{\partial \phi}}_{\frac{\partial^2 U}{\partial \tilde{\chi} \partial \phi}} d\phi \quad (2.38)$$

On obtient donc l'équation (2.39).

$$d\tilde{\zeta} = \underbrace{\frac{\partial \tilde{\zeta}}{\partial \tilde{\chi}}}_{\text{écrouissage plastique}} d\tilde{\chi} + \underbrace{\frac{\partial \tilde{\zeta}}{\partial \xi}}_{\text{écrouissage chimioplastique d'hydratation}} d\xi + \underbrace{\frac{\partial \tilde{\zeta}}{\partial \phi}}_{\text{écrouissage chimioplastique de frittage}} d\phi \quad (2.39)$$

Par l'hypothèse **H 15**, l'aspect mécanique n'influence pas les réactions chimiques, ce qui nous permet de considérer un couplage unidirectionnel ; dans ce cas, le matériau est considéré comme "chimiquement inerte", tel qu'expliqué par Ulm et Coussy (1996). Ainsi, les variables sont évaluées au degré d'hydratation et de frittage courant et toutes les contributions en $d\xi$ et $d\phi$ sont nulles. De cette manière, les changements d'hydratation et de frittage au cours du pas n'interviennent pas dans l'évolution de l'écrouissage mécanique, et les algorithmes classiques d'intégration de la plasticité peuvent donc être utilisés.

Notez que l'évolution de $\tilde{\chi}$, la variable d'écrouissage mécanique, sera traitée à la section 2.2.3.9.

2.2.3.9 Élastoplasticité

Il faut maintenant adjoindre une loi d'évolution des déformations plastiques au modèle de comportement. Rappelons les postulats de l'élastoplasticité classique, à savoir l'existence d'une surface de plasticité f , d'un potentiel d'écoulement g et d'un potentiel d'écrouissage h . La loi d'écoulement s'écrit selon les équations (2.40) et (2.41) (voir A.2).

$$d\mathbf{E}^P = d\lambda \frac{\partial g}{\partial \mathbf{S}} \quad (2.40)$$

$$d\tilde{\chi} = d\lambda \frac{\partial h}{\partial \tilde{\zeta}} \quad (2.41)$$

Dans le cas le plus simple, $f = g = h$; par contre, pour les matériaux granulaires, le plus souvent $f \neq g = h$ afin de bien représenter la dilatance. Il faut donc maintenant choisir les surfaces f et g ainsi que la forme fonctionnelle de la force d'écrouissage $\tilde{\zeta}(\xi, \phi, \tilde{\chi})$. Cette force d'écrouissage doit pouvoir rendre compte de la diminution de la résistance avec la déshydratation ainsi que de l'écrouissage, puis de l'adoucissement purement mécanique observé dans le béton. Ainsi, f et g dépendent directement de $\tilde{\zeta}(\xi, \phi, \tilde{\chi})$.

Un modèle de béton adapté par D'Amours (2004) pour les matériaux granulaires ductiles, a été choisi. Il s'agit d'un modèle non associé à la fois en écoulement et en écrouissage, et dont la ductilité dépend de la pression hydrostatique. Les paramètres de ces fonctions peuvent dépendre explicitement de l'état d'hydratation, de manière analogue au comportement de la pâte à brasquer, tel que montré par D'Amours (2004). Les détails des enveloppes f et g ainsi que les fonctions d'écrouissage et d'adoucissement sont présentés à l'annexe A.4. L'intégration numérique des déformations plastiques sera discutée en détail à l'annexe A.2.2, et l'implémentation informatique sera présentée à la section 4.6.3.2.

Suivant Ulm et Coussy (1995), l'évolution de la résistance en compression uniaxiale avec l'état d'hydratation est posée linéaire. De plus, l'effet du frittage étant supposé indépendant de l'hydratation, la forme montrée à l'équation (2.42) est donc postulée pour la résistance en compression.

$$f_c(\xi, \phi) = \xi f_{c,0} + \phi f_{c,\phi} \quad (2.42)$$

2.2.4 Validation du modèle de comportement

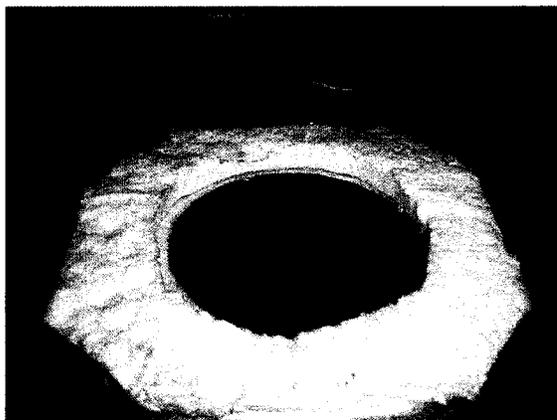
2.2.4.1 Hydratation

Afin de s'assurer de la validité de l'approche choisie, deux montages expérimentaux ont été simulés ; d'abord, une cellule de calorimétrie quasi-adiabatique a été utilisée afin d'extraire les paramètres de la cinétique de réaction du béton. Par la suite, un montage représentatif d'hydratation, conçu pour obtenir les échantillons nécessaires aux essais mécaniques, a été simulé avec les mêmes paramètres (voir la section 2.2.1). Cette simulation visait à valider les paramètres obtenus précédemment. Ces travaux ont d'ailleurs été présentés par Richard *et coll.* (2003a).

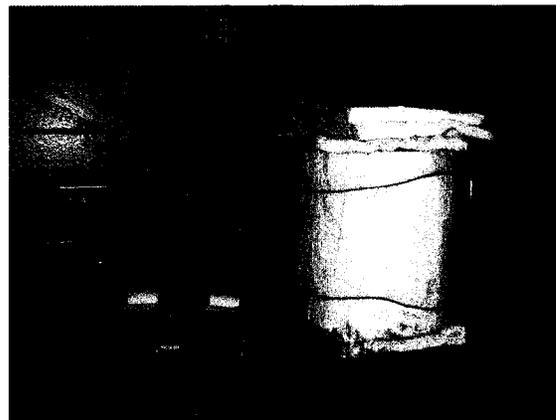
Ainsi, le montage montré aux figures 2.5(a) et 2.5(b) a été instrumenté de thermocouples de type K avant que du béton ne soit versé dans le creuset de graphite. Un maillage de 2000 hexaèdres à 8 noeuds a été construit en exploitant la double symétrie du problème (figure 2.5(c)) ; des conditions de convection naturelle équivalentes, prenant en compte le rayonnement (voir l'annexe C), ont été appliquées sur les surfaces exposées, tel que montré à la figure 2.5(d).

Les températures expérimentales ont été comparées aux températures obtenues aux mêmes endroits dans le modèle numérique, par le biais de jauges numériques. Les propriétés du béton ont été ajustées manuellement pour reproduire le plus fidèlement possible les données expérimentales. La figure 2.6 illustre les meilleures courbes obtenues.

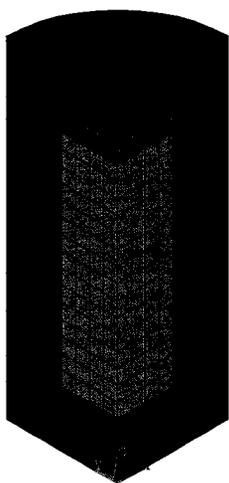
Bien que la température demeure sous le point de vaporisation de l'eau, l'évaporation est néanmoins suffisante pour faire changer significativement la capacité calorifique du béton, tel que le montre la comparaison des figures 2.6(a) et 2.6(b), particulièrement en phase de refroidissement. Cela s'explique par le fait que la capacité thermique de l'eau se situe autour de 4186 kJ/kg K et celle du béton, autour de 800 kJ/kg K (voir l'équation (2.21)). De plus, la température du laboratoire a changé au cours de l'expérience, tel que l'illustre l'évolution de la température dans l'isolant (figure 2.6(c)).



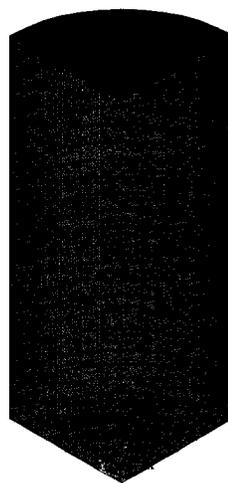
(a) Creuset de graphite et isolation.



(b) Acquisition de données.

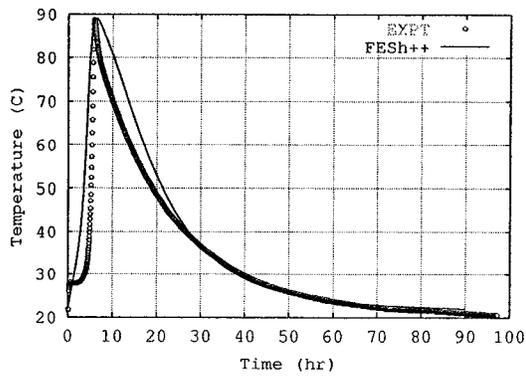


(c) Maillage.

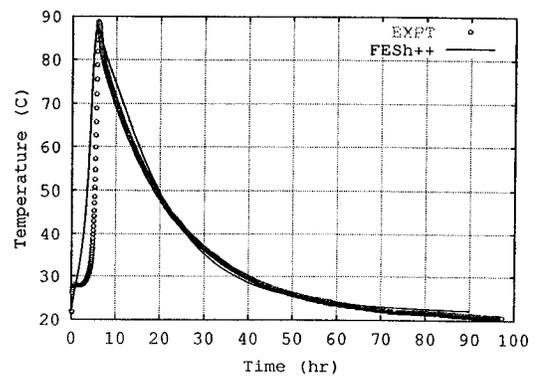


(d) Surfaces
d'échange.

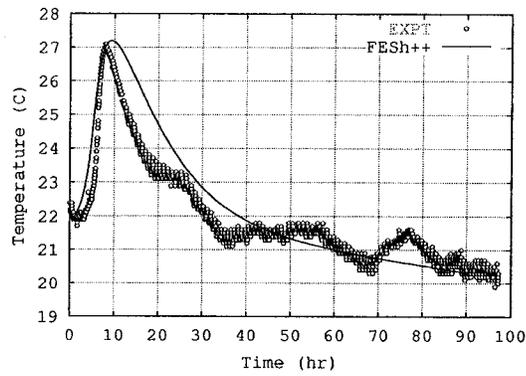
Figure 2.5: Montage de calorimétrie quasi-adiabatique



(a) Centre du béton. Sans eau libre.



(b) Centre du béton. Avec eau libre.



(c) Dans l'isolant. Avec eau libre.

Figure 2.6: Évolution de la température dans un montage de calorimétrie quasi-adiabatique

Par la suite, le montage représentatif d'hydratation, montré à la figure 2.1, a été instrumenté à l'aide de thermocouples de type K, puis discrétisé à l'aide de 5000 hexaèdres à 8 noeuds. Cette fois, une seule symétrie du problème a pu être exploitée (figure 2.7(a)); des conditions de convection naturelle équivalentes, prenant en compte le rayonnement, ont été appliquées sur les surfaces exposées, tel que montré à la figure 2.7(b).

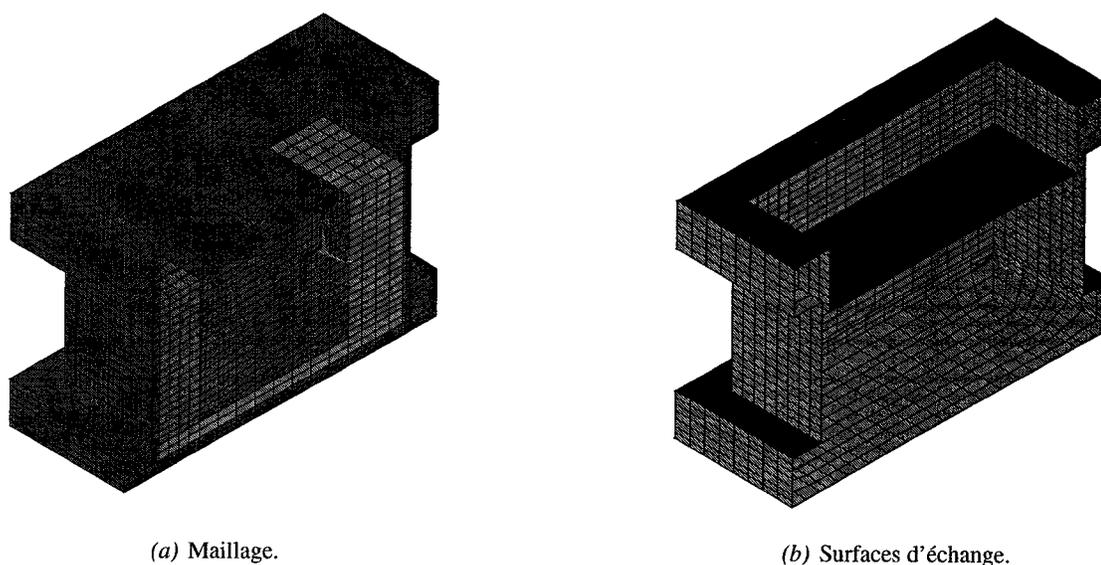


Figure 2.7: Discretisation d'un montage représentatif d'hydratation du béton

Les paramètres obtenus à l'aide du montage de calorimétrie quasi-adiabatique ont été utilisés pour encore une fois résoudre le problème avec et sans le terme d'évaporation de l'eau libre, qui prend ici tout son sens. En effet, il est évident que l'ajout de l'effet thermique de l'évaporation de l'eau libre est indispensable, puisque les résultats montrés à la figure 2.8(a) sont carrément farfelus. De plus, la figure 2.8(b) illustre bien l'impact de n'utiliser qu'une seule réaction d'hydratation; une erreur importante est présente lors des premières heures.

Évidemment, les résultats numériques sont loin de coller parfaitement aux résultats expérimentaux, mais dans le contexte où la simulation de l'hydratation ne sert qu'à déterminer les conditions initiales du béton lors du préchauffage, et en considérant la relative simplicité du modèle présenté, les résultats du modèle semblent tolérables.

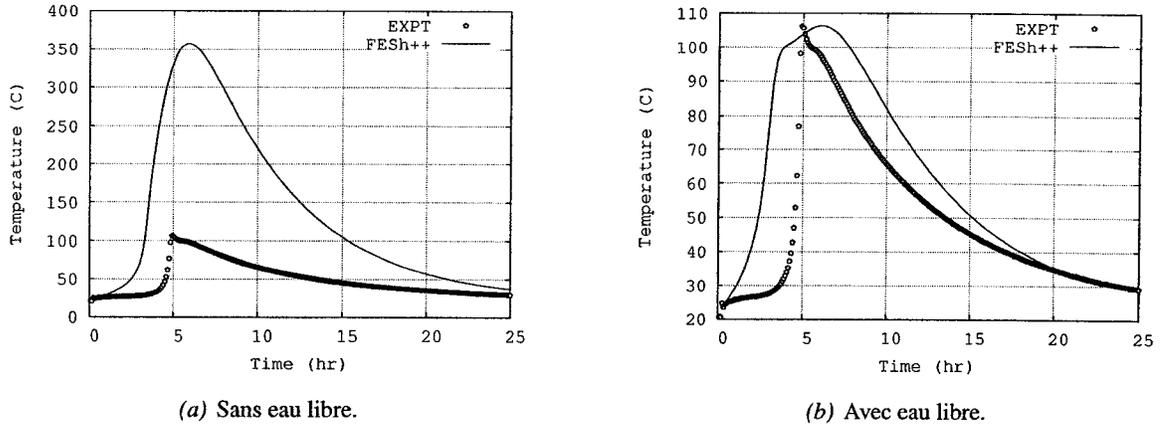


Figure 2.8: Évolution de la température au centre du béton dans un montage représentatif d'hydratation du béton

2.2.4.2 Déshydratation et frittage

Les simulations présentées à la section 2.2.4.1 permettent d'obtenir l'état d'hydratation moyen d'un échantillon carotté à 7 jours ; la résistance en compression obtenue à température ambiante par Akande (2003b) nous permet donc de calculer la résistance à l'infini $f_{c,0}$ de l'équation (2.42). À partir des résultats de résistance en compression uniaxiale à chaud avant frittage de Akande (2003b), l'état d'hydratation peut ensuite être calculé à l'aide de la même équation, en simulant un essai au même taux de chauffe de 13°C à l'heure.

La température critique est donc identifiée ainsi que la fonction de déshydratation $\xi(T^{\max})$ (voir l'équation (2.9)) ; la forme montrée à l'équation (2.43) est proposée.

$$\xi(T^{\max}) = \frac{a_{\xi}}{1.0 + \exp\left[\frac{T^{\max} - b_{\xi}}{c_{\xi}}\right]} + d_{\xi} \quad (2.43)$$

La comparaison des résultats numériques et expérimentaux d'un essai de chauffage suivi d'un refroidissement – tous deux au taux de 13°C à l'heure – est montrée à la figure 2.9.

En posant le frittage maximal à 750°C (par l'hypothèse **H 7**) et nul à 350 °C, la forme montrée à l'équation (2.44) est posée pour la fonction $\phi(T^{\max})$ de l'équation (2.18).

$$\phi(T^{\max}) = a_{\phi} - b_{\phi} \exp\left[-c_{\phi} (T^{\max})^{d_{\phi}}\right] \quad (2.44)$$

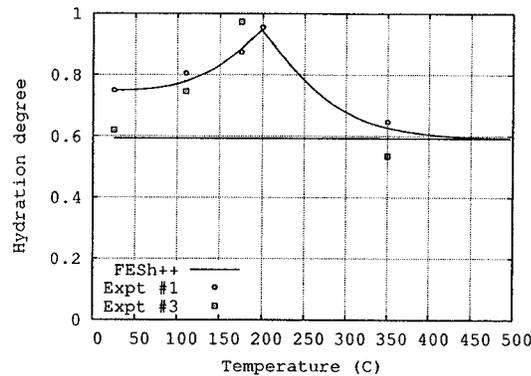


Figure 2.9: Comparaison des résultats expérimentaux tirés de Akande (2003b) et des résultats numériques de l'état d'hydratation du béton

Finalement, la différence entre la résistance prédite par l'état d'hydratation et les résultats expérimentaux de Akande (2003b) au-delà de 350°C est attribuée entièrement à l'évolution du frittage. Le paramètre $f_{c,\phi}$ de l'équation (2.42) peut donc être identifié. La comparaison des résultats numériques et expérimentaux d'un essai de chauffage suivi d'un refroidissement – tous deux au taux de 13°C à l'heure – est montrée à la figure 2.10.

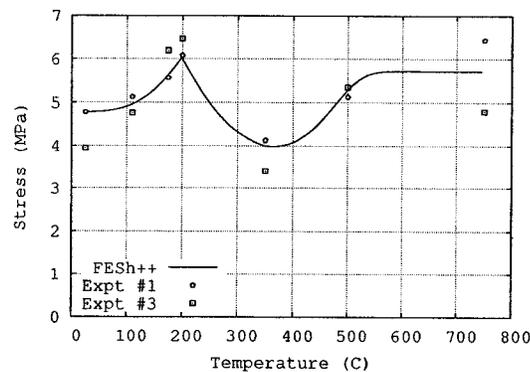
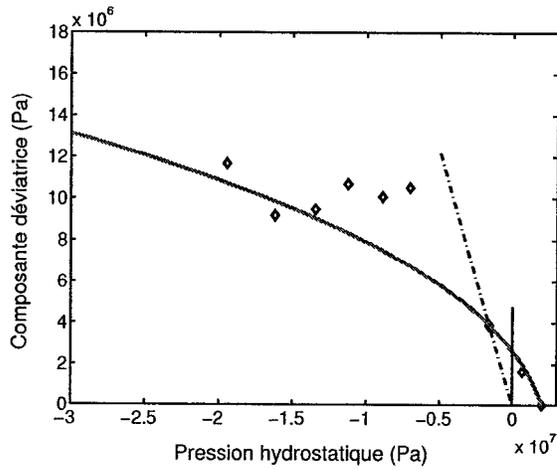


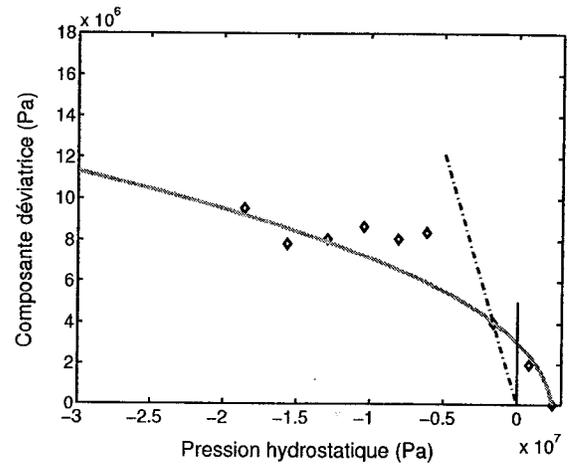
Figure 2.10: Comparaison des résultats expérimentaux tirés de Akande (2003b) et des résultats numériques de la résistance en compression uniaxiale

2.2.4.3 Élastoplasticité

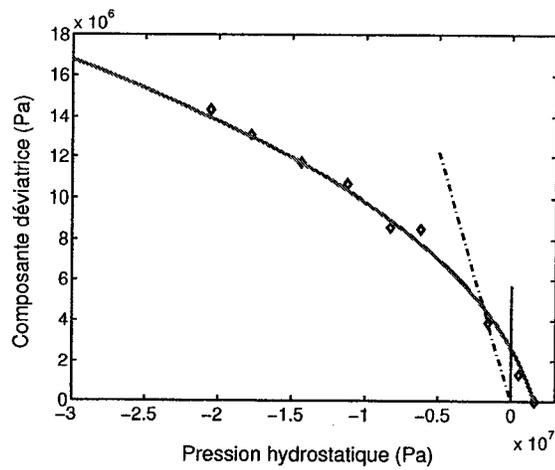
Un ensemble de paramètres pour le modèle élastoplastique présenté à l'annexe A.4 a été obtenu d'essais triaxiaux pour un béton à température ambiante, pour un béton traité à 250°C et pour un béton traité à 750°C. Les surfaces de charge obtenues sont montrées à la figure 2.11.



(a) 25°C



(b) 250°C



(c) 750°C

Figure 2.11: Surfaces de charge obtenues des essais triaxiaux de Akande (2003b)

Les paramètres sont par la suite exprimés selon l'état d'hydratation ξ et de frittage ϕ . En première approximation, l'écoulement est posé associé. Le module élastique de l'équation (2.32) s'exprime maintenant selon l'expression (2.45).

$$E(\xi, \phi) = E_\xi(\xi) + E_\phi(\phi) = \frac{a_E}{1.0 + \exp\left[-\frac{\xi - b_E}{c_E}\right]} + d_E + e_E f_E^\phi \quad (2.45)$$

Les paramètres a_f , b_f et m_f s'expriment selon les équations (2.46) à (2.48) ; les paramètres α_f et β_f sont gardés constants.

$$a_f(\xi, \phi) = \frac{a_{af}}{1.0 + \exp\left[-\frac{\xi - b_{af}}{c_{af}}\right]} + d_{af} + e_{af} \phi \quad (2.46)$$

$$b_f(\xi, \phi) = \frac{a_{bf}}{1.0 + \exp\left[-\frac{\xi - b_{bf}}{c_{bf}}\right]} + d_{bf} + e_{bf} \phi \quad (2.47)$$

$$m_f(\xi, \phi) = \frac{a_{mf}}{1.0 + \exp\left[-\frac{\xi - b_{mf}}{c_{mf}}\right]} + d_{mf} + e_{mf} \phi \quad (2.48)$$

La fonction de ductilité d_h est représentée par un polynôme de 9^{ième} ordre en pression hydrostatique p , pondérée par une fonction de gain selon l'hydratation ξ et le frittage ϕ , tel que montré à l'équation (2.49).

$$d_h(\xi, \phi) = \left(a_{dh} \xi^{b_{dh}} + c_{dh} - \frac{d_{dh}}{1.0 + \exp\left[-\frac{\phi - e_{dh}}{f_{dh}}\right]} \right) (g_{dh}^0 + g_{dh}^1 p + \dots + g_{dh}^9 p^9) \quad (2.49)$$

La comparaison des résultats numériques et expérimentaux pour des essais de compression uniaxiale à différentes températures est montrée à la figure 2.12.

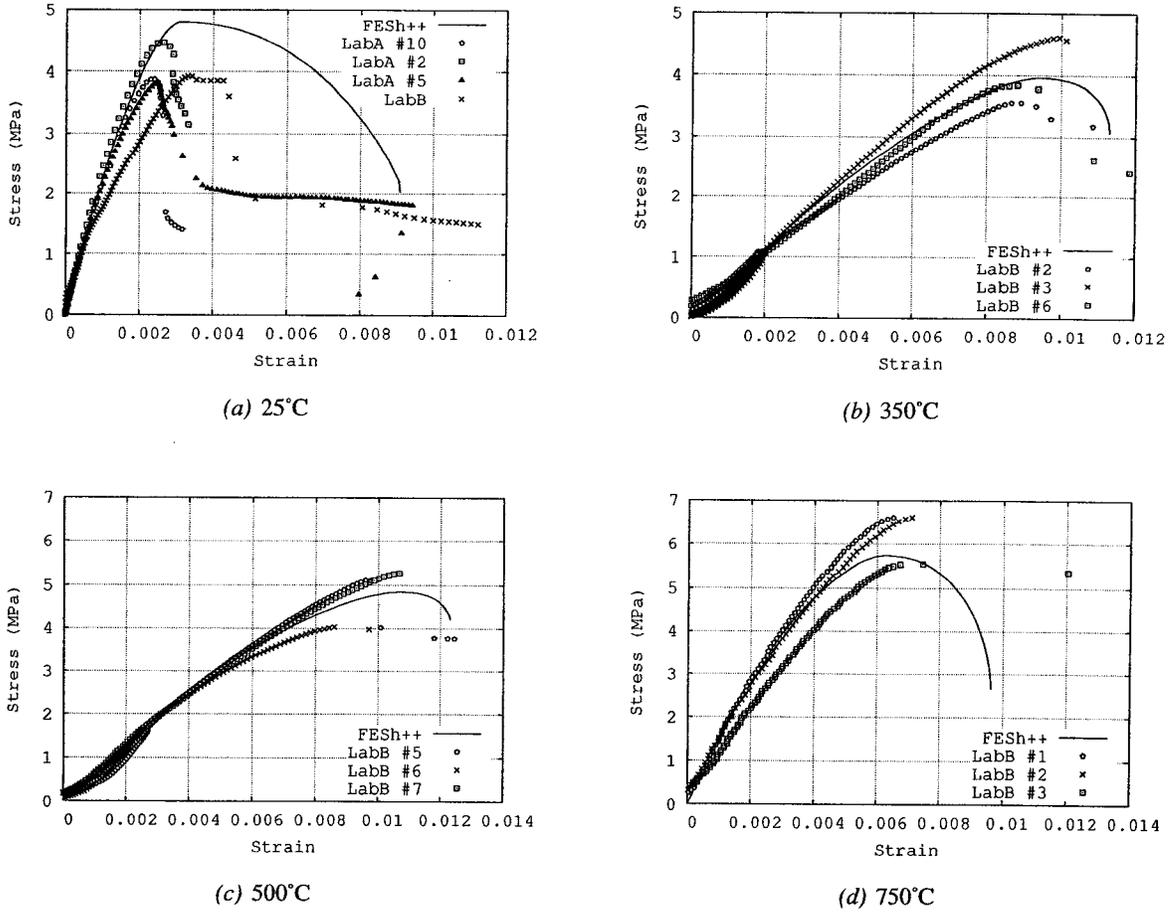


Figure 2.12: Comparaison des résultats expérimentaux tirés de Akande (2003b) et des résultats numériques de compression uniaxiale

2.2.4.4 Dilatométrie

Les travaux réalisés par Akande (2003b) sur le béton réfractaire isolant permettent de mettre en évidence les déformations réversibles et irréversibles dues à l'expansion thermique, la perte d'eau libre et la déshydratation. En effet, les échantillons ont été chauffés à différents taux jusqu'à une certaine température, puis refroidis. Ces essais ont été simulés numériquement, en prenant les conditions initiales pour la teneur en eau libre et l'état d'hydratation du modèle présenté à la section 2.2.4.1. Le coefficient d'expansion thermique instantané selon l'état d'hydratation du béton a été estimé à partir des résultats en refroidissement de Akande (2003b).

Essai jusqu'à 110°C

D'abord, un essai où la température maximale était de 110°C a été simulé à des taux de chauffe de 6°C, 13°C et 30°C à l'heure, en utilisant la cinétique d'évaporation d'eau libre développée à la section 2.2.3.3. Cette cinétique permet l'évaporation complète de l'eau à la fin de l'essai pour les taux de 6°C et de 13°C à l'heure, alors qu'il subsiste une teneur résiduelle pour le taux de 30°C à l'heure.

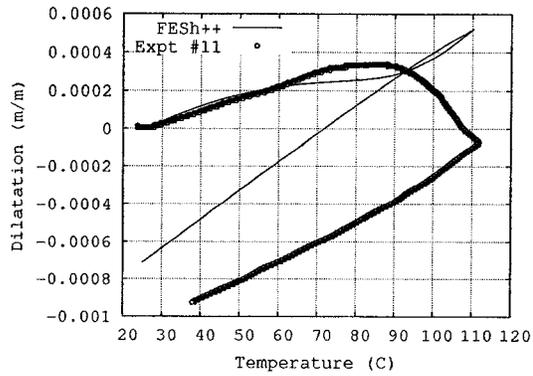
La fonction de contraction $\gamma(w)$ (voir l'équation (2.27)) a été calée à l'aide de l'équation (2.50).

$$\gamma(w) = \gamma_0 (w_0 - w)^{n_w} \quad (2.50)$$

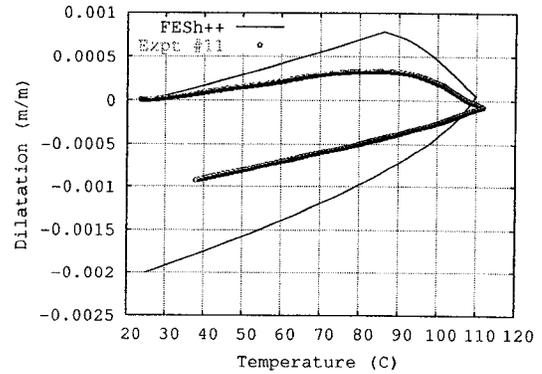
Notez que γ_0 et n_w sont des constantes, alors que w_0 est la valeur initiale de la teneur en eau libre. Il faut aussi savoir que les déformations maximales mesurées sont assez faibles, de l'ordre de 1×10^{-3} , alors que la précision de l'instrument de mesure est estimée à environ 1×10^{-4} . La comparaison entre les simulations numériques et les données expérimentales est montrée à la figure 2.13.

Pour les taux de chauffe modérés de 13°C et 30°C à l'heure, correspondant aux figures 2.13(c) et 2.13(d), les résultats numériques et expérimentaux collent. Par contre, pour le taux de chauffe lent de 6°C à l'heure, correspondant à la figure 2.13(a), le modèle ne semble pas bien fonctionner; il faut cependant noter que les résultats d'un seul essai sont comparés. Néanmoins, dans le modèle numérique, il ne reste pratiquement plus d'eau à évaporer une fois les 90°C atteints à ce taux de chauffe lent, alors que les résultats expérimentaux semblent indiquer qu'il y en a encore une grande perte d'eau. Pour pallier à cette lacune, une cinétique légèrement modifiée est proposée pour les taux de chauffe lent, avec un nouvel ensemble de paramètres γ_0 et n_w ; la courbe dilatométrique simulée obtenue est montrée à la figure 2.13(b). Cette fois, l'évaporation est concentrée au-dessus de 85°C grâce à l'utilisation d'une fonction de Heaviside dans la cinétique.

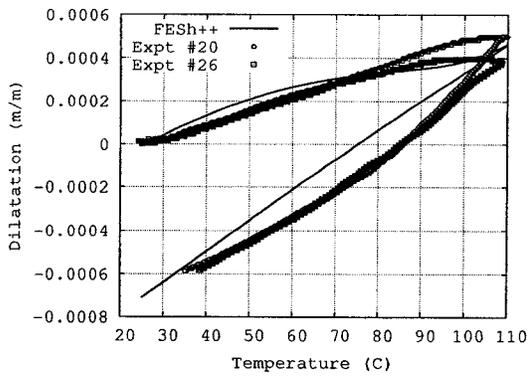
Tel que montré par Akande (2003b), la teneur en eau libre mesurée par le traitement des échantillons à 100°C pendant 48 heures dans un four est plus grande que la teneur en eau libre qui doit être utilisée dans le modèle numérique. Selon Witasse (2000), l'eau évaporable est constituée de l'eau libre – libre des forces superficielles – de l'eau capillaire – répondant aux lois de la capillarité – et de l'eau physiquement adsorbée – retenues par des forces de van der Waals. Il semble probable que le taux de chauffe lent de 6°C à l'heure permet au moins à l'eau capillaire de migrer dans les pores



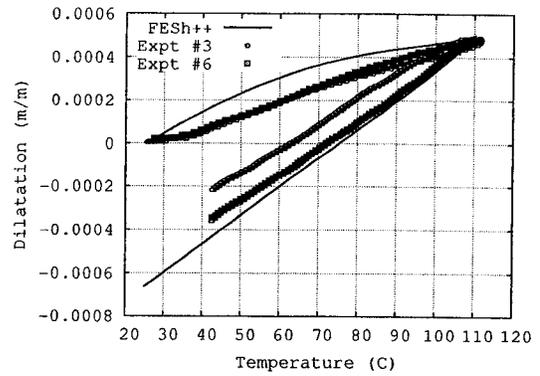
(a) 6°C à l'heure



(b) 6°C à l'heure, cinétique modifiée



(c) 13°C à l'heure



(d) 30°C à l'heure

Figure 2.13: Comparaison des résultats expérimentaux tirés de Akande (2003b) et des résultats numériques d'un essai de dilatométrie jusqu'à 110°C pour le béton

avant d'être évaporée. Par conséquent, la pertinence de la définition de l'eau libre et de sa cinétique d'évaporation utilisées dans le modèle proposé se limite aux taux de chauffe modérés. Pour raffiner le modèle, des variables internes supplémentaires pour l'eau capillaire et l'eau adsorbée physiquement ainsi que leur cinétique correspondante pourraient être ajoutées.

Essais jusqu'à 500°C et 600°C

Ensuite, un essai où la température maximale était de 500°C et un autre où la température maximale était de 600°C ont été simulés à un taux de chauffe de 13°C à l'heure, en utilisant la cinétique d'évaporation d'eau libre développée à la section 2.2.3.3 et d'hydratation / déshydratation de la section 2.2.3.2. Une forme cubique est posée pour les paramètres β_h et β_d (voir l'équation (2.26)). La comparaison entre la simulation numérique et les données expérimentales est montrée à la figure 2.14.

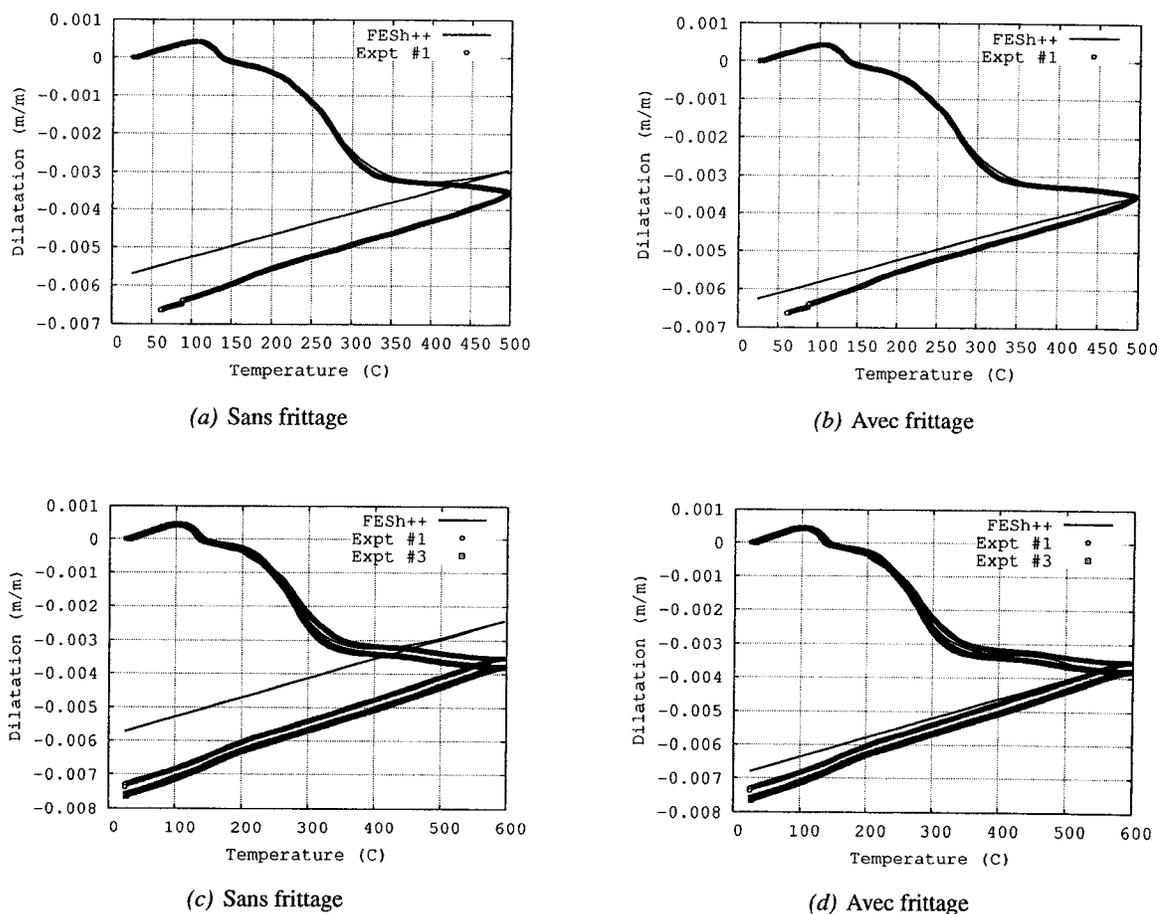


Figure 2.14: Comparaison des résultats expérimentaux tirés de Akande (2003b) et des résultats numériques d'essais de dilatométrie jusqu'à 500°C et 600°C pour le béton

En ajoutant la déformation de frittage de l'équation (2.28) aux déformations déjà prises en compte, une meilleure représentation des résultats expérimentaux peut être obtenue, comme le montrent la comparaison des figures 2.14(a) et 2.14(b) et celle des figures 2.14(c) et 2.14(d). La fonction $\varphi(\phi)$ de l'équation (2.28) est posée cubique.

2.2.4.5 Fluage

Trois essais de fluage ont été simulés en utilisant le modèle de Burger montré à la section 2.2.3.7, soit à 25°C, 375°C et 750°C. Les éprouvettes ont toutes été chargées une première fois, déchargées pendant un certain temps, rechargées de nouveau à une charge supérieure, et finalement déchargées. Les contraintes correspondantes sont montrées au tableau 2.3.

Tableau 2.3: Contraintes appliquées lors d'essais de fluage pour le béton

TEMPÉRATURE (°C)	CONTRAINTE 1 (MPa)	CONTRAINTE 2 (MPa)
25	0.75	1.88
375	0.76	1.83
750	1.03	2.56

Afin d'éliminer l'effet de la variabilité des propriétés élastoplastiques – évidente à la section 2.2.4.3 – la composante instantanée a été retranchée des résultats expérimentaux. Leur comparaison avec les résultats numériques est montrée à la figure 2.15. Notez que les déformations ont été normalisées.

Les coefficients de Poisson visqueux ont été considérés comme étant identiques au coefficient de Poisson instantané, puisque les déformations transverses n'ont pas été mesurées pendant les essais de fluage. Les modules visqueux E_{va} , E_v et E_a (voir les équations (2.36) et (2.37)) ont quant à eux été calés sur les résultats expérimentaux. Étant donné le manque de données sur le fluage à froid d'échantillons ayant été chauffés, les paramètres E_{va} , E_v et E_a ont été exprimés selon la température par un polynôme. Finalement, bien que simple, le modèle de Burger permet de représenter relativement bien le comportement temporel du béton.

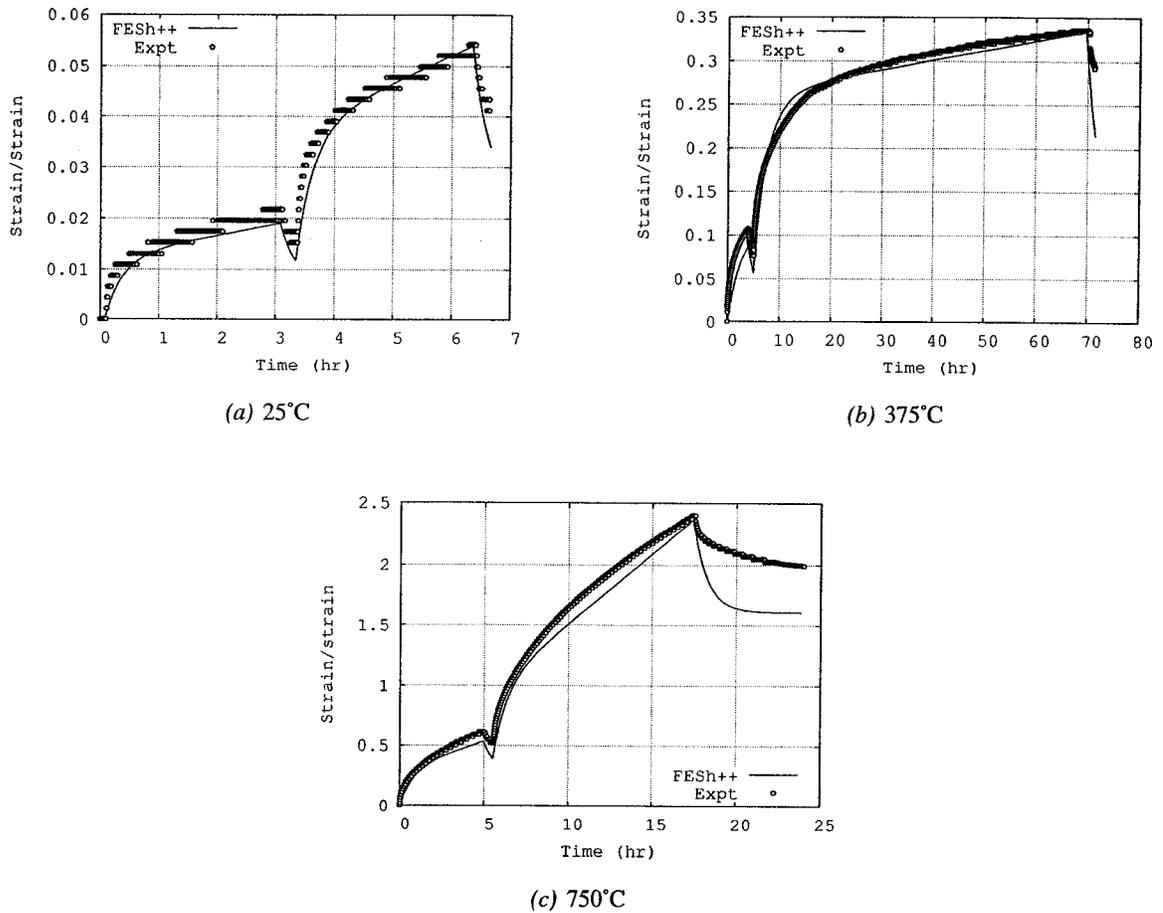


Figure 2.15: Comparaison des résultats numériques et expérimentaux de la composante temporelle normalisée d'essais de fluage pour le béton

2.3 Isolants poreux cellulaires

2.3.1 Comportement thermomécanique

Dans la cuve P-155, deux types d'isolants poreux sont employés : des panneaux de silicate de calcium et des briques isolantes d'aluminosilicates. Ces matériaux sont caractérisés par leur faible résistance mécanique et une faible expansion thermique, tel que confirmé par Greenwood et Uru (1990) pour les panneaux isolants sous les cathodes d'une cuve de Hall-Héroult. Tel que le mentionne Allaire (1992), les panneaux du côté de la cuve peuvent être comprimés de 25 à 50% lorsque la cuve est en opération. Allaire rapporte aussi que la conductivité des panneaux comprimés de 40% pouvait augmenter d'environ 41%.

Tabereaux (1982) nous apprend que les panneaux de silicate de calcium utilisés dans les cuves de Hall-Héroult ont une microstructure de type mousse à cellules ouvertes, comprenant environ 91% de porosité. Les travaux de Gibson *et coll.* sur ce type de matériaux (Gibson *et coll.*, 1982b,a; Maiti *et coll.*, 1984a; Gibson, 1989; Gibson et Ashby, 1997) ont montré qu'ils présentent une microstructure de poutres connectées de façon à former des cages.

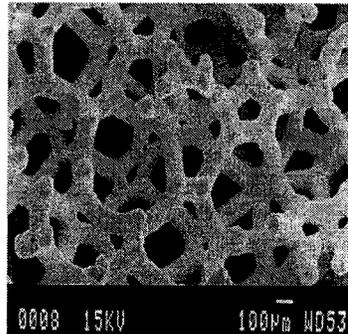


Figure 2.16: Structure d'une mousse réfractaire à cellules ouvertes

Dans le cas de matériaux fragiles, Gibson *et coll.* expliquent qu'ils présentent trois phases, montrées à la figure 2.17(a), lorsque chargés en compression volumétrique, soit :

<i>Élastique</i>	Flexion des poutres, coefficient de Poisson typiquement de $\frac{1}{3}$.
<i>Affaissement plastique</i>	Rupture en cascade à contrainte constante des poutres, sans déformation transverse, <i>i.e.</i> le coefficient de Poisson tend vers zéro.
<i>Écrouissage plastique</i>	Consolidation ("compactage") des débris de poutres : écrouissage exponentiel. Le comportement de la mousse en compression tend vers celui du matériau parent.

Les travaux de Dam *et coll.* (1990) sur les mousses fragiles d'alumine montrent un comportement volumétrique un peu différent, tel que montré à la figure 2.17(b). Il semble que leurs essais aient été réalisés avec une presse asservie commandée en déplacement, ce qui laisse apparaître une courbe d'adoucissement après la rupture, similaire à celle d'autres matériaux quasifragiles, tel le béton. Ils insistent aussi sur l'importance d'utiliser une tête de chargement se conformant à l'échantillon afin d'éviter l'effet de la taille de l'échantillon sur sa réponse mécanique.

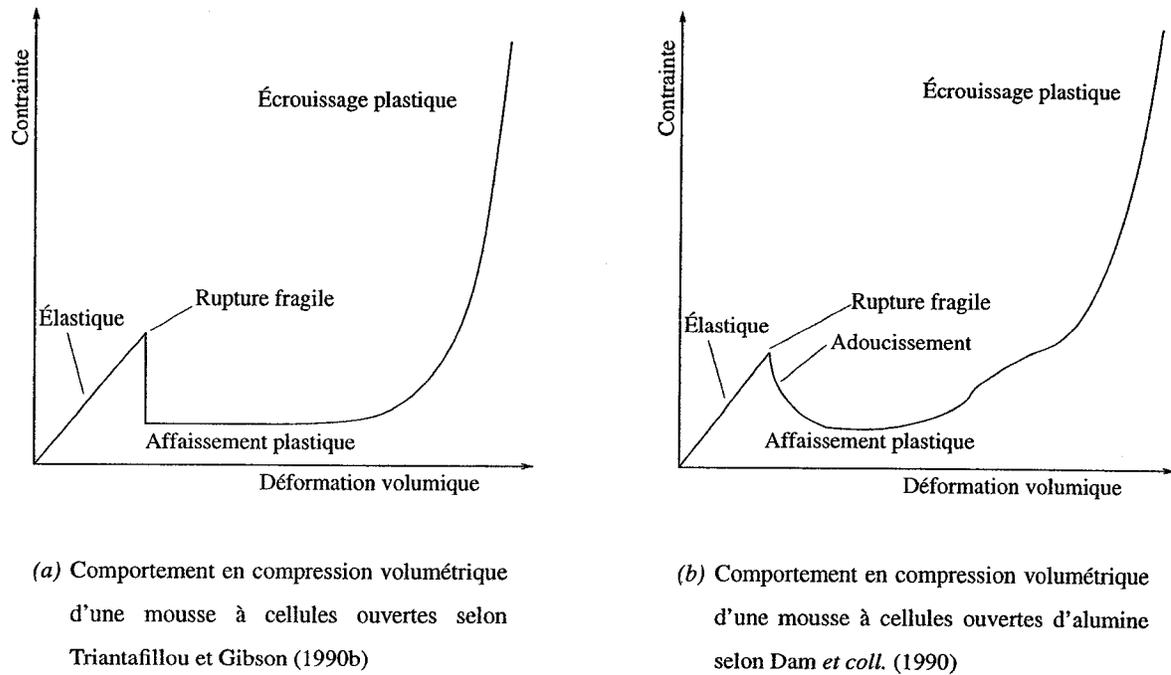


Figure 2.17: Comportement en compression de mousses fragiles

D'un autre côté, le comportement en traction des mousses fragiles est très différent de celui en compression, tel que le montrent Maiti *et coll.* (1984b) et Huang et Gibson (1991); en effet, ils sont à toutes fins pratiques élastiques fragiles.

L'effet de la température sur le comportement du silicate de calcium doit aussi être pris en compte. Selon Tabereaux (1982), ce matériau subit une perte de masse importante avec la température, de l'ordre de 15% pour une exposition de 24 heures à 800-900°C; la contraction volumétrique correspondante est d'environ 5%. Il faut toutefois noter que la qualité des mousses de silicate de calcium s'est beaucoup améliorée depuis cette publication. Ainsi, selon les ingénieurs de l'Alcan, il n'y a pas de perte de masse avec la température ni de contraction volumétrique.

Par contre, le matériau subit du fluage; la fiche technique du fabricant rapporte une contraction linéaire de 0.4% après 50 heures à 900°C et 0.1 MPa. Cependant, tel que mentionné précédemment, ce matériau peut subir une déformation de l'ordre de 50% dans les côtés de la cuve; il semble donc justifié de négliger l'effet visqueux pour cette région.

2.3.2 Travaux antérieurs

Triantafillou et Gibson (1990b) présentent une enveloppe de rupture pour ces matériaux, montrée à la figure 2.18 ; de plus Triantafillou et Gibson (1990a) ont aussi développé un modèle constitutif incrémental élastoplastique valide en petites déformations, et ne comprenant pas d'écroutissement plastique. Shreyer *et coll.* (1994) présentent quant à eux une loi de comportement incrémentale élastoplastique en grandes déformations (et petites rotations) avec écroutissement plastique linéaire pour la consolidation volumétrique.

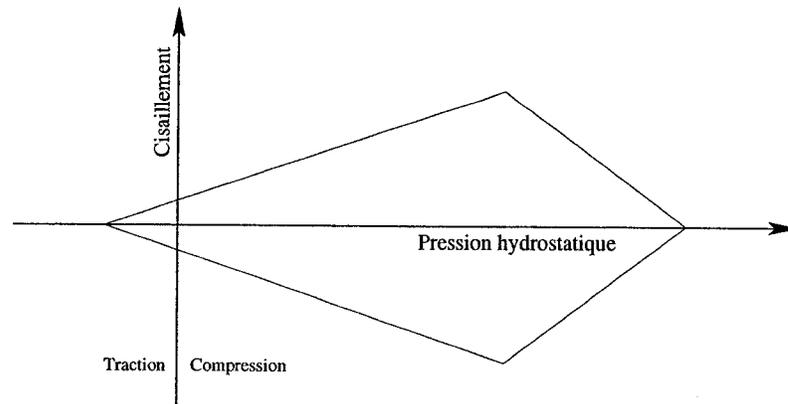


Figure 2.18: Enveloppe de rupture des mousses fragiles dans le plan hydrostatique-cisaillement selon Triantafillou et Gibson (1990b)

Le comportement de ce matériau à de petites déformations peut être rapproché de celui de plusieurs sols, en tout cas en ce qui a trait à sa surface de charge. Dans un premier effort de modélisation, l'adaptation d'un modèle existant est séduisante.

2.3.3 Modèle de comportement

Une loi constitutive thermomécanique peut être dérivée de la même manière que pour le béton réfractaire – voir la section 2.2.3.1 – à partir des principes de la thermodynamique des processus irréversibles ; cependant, un modèle thermique standard sera postulé, *i.e.* le modèle répond à la loi de Fourier et il n'y a pas de changement de phase, et le modèle mécanique sera adapté d'un modèle existant. Par conséquent, la cohérence thermodynamique sera considérée comme établie.

De plus, étant donnée la nature thermo-électro-mécanique transitoire du problème à résoudre, le pas de temps lors de la simulation du préchauffage électrique d'une cuve de Hall-Héroult sera dicté par des considérations essentiellement thermiques. Les taux de chauffe typiques étant relativement faibles pour cette méthode, les incréments de déformation à intégrer seront petits sur la base d'un pas. Dans ces conditions, une formulation lagrangienne actualisée est valable, tel que montré par Bourgeois (1997) pour la simulation d'un sol.

La surface de charge montrée en 2.18 a le désavantage d'être composite, et peut donc poser un problème pour la définition de la direction d'écoulement. Le choix d'un modèle composite non associé devient donc intéressant, d'autant plus que les mêmes problèmes de dilatance plastique que pour le béton se posent ici. Par conséquent, un modèle avec cohésion initiale simplifié composé d'un cône et d'un cap hémisphérique, qu'il est possible de voir comme un cas limite du modèle de MRS-Lade modifié tel que proposé par Pérez-Foguet (2000), a été choisi. En effet, le modèle est rendu indépendant de l'angle de Lode θ (donc de l'invariant J_3); de plus, une consolidation plastique a été ajoutée lorsque les déformations deviennent très grandes. La définition complète du modèle est détaillée à l'annexe A.5, alors que la surface de charge et les vecteurs d'écoulement, reproduits de la section A.5.1, sont montrés à la figure 2.19.

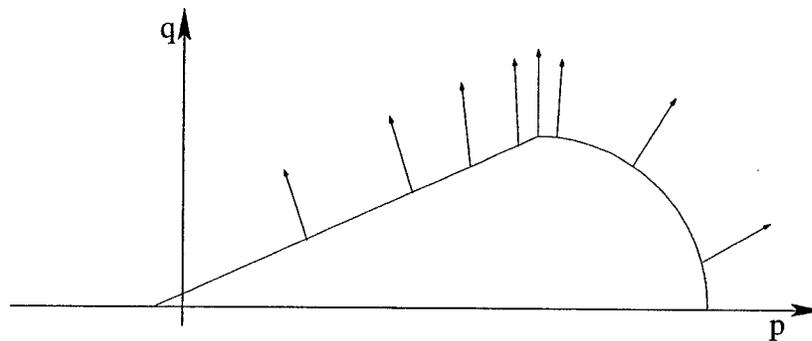


Figure 2.19: Écoulement non associé pour le modèle Cone-Cap dans le plan pression-cisaillement

2.3.4 Validation du modèle de comportement

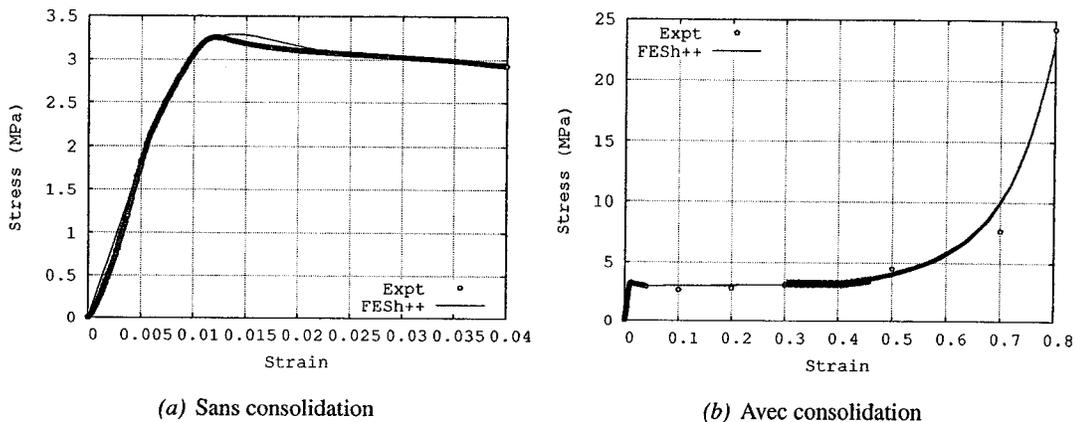


Figure 2.20: Simulation d'un essai de compression uniaxiale d'un isolant poreux cellulaire

Les paramètres du modèle ont été calés par rétro-ingénierie à partir d'un essai de compression uniaxiale. La comparaison entre une simulation avec un seul élément et les données expérimentales est montrée à la figure 2.20. Les paramètres du cap ont dû être postulés, étant donné le manque de données expérimentales.

2.4 Autres matériaux

Ici aussi, bien qu'une loi constitutive thermomécanique puisse être dérivée pour chacun des matériaux de cette section de la même manière que pour le béton réfractaire – voir la section 2.2.3.1 – soit à partir des principes de la thermodynamique des processus irréversibles, un modèle thermique standard sera postulé, *i.e.* le modèle répond à la loi de Fourier et il n'y a pas de changement de phase, et le modèle mécanique sera adapté d'un modèle existant. Par conséquent, dans chacun des cas suivants, la cohérence thermodynamique sera considérée comme établie.

2.4.1 Réfractaires d'aluminosilicates

Les réfractaires denses se retrouvent à la fois dans la ligne d'action de l'expansion des cathodes, et sous celles-ci tel que le montre la figure 1.5. Dans ce dernier cas, ils ne sont que peu chargés, et une loi élastique linéaire est proposée. Par contre, pour celles dans le côté de la cuve, une loi plus complexe devrait être considérée. À cette fin, l'examen de la littérature s'avère éclairant.

2.4.1.1 Comportement thermomécanique

Une littérature considérable existe sur les réfractaires, en particulier sur les aluminosilicates (voir par exemple Carneglia et Barna, 1992). Selon Chien *et coll.* (1982), les réfractaires en général sont des matériaux céramiques complexes, poreux, multiphasés et multicomposants. Par exemple, des briques d'aluminosilicates pourraient contenir de la mullite, de la cristobalite, du quartz, des phases vitreuses et des pores. Tel que mentionné par Peretz (1983), les aluminosilicates sont des composés de silice (SiO_2) et d'alumine (ou corindon, Al_2O_3) ; de façon similaire aux alliages métalliques, ces composés forment différentes phases, selon leur répartition molaire et la température.

Ainsi, ils sont donc caractérisés par l'absence de point de fusion défini ; ils présentent plutôt un ramollissement au-delà d'une certaine température critique. Il faut savoir qu'à haute température, les réfractaires contiennent une proportion non négligeable de liquide au sein de leur structure. En présence d'impuretés (K_2O , Na_2O , Fe_2O_3 , etc.), de nouvelles phases peuvent être présentes, affectant les propriétés thermophysiques, thermochimiques et thermomécaniques.

Selon Schacht (1995), les réfractaires sont des matériaux quasifragiles, au comportement mécanique s'apparentant à celui du béton. À température ambiante, ils sont plutôt fragiles, mais ils

démontrent une ductilité accrue à température élevée, et sont reconnus pour fluer énormément. La température à laquelle ils commencent à montrer d'importantes déformations anélastiques augmente avec le taux d'alumine. De plus, toujours selon Schacht, les briques pressées montrent une forte orthotropie (Schacht, 1987) Le comportement en compression uniaxiale typique d'une brique à faible taux d'alumine (moins de 47.5%) est montré à la figure 2.21.

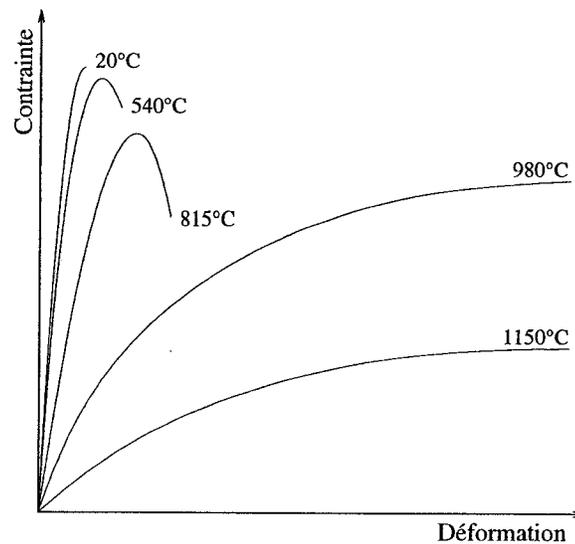


Figure 2.21: Comportement en compression uniaxiale typique d'une brique réfractaire d'aluminosilicate à faible alumine, selon Schacht (1995)

2.4.1.2 Travaux antérieurs

Les travaux de Schacht (1984, 1987, 1993) sur la modélisation de poches de coulées utilisées dans l'industrie de l'acier ont montré qu'une loi de comportement élastoplastique associée classique avec écrouissage isotrope et surface d'écoulement de von Mises, bien que ne permettant pas rigoureusement de tenir compte de ses caractéristiques, était suffisante pour bien représenter le comportement en opération des briques d'aluminosilicates denses. Dans le cas de son comportement à court terme (quelques heures), le fluage n'était pas suffisamment important pour l'inclure dans la simulation. Par contre, d'après Schacht, l'écart entre ses résultats numériques et les mesures expérimentales est dû au fait qu'il avait négligé l'effet des joints de mortier entre les briques. Il faut noter que les briques réfractaires de ces poches sont à haute teneur en alumine (>70%), par conséquent, les phénomènes visqueux prennent place à plus haute température que les briques à faible teneur en alumine utilisées dans la P-155. Par contre, les températures atteintes dans les poches de coulées pour l'acier (1600°C) dépassent largement celles vécues dans une cuve en préchauffage (800°C).

2.4.1.3 Modèle de comportement probable

Le choix le plus évident pour représenter le comportement des briques denses du côté de la cuve est de reprendre le modèle élastoplastique pour les matériaux quasifragiles utilisé pour le béton réfractaire, et dont la définition complète est donnée à l'annexe A.4.

2.4.2 Acier

2.4.2.1 Comportement thermomécanique

Contrairement aux matériaux présentés précédemment, l'acier doux est passablement bien connu et caractérisé. Il y a deux applications principales pour l'acier dans une cuve d'électrolyse : le caisson et les conducteurs des électrodes (cathodes et anodes).

Dans le cas du caisson, de nombreuses analyses numériques sur son comportement mécanique ont été réalisées. Les pionniers Toia et Soletta (1979) ont d'abord utilisé une loi de comportement linéaire élastique indépendante de la température. Cette approche a aussi été utilisée par Youhei et Shihuan (1991), et par Megahed *et coll.* (1996). Cependant, tel que l'affirment Dupuis *et coll.* (1991), l'élastoplasticité de l'acier doit être prise en compte, afin de reproduire les mesures *in situ* sur le caisson d'une cuve à 65 kA ; Megahed *et coll.* (1996) et Sayed *et coll.* (1997) ont eux aussi inclus cette non-linéarité matérielle dans leurs modèles.

De plus, Asadi et Tomlinson (1995) montrent que la dépendance des propriétés de l'acier à la température doit être prise en compte ; dans le cas de caissons de seconde génération et plus – plus d'une vie de revêtement dans le même caisson – le vieillissement de l'acier par sphéroïdisation doit aussi être considéré. En effet, les zones du caisson soumises à des températures de plus de 300°C pendant plusieurs années voient leur microstructure se modifier, ce qui en modifie passablement les propriétés. De plus, ces zones pourraient aussi subir du fluage.

2.4.2.2 Modèle de comportement probable

Dans le cadre de **START-CUVE**, le caisson simulé sera neuf ; par conséquent, une loi de comportement élastoplastique avec écrouissage isotrope classique a été utilisée. Les propriétés seront définies par des fonctions explicites de la température. Des mesures expérimentales de propriétés à court terme de l'acier à haute température sont publiées dans un rapport de l'ASTM (Ward et Cross, 1955). Le préchauffage étant une opération relativement courte, le fluage a été négligé.

D'un autre côté, l'acier des barres collectrices et des rondins anodiques n'est pas soumis à de grandes sollicitations. L'approche prise par Richard (2000) et qui consistait à utiliser une loi de comportement élastoplastique en J2 avec écrouissage cinématique classique (voir A.3), et dont les

propriétés évoluent avec la température tel que publié par l'ASTM (Ward et Cross, 1955), a été retenue. Compte tenu du fait que le chargement dans ces zones est monotone, un écrouissage isotrope a cependant été utilisé.

2.4.3 Fonte

2.4.3.1 Comportement thermomécanique

La fonte grise est utilisée pour faire le joint thermoélectromécanique entre l'acier des conducteurs et le carbone des électrodes. Comme l'expliquent Barstow *et coll.* (1997), les compositions de fontes utilisées à cette fin contiennent du carbone, du silicium, du phosphore, du manganèse et des impuretés (vanadium, soufre, scandium, etc.). Le tout peut être représenté par un diagramme de phase ternaire Fe-C-Si. La microstructure de la fonte solidifiée entre le carbone et l'acier dans les électrodes dépend d'un grand nombre de facteurs : composition chimique, température de coulée, température de l'acier et du carbone à la coulée, de même que la vitesse de solidification. Cette microstructure en détermine les propriétés thermophysiques et thermomécaniques. Selon les travaux de Rendón et Rao (1998), des compositions apparemment similaires peuvent donner des microstructures complètement différentes.

Le comportement mécanique isotherme de la fonte grise est relativement complexe (voir Walton, 1983). En effet, il présente un comportement différent en traction et en compression, ce qui s'explique par la présence de lamelles de graphite précipité dans sa microstructure. De plus, son régime élastique est non linéaire. Il présente aussi une limite élastique dépendant de la pression hydrostatique.

2.4.3.2 Modèle de comportement probable

N'étant soumis qu'à de relativement faibles sollicitations au cours du préchauffage, l'approche de Richard (2000) qui consistait à utiliser une loi de comportement élastoplastique non linéaire avec écrouissage cinématique classique ne sera pas retenue ici. Une loi élastoplastique en J2 avec écrouissage isotrope classique a plutôt été utilisée (voir A.3).

2.4.4 Cuivre

Le cuivre des tiges anodiques ne participant d'aucune façon au comportement mécanique de la cuve, il a été représenté par une loi linéaire élastique.

2.4.5 Carbure de silicium

2.4.5.1 Comportement thermomécanique

Le carbure de silicium utilisé dans la P-155 est lié au nitrure de silicium, pour donner le composé $Si_3N_4 \cdot SiC$. Ce matériau démontre une forte résistance mécanique à haute température, une bonne conductivité thermique, une excellente résistance à la propagation de fissure et à l'oxydation. Il tend aussi à devenir plus résistant à haute température. Les propriétés du composé $Si_3N_4 \cdot SiC$ dépendent de la fraction de Si_3N_4 présente ; en effet, ce dernier est beaucoup plus résistant que le SiC . Les travaux de Dell (1985) montrent un comportement linéaire en flexion à 1350°C jusqu'à 300 MPa environ et une rupture autour de 450 MPa, alors que les résultats publiés par Woodilla *et coll.* (1993) donnent une limite en rupture entre 300 et 500 MPa pour le Si_3N_4 . Le composé $Si_3N_4 \cdot SiC$ présente un module de rupture en flexion de l'ordre de 45 à 75 MPa, tel que le montrent les mesures effectuées par Reddy et Mukerji (1991) et Zhao *et coll.* (2000).

2.4.5.2 Modèle de comportement probable

Dans une cuve d'électrolyse en préchauffage, le carbure de silicium ne sera soumis qu'à des températures inférieures à 300°C. Les sollicitations seront aussi passablement faibles, n'étant pas dans la ligne d'action de l'expansion des cathodes. Par conséquent, une loi linéaire élastique a été utilisée.

2.5 Conclusion

Au risque de se répéter, il est important de bien représenter le comportement des matériaux du côté de la cuve – ceux qui sont dans la ligne d'action de l'expansion des blocs cathodiques. Beaucoup d'efforts ont été consacrés à la caractérisation et la modélisation du béton réfractaire, dont le comportement complexe a été détaillé à la section 2.2. Une loi de comportement relativement simple, incluant pourtant les phénomènes les plus importants, a pu être dégagée. Cependant, un manque de données expérimentales, découlant de contraintes budgétaires, a limité le travail dédié aux autres matériaux complexes, à savoir les réfractaires denses et les isolants poreux cellulaires.

Les réfractaires denses se rapprochent d'un béton réfractaire précuit et fritté dans des conditions très contrôlées. Par conséquent, des essais multiaxiaux selon la température devraient être réalisés afin d'adapter le modèle élastoplastique pour les matériaux granulaires détaillé à l'annexe A.4. De plus, des essais de fluage à chaud devraient aussi être réalisés pour caractériser le comportement visqueux de ces matériaux.

D'un autre côté, des essais multiaxiaux devraient être réalisés sur les isolants poreux cellulaires, particulièrement dans la région du cap. En effet, le calage présenté à la section 2.3.4 en postule

la position et l'érouissage, étant donnée l'absence de données. De plus, tel que visible à la figure 2.1(b), cet isolant poreux cellulaire absorbe une partie de l'eau contenue dans le béton. Ainsi, l'effet de cette eau sur les comportements mécanique et thermique devrait être étudié.

De plus, bien que l'approche simpliste de modélisation des aspects hydriques dans le béton réfractaire se soit révélée acceptable pour des taux de chauffe modérés à rapides, il serait important d'un point de vue scientifique d'explorer un modèle plus complexe ; en effet, une approche multi-constituantes, *i.e.* distinguant les différents types d'eau évaporable (libre, capillaire et physiquement adsorbée), prenant en compte la consommation d'eau par la réaction d'hydratation ainsi que les phénomènes de transport, pourrait être étudiée.

Finalement, le caractère prédictif d'un modèle numérique étant intimement lié à la description du comportement matériel de ses constituantes, un travail d'analyse de sensibilité devrait être mené à l'aide d'un modèle de cuve de Hall-Héroult, afin de guider les efforts de caractérisation à venir.

Chapitre 3

Formes variationnelles et discrétisation

3.1 Généralités

La méthode des éléments finis est celle qui a été retenue pour résoudre les équations différentielles partielles qui représentent le problème thermo-électro-mécanique que nous voulons résoudre. Cette méthode est maintenant mature, et se passe de présentation ; les ouvrages suivants pourront cependant être consultés pour plus de détails : Bathe (1996), Batoz et Dhatt (1992), Dhatt et Touzot (1984) ou encore Crisfield (1991, 1997).

Le problème thermo-électro-mécanique peut être résolu de manière découplée avec recouplage itératif. Dans le cas du béton réfractaire, cela implique cependant de converger une solution *thermo-chimique*. En effet, l'évolution des variables internes a un effet important sur le champ de température, de par la nature endo- ou exothermique des réactions chimiques. Nous présenterons donc les formes variationnelles discrétisées et leur linéarisation pour le problème thermochimique et pour le problème mécanique.

3.2 Problème thermochimique

3.2.1 Forme faible

Rappelons brièvement l'équation différentielle obtenue pour le problème thermochimique (équation (2.20)).

$$\underbrace{\rho C_p \dot{T}}_{\text{Accumulation}} - \underbrace{L_\xi \dot{\xi}}_{\text{Hydratation/désydratation}} - \underbrace{\rho L_w \dot{w}}_{\text{Vaporisation de l'eau libre}} + \underbrace{\text{div} [-\mathbf{K} \text{grad} [T]]}_{\text{Diffusion}} = 0$$

La méthode des résidus pondérés, jumelée à une approximation nodale de la température, sera utilisée pour obtenir la forme variationnelle de cette équation. Une approximation du domaine par éléments finis nous permet d'écrire l'intégrale sur le volume comme étant la somme sur tous les éléments des intégrales élémentaires. Ainsi, la forme intégrale forte de l'équation (2.20) s'exprime donc pour un élément selon (3.1). Notez que W^e représente le travail virtuel sur un élément.

$$W^e = \int_{V^e} \delta T \left(\rho C_p \dot{T} - L_\xi \dot{\xi} - \rho L_w \dot{w} + \text{div} [-\mathbf{K} \text{grad} [T]] \right) dV \quad (3.1)$$

Le terme de diffusion peut être intégré par parties afin de permettre l'introduction des conditions aux frontières, ce qui nous permet d'obtenir l'équation (3.2).

$$\begin{aligned} W^e &= \int_{V^e} \delta T \left(\rho C_p \dot{T} - L_\xi \dot{\xi} - \rho L_w \dot{w} \right) dV \\ &+ \int_{V^e} (\text{grad} [\delta T] \mathbf{K} \text{grad} [T]) dV \\ &- \int_{S^e} (\delta T \mathbf{K} \text{grad} [T]) \cdot \tilde{\mathbf{n}} dS \end{aligned} \quad (3.2)$$

L'intégrale de contour sur S^e peut être identifiée à la fois à une sollicitation surfacique par un flux q_s et aux conditions de rayonnement ou de convection, caractérisées selon les équations (3.3) et (3.4).

$$q_{\text{conv}} = h_{\text{conv}} (T_s - T_\infty) \quad (3.3)$$

$$q_{\text{ray}} = h_{\text{rad}} (T_s^4 - T_\infty^4) \quad (3.4)$$

Ces conditions naturelles s'expriment donc selon (3.5).

$$-\mathbf{K} \text{grad}[T] \cdot \tilde{\mathbf{n}} = \tilde{q} \cdot \tilde{\mathbf{n}} \quad (3.5)$$

Ainsi, en distinguant les surfaces S_q^e sujettes à un flux q_s , S_c^e sujette à la convection et S_r^e soumise à un rayonnement, on obtient la forme variationnelle montrée en (3.6).

$$\begin{aligned} W^e &= \int_{V^e} \delta T \left(\rho C_p \dot{T} - L_\xi \ddot{\xi} - \rho L_w \dot{w} \right) dV \\ &+ \int_{V^e} (\text{grad}[\delta T] \mathbf{K} \text{grad}[T]) dV \\ &- \int_{S_q^e} \delta T q_s dS - \int_{S_c^e} \delta T h_{conv} (T_s - T_\infty) dS - \int_{S_r^e} \delta T h_{rad} (T_s^4 - T_\infty^4) dS \end{aligned} \quad (3.6)$$

3.2.2 Discrétisation

On introduit maintenant des approximations nodales des températures et des températures virtuelles sur un élément, définies aux équations (3.7) et (3.8).

$$T = \langle N \rangle \{ \bar{T} \} \quad (3.7)$$

$$\delta T = \langle N \rangle \{ \delta \bar{T} \} \quad (3.8)$$

où \bar{T} représente les températures nodales, et $\langle N \rangle$, les fonctions de forme. Ces approximations sont maintenant appliquées à l'équation (3.6), ce qui nous permet d'obtenir l'équation (3.9).

$$\begin{aligned} W^e &= \langle \delta \bar{T} \rangle \int_{V^e} \{ N \} \left(\rho C_p \frac{\partial}{\partial t} (\langle N \rangle \{ \bar{T} \}) - L_\xi \ddot{\xi} - \rho L_w \dot{w} \right) dV \\ &+ \langle \delta \bar{T} \rangle \int_{V^e} [\text{grad}[N]] \mathbf{K} [\text{grad}[N]] \{ \bar{T} \} dV \\ &- \langle \delta \bar{T} \rangle \int_{S_q^e} \{ N \} q_s dS \\ &- \langle \delta \bar{T} \rangle \int_{S_c^e} \{ N \} h_{conv} (\langle N \rangle \{ \bar{T} \} - T_\infty) dS \\ &- \langle \delta \bar{T} \rangle \int_{S_r^e} \{ N \} h_{rad} (\langle N \rangle \{ \bar{T} \}^4 - T_\infty^4) dS \end{aligned} \quad (3.9)$$

L'équation (3.9) doit être valide *pour toute variation de température* $\delta\bar{T}$. De plus, une discrétisation du temps doit être faite pour évaluer les termes en taux de variation temporelle ; la discrétisation des taux choisie pour la température est montrée en (3.10).

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \{N\} \langle \dot{T} \rangle \quad (3.10)$$

Les variables internes ξ et w sont discrétisées en temps de la même manière, selon les équations (3.11) et (3.12).

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} = \frac{\xi_{n+1} - \xi_n}{t_{n+1} - t_n} = \frac{\Delta \xi_{n+1}}{\Delta t_{n+1}} \quad (3.11)$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} = \frac{w_{n+1} - w_n}{t_{n+1} - t_n} = \frac{\Delta w_{n+1}}{\Delta t_{n+1}} \quad (3.12)$$

En introduisant ces relations dans l'équation (3.9) on obtient (3.13).

$$\begin{aligned} w^e = & \langle \delta\bar{T} \rangle \int_{V^e} \{N\} \rho C_p \langle N \rangle \langle \dot{T} \rangle dV \\ & - \langle \delta\bar{T} \rangle \int_{V^e} \{N\} L_\xi \frac{\Delta \xi_{n+1}}{\Delta t_{n+1}} dV \\ & - \langle \delta\bar{T} \rangle \int_{V^e} \{N\} \rho L_w \frac{\Delta w_{n+1}}{\Delta t_{n+1}} dV \\ & + \langle \delta\bar{T} \rangle \int_{V^e} [B]^T [\mathbf{K}[B] \{ \bar{T}_{n+1} \}] dV \\ & - \langle \delta\bar{T} \rangle \int_{S_q^e} \{N\} q_s dS \\ & - \langle \delta\bar{T} \rangle \int_{S_c^e} \{N\} h_{conv} (\langle N \rangle \{ \bar{T}_{n+1} \} - T_\infty) dS \\ & - \langle \delta\bar{T} \rangle \int_{S_r^e} \{N\} h_{rad} \left((\langle N \rangle \{ \bar{T}_{n+1} \})^4 - T_\infty^4 \right) dS \end{aligned} \quad (3.13)$$

Notez que la matrice $[B]$ représente l'opérateur gradient, et qu'elle est obtenue à partir des dérivées des fonctions de forme.

3.2.3 Intégration locale des variables internes

Les variables internes ξ et w sont régies par une cinétique similaire (voir les équations (2.6) et (2.12)) généralisée selon la forme montrée en (3.14).

$$\dot{\omega} = \bar{A}_{\omega}(T, \omega) \exp \left[-\frac{E_{a,\omega}}{RT} \right] \quad (3.14)$$

où $\bar{A}_{\omega}(T, \omega)$ est une affinité chimique. Cette équation différentielle ordinaire est non linéaire et doit être résolue numériquement. Ainsi, en utilisant la discrétisation temporelle introduite aux équations (3.11) et (3.12), on construit le résidu montré à l'équation (3.15).

$$\mathfrak{R}(\dot{\omega}) = \Delta\omega_{n+1} - \Delta t_{n+1} \bar{A}_{\omega}(T_{n+1}, \omega_{n+1}) \exp \left[-\frac{E_{a,\omega}}{RT_{n+1}} \right] = 0 \quad (3.15)$$

Les travaux de Hellmich *et coll.* (1999) semblent indiquer qu'il est difficile d'utiliser une méthode de Newton-Raphson standard pour résoudre cette équation ; une méthode sécante semble bien fonctionner selon eux. La construction de la matrice tangente du problème thermochimique demandera l'évaluation des dérivées $\frac{d\omega}{dT}$; elles seront identifiées à partir du résidu présenté à l'équation (3.15). En effet, toujours selon Hellmich *et coll.* (1999), elles doivent être bâties à partir du *problème discrétisé* pour conserver le taux de convergence quadratique de l'algorithme de Newton-Raphson. Cela constitue l'équivalent des matrices tangentes algorithmiques en élastoplasticité (voir entre autres Simo et Taylor, 1985). Ainsi, la dérivée algorithmique est obtenue par l'équation (3.17).

$$\mathfrak{R}(\dot{\omega}) = \frac{\partial \mathfrak{R}}{\partial \omega} d\omega + \frac{\partial \mathfrak{R}}{\partial T} dT = 0 \quad (3.16)$$

$$\frac{d\omega}{dT} = -\frac{\partial \mathfrak{R}}{\partial T} \left(\frac{\partial \mathfrak{R}}{\partial \omega} \right)^{-1} \quad (3.17)$$

3.2.4 Linéarisation

Afin de résoudre le problème thermochimique non linéaire présenté précédemment, on construit un résidu d'équilibre à l'itération k et au pas de temps $n+1$ par une expansion en série de Taylor tronquée au premier terme, telle que montrée en (3.18).

$$\mathfrak{R}^k(T_{n+1}) + \overbrace{\frac{\partial \mathfrak{R}^k(T)}{\partial T_{n+1}}}^{\text{matrice tangente}} \Delta T_{n+1}^{k+1} = 0 \quad (3.18)$$

Le terme ΔT_{n+1}^{k+1} représente la correction de Newton à apporter à la solution T_{n+1} . Le résidu $\mathfrak{R}^k(T_{n+1})$ est donné par la forme variationnelle discrétisée présentée en (3.13); la matrice tangente est construite en dérivant chacun des termes de (3.13) par rapport à la température T_{n+1} . On a donc l'équation (3.19).

$$[K_t] = \overbrace{[K_t^{\text{acc}}]}^{\text{accumulation}} + \overbrace{[K_t^{\xi}]}^{\text{hydratation/déshydratation}} + \overbrace{[K_t^{\text{w}}]}^{\text{eau libre}} + \overbrace{[K_t^{\text{diff}}]}^{\text{diffusion}} + \overbrace{[K_t^{\text{qs}}]}^{\text{flux surfacique}} + \overbrace{[K_t^{\text{conv}}]}^{\text{convection}} + \overbrace{[K_t^{\text{ray}}]}^{\text{rayonnement}} \quad (3.19)$$

Les contributions à la matrice tangente sont données par les équations (3.20) à (3.25).

$$\begin{aligned}
 [K_t^{\text{e,acc}}] &= \frac{\partial \left(\int_{V^e} \{N\} \rho C_p \langle N \rangle \{\dot{T}\} dV \right)}{\partial T_{n+1}} \\
 &= \int_{V^e} \{N\} \frac{\partial \rho C_p}{\partial T} \langle N \rangle \{\dot{T}\} \langle N \rangle dV + \int_{V^e} \{N\} \lambda \rho C_p \langle N \rangle dV \quad (3.20)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 [K_t^{\text{e,\xi}}] &= - \frac{\partial \left(\int_{V^e} \{N\} L_{\xi} \frac{\Delta \xi_{n+1}}{\Delta t_{n+1}} dV \right)}{\partial T_{n+1}} \\
 &= - \int_{V^e} \{N\} L_{\xi} \frac{1}{\Delta t_{n+1}} \left(\frac{d\xi}{dT} \right)_{n+1} \langle N \rangle dV \quad (3.21)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 [K_t^{\text{e,w}}] &= - \frac{\partial \left(\int_{V^e} \{N\} \rho L_w \frac{\Delta w_{n+1}}{\Delta t_{n+1}} dV \right)}{\partial T_{n+1}} \\
 &= - \int_{V^e} \{N\} \rho L_w \frac{1}{\Delta t_{n+1}} \left(\frac{dw}{dT} \right)_{n+1} \langle N \rangle dV \quad (3.22)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 [K_t^{\text{e,diff}}] &= \frac{\partial \left(\int_{V^e} [B]^T [\mathbf{K}[B]] \{\bar{T}_{n+1}\} dV \right)}{\partial T_{n+1}} \\
 &= \int_{V^e} [B]^T \mathbf{K}[B] dV + \int_{V^e} [B]^T \frac{\partial \mathbf{K}}{\partial T} [B] \{\bar{T}_{n+1}\} \langle N \rangle dV \quad (3.23)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 [K_t^{\text{e,conv}}] &= - \frac{\partial \left(\int_{S_c^e} \{N\} h_{\text{conv}} (\langle N \rangle \{\bar{T}_{n+1}\} - T_{\infty}) dS \right)}{\partial T_{n+1}} \\
 &= - \int_{S_c^e} \{N\} h_{\text{conv}} \langle N \rangle dS - \int_{S_c^e} \{N\} \frac{\partial h_{\text{conv}}}{\partial T} (\langle N \rangle \{\bar{T}_{n+1}\} - T_{\infty}) \langle N \rangle dS \quad (3.24)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 [K_t^{e,ray}] &= - \frac{\partial \left(\int_{S_f^e} \{N\} h_{ray} (\langle N \rangle \{\bar{T}_{n+1}\}^4 - T_\infty^4) dS \right)}{\partial T_{n+1}} \\
 &= - \int_{S_f^e} \{N\} 4h_{ray} (\langle N \rangle \{\bar{T}_{n+1}\})^3 \langle N \rangle dS - \int_{S_f^e} \{N\} \frac{\partial h_{ray}}{\partial T} \left((\langle N \rangle \{\bar{T}_{n+1}\})^4 - T_\infty^4 \right) \langle N \rangle dS
 \end{aligned} \tag{3.25}$$

Le facteur λ provient du schéma d'intégration en temps utilisé ; il est égal à $\frac{1}{\Delta t_{n+1}}$ pour Euler implicite, et $\frac{3}{2\Delta t_{n+1}}$ pour Gear. La thèse de Goulet (2004) peut être consultée pour plus de détails à ce sujet.

3.3 Problème mécanique

3.3.1 Formulation variationnelle incrémentale

Rappelons brièvement l'équation d'équilibre mécanique dans un milieu continu V et les conditions sur ses frontières S_u et S_t , qui peut s'exprimer selon les équations (3.26) à (3.28).

$$\text{div} [\sigma] + \overbrace{f_v}^{\text{Forces de volume}} = 0 \tag{3.26}$$

$$\tilde{u} = \tilde{u}_{\text{imposé}} \quad \text{sur } S_u \tag{3.27}$$

$$\tilde{t} = \sigma \cdot \hat{n} = f_s \quad \text{sur } S_t \tag{3.28}$$

Notons que \tilde{u} représente les déplacements et σ , les contraintes de Cauchy. L'ouvrage de Holzapfel (2000) pourra par exemple être consulté pour plus de détails sur les développements suivants, correspondant à une formulation lagrangienne totale.

En appliquant le principe des puissances virtuelles, la forme intégrale faible pour un élément devient donc, après intégration par parties du terme de divergence, l'équation en (3.29).

$$W^e = \int_{V^e} \text{tr} \left[\frac{\partial \delta \tilde{v}}{\partial \tilde{x}} \sigma \right] dV + \int_{V^e} \delta \tilde{v} f_v dV - \int_{S_f^e} \delta \tilde{v} \cdot \tilde{t} dS \tag{3.29}$$

Le terme $\frac{\partial \delta \tilde{v}}{\partial \tilde{x}}$ représente le tenseur gradient de vitesse virtuelle $\delta \mathbf{L}$.

Il est souhaitable de transformer l'intégrale de volume sur V (dans configuration actuelle C_t) en une intégrale sur V_0 (dans la configuration initiale C_0) en utilisant la relation $dV = JdV_0$. Il est possible de réécrire (3.29) selon (3.30).

$$W^e = \int_{V_0^e} \text{tr}[\delta \mathbf{L} \boldsymbol{\tau}] dV_0 + \int_{V_0^e} \delta \tilde{v} f_v J dV_0 - \int_{S_{0,t}^e} \delta \tilde{v} \mathbf{F}^{-T} \tilde{\boldsymbol{\tau}} J dS_0 \quad (3.30)$$

Le tenseur $\delta \mathbf{L}$ est ramené dans la configuration initiale selon (3.31).

$$\delta \mathbf{L} = \frac{\partial \delta \tilde{v}}{\partial \tilde{x}_0} \frac{\partial \tilde{x}_0}{\partial \tilde{x}} = \delta \dot{\mathbf{F}} \mathbf{F}^{-1} \quad (3.31)$$

En utilisant les propriétés de l'opérateur $\text{tr}[\cdot]$, on réarrange l'équation (3.31) pour obtenir l'équation (3.32).

$$\begin{aligned} W^e &= \int_{V_0^e} \text{tr} \left[\delta \dot{\mathbf{F}}^T \overbrace{\mathbf{F} \mathbf{F}^{-1} \boldsymbol{\tau} \mathbf{F}^{-T}}^{\mathbf{S}} \right] dV_0 + \int_{V_0^e} \delta \tilde{v} f_v J dV_0 - \int_{S_{0,t}^e} \delta \tilde{v} \mathbf{F}^{-T} \tilde{\boldsymbol{\tau}} J dS_0 \\ &= \int_{V_0^e} \text{tr} \left[\overbrace{\frac{1}{2} (\delta \dot{\mathbf{F}}^T \mathbf{F} + \mathbf{F}^T \delta \dot{\mathbf{F}})}^{\delta \dot{\mathbf{E}}} : \mathbf{S} \right] dV_0 + \int_{V_0^e} \delta \tilde{v} f_v J dV_0 - \int_{S_{0,t}^e} \delta \tilde{v} \mathbf{F}^{-T} \tilde{\boldsymbol{\tau}} J dS_0 \\ &= \int_{V_0^e} \text{tr} [\delta \dot{\mathbf{E}} : \mathbf{S}] dV_0 + \int_{V_0^e} \delta \tilde{v} f_v J dV_0 - \int_{S_{0,t}^e} \delta \tilde{v} \mathbf{F}^{-T} \tilde{\boldsymbol{\tau}} J dS_0 = 0 \end{aligned} \quad (3.32)$$

Cette équation en *taux de déformation* doit maintenant être intégrée sur un pas de temps fictif afin d'obtenir une forme *incrémentale* compatible avec la résolution numérique. Ainsi, entre les temps t et $t + dt$, elle peut maintenant s'exprimer selon (3.33).

$$\begin{aligned} W^e &= dt \int_{V_0^e} \text{tr} [\delta \dot{\mathbf{E}} : \mathbf{S}] dV_0 + dt \int_{V_0^e} \delta \tilde{u} f_v J dV_0 - dt \int_{S_{0,t}^e} \delta \tilde{u} \mathbf{F}^{-T} \tilde{\boldsymbol{\tau}} J dS_0 \\ W^e &= \int_{V_0^e} \text{tr} [\delta \mathbf{E} : \mathbf{S}] dV_0 + \int_{V_0^e} \delta \tilde{u} f_v J dV_0 - \int_{S_{0,t}^e} \delta \tilde{u} \mathbf{F}^{-T} \tilde{\boldsymbol{\tau}} J dS_0 \end{aligned} \quad (3.33)$$

3.3.2 Linéarisation

La formulation variationnelle incrémentale montrée à l'équation (3.33) doit être linéarisée afin de pouvoir être résolue numériquement. Une expansion en série de Taylor tronquée au premier terme de la forme variationnelle à l'itération k nous permet d'obtenir l'équation (3.34).

$$W(\tilde{\mathbf{u}}^k) + \Delta W(\tilde{\mathbf{u}}^k, \Delta\tilde{\mathbf{u}}^k) = 0 \quad (3.34)$$

La linéarisation par rapport à un champ vectoriel ($\tilde{\mathbf{u}}$) implique une dérivée directionnelle par rapport à un incrément du champ ($\Delta\tilde{\mathbf{u}}$), dite dérivée de Gâteaux, notée $\mathcal{D}[\cdot]$. La linéarisation du premier terme de (3.33) s'exprime donc maintenant selon l'équation (3.35).

$$\Delta W_{\text{int}}^e = \int_{V_0^e} \text{tr} [\mathcal{D}[\delta\mathbf{E}]_{\Delta\tilde{\mathbf{u}}} \mathbf{S} + \delta\mathbf{E} \mathcal{D}[\mathbf{S}]_{\Delta\tilde{\mathbf{u}}}] dV_0 \quad (3.35)$$

La dérivée de Gâteaux des contraintes s'exprime quant à elle selon l'équation en (3.36).

$$\mathcal{D}[\mathbf{S}]_{\Delta\tilde{\mathbf{u}}} = \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{E}} : \mathcal{D}[\delta\mathbf{E}]_{\Delta\tilde{\mathbf{u}}} = \mathbf{C} : \mathcal{D}[\mathbf{E}]_{\Delta\tilde{\mathbf{u}}} \quad (3.36)$$

Le tenseur de quatrième ordre \mathbf{C} est l'opérateur tangent local. La dérivée de Gâteaux du tenseur de Green-Lagrange est donnée à l'équation (3.37).

$$\mathcal{D}[\mathbf{E}]_{\Delta\tilde{\mathbf{u}}} = \text{sym} [\mathbf{F}^T \text{Grad}[\Delta\tilde{\mathbf{u}}]] = \frac{1}{2} [(\mathbf{F}^T \text{Grad}[\Delta\tilde{\mathbf{u}}])^T + \mathbf{F}^T \text{Grad}[\Delta\tilde{\mathbf{u}}]] \quad (3.37)$$

La dérivée de Gâteaux du tenseur de Green-Lagrange virtuel $\delta\mathbf{E}$ est quant à elle donnée par l'équation (3.38).

$$\mathcal{D}[\delta\mathbf{E}]_{\Delta\tilde{\mathbf{u}}} = \text{sym} [\text{Grad}[\Delta\tilde{\mathbf{u}}]^T \text{Grad}[\delta\tilde{\mathbf{u}}]] = \frac{1}{2} [(\text{Grad}[\Delta\tilde{\mathbf{u}}]^T \text{Grad}[\delta\tilde{\mathbf{u}}])^T + \text{Grad}[\Delta\tilde{\mathbf{u}}]^T \text{Grad}[\delta\tilde{\mathbf{u}}]] \quad (3.38)$$

En remplaçant les équations (3.36), (3.38) et (3.37) dans (3.35), l'équation (3.39) peut être obtenue après réarrangement, en utilisant les propriétés de l'opérateur trace, et en considérant la symétrie des contraintes \mathbf{S} .

$$\Delta W_{\text{int}}^e = \int_{V_0^e} (\text{Grad}[\Delta\tilde{\mathbf{u}}] \text{Grad}[\delta\tilde{\mathbf{u}}] : \mathbf{S} + \mathbf{F}^T \text{Grad}[\delta\tilde{\mathbf{u}}] : \mathbf{C} : \mathbf{F}^T \text{Grad}[\Delta\tilde{\mathbf{u}}]) dV_0 \quad (3.39)$$

En utilisant les propriétés des opérateurs Δ et δ et la définition du tenseur \mathbf{E} , l'équation (3.39) peut se réécrire selon l'équation (3.40).

$$\Delta W_{\text{int}}^e = \int_{V_0^e} (\Delta(\delta \mathbf{E}) : \mathbf{S} + \delta \mathbf{E} : \mathbf{C} : \Delta \mathbf{E}) dV_0 \quad (3.40)$$

3.3.3 Discrétisation

Les formes discrètes correspondant aux sollicitations étant bien connues (voir par exemple l'ouvrage de Batoz et Dhatt (1992)), elles ne seront pas détaillées ici. La partie interne du travail virtuel présenté à l'équation (3.33) est montrée à l'équation (3.41).

$$\mathfrak{R}_{\text{int}}^e = \int_{V_0^e} \text{tr}[\delta \mathbf{E} : \mathbf{S}] dV_0 \quad (3.41)$$

On introduit maintenant des approximations nodales des déplacements et des déplacements virtuels sur un élément, définies aux équations (3.42) et (3.43).

$$\tilde{\mathbf{u}} = \langle N \rangle \{ \tilde{\mathbf{u}} \} \quad (3.42)$$

$$\delta \tilde{\mathbf{u}} = \langle N \rangle \{ \delta \tilde{\mathbf{u}} \} \quad (3.43)$$

où $\tilde{\mathbf{u}}$ représente les déplacements nodaux, et $\langle N \rangle$, les fonctions de forme. Il est facile de montrer que les tenseurs des déformations de Green-Lagrange et celui de Green-Lagrange virtuel sont donnés par les équations (3.44) et (3.45).

$$\mathbf{E} = \left[[B_L] + \frac{1}{2} [B_{NL}] \right] \{ \tilde{\mathbf{u}} \} \quad (3.44)$$

$$\delta \mathbf{E} = \left[[B_L] + [B_{NL}] \right] \{ \delta \tilde{\mathbf{u}} \} \quad (3.45)$$

La matrice $[B_L]$ correspond à l'opérateur permettant d'obtenir le tenseur des petites déformations, alors que $\frac{1}{2} [B_{NL}]$ correspond à l'opérateur ajoutant la non-linéarité géométrique à ce tenseur, ce qui permet d'obtenir le tenseur de Green-Lagrange.

Le travail interne de l'équation (3.41) s'exprime donc maintenant selon l'équation (3.46).

$$W^e = \langle \delta \tilde{\mathbf{u}} \rangle \int_{V_0^e} \left[[B_L] + [B_{NL}] \right]^T \mathbf{S} dV_0 \quad (3.46)$$

Il est possible d'exprimer sous forme de produits matrice-vecteurs la première partie de la linéarisation du travail virtuel ΔW_{int}^e donné par l'équation (3.35). D'abord, il faut calculer les tenseurs gradient de déformation virtuelle $\delta \mathbf{F}$ et incrément de gradient de déformation $\Delta \mathbf{F}$ comme des vecteurs, soit respectivement selon les équations (3.47) et (3.48).

$$\{\delta \mathbf{F}\} = [B_\Phi] \{\delta \tilde{\mathbf{u}}\} \quad (3.47)$$

$$\{\Delta \mathbf{F}\} = [B_\Phi] \{\Delta \tilde{\mathbf{u}}\} \quad (3.48)$$

L'opérateur $[B_\Phi]$, permettant d'obtenir le gradient de déformation, est obtenu à partir des dérivées des fonctions de forme. Ensuite, le tenseur des contraintes \mathbf{S} est utilisé pour contruire la matrice $[\mathbf{S}]_\Phi$, telle que définie à l'équation (3.49).

$$[\mathbf{S}]_\Phi = \begin{bmatrix} \mathbf{S} & & \\ & \mathbf{S} & \\ & & \mathbf{S} \end{bmatrix} \quad (3.49)$$

Finalement, la linéarisation du travail interne donnée à l'équation (3.35) devient donc, dans sa version discrète, telle que montrée à l'équation (3.50).

$$\Delta W_{\text{int}}^e = \langle \delta \tilde{\mathbf{u}} \rangle \int_{V_0^e} \left([B_\Phi]^T [\mathbf{S}]_\Phi [B_\Phi] + \left[[B_L] + [B_{NL}] \right]^T C \left[[B_L] + [B_{NL}] \right] \right) dV_0 \quad (3.50)$$

Les formes explicites des opérateurs $[B_L]$, $[B_{NL}]$ et $[B_\Phi]$ sont données par Fallah *et coll.* (2000).

3.4 Conclusion

Les formes variationnelles discrétisées sont la base de la méthode des éléments finis. Une forme consistante avec l'algorithme de Newton-Raphson utilisé pour la résolution globale du problème non linéaire a été présentée pour les sous-problèmes thermo-chimique et mécanique. Du point de vue informatique, l'implémentation de ces *formulations* a été réalisée dans le code FESh++, telle que détaillée par Goulet (2004).

Chapitre 4

Aspects numériques et logiciels

4.1 Généralités

Tel que mentionné par Archer *et coll.* (1999), les logiciels d'analyse par éléments finis basés sur la programmation procédurale – de type FORTRAN – sont en général énormes et complexes, ce qui les rend difficiles à lire, à maintenir et à porter sur de nouvelles plateformes. Selon les auteurs, l'expérience a montré que ces logiciels présentaient les désavantages suivants :

- Une connaissance profonde du code est nécessaire pour n'y apporter ne serait-ce qu'un changement mineur ;
- La réutilisation de lignes de code est presque impossible ;
- Un petit changement dans une portion du logiciel peut avoir des conséquences insoupçonnées ailleurs ;
- Les interdépendances entre les portions du logiciel sont cachées et difficiles à déterminer (code “spaghetti”) ;
- L'intégrité des données n'est pas assurée.

La complexité de ces logiciels étant une caractéristique *intrinsèque*, le paradigme de programmation Orientée-Objet a donc suscité un intérêt toujours croissant ces dernières années (voir par exemple Archer *et coll.*, 1999; Beall et Shephard, 1989, pour une revue de littérature plus exhaustive). En effet, cette approche permet de découper un problème complexe selon des concepts abstraits, issus d'un modèle mathématique ou du monde réel, pour former des *objets*. Ces structures informatiques contiennent les données nécessaires à leur bon fonctionnement (les attributs) et les fonctions qu'elles peuvent utiliser (les méthodes). Ces objets sont développés et validés séparément, ce qui en facilite énormément la mise en oeuvre. Il devient donc possible de faire interagir des objets sans se soucier de leur fonctionnement interne.

Dans le cadre de **START-CUVE**, un logiciel Orienté-Objet, `FESh++`, a donc été développé en C++ (voir Stroustrup, 1991). Cette décision a été prise en raison de la complexité du problème à résoudre, notamment son caractère multiphysique et les relations indirectes que cela suppose. Par exemple, les paramètres d'une loi de comportement mécanique peuvent dépendre de la température (degré de liberté) ou encore de l'état d'hydratation du béton (variable interne scalaire). Le partage d'information efficace entre phénomènes est donc primordial.

L'examen de la littérature sur le domaine révélera le besoin de concevoir et d'implémenter des structures originales et flexibles permettant une gestion efficace des variables internes, des matériaux et des lois constitutives.

4.2 État actuel des connaissances

L'examen de la littérature récente sur la conception Orientée-Objet de logiciels d'analyse par éléments finis nous montre que la gestion des lois constitutives et des matériaux a d'abord été calquée sur la structure classique des codes procéduraux, *i.e.* où presque tout est inclus dans l'élément (voir par exemple Dhatt et Touzot, 1984). C'est le cas de Kong et Chen (1995) qui ont développé un logiciel en C++ où les éléments sont construits par héritage multiple d'une physique et d'une géométrie. La physique comprend la loi de comportement et les paramètres, alors que la géométrie regroupe l'interpolation, le schéma d'intégration numérique et l'élément de référence. Les variables internes sont quant à elles gérées directement dans l'élément. L'inconvénient majeur d'une telle structure est la nécessité de créer un élément par combinaison de physique et de géométrie. Dans le cas de logiciels multiphysiques, cela mène rapidement à une gigantesque librairie d'éléments, tel que l'attestent la plupart des logiciels commerciaux. Les objectifs de faciliter la maintenance et les nouveaux développements ne sont donc pas vraiment remplis.

Les logiciels d'éléments finis multiphysiques Orientés-Objet semblent plutôt rares dans la littérature. Notons cependant Eustache *et coll.* (1996), où il n'y a aucune information sur les matériaux ou les lois constitutives, et Mai et Henneberger (2000), où les lois constitutives sont incluses dans les formulations. Par contre, ces derniers ont inclus une classe générique, `MatProp`, qui permet de gérer des ensembles d'éléments ayant différents ensembles de paramètres.

En grandes transformations, notons entre autres Bao (1999) et Zabarar et Srikanth (1999a,b) qui ont développé un logiciel thermomécanique basé sur `Diffpack`; les lois constitutives y sont forcément thermoélastoplastiques, et lient un état de déformation à un état de contrainte. Un objet indépendant est utilisé pour l'intégration de la loi mécanique. Il n'y a pas non plus de gestion des variables internes en tant que telles, définies spécifiquement dans la loi de comportement, et les paramètres doivent y être entrés directement.

De façon générale, les logiciels décrits dans la littérature sont purement monophysiques. Par exemple, notons entre autres les travaux de Archer (1996) et Archer *et coll.* (1999), où les lois constitutives uniquement mécaniques lient des objets `Action` (contraintes) à des objets `Deformation`. Les matériaux fournissent les paramètres nécessaires aux lois de comportement. Il n'y a pas de gestion des

variables internes en tant que telles, elles sont définies spécifiquement dans la loi de comportement. Le code présenté par Patzàk et Bittnar (2001) et celui présenté par Commend et Zimmermann (2001) implémentent la loi de comportement directement dans le matériau. L'utilisation des patrons de classe ("templates") a été explorée par Bittencourt (2000). Cette fois, les lois constitutives sont directement implémentées dans le matériau, de nature obligatoirement mécanique, et les paramètres sont passés comme un vecteur de valeurs réelles, ce qui s'apparente à une approche FORTRAN.

Les travaux de Besson et Foerch (1997) et Foerch *et coll.* (1997) sont par contre beaucoup plus intéressants dans la mesure où, basée sur des considérations thermodynamiques, une distinction forte est faite entre les variables internes, les paramètres externes et les variables d'état. Aussi, des lois de comportement génériques relient un flux à un grad. Ces lois sont définies dans un objet BEHAVIOR, qui fait office de matériau. Des objets utilitaires représentant le critère de plasticité, la surface d'écoulement et la force d'écrouissage sont aussi détaillés. Par contre, une approche par vecteur d'objets est utilisée, ce qui rend moins évident les couplages indirects ; il faut en effet connaître *l'indice* de la variable d'intérêt dans le vecteur, indice qui peut changer selon la loi de comportement particulière. De plus, bien que les lois de comportement puissent être de n'importe quelle nature, il n'y a qu'une seule méthode d'intégration, donc un couplage de phénomènes semble difficile à implémenter. Par exemple, un comportement thermoélectrique résolu de manière découplée doit pouvoir représenter tour à tour la loi de Fourier et la loi d'Ohm.

En résumé, aucune structure trouvée dans la littérature ne permet de satisfaire tous nos besoins. Qui plus est, aucun des codes présentés plus haut ne permet de traiter les réactions chimiques telles que celles prenant place dans le béton réfractaire (voir la section 2.2.3.2). Cependant, l'approche rationnelle de découpage des concepts à partir de la thermodynamique, ainsi que certaines bonnes idées présentées par Foerch *et coll.* (1997) ont été retenues lors des développements présentés plus loin.

4.3 Concepts et structures

Dans le logiciel FESh++, les contributions élémentaires sont assemblées par des *formulations* (FEShFormulation), qui elles-mêmes contiennent des *termes de formulation* (FEShFormTerm). Ces derniers représentent des termes de l'intégrale de la forme variationnelle. Par exemple, prenons le résidu élémentaire d'une formulation thermo-chimique, obtenu à partir de l'équation (3.13), qui s'exprime selon l'équation (4.1).

$$\begin{aligned}
 \mathfrak{R}^e = & \overbrace{\int_{V^e} \{N\} \rho C_p \langle N \rangle \{\dot{T}\} dV^e}^{\text{Terme de formulation}} \\
 & - \overbrace{\int_{V^e} \{N\} L_\xi \frac{\Delta \xi_{n+1}}{\Delta t_{n+1}} dV^e}^{\text{Terme de formulation}} \\
 & - \overbrace{\int_{V^e} \{N\} \rho L_w \frac{\Delta w_{n+1}}{\Delta t_{n+1}} dV^e}^{\text{Terme de formulation}} \\
 & + \overbrace{\int_{V^e} [B]^T \mathbf{K} [B] \{\bar{T}_{n+1}\} dV^e}^{\text{Terme de formulation}} \\
 & - \dots
 \end{aligned} \tag{4.1}$$

Prenons par exemple le terme de diffusion, montré en (4.2).

$$\mathfrak{R}_{\text{diffusion}}^e = \int_{V^e} [B]^T \mathbf{K} [B] \{\bar{T}_{n+1}\} dV^e = \int_{V^e} [B]^T \{Q(\{\bar{T}_{n+1}\})\} dV^e \tag{4.2}$$

où $\{\bar{T}\}$ est le vecteur de températures nodales, $[B]$ est l'opérateur gradient, \mathbf{K} est le tenseur de conductivité thermique et $\{Q\}$ est le flux thermique.

Il est possible de démontrer que le terme de formulation de diffusion est presque identique pour d'autres phénomènes de même nature, par exemple la conduction électrique ou le transfert de masse ; la seule vraie différence réside dans le calcul du flux $[Q]$. De la même manière, pour une certaine cinématique, l'évaluation du résidu mécanique est toujours la même, la différence entre les modèles de comportement étant la façon particulière de calculer les contraintes. Ainsi, il semble évident qu'une structure bien conçue pour le calcul au point d'intégration permettra la réutilisation maximale du code et facilitera l'implémentation de nouveaux modèles de comportement.

Suivant Foerch *et coll.* (1997), la thermodynamique des processus irréversibles et la mécanique des milieux continus ont été prises comme cadre théorique pour concevoir la structure informatique Orientée-Objet. Les définitions suivantes ont été adoptées :

Variable interne

Variable définissant l'état énergétique d'un milieu, mais dont l'évolution ne peut être déduite des équations d'équilibre, d'un bilan d'énergie ou d'un bilan d'entropie ; une loi d'évolution doit donc leur être adjointe.

Variable d'état

Variable définissant l'état énergétique d'un milieu et dont l'évolution est déduite des équations d'équilibre, d'un bilan d'énergie ou d'un bilan d'entropie. Il y a deux types de variables d'état : les *forces thermodynamiques* et les *flux thermodynamiques* ; le lien entre les deux est assuré par une *loi de comportement*. Les variables d'état n'étant pas des degrés de liberté du milieu, elles seront traitées par les mêmes objets que les variables internes, pour des raisons de stockage et d'accès informatique ; c'est le cas des contraintes, calculées par loi de comportement, et des déformations, calculées à partir de degrés de liberté.

Loi constitutive

Ensemble d'équations reliant un flux à sa force thermodynamique conjuguée.

Loi d'évolution

Ensemble d'équations permettant de mettre à jour une variable interne ; n'existe pas chez Foerch *et coll.* (1997).

Matériau

Regroupement de lois constitutives, de lois d'évolutions et des paramètres nécessaires à leur définition complète ; n'existe pas chez Foerch *et coll.* (1997).

Les lois d'évolution pour les variables internes tensorielles, par exemple certaines composantes de déformation, sont en général intimement liées au calcul du flux thermodynamique, dans ce cas les contraintes. Pour cette raison, les lois d'évolution sont spécialisées au cas des variables scalaires seulement, devenant ainsi des *cinétiques*.

Ces concepts se traduisent de manière informatique par les objets abstraits suivants :

FEShISV	Variables internes et d'état ;
FEShCstvLaw	Lois constitutives ;
FEShIVKinetics	Lois d'évolution pour les variables internes scalaires (cinétiques) ;
FEShCapacity	Capacités (par exemple la capacité thermique) ;
FEShMaterial	Matériaux.

Ainsi, les variables internes sont associées aux éléments, ce qui leur permet d'être accessible de partout. À chaque élément est associé un matériau, par l'intermédiaire d'une *étiquette* informatique. De plus, les matériaux *contiennent* les lois constitutives, les cinétiques et les capacités. Ces objets interviendront lors du calcul sur un point d'intégration.

À un niveau plus élevé, les formulations contiennent un maillage (constitué des éléments et de leurs noeuds) sur lequel cette formulation s'applique. Pour assembler leur contribution à un problème donné, elles bouclent sur les éléments de leur maillage, et pour chaque élément, elles bouclent sur leurs termes de formulation. Du point de vue algorithmique, le calcul de la contribution d'une formulation s'effectue donc selon l'algorithme 4.1.

Algorithme 4.1: Algorithme de calcul de la contribution d'une formulation

Pour Chaque élément

Construit une matrice et/ou vecteur élémentaire à partir de l'élément courant

Demande le matériau correspondant à l'élément courant

Pour Chaque terme de formulation

Calcule la contribution du terme :

Demande la loi constitutive et/ou la capacité et/ou la cinétique nécessaire(s) au matériau

(Demande les variables internes de l'élément si nécessaire)

Pour Chaque point d'intégration

Calcule le flux à l'aide de la loi constitutive OU

Calcule la capacité à l'aide de la capacité OU

Utilise la cinétique pour mettre à jour une variable interne

Calcule la contribution requise pondérée par le poids d'intégration

Fin Pour

Ajoute la contribution dans le vecteur et/ou la matrice élémentaire

Fin Pour

Assemble la contribution élémentaire dans le vecteur global et/ou la matrice globale.

Fin Pour

Avec ceci en tête, les structures de ces objets seront maintenant examinées en détail.

4.4 Variables internes et d'état

Les variables internes et d'état doivent être facilement accessibles par tous les phénomènes physiques ; par exemple, le degré d'hydratation d'un béton, calculé par la formulation thermo-chimique, détermine à la fois son domaine d'élasticité et sa rigidité mécanique. De plus, dans un processus itératif de résolution d'un problème non linéaire, il est nécessaire de conserver au moins deux valeurs historiques : la dernière valeur convergée et la valeur en cours de calcul. Aussi, étant donnée l'intégration numérique sur un élément par le biais de calcul en un point d'intégration, les variables internes doivent donc être définies en ces points. Finalement, les variables internes peuvent être de plusieurs natures, par exemple scalaire ou tensorielle. Notez que les tenseurs bidimensionnels sont distincts des tenseurs tridimensionnels pour des raisons d'efficacité du stockage.

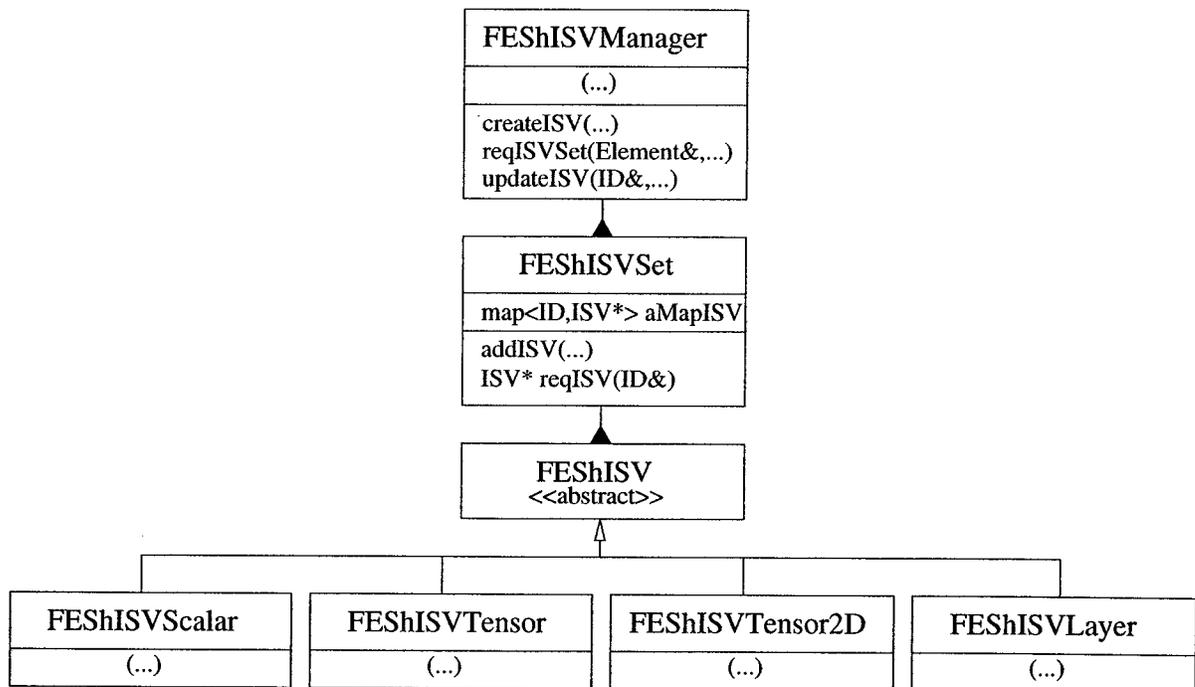


Figure 4.1: Structure des objets de gestion des variables internes et d'état

Pour toutes ces raisons, l'objet de variable interne stocke un tableau de valeurs, c'est-à-dire une valeur pour chaque point d'intégration et chaque valeur historique. Les variables internes sont identifiées par une chaîne de caractères, ce qui permet d'en ajouter dans un problème sans avoir à recompiler la librairie. Toutes les variables internes d'un élément sont maintenues par un *conteneur*, le `FEShISVSet`. Par conséquent, en ayant en main le `FEShISVSet`, on a accès à *toutes* les variables internes de l'élément, rendant possible facilement le couplage indirect entre phénomènes. Ces conteneurs sont créés, mis à jour, manipulés et détruits par un gestionnaire, le `FEShISVManager`. Cette structure diffère totalement de celle de Foerch *et coll.* (1997), où le tout est maintenu dans un vecteur de variables. Le diagramme de classe de la librairie est montré schématiquement à la figure 4.1.

Le terme de formulation a donc un pointeur sur le gestionnaire de variables internes et d'état, auquel il demande le conteneur pour l'élément en cours de calcul ; il peut ensuite demander la variable interne qui l'intéresse à partir d'un identificateur.

Par ailleurs, l'allocation des variables internes est confiée aux formulations. En effet, ces dernières contiennent le gestionnaire et lui demande d'allouer les variables internes ou d'état dont elles ont besoin pour travailler, par exemple les contraintes et les déformations totales pour une formulation en mécanique ; elles demandent aussi aux matériaux les variables *supplémentaires* qu'elles doivent allouer, telles que les déformations plastiques par exemple, et demandent donc au gestionnaire de les allouer seulement pour les éléments associés à ce matériau. Cet aspect sera traité en détail à la section 4.7. Cela permet entre autres de traiter l'élasticité et l'élastoplasticité *avec la même formulation*, ce qui maximise la flexibilité et la réutilisation du code, en plus d'éviter de stocker des variables inutiles.

Il y a plusieurs façons de mettre à jour une variable interne ou d'état. En général, ce sont les lois constitutives qui intègrent les variables internes. Les variables d'état, par exemple les déformations totales, sont quant à elles mises à jour par un terme de formulation. Par contre, la mise à jour peut être confiée à un objet représentant la *cinétique* associée à cette variable lorsqu'il s'agit de l'intégration temporelle d'une variable interne scalaire. Dans ce cas, c'est la formulation qui demande l'intégration, puisqu'il faut s'assurer que la valeur de la variable est bien celle de l'itération courante afin que les termes de formulation soient thermodynamiquement cohérents. La section suivante s'attarde à expliquer le fonctionnement de ces objets cinétiques.

4.5 Cinétiques

Tel que mentionné précédemment, les variables internes scalaires sont intégrées temporellement en utilisant un objet de *cinétique*. Ces objets sont conçus pour représenter une réaction chimique prenant place dans un corps. Elles ont un effet thermique de par leur *chaleur latente de réaction*. En général, elles peuvent être exprimées en termes d'une ou d'un ensemble d'équations différentielles ordinaires. Par exemple, rappelons l'équation (3.15), qui représente le résidu discrétisé en temps selon un schéma de différence finie avant, et intégré selon un schéma de Euler implicite, d'une cinétique thermoactivée de type Arrhénius :

$$\mathfrak{R}(\dot{\omega}) = \Delta\omega_{n+1} - \Delta t_{n+1} \bar{A}_{\omega}(T_{n+1}, \omega_{n+1}) \exp\left[-\frac{E_{a,\omega}}{T_{n+1}}\right] = 0 \quad (4.3)$$

où ω est la variable interne elle-même, \bar{A} est l'affinité chimique poussant la réaction et $E_{a,\omega}$ est l'énergie d'activation normalisée.

Ceci a été implémenté dans la classe `FEShIVKArrheniusStd`. Les réactions d'hydratation peuvent être représentées de cette manière (voir la section 2.2.3.2 et les travaux de Hellmich *et coll.* (1999)). La comparaison entre l'intégration analytique et numérique par cette classe est montrée à la figure 4.2.

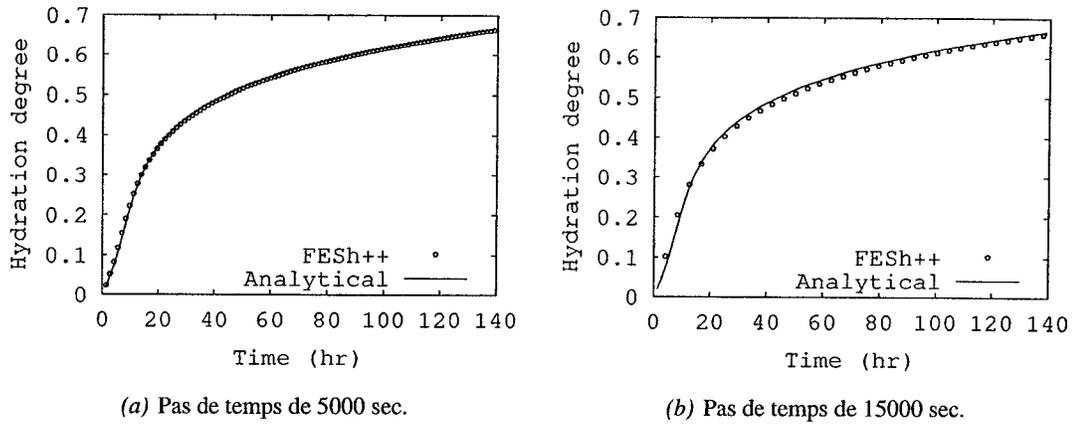


Figure 4.2: Intégration d’une variable interne scalaire par une cinétique d’Arrhénius, cas isotherme tiré de Hellmich *et coll.* (1999)

4.6 Lois constitutives

4.6.1 Structure de base

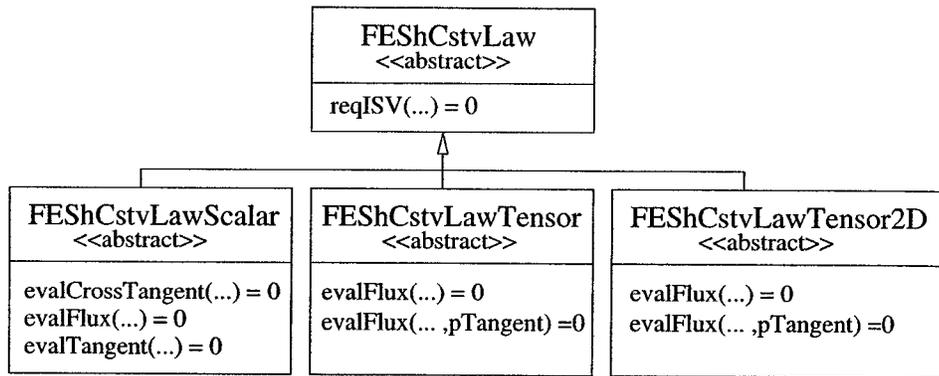


Figure 4.3: Structure de base des lois constitutives

Rappelons qu’une loi constitutive relie un flux à une force thermodynamique. Une structure plus complexe que celle de Foerch *et coll.* (1997) a été conçue, en raison de la nature multiphysique et de la possibilité de résolution couplée ou découplée du problème à traiter. Ainsi, de façon générale, on peut distinguer des lois *scalaires*, reliant un vecteur au gradient d’un champ scalaire – Fourier, Ohm, Fick, etc. – et des lois *tensorielles*, reliant un tenseur à un autre tenseur – Hooke, élastoplasticité, etc. La structure informatique choisie respecte ceci, tel que montré à la figure 4.3. Notez que les lois

tensorielles 2D sont distinguées des lois 3D en raison de leur nature spécifique (contraintes planes, déformations planes ou axisymétrie).

La classe abstraite de base `FEShCstvLaw` a une méthode virtuelle `reqISV(...)` qui ne fait rien du tout, mais qui peut être redéfinie dans les classes dérivées. C'est là l'astuce permettant d'obtenir les variables internes supplémentaires qui doivent être allouées dans la formulation. Par exemple, une loi élastoplastique en J2 retournerait une variable tensorielle pour les déformations plastiques et une variable scalaire pour la déformation plastique équivalente.

4.6.2 Lois scalaires

Les lois classiques de Fourier, Ohm et Fick sont toutes dérivées de la classe abstraite de base `FEShCstvLawScalar` (voir la figure 4.3). Leur implémentation est relativement aisée, si ce n'est une légère subtilité qui apparaît dans le cas de phénomènes fortement couplés. En effet, la linéarisation du terme de diffusion électrique (voir l'équation (4.2)) par rapport au champ de température est non nulle, tel que montré à l'équation (4.4).

$$\begin{aligned} \Delta \mathcal{R}^e(T) &= \int_{V^e} [B]^T \frac{\partial [Q(\{\bar{V}_{n+1}\})]}{\partial T} dV^e \\ &= \int_{V^e} [B]^T \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial T} [B] \{\bar{V}_n\} dV^e \end{aligned} \quad (4.4)$$

où $\{\bar{V}\}$ est le vecteur des voltages nodaux, T , la température et \mathbf{G} , la conductivité électrique. La méthode `evalCrossTangent(...)` est donc conçue pour calculer le terme $\partial [Q(A)] / \partial B$, où A et B sont des champs scalaires distincts. Cette possibilité de couplage fort, bien qu'elle soit simple à implémenter du point de vue informatique, n'est pas prévue pour le cas des lois tensorielles, en raison de la grande complexité des développements mathématiques que cela suppose.

4.6.3 Lois tensorielles

La complexité des modèles de comportement permettant de relier les contraintes aux déformations implique une conception plus élaborée. Dans le contexte de problèmes multiphysiques, plusieurs composantes de déformations supplémentaires doivent être prises en compte ; elles sont reliées à des champs scalaires (expansion thermique), des variables internes scalaires (expansions/retraits chimiques) ou encore au temps (fluage). Cependant, les lois constitutives mécaniques relient toujours les contraintes à la *déformation mécanique*, et la classe `FEShStrainKeeper`, montrée à la figure 4.4, a donc été créée pour gérer ces composantes de déformation supplémentaires, selon l'équation en (4.5).

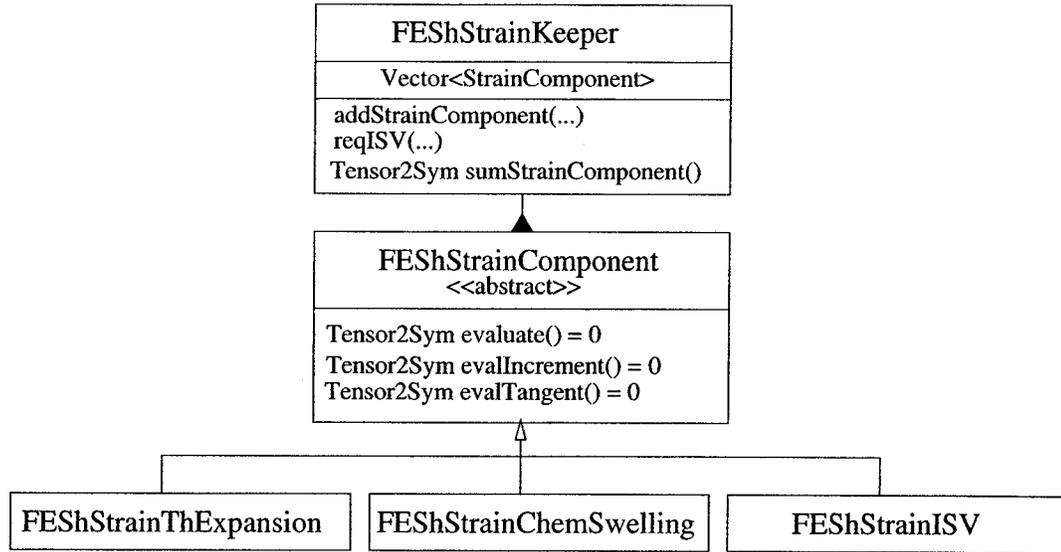


Figure 4.4: Diagramme de classe du gestionnaire de composantes de déformation

$$\underbrace{\mathbf{E}^m}_{\text{Déformation mécanique}} = \mathbf{E}^e (+\mathbf{E}^P + \dots) = \mathbf{E}^{Total} - \overbrace{\sum_{i=1}^n \mathbf{E}_i}^{\text{Gérée par FEShStrainKeeper}} \text{ additionnelle} \quad (4.5)$$

La classe `FEShStrainThExpansion` représente une composante sphérique de déformation liée à un champ scalaire (analogue à la déformation thermique), la classe `FEShStrainChemSwelling` représente une composante sphérique de déformation liée à une variable interne scalaire, alors que la classe `FEShStrainISV` est une composante générique dont la valeur est directement celle d'une variable interne tensorielle. L'utilité de cette classe sera montrée un peu plus loin.

Ainsi, une classe de base pour les lois constitutives mécaniques intégrant des contraintes a été créée par héritage multiple, tel que montré à la figure 4.5.

Avec cette structure, les couplages indirects sont *ajoutés* à une loi constitutive existante, à l'aide de la méthode `addStrainComponent(...)`. Tout dépendant de la nature totale ou incrémentale de la loi constitutive, la somme des déformations supplémentaires ou la somme des incréments de ces déformations peut être obtenue du parent `FEShStrainKeeper`. Leur contribution à l'opérateur tangent local peut aussi être ajoutée. Par conséquent, les mêmes termes de formulation sont utilisés à la fois pour des problèmes monophysiques et pour des problèmes couplés indirectement.

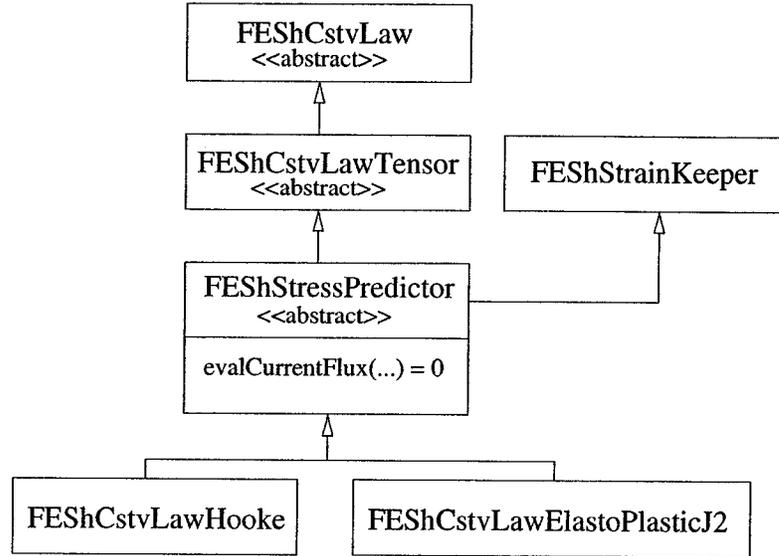


Figure 4.5: Diagramme de classe de l'intégrateur de contraintes

4.6.3.1 Aspects temporels

Tel que discuté à la section 2.2.3.7, le comportement temporel des déformations doit aussi être pris en compte. Le cas idéal du point de vue informatique serait évidemment *d'ajouter* ce comportement à une loi existante. C'est ce que permet la structure de prédicteur de contrainte présentée plus haut.

Rappelons d'abord l'expression du modèle de Burger généralisé tiré de Fafard *et coll.* (2001) et exprimé en relaxation, tel que présenté à l'équation (4.6).

$$\begin{aligned}
 \mathcal{G}^{-1,a} : \mathbf{E}^a + \mathcal{H}^a : \mathbf{E}^a &= \mathbf{S} \\
 \mathcal{G}^{-1,v} : \mathbf{E}^v &= \mathbf{S}
 \end{aligned} \tag{4.6}$$

Ensuite, il peut être démontré (voir l'annexe B.2.2) qu'une fois discrétisées en temps par un schéma de différence finie avant, les équations en (4.6) peuvent être exprimées selon (4.7).

$$\begin{bmatrix} \mathcal{G}^{-1,a} + \Delta t (\mathcal{H}^a + \bar{\mathcal{H}}) & \Delta t \bar{\mathcal{H}} \\ \Delta t \mathcal{H} & \mathcal{G}^{-1,v} + \Delta t \bar{\mathcal{H}} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \Delta \mathbf{E}_{t+\Delta t}^a \\ \Delta \mathbf{E}_{t+\Delta t}^v \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \Delta t \bar{\mathbf{S}} - \Delta t \mathcal{H}^a : \mathbf{E}_t^a \\ \Delta t \bar{\mathbf{S}} \end{Bmatrix}$$

$$\begin{aligned}\bar{\mathbf{S}}_{t+\Delta t} &= \bar{\mathcal{H}} : \left(\mathbf{E}_{t+\Delta t}^{\text{Total}} (-\mathbf{E}_{t+\Delta t}^P - \dots) - \sum_{i=1}^n \mathbf{E}_{t,t+\Delta t}^{\text{additionnelle}} - \mathbf{E}_t^v - \mathbf{E}_t^a \right) \\ &= \bar{\mathcal{H}} : (\mathbf{E}^m (-\mathbf{E}_{t+\Delta t}^P - \dots) - \mathbf{E}_t^v - \mathbf{E}_t^a)\end{aligned}\quad (4.7)$$

tel que $\bar{\mathbf{S}}$ représente les contraintes évaluées à l'état courant des composantes de déformation, *i.e.* sans intégration et avec les deux composantes visqueuses du dernier pas de temps convergé, et $\bar{\mathcal{H}}$ représente le tenseur d'élasticité courant. Ces deux quantités sont calculées par la méthode `evalCurrentFlux(...)` du prédicteur de contraintes de la figure 4.5.

La classe `FEShCstvLawViscousBurger` est dérivée directement de la classe de base abstraite `FEShCstvLawTensor`; en effet, elle n'intègre pas de contraintes, mais prédit plutôt l'évolution de deux variables internes tensorielles, $\bar{\mathbf{E}}^a$ et $\bar{\mathbf{E}}^v$. Les contraintes sont calculées par un objet de prédicteur de contraintes, représentant $\bar{\mathcal{H}}$, et pouvant tenir compte de composantes de déformation additionnelles *en série* – expansion thermique, déformation plastique, etc. Comme la nouvelle classe `FEShCstvLawViscousBurger` ajoute deux composantes de déformation de type `FEShStrainISV` (voir la figure 4.4) à son attribut prédicteur de contraintes, le comportement visqueux est effectivement *ajouté* à n'importe quelle loi prédisant des contraintes.

De plus, l'opérateur tangent consistant local, défini par les équations (4.8) à (4.14), est construit à partir de l'opérateur tangent du prédicteur de contraintes, ce qui permet de conserver le taux de convergence quadratique de l'algorithme global de Newton-Raphson.

$$x_a = \mathcal{G}^{-1,a} + \Delta t \left(\mathcal{H}^a + \bar{\mathcal{H}} \right) \quad (4.8)$$

$$x_v = \mathcal{G}^{-1,v} + \Delta t \bar{\mathcal{H}} \quad (4.9)$$

$$x_{va} = x_v - (\Delta t)^2 \mathcal{H} x_a^{-1} \mathcal{H} \quad (4.10)$$

$$x_{av} = x_a - (\Delta t)^2 \mathcal{H} x_v^{-1} \mathcal{H} \quad (4.11)$$

$$x_{aa} = I - \Delta t \mathcal{H} x_a^{-1} \quad (4.12)$$

$$x_{vv} = I - \Delta t \mathcal{H} x_v^{-1} \quad (4.13)$$

$$C = \bar{C} - \Delta t \mathcal{H} (x_{va}^{-1} x_{aa} + x_{av}^{-1} x_{vv}) \bar{C} \quad (4.14)$$

$$C \approx \bar{C} - \Delta t \bar{C} (x_{va}^{-1} x_{aa} + x_{av}^{-1} x_{vv}) \bar{C} \quad (4.15)$$

avec C l'opérateur tangent total, et \bar{C} , l'opérateur tangent du prédicteur de contraintes (voir l'annexe B.2.2). L'intégration temporelle des déformations visqueuses est faite par un schéma d'Euler implicite, en résolvant itérativement le système d'équations en (4.7). L'algorithme de résolution utilisé est détaillé à l'algorithme 4.2.

Algorithme 4.2: Algorithme d'intégration des déformations visqueuses permanentes et réversibles de la classe `FEShCstvLawViscousBurger`

Répète

Évalue $\bar{\mathcal{H}}$ et $\bar{\mathbf{S}}$ avec `evalCurrentFlux(...)` de l'intégrateur de contraintes (avec \mathbf{E}_t^a et \mathbf{E}_t^v);

Évalue x_a (équation (4.8));

Évalue x_v (équation (4.9));

Évalue $[X] = \begin{bmatrix} x_a & \Delta t \bar{\mathcal{H}} \\ \Delta t \bar{\mathcal{H}} & x_v \end{bmatrix}$;

Inverse $[X]$;

Calcule le vecteur de droite $\{RHS\} = \begin{Bmatrix} \Delta t \bar{\mathbf{S}} - \Delta t \mathcal{H}^a : \mathbf{E}_t^a \\ \Delta t \bar{\mathbf{S}} \end{Bmatrix}$;

Calcule $\begin{Bmatrix} \Delta \mathbf{E}_{t+\Delta t}^a \\ \Delta \mathbf{E}_{t+\Delta t}^v \end{Bmatrix} = [X]^{-1} \{RHS\}$;

Évalue les contraintes à l'aide de l'intégrateur de contraintes (avec $\mathbf{E}_{t+\Delta t}^a$ et $\mathbf{E}_{t+\Delta t}^v$);

Calcule la norme $= \max \left(\frac{\|\mathbf{E}_{new,t+\Delta t}^a - \mathbf{E}_{old,t+\Delta t}^a\|}{\|\mathbf{E}_{old,t+\Delta t}^a\|}, \frac{\|\mathbf{E}_{new,t+\Delta t}^v - \mathbf{E}_{old,t+\Delta t}^v\|}{\|\mathbf{E}_{old,t+\Delta t}^v\|} \right)$;

Tant que norme > tolérance

Il s'agit donc dans les faits d'un algorithme itératif de prédiction viscoélastique des composantes de déformation visqueuses avec rabattement subséquent des contraintes. Cette prédiction est donc en retard d'une itération sur le calcul des contraintes, ce qui implique qu'une simulation viscoélastique linéaire convergera en deux itérations au lieu d'une seule. Cela semble être un inconvénient mineur en regard de la flexibilité de cette approche.

Ainsi, pour construire une loi avec un comportement visqueux de type Burger, il s'agit d'allouer un objet de la classe `FEShCstvLawViscousBurger`, puis de lui assigner *n'importe quel intégrateur de contraintes*. Il est possible de faire la même chose avec d'autres modèles de comportement visqueux. Par exemple, un modèle à une seule chaîne de Maxwell a aussi été implémenté (voir l'annexe B.1).

4.6.3.2 Outils élastoplastiques

Suivant Foerch *et coll.* (1997), une structure d'objets utilitaires a aussi été mise en place afin de faciliter l'implémentation de lois de comportement élastoplastiques. Rappelons les postulats de l'élastoplasticité classique, à savoir l'existence d'une surface de plasticité f , d'un potentiel d'écoulement g et d'un potentiel d'écrouissage h (voir A.2.1). Les notions de *potentiel plastique* (surfaces de charge, d'écoulement et d'écrouissage) et de *force d'écrouissage* ont été représentées par des objets abstraits, soit respectivement `FEShPlasticPotential` et `FEShPlasticHrdngForce`. Par ailleurs, notez aussi qu'une classe utilitaire, nommée `FEShPlasticWillamWarnke`, a été créée afin d'encapsuler la fonction de Willam-Warnke (voir par exemple Etse et Willam, 1994) et le calcul de ses dérivées.

Les potentiels contiennent donc une ou plusieurs forces d'écrouissage leur permettant de déterminer leur état courant. À chaque force d'écrouissage, notée ζ , est associée une *variable d'écrouissage* scalaire, que nous noterons ici χ . La loi d'écoulement pour les déformations plastiques \mathbf{E}^P et la variable d'écrouissage χ , de même que le module d'écrouissage A , détaillés à l'annexe A.2.1, s'écrivent selon les équations (4.16) à (4.18).

$$d\mathbf{E}^P = d\lambda \frac{\partial g}{\partial \mathbf{S}} \quad (4.16)$$

$$d\chi = d\lambda \frac{\partial h}{\partial \zeta} \quad (4.17)$$

$$A = - \frac{\partial f}{\partial \zeta} \frac{\partial \zeta}{\partial \chi} \frac{\partial h}{\partial \zeta} \quad (4.18)$$

Rappelons aussi la construction de l'opérateur tangent élastoplastique local algorithmique consistant, expliqué à l'annexe A.2.3, et qui s'écrit selon l'équation (4.22).

$$\mathbf{n} = \frac{\partial f}{\partial \mathbf{S}} \quad (4.19)$$

$$\mathbf{m} = \frac{\partial g}{\partial \mathbf{S}} \quad (4.20)$$

$$\chi_{ep} = \left[I + d\lambda \mathcal{H} \frac{\partial^2 g}{\partial \mathbf{S}^2} \right]^{-1} \quad (4.21)$$

$$\mathcal{C} = \mathcal{H} \chi_{ep} - \frac{\mathcal{H} \chi_{ep} : \mathbf{n} \mathbf{m} : \mathcal{H} \chi_{ep}}{\mathbf{n} : \mathcal{H} \chi_{ep} : \mathbf{m} + A} \quad (4.22)$$

Les potentiels plastiques doivent donc pouvoir fournir leurs dérivées par rapport aux contraintes et à la force d'écrouissage, ainsi que leur dérivée seconde par rapport aux contraintes (hessien). Quant à elles, les forces d'écrouissage doivent aussi pouvoir fournir leur dérivées par rapport à leur variable d'écrouissage. Les structures informatiques montrées aux figures 4.6 et 4.7 ont donc été adoptées.

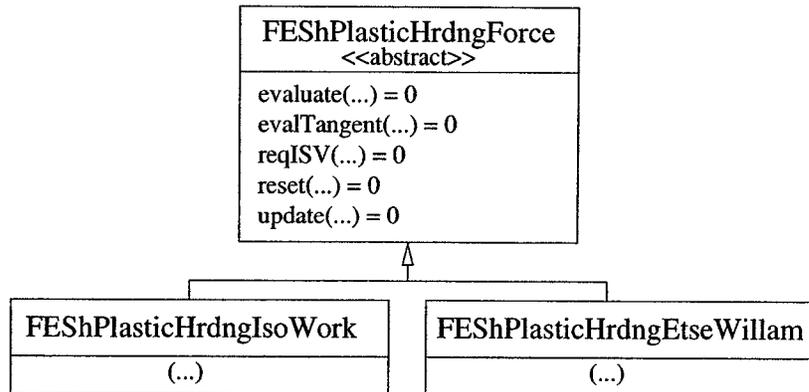


Figure 4.6: Diagramme de classe des forces d'érouissage (tronqué)

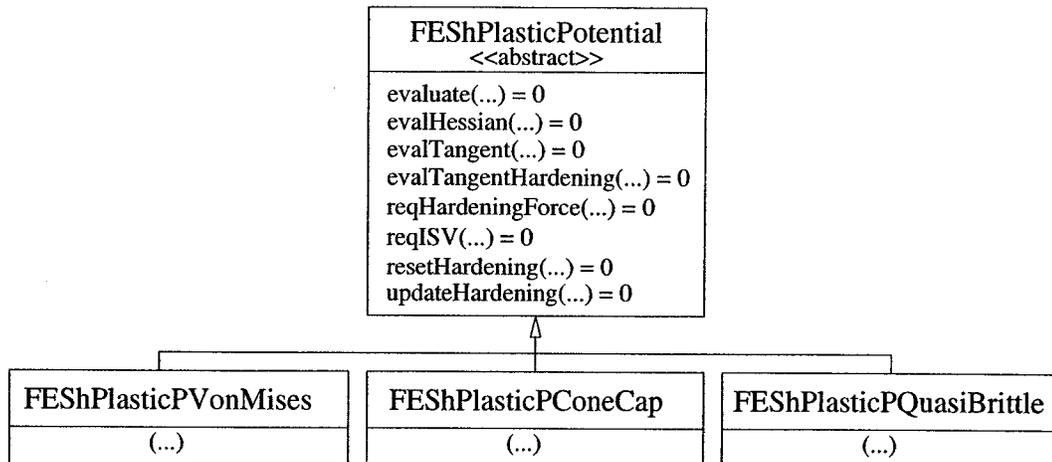


Figure 4.7: Diagramme de classe des potentiels plastiques (tronqué)

Ces deux diagrammes sont incomplets, dans la mesure où seulement deux ou trois classes dérivées sont données en exemple.

Il est possible de démontrer (voir A.2) que les algorithmes d'intégration des contraintes sur un pas sont *indépendants* du modèle particulier. Il est donc intéressant de développer une loi constitutive élastoplastique *générique*, telle que celle implémentée dans la classe `FEShCstvLawElastoPlasticStd`.

Cet objet *est* un intégrateur de contraintes. Il a été conçu pour travailler avec les objets abstraits de potentiels plastiques et il encapsule les algorithmes d'intégration des contraintes. Il contient donc un tenseur de quatrième ordre représentant \mathcal{H} , le tenseur d'élasticité, ainsi que trois objets de potentiels plastiques – f , g et h . Le diagramme de classe est montré à la figure 4.8.

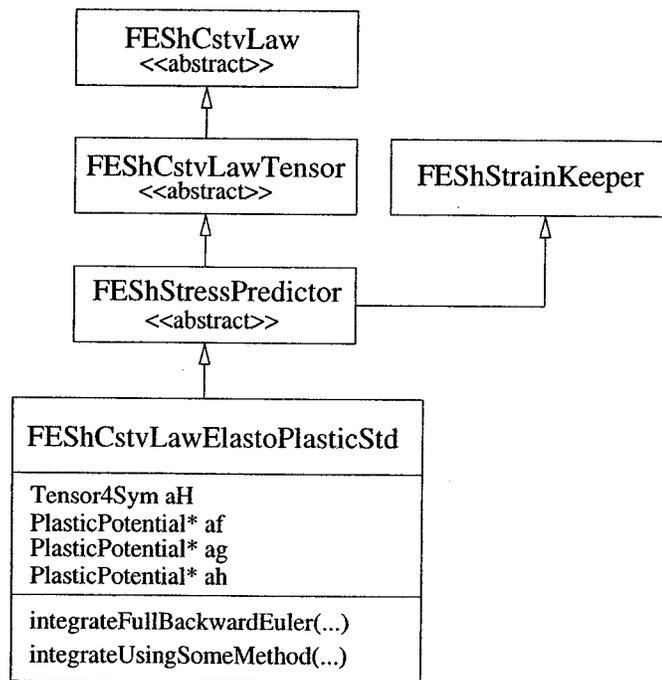


Figure 4.8: Diagramme de classe de la loi élastoplastique standard

Cette classe redéfinit la méthode `reqISV(...)` du patriarche `FEShCstvLaw` (figure 4.3), en demandant à ses potentiels les variables supplémentaires à allouer (figure 4.7) – qui eux le demanderont à leur(s) force(s) d'érouissage (figure 4.6) – puis en ajoutant une variable tensorielle pour les déformations plastiques. Tel qu'expliqué à la section 4.6.1, cela permet donc d'utiliser les mêmes formulations pour l'élasticité et pour l'élastoplasticité, puisqu'il n'y a que la loi de comportement qui change.

Ainsi, différents algorithmes d'intégration des contraintes sont implémentés à l'aide de méthodes de type `integrateXXX(...)`, et la méthode désirée est choisie grâce à un pointeur de méthode. Il est donc facile d'*ajouter* des méthodes d'intégration à mesure que le besoin s'en fait sentir. L'algorithme 4.3 illustre l'algorithme de Euler implicite.

Algorithme 4.3: Algorithme d'intégration d'Euler implicite dans FShCstvLawElastoPlasticStd

Calcule la déformation mécanique ; $(\mathbf{E}_{t+\Delta t}^m = \mathbf{E}_{t+\Delta t} - \text{sumStrainComponents}(\dots))$;

Calcule les contraintes en b, par une prédiction élastique : $\mathbf{S}_B = \mathcal{H} : (\mathbf{E}_{t+\Delta t}^m - \mathbf{E}_t^P)$;

Remet les forces d'écrouissage à leur dernière valeur convergée ; (Pour f,
af->resetHardening(...) et ainsi de suite)

Calcule le critère f_B ($f_B = \text{af->evaluate}(\dots)$)

Si $f_B >$ tolérance Alors

Calcule les dérivées \mathbf{n} et \mathbf{m} ; (équations (4.19) et (4.20),
 $\mathbf{n} = \text{af->evalTangent}(\dots)$, $\mathbf{m} = \text{ag->evalTangent}(\dots)$)

Demande la force d'écrouissage courante ; ($\text{lHrdngForce} = \text{af->reqHardeningForce}(\dots)$)

Calcule le module d'écrouissage A ; (équation (4.18),
 $\text{ldfdZeta} = \text{af->evalTangentHardening}(\dots)$; $\text{ldhdZeta} = \text{ah->evalTangentHardening}(\dots)$;
 $\text{ldzetadchi} = \text{lHrdngForce->evalTangent}(\dots)$; $A = \text{ldfdZeta} * \text{ldhdZeta} * \text{ldzetadchi}$;)

Calcule la première correction tel que $d\lambda = \frac{f_B}{\mathbf{n} : \mathcal{H} : \mathbf{m} + A}$;

Calcule les contraintes tel que $\mathbf{S}_C = \mathbf{S}_{t+\Delta t} = \mathbf{S}_B - d\lambda \mathcal{H} : \mathbf{m}$;

Met à jour l'écrouissage ; ($\text{ah->updateHardening}(\dots)$) ;

Calcule \mathbf{n} et \mathbf{m} ;

Calcule le nouveau critère f_C ; ($f_C = \text{af->evaluate}(\dots)$)

Répète

Calcule le résidu tel que $\mathbf{r} = \mathbf{S}_C - (\mathbf{S}_B - d\lambda \mathcal{H} : \mathbf{m})$;

Calcule le hessien $\frac{\partial \mathbf{m}}{\partial \mathbf{S}} = \frac{\partial^2 g}{\partial \mathbf{S}^2}$; ($\text{ag->evalHessian}(\dots)$)

Calcule la matrice X_{ep} ; (équation (4.21))

Calcule le module d'écrouissage A ;

Calcule la correction $\delta d\lambda = \frac{f_C - \mathbf{n} : X_{ep} : \mathbf{r}}{\mathbf{n} : X_{ep} : \mathcal{H} : \mathbf{m} + A}$

Calcule les nouvelles contraintes tel que $\mathbf{S}_{C+} = X_{ep} : \mathbf{r} + \delta d\lambda X_{ep} : \mathcal{H} : \mathbf{m}$;

Met à jour l'écrouissage $\text{ah->updateHardening}(\dots)$;

Met à jour le multiplicateur plastique selon $d\lambda_+ = \delta d\lambda$;

Calcule les dérivées \mathbf{n} et \mathbf{m} ;

Calcule le nouveau critère f_C ;

Tant que $f_C <$ tolérance

Met à jour les déformations plastiques tel que $\mathbf{E}_{t+\Delta t}^P = \mathbf{E}_t^P + d\lambda \mathbf{m}$;

Sinon

$\mathbf{S}_{t+\Delta t} = \mathbf{S}_B$;

Fin Si

Cet algorithme est en fait l'implémentation de l'algorithme de type Crisfield (1991), tel que présenté en A.2.2, et il est réalisé dans la méthode `integrateFullBackwardEuler(...)` de la classe `FEShCstvLawElastoPlasticStd`. Cette méthode permet d'exploiter au maximum les possibilités de l'intégrateur de contraintes `FEShStressPredictor`, qui est un parent de la classe, ainsi que celles des outils élastoplastiques présentés précédemment.

À l'aide de cette classe, des comportements aussi différents que ceux d'un acier (J2 et associée), d'un béton (voir A.4) ou d'un isolant poreux cellulaire (voir A.5) peuvent être intégrés *avec le même objet*. En effet, la mise en oeuvre d'un nouveau modèle de comportement élastoplastique implique l'implémentation d'un ou de plusieurs potentiels plastiques, et d'une ou plusieurs forces d'écroutissage, ce qui est une tâche relativement simple.

Cependant, pour des soucis de performance, une classe spécialisée pour la plasticité en J2 et associée, `FEShCstvLawElastoPlasticJ2` a été créée. Son diagramme de classe est montré à la figure 4.9.

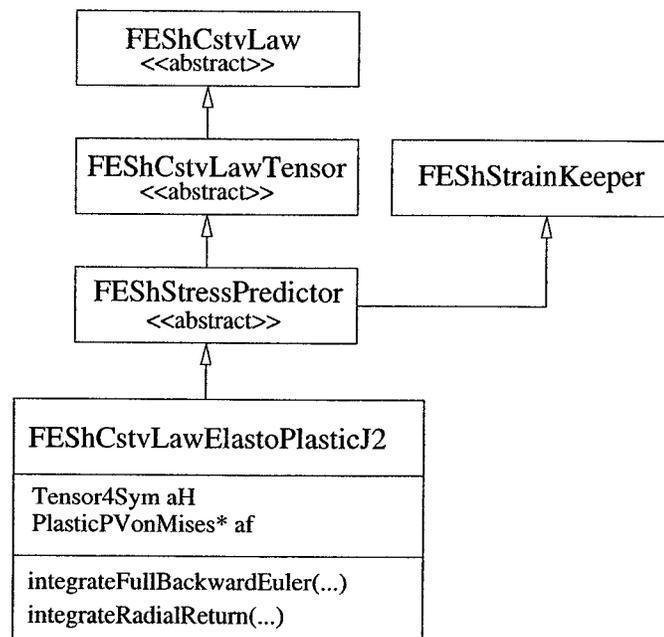


Figure 4.9: Diagramme de classe de la loi élastoplastique en J2

L'algorithme d'intégration par retour radial, tel que détaillé en A.3.4, a été implémenté dans la méthode `integrateRadialReturn(...)`. En effet, la direction d'écoulement de la prédiction élastique est la même que celle une fois rabattue, puisque le critère de von Mises est indépendant de la pression et de l'angle de Lode. Cela se traduit par la résolution itérative d'un système algébrique *scalaire*, ce qui est beaucoup plus rapide que la résolution tensorielle présentée dans l'algorithme 4.3. Sa mise en oeuvre est montrée à l'algorithme 4.4.

Algorithme 4.4: Algorithme d'intégration par Retour Radial dans FEShCstvLawElastoPlasticJ2

Calcule la déformation mécanique ; $(\mathbf{E}_{t+\Delta t}^m = \mathbf{E}_{t+\Delta t} - \text{sumStrainComponents}(\dots))$;
 Calcule les contraintes en b, par une prédiction élastique : $\mathbf{S}_B = \mathcal{H} : (\mathbf{E}_{t+\Delta t}^m - \mathbf{E}_t^p)$;
 Remet les forces d'écrouissage à leur dernière valeur convergée ; $(\text{af.resetHardening}(\dots))$
 Calcule le critère f_B ($f_B = \text{af.evaluate}(\dots)$)
Si $f_B > \text{tolérance}$ **Alors**
 Calcule la dérivée \mathbf{n} ; (équation (4.19))
 $\mathbf{n} = \text{af.evalTangent}(\dots)$
 Demande la force d'écrouissage courante ; $(\text{lHrdngForce} = \text{af.reqHardeningForce}(\dots))$
 Calcule le module d'écrouissage A ; (équation (4.18),
 $A = \text{lHrdngForce.evalTangent}(\dots)$)
 Calcule $\frac{\partial f}{\partial \mathbf{S}_B} : \mathcal{H} : \frac{\partial f}{\partial \mathbf{S}_B} = 3\mu$ (équation (A.43))
 Calcule la première correction tel que $d\lambda = \frac{f_B}{3\mu + A}$;
 Calcule les contraintes tel que $\mathbf{S}_C = \mathbf{S}_{t+\Delta t} = \mathbf{S}_B - d\lambda \mathcal{H} : \mathbf{n}$;
 Met à jour l'écrouissage ; $(\text{af.updateHardening}(\dots))$;
 Calcule la pression hydrostatique p_B ; (équation (A.45))
 Calcule le déviateur des contraintes \mathbf{S}'_B ; (équation (A.46))
 Calcule la contrainte équivalente q_B ; (équation (A.37))
 Calcule le nouveau critère f_C ; ($f_C = \text{af.evaluate}(\dots)$)
 Répète
 Calcule la pondération $\alpha = 1 - \frac{3\mu d\lambda}{q_B}$;
 Reconstruit les contraintes $\mathbf{S}_C = p_B \mathbf{1} + \alpha \mathbf{S}'_B$; (équation (A.48))
 Calcule le nouveau critère f_C ;
 Calcule le nouveau module d'écrouissage A_C ;
 Calcule l'incrément du multiplicateur plastique $\delta d\lambda = \frac{f_C}{3\mu + A_C}$ (équation (A.49))
 Met à jour l'écrouissage $\text{af.updateHardening}(\dots)$;
 Met à jour le multiplicateur plastique selon $d\lambda \leftarrow d\lambda + \delta d\lambda$;
 Tant que $(\delta d\lambda / d\lambda) < \text{tolérance}$
 Met à jour les déformations plastiques tel que $\mathbf{E}_{t+\Delta t}^p = \mathbf{E}_{t+\Delta t}^p + d\lambda \mathbf{n}$;
Sinon
 $\mathbf{S}_{t+\Delta t} = \mathbf{S}_B$;
Fin Si

4.7 Matériaux

4.7.1 Structure de base

Les matériaux servent ainsi de conteneurs de lois de comportement, de lois d'évolution pour les variables internes et des paramètres nécessaires à leur calcul. Ils sont aussi identifiés par une chaîne de caractères. On leur fait donc la requête de la `FEShCstvLaw` associée à un champ de calcul `FEShDOFField`, de la `FEShCapacity` associée à un champ de calcul `FEShDOFField`, et de la `FEShIVKinetics` associée à une variable interne.

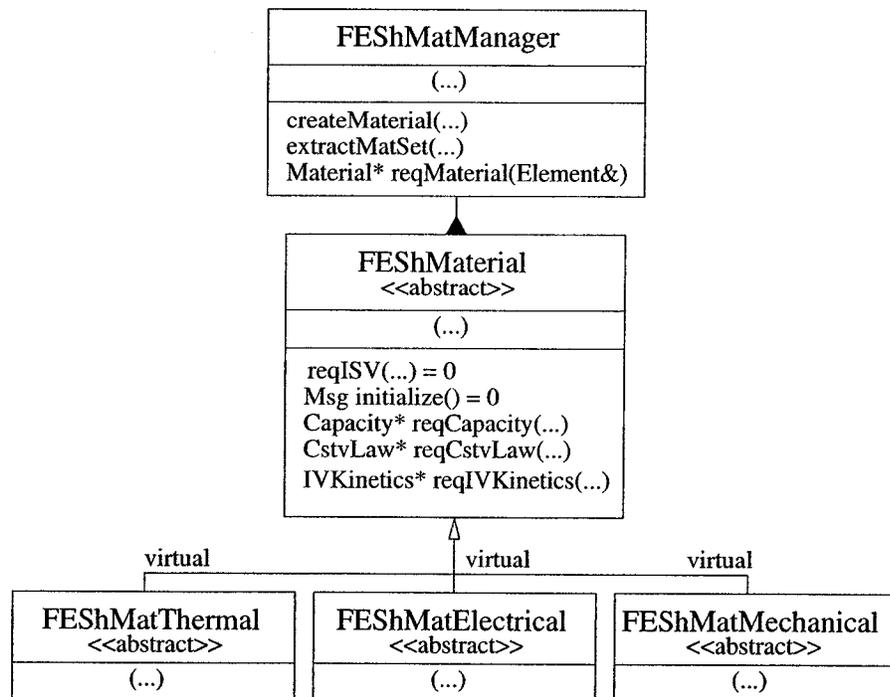


Figure 4.10: Structure de base des matériaux

Encore une fois, les opérations de création, de destruction et de stockage des matériaux sont confiées à un gestionnaire, le `FEShMatManager`. Ce dernier contient des pointeurs de matériaux génériques liés à une étiquette informatique. Lors de l'importation des éléments du maillage, une étiquette représentant leur association à un matériau leur est assignée. La requête du matériau associé à un élément passe donc par le `FEShMatManager`. Il n'y a donc *qu'un seul* matériau en mémoire, peu importe le nombre d'éléments qui lui fait référence.

La hiérarchie des matériaux comporte des objets abstraits pour représenter un matériau thermique, électrique, et mécanique, afin de forcer la même interface ; la dérivation de ces classes est virtual

pour permettre l'héritage multiple. Le `virtual` évite d'avoir deux instances de `FEShMaterial` et élimine ainsi les ambiguïtés à la compilation.

4.7.2 Spécialisation

La construction d'un matériau multiphysique se fait souvent par héritage multiple, tel que le montre cet exemple typique à la figure 4.11.

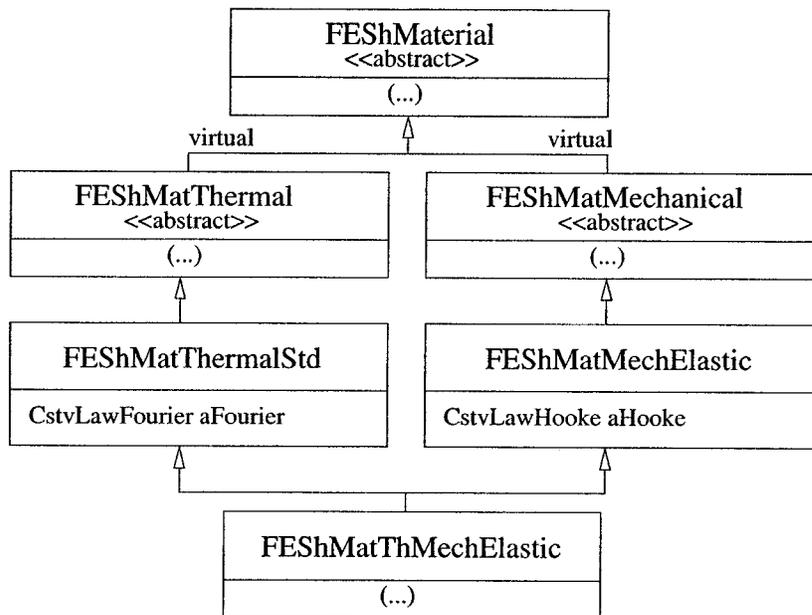


Figure 4.11: Matériau thermoélastique

La nouvelle classe `FEShMatThMechElastic` est un matériau thermique autant qu'elle est un matériau mécanique ; elle peut donc moduler son comportement, par exemple en ajoutant une composante de déformation d'expansion thermique à la loi de Hooke de son parent mécanique, puisque cette loi est un prédicteur de contraintes (voir la figure 4.5). L'héritage multiple permet donc la résolution couplée ou découplée d'un problème multiphysique, puisque le matériau peut réagir comme n'importe lequel de ses parents, ou comme lui-même, *i.e* comme le couplage des deux.

Une autre caractéristique importante des matériaux est le fait qu'ils constituent l'interface aux lois constitutives, aux cinétiques et aux capacités pour les termes de formulation et les formulations. Par exemple, ils ont une méthode `reqISV(...)` qui permet d'assembler les variables internes supplémentaires à allouer pour ce matériau en demandant tour à tour aux lois constitutives, aux capacités et aux cinétiques stockées par le matériau. Au risque de se répéter, cela permet l'utilisation des mêmes formulations et termes de formulation, peu importe les détails de comportement.

Finalement, une grande variété de matériaux peut être créée à partir d'un petit nombre de lois constitutives, de cinétiques et de capacités. Des phénomènes peuvent être facilement ajoutés à un matériau existant. Le matériau constitue donc un véritable *modèle de comportement*.

4.7.3 Couplage par variables internes

Il est possible de spécialiser encore plus un matériau. Par exemple, à partir d'un matériau de type `FEShMatThermalStd` on dérive un matériau réactif, *i.e* avec une cinétique et une variable interne, nommée ω . Le diagramme de classe est montré à la figure 4.12.

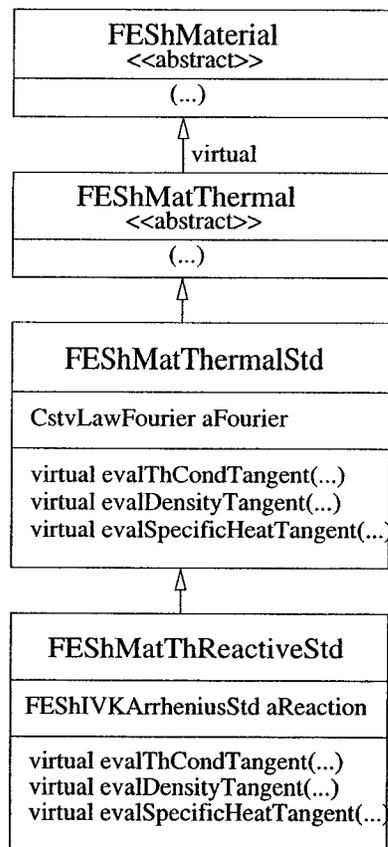


Figure 4.12: Matériau thermoréactif standard

La classe dérivée contient un objet de type `FEShIVKArrheniusStd`, qui correspond à la cinétique détaillée à la section 4.5.

Afin de permettre le calcul correct de la matrice tangente, il importe de bien calculer les dérivées

des paramètres des lois de comportement. Par exemple, rappelons l'équation (3.23), qui présente la contribution élémentaire du terme de diffusion.

$$\begin{aligned} [k_t^{e,\text{diff}}] &= \frac{\partial (\int_{V^e} [B]^T \mathbf{K}[B] \{\bar{T}_{n+1}\} dV^e)}{\partial T_{n+1}} \\ &= \int_{V^e} [B]^T \mathbf{K}[B] dV^e + \int_{V^e} [B]^T \frac{\partial \mathbf{K}}{\partial T} ([B] \{\bar{T}_{n+1}\}) \langle N \rangle dV^e \end{aligned}$$

Ainsi, on considère *a priori* que la conductivité thermique dépend à la fois de la température et de la variable interne ω . Comme ω dépend indirectement de la température par sa cinétique, la dérivée complète est donc montrée en (4.23).

$$\frac{\partial \mathbf{K}}{\partial T} = \frac{\partial \mathbf{K}}{\partial T} + \frac{\partial \mathbf{K}}{\partial \omega} \frac{d\omega}{dT} \quad (4.23)$$

Le terme $\frac{d\omega}{dT}$ est une dérivée *algorithmique* obtenue de la cinétique correspondante (voir par exemple l'équation (3.17) pour une cinétique d'Arrhénius standard). La dérivée "algébrique" de la conductivité thermique par rapport à la température ne nous donne pas tous les termes, puisque seul le matériau peut savoir que ω dépend aussi de la température. Afin de pallier à cette lacune, des méthodes virtuelles ont été introduites dans `FEShMatThermalStd` :

```
virtual evalThCondTangent(...);
virtual evalSpecificHeatTangent(...);
virtual evalDensityTangent(...);
```

Ces méthodes calculent la dérivée "algébrique" dans le parent `FEShMatThermalStd`. Elles sont redéfinies dans l'enfant `FEShMatThReactiveStd`, qui *ajoute* la contribution $\frac{\partial \mathbf{K}}{\partial \omega} \frac{d\omega}{dT}$ à celle du parent.

L'utilisation du virtuel dans `FEShMatThermalStd` permet donc de conserver l'encapsulation des données : en aucun cas `FEShMatThReactiveStd` n'a accès aux attributs de son parent. Le calcul des tangentes est donc confié au *matériau*, et les lois constitutives les utilisent bêtement. Par conséquent, en assignant directement les tangentes à la loi de Fourier et à la capacité thermique, on évite d'avoir à créer de nouvelles classes de lois constitutives à chaque fois qu'une nouvelle combinaison de variables internes est utilisée par un matériau.

Encore une fois, un nouveau phénomène est *ajouté* à un matériau existant, ce qui permet de maximiser la réutilisation du code et de faciliter l'entretien du logiciel.

4.8 Conclusion

Des bibliothèques de gestion des variables internes, des lois constitutives et des matériaux ont été conçues puis implémentées avec succès dans le code FESh++. Des concepts rationnels issus de la thermodynamique ont guidé le processus de conception, menant à la création de structures maximisant la réutilisation de code et permettant *l'ajout* de couplages ou de phénomènes à des objets déjà existants.

En particulier, des objets de cinétiques, permettant de faire évoluer temporellement une variable interne scalaire, ont été créés. Cet aspect est original vis-à-vis la littérature sur le sujet.

De plus, la séparation des lois constitutives et des matériaux permet de traiter efficacement les problèmes multiphysiques de manière couplée ou découplée, contrairement à la structure présentée par Foerch *et coll.* (1997) qui fusionne ces deux concepts. En effet, dans le code FESh++, les matériaux agissent comme des conteneurs intelligents de lois constitutives, de cinétiques, de capacités, et de leurs paramètres, ce qui leur permet *d'ajouter* les bons couplages à ces objets. Par le fait même, les matériaux constituent de réels modèles de comportement multiphysique construits à partir d'objets existants. Cela constitue aussi un aspect original.

Finalement, la flexibilité des structures proposées a été démontrée ; les concepts d'*intégrateur de contraintes* et de *composantes de déformation* permettent d'utiliser les mêmes lois constitutives dans un contexte multiphysique en tenant correctement compte des couplages indirects entre les phénomènes. L'implémentation du comportement visqueux de Burger en est un exemple frappant ; la simulation d'un comportement visco-élastique et visco-élastoplastique à partir du même objet est montrée à l'annexe B.2.3. Le développement du modèle de Maxwell est quant à lui détaillé à l'annexe B.1, et des exemples de simulation sont illustrés à l'annexe B.1.3.

Chapitre 5

Validation du modèle numérique

5.1 Généralités

Tout modèle numérique doit être confronté à des résultats expérimentaux afin de s'assurer de sa validité dans un contexte industriel ; cette étape permet d'éprouver ses limites et de révéler certaines pistes d'amélioration. Ceci étant admis, la difficulté d'instrumentation *in situ* – particulièrement la mesure du déplacement relatif entre les matériaux – d'une cuve industrielle, ainsi que la taille présumée du maillage d'un quart de cuve, ont mené à la réalisation d'un exercice de validation à petite échelle pour les fins de cette thèse.

Le banc d'essai **BERTA** – Banc d'Essai de Résistance Thermomécanique Alcan, voir Allaire (1993, 1994) – a donc été mis à jour et modifié de manière à en améliorer la précision. Il s'agit essentiellement d'un système de mise en charge dans le plan horizontal, *via* des poutres en I d'acier, reliées par des tiges filetées de fort calibre. Entre ces poutres, un arrangement de matériaux peut être installé dans l'enceinte expérimentale ; un four est ensuite placé sur ceux-ci, afin de fournir un chauffage unidirectionnel et perpendiculaire à l'axe de chargement mécanique, simulant ainsi le mode de transmission de la chaleur dans une cuve de Hall-Héroult. Une vue d'ensemble du banc en opération est montrée à la figure 5.1, où le chapeau contenant le four et les tiges de chargement sont visibles.

Ce chapitre sera donc entièrement consacré à l'analyse d'un essai de validation dans le banc **BERTA**.

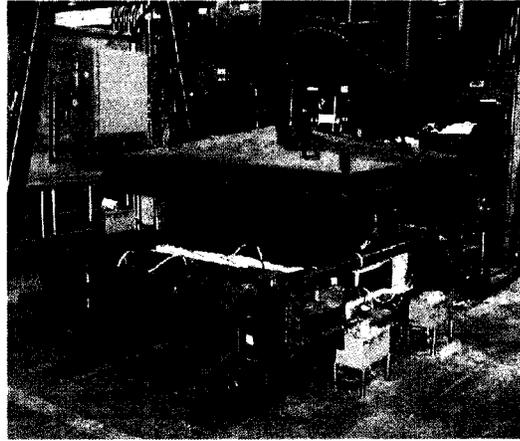


Figure 5.1: Banc d'essai **BERTA**, vue d'ensemble tirée de Even (2003)

5.2 Présentation du montage de validation

5.2.1 Banc d'essai BERTA

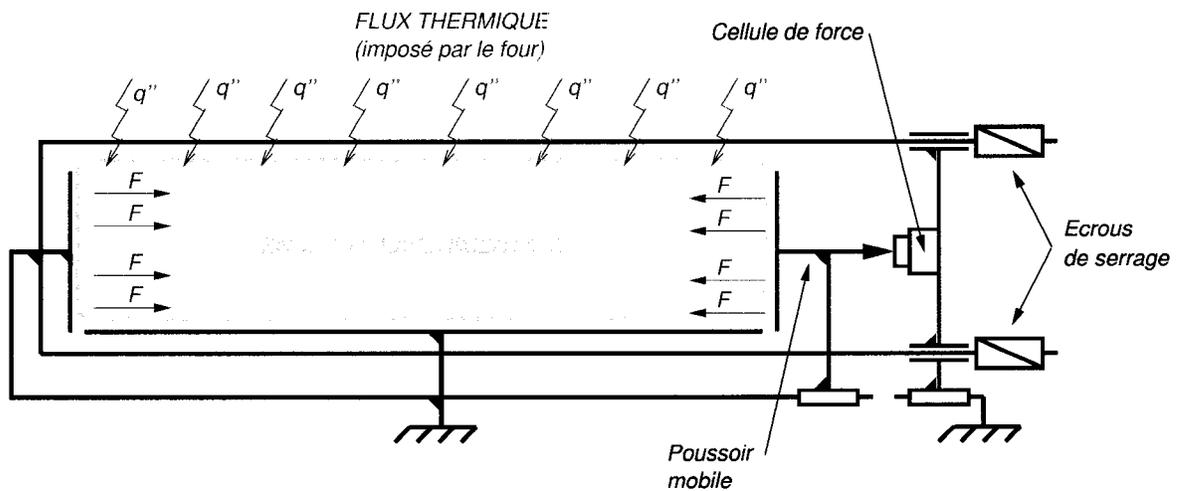


Figure 5.2: Banc d'essai **BERTA**, schéma cinématique tiré de Even (2003)

Le schéma cinématique du banc est montré à la figure 5.2. Le chargement est imposé en serrant manuellement les écrous de serrage qui entraînent le poussoir mobile. Ce dernier repose sur des glissières à roulements, éliminant ainsi le frottement dans l'axe de chargement. Les forces de réaction développées par les matériaux de l'enceinte ainsi mis en compression sont lues par deux cellules de

charge en parallèle. Le banc est d'ailleurs ancré au sol afin de prévenir les mouvements de corps rigide.

La structure du banc est instrumentée de plusieurs thermocouples. Le four, contrôlé par un régulateur électronique, a une puissance de 34 kW et peut atteindre près de 1500°C.

5.2.2 Enceinte d'essais

Tel que le montre la figure 5.3, l'enceinte entre les poutres de chargement en I est remplie d'un mélange de briques denses (**BRO**) et isolantes (**BIL**) dans l'axe de chargement, et de briques isolantes sur les côtés (**BIL**); les briques denses servent à transmettre le chargement mécanique des poutres en I aux matériaux testés. Le montage de validation en tant que tel est constitué d'un assemblage de carbone (**C**), de pâte monolithique (**P**) et de béton réfractaire (**B**).

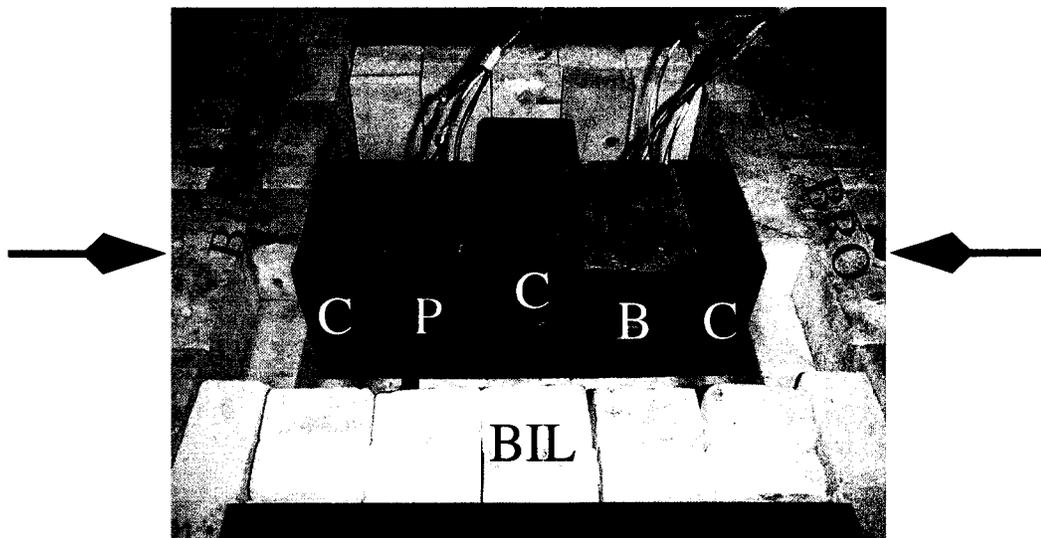


Figure 5.3: Montage de validation dans l'enceinte de BERTA

Le béton, la pâte à brasquer et le carbone sont instrumentés de thermocouples, comme le sont les briques de l'enceinte. Les fils des thermocouples du béton et de la pâte à brasquer sont visibles sur la figure 5.3.

L'espace latéral entre les matériaux du montage et les briques isolantes du côté est rempli de laine isolante (figure 5.4(a)), puis de la laine isolante est posée sur le dessus des briques et de tous les matériaux, excepté sur le carbone central, tel que le montre la figure 5.4(b). De cette manière, la chaleur du four est absorbée principalement par le carbone central, puis diffusera horizontalement dans la pâte et le béton réfractaire, ce qui correspond grossièrement à ce qui se passe dans une cuve de Hall-Héroult en préchauffage.



(a) Laine isolante latérale

(b) Laine isolante sur le dessus

Figure 5.4: Isolation dans l'enceinte de BERTA

Les matériaux de l'enceinte sont instrumentés de thermocouples de type K, selon le schéma montré à la figure 5.5. Pour chaque position A à P, trois thermocouples ont été placés, soit à un pouce du fond (25.4 mm), au centre (4.5 pouces ou 114.3 mm du fond) et à 8 pouces du fond (203.2 mm).

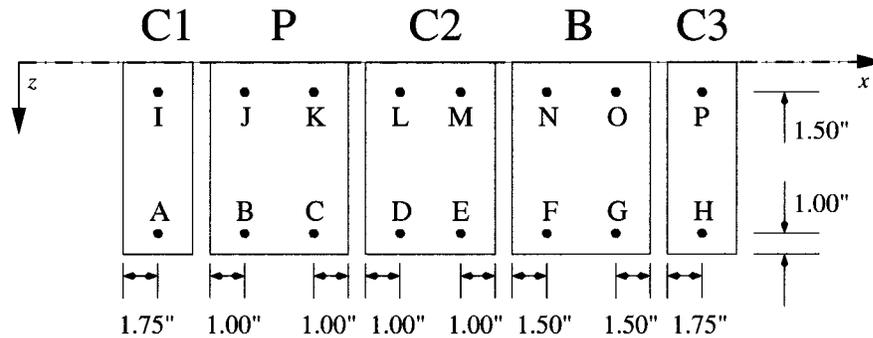


Figure 5.5: Positionnement des thermocouples dans le montage de validation, vue du dessus

La nomenclature des thermocouples suit la convention suivante : MATERIAU-POSITION-HAUTEUR. Par exemple, les trois thermocouples dans le carbone de gauche (C1) à la position A sont dénotés ainsi :

- C1A1
- C1A4.5
- C1A8

5.2.3 Modèle élément fini

Le modèle élément fini de **BERTA** réalisé lors d'un stage de fin d'étude d'ingénieur par Even (2003) a été utilisé comme base de départ. Le maillage de la structure d'un demi-banc, tenant donc compte de la symétrie dans le plan perpendiculaire à celui de l'application de la charge et perpendiculaire au plancher, est montré à la figure 5.6. Ce modèle d'environ 30 000 éléments a été validé autant en thermique qu'en mécanique.

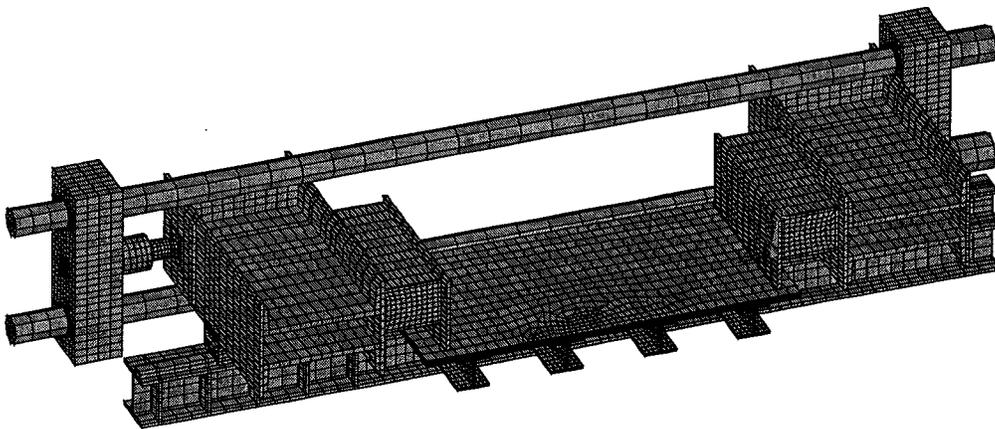
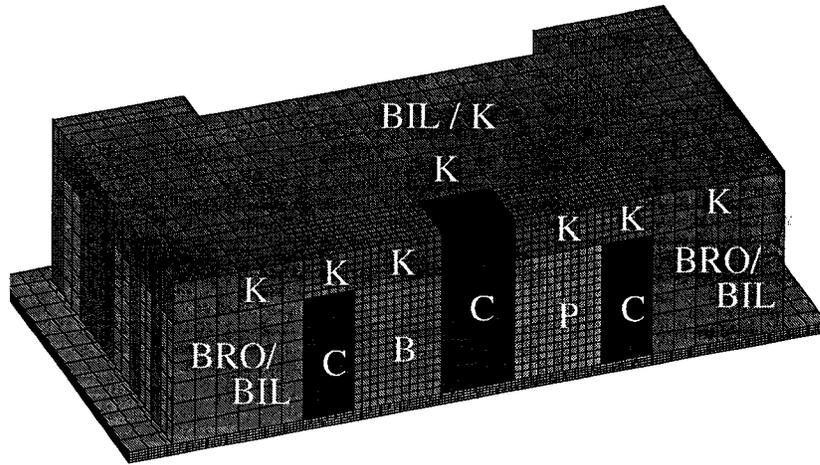


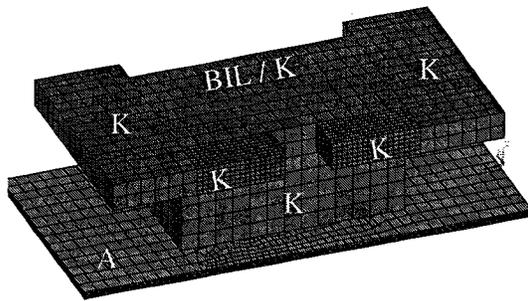
Figure 5.6: Maillage de la structure du banc **BERTA**, tiré de Even (2003)

À ce maillage s'ajoute celui de l'enceinte, comprenant les briques de chargement (**BRO / BIL**) et les briques d'isolation (**BIL**) ainsi que le carbone, la pâte, le béton et la laine isolante (**K**). Le maillage des briques a été repris de Even (2003), alors que celui des matériaux du montage de validation y a été ajouté dans le cadre de cette thèse. Le maillage complet de l'enceinte est montré à la figure 5.7(a).

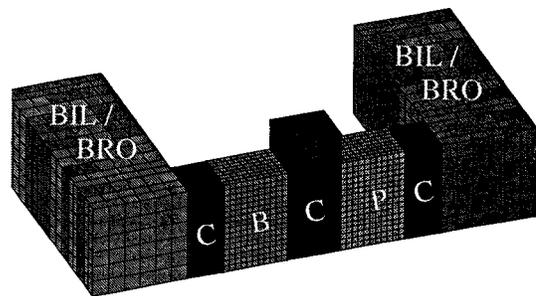
Le comportement mécanique de la laine isolante et des briques isolantes latérales n'a pas été considéré ; ces régions sont donc uniquement assemblées dans le problème thermique (figure 5.7(b)). Par contre, le béton, la pâte, le carbone et les briques de chargement sont thermomécaniques (figure 5.7(c)). Les maillages des différents matériaux sont indépendants, afin de bien représenter la nature de l'assemblage des matériaux du montage. Des éléments de contact thermique (figure 5.7(d)) et thermomécanique (figure 5.7(e)) ont donc été utilisés pour obtenir la continuité des flux et des contraintes aux interfaces.



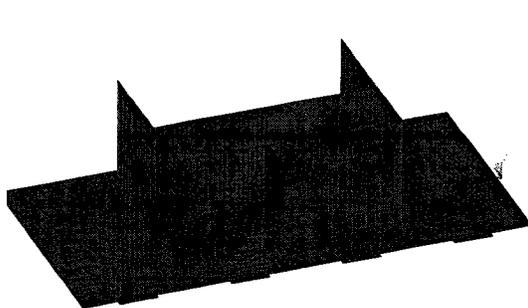
(a) Complet



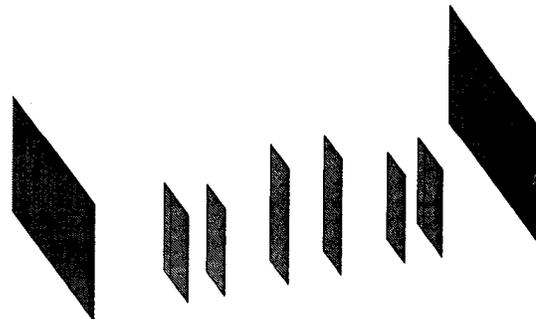
(b) Thermique



(c) Thermomécanique



(d) Contact thermique



(e) Contact thermomécanique

Figure 5.7: Maillage de l'enceinte du banc BERTA pour le montage de validation

5.2.4 Description de l'essai

Pour s'assurer de sa représentativité, le béton a été coulé dans un moule d'acier une semaine avant le début de l'essai. Cela nous permet d'utiliser le calage de la loi constitutive présenté à la section 2.3.4. Par contre, étant donnée l'absence de pertes d'eau vers les isolants poreux cellulaires, sa teneur en eau est substantiellement différente du béton coulé dans le montage d'hydratation. Les thermocouples ont été insérés avec précision dans le béton encore visqueux.

Au moment de commencer l'essai proprement dit, les écrous de serrage ont été serrés afin d'imposer une précharge totale d'environ 13.42 kN sur les échantillons (ou 6711 N, étant donné que la moitié du banc est simulée); de cette manière, le contact est clairement établi entre les matériaux, et les conditions initiales sont donc bien connues. Par la suite, le four est chauffé à un taux de chauffe constant de 24°C par heure, jusqu'à 933.4°C; cette température est maintenue pendant 24 heures, puis le four est refroidi à un taux de 24°C par heure jusqu'à la température ambiante. Durant l'essai, les données de température et de charge sont échantillonnées par un système d'acquisition informatisé, puis stockées sur disque.

5.2.5 Pertinence de l'exercice

Rappelons donc les caractéristiques de cet essai :

- Assemblage de matériaux déposés les uns sur les autres, reliés par contact ;
- Matériaux carbonés (pâte à brasquer verte et carbone précuit, voir D'Amours (2004)) ;
- Matériaux non carbonés (béton réfractaire en première chauffe, briques denses, briques isolantes) dont les lois constitutives sont décrites au chapitre 2 ;
- Essai thermo-chimio-mécanique transitoire de validation.

De plus, le fait d'utiliser le code FESh++, détaillé au chapitre 4, implique les aspects numériques et informatiques suivants :

- Pour la pâte à brasquer et le béton réfractaire, lois constitutives tenant compte des modifications irréversibles de leur microstructure, de leur cinétique et de leurs effets thermiques et mécaniques ;
- Pour tous les matériaux, prise en compte adéquate des déformations permanentes instantanées et temporelles ;
- Prise en compte des non-linéarités géométriques et matérielles ;
- Prise en compte des couplages indirects entre phénomènes ;
- Intégration implicite des lois de comportement ;
- Intégration de tous ces aspects dans un même code d'éléments finis.

Par conséquent, la simulation du montage de validation permet de mettre en lumière tous les aspects originaux de la thèse introduits à la section 1.6.

5.3 Stratégie de simulation

5.3.1 Précharge

Dans un premier temps, une simulation purement mécanique a été réalisée afin de connaître le déplacement du poussoir mobile (illustré à la figure 5.2) à imposer pour retrouver la précharge appliquée.

Seul le maillage de l'enceinte a été utilisé, le banc étant beaucoup plus rigide que les matériaux de l'enceinte. Les éléments solides considérés sont ceux de la figure 5.7(c) – soit environ 8000 éléments – alors que les éléments de contact sont montrés à la figure 5.7(e).

Les conditions aux frontières mécaniques sont montrées à la figure 5.8. De plus, un élément de contact (à gauche sur la figure) correspondant à la surface du poussoir mobile a été ajouté ; un déplacement axial est imposé en 25 pas sur ses noeuds, représentant ainsi le resserrement des écrous de serrage. La pression de contact est intégrée sur l'interface représentant le poussoir mobile, ce qui représente la force lue par l'une des cellules de charge, étant donné qu'un demi banc est simulé.

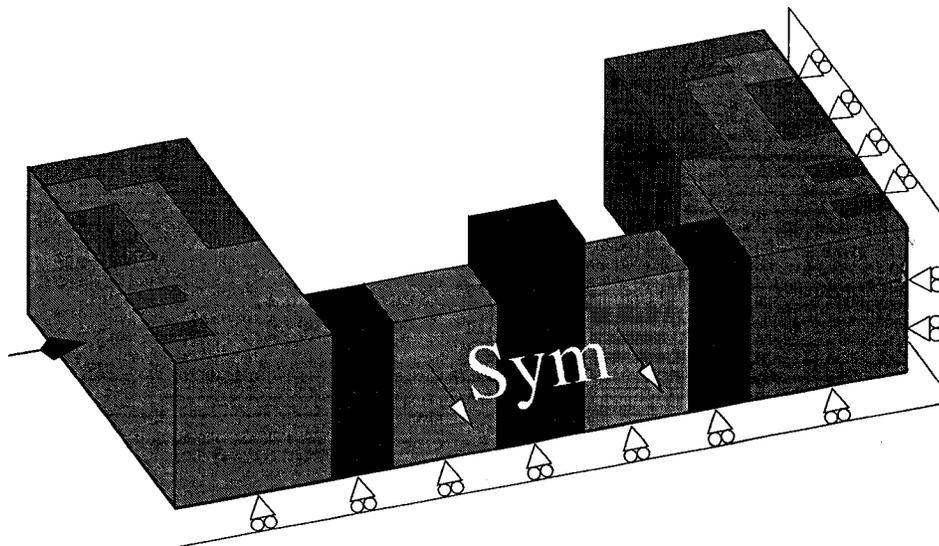


Figure 5.8: Conditions aux frontières mécaniques du maillage de l'enceinte du banc **BERTA**

Les briques de chargement BIL/BRO ayant déjà servi dans d'autres expériences et les charges lues par les cellules étant relativement faibles, il est raisonnable de présumer que leur comportement sera élastique durant notre essai.

Un résolveur direct a été utilisé (voir Balay *et coll.*, 2002) pour résoudre le système linéarisé. Le contact mécanique est traité en pénalisation standard (voir Marceau, 2001) avec des constantes de l'ordre de 1×10^{12} . La courbe force-déplacement (F-U) obtenue est montrée à la figure 5.9. La précharge de 6711.7 N est donc obtenue à un déplacement de plateau de 1.1755 mm. Ce déplacement du poussoir mobile devra donc être maintenu tout au long de l'essai de chauffage monotone. Fait à noter, la pâte à brasquer plastifie légèrement.

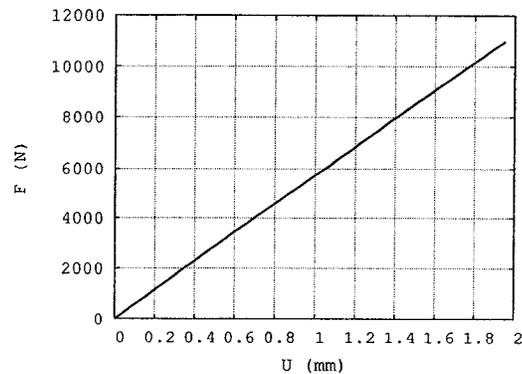


Figure 5.9: Courbe de précharge simulée de l'enceinte du banc **BERTA**

Afin de vérifier la pertinence de l'approche utilisée (**U**), le même problème a aussi été résolu en imposant une pression uniforme en 25 pas sur la surface des briques en contact avec le poussoir mobile (**F**). La courbe de précharge obtenue est légèrement différente, tel que le montre la figure 5.10.

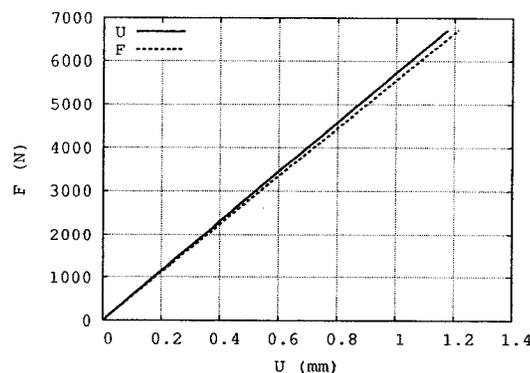


Figure 5.10: Comparaison des courbes de précharge simulées de l'enceinte du banc **BERTA** selon le mode de pilotage

Le déplacement axial obtenu sur la demi-largeur du poussoir mobile est comparé pour les deux approches à la figure 5.11. Afin de maintenir une pression constante sur les briques en contact avec le poussoir mobile, le déplacement axial de celles-ci aura tendance à leur faire prendre une forme de "U" autour de l'axe vertical lors du contrôle en chargement (**F**). Ceci se traduit par l'introduction

d'une flexion artificielle dans les briques de chargement ; une partie du déplacement supplémentaire autour de l'axe vertical est transmise à la pâte (figure 5.12(a)), ce qui provoque des efforts de flexion additionnels (figure 5.12(b)).

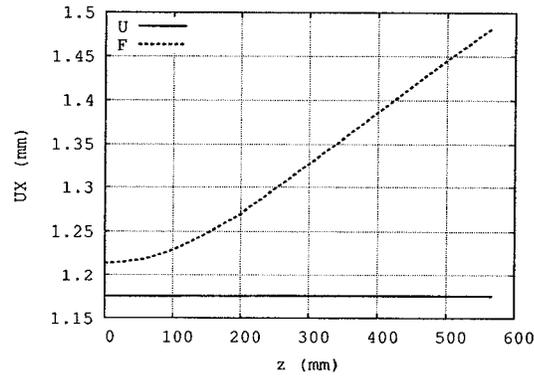


Figure 5.11: Déplacement le long du demi-poussoir mobile à la fin de la simulation de précharge de l'enceinte du banc **BERTA**

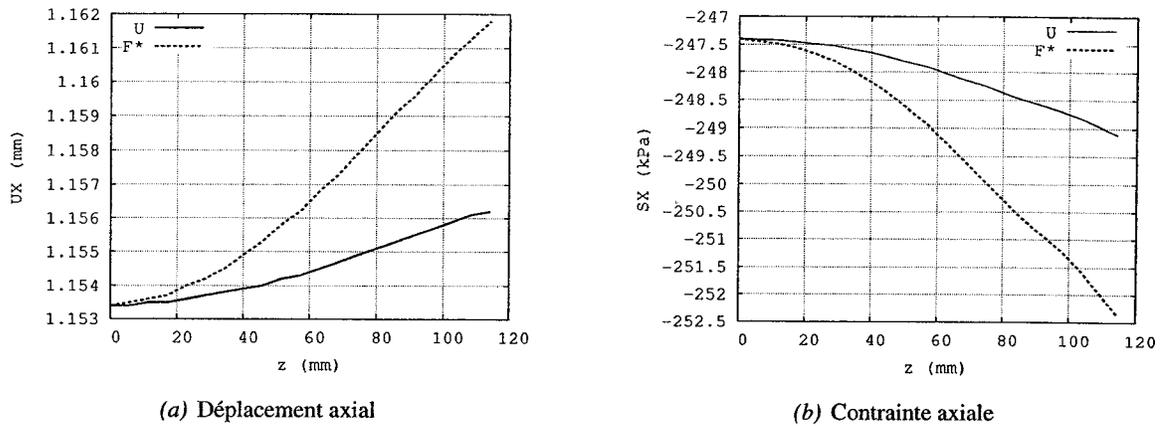


Figure 5.12: Résultats obtenus au contact carbone/pâte à la fin de la simulation de précharge de l'enceinte du banc **BERTA**

Par conséquent, une bonne représentation des conditions expérimentales doit absolument passer par le contrôle en déplacement d'un contacteur représentant le poussoir mobile.

5.3.2 Chauffage uniquement

Cette fois, le maillage complet du banc est utilisé, tel que le montre la figure 5.13.

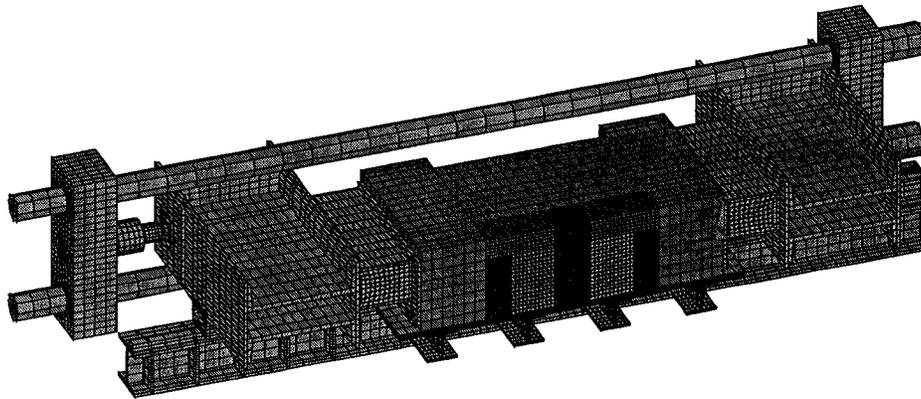
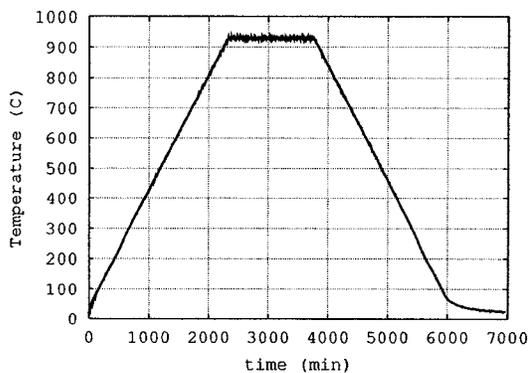
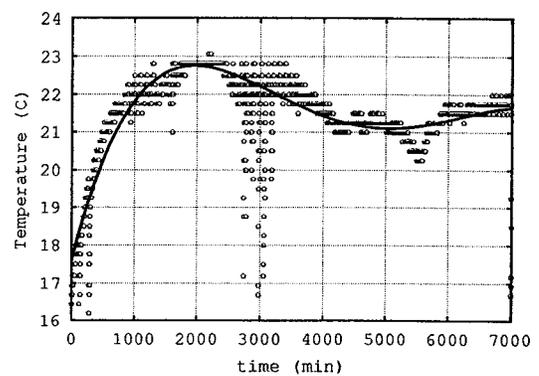


Figure 5.13: Maillage complet du banc BERTA

Le chargement thermique consiste à augmenter graduellement la température ambiante vue par le dessus du carbone et de la laine isolante, selon la température mesurée dans le four. Son évolution est montrée à la figure 5.14(a). La température ambiante subie par les autres surfaces de convection est montrée à la figure 5.14(b).



(a) Température mesurée dans le four



(b) Température ambiante mesurée

Figure 5.14: Température de l'environnement du banc BERTA

Les coefficients d'échange entre le four et le dessus du carbone et de la laine isolante ont été ajustés manuellement, à défaut d'avoir une mesure du flux entrant par ces surfaces. Pour les autres

surfaces de convection, le coefficient d'échange a été estimé à $5 \text{ W/m}^2\text{K}$; étant donnée l'énorme capacité calorifique que représente la structure d'acier et les températures assez faibles mesurées sur celui-ci, la sensibilité de ces coefficients sur la réponse dans l'enceinte est très faible. Cependant, la conductance de contact thermique entre les matériaux de l'enceinte a un impact majeur sur la distribution de température obtenue. Des valeurs raisonnables ont encore une fois été ajustées manuellement.

Aussi, le béton réfractaire ayant été coulé dans un moule d'acier, sa teneur en eau était substantiellement différente du béton coulé dans le montage d'hydratation. Ainsi, sa teneur en eau libre a dû être augmentée pour reproduire les températures enregistrées dans le béton lors de l'essai.

De plus, les conductivités thermiques et les chaleurs spécifiques à chaud des matériaux réactifs de l'enceinte, soit le béton et la pâte, sont mal connues. Des valeurs raisonnables ont donc dû être calées manuellement ; évidemment, le fait d'avoir à ajuster à la fois les conditions aux limites, les conductances de contact et la diffusivité des matériaux réactifs, rend l'exercice de validation difficile. Par conséquent, les paramètres ont été ajustés jusqu'à ce que les résultats de simulation montrent les mêmes points saillants que les résultats expérimentaux, même si on retrouve un écart de quelques degrés entre les deux.

En se rapportant à la figure 5.5 et aux explications de la section 5.2.2 pour la nomenclature des thermocouples, les résultats de simulation sont comparés aux températures mesurées dans les matériaux du montage de validation aux figures 5.15 à 5.19.

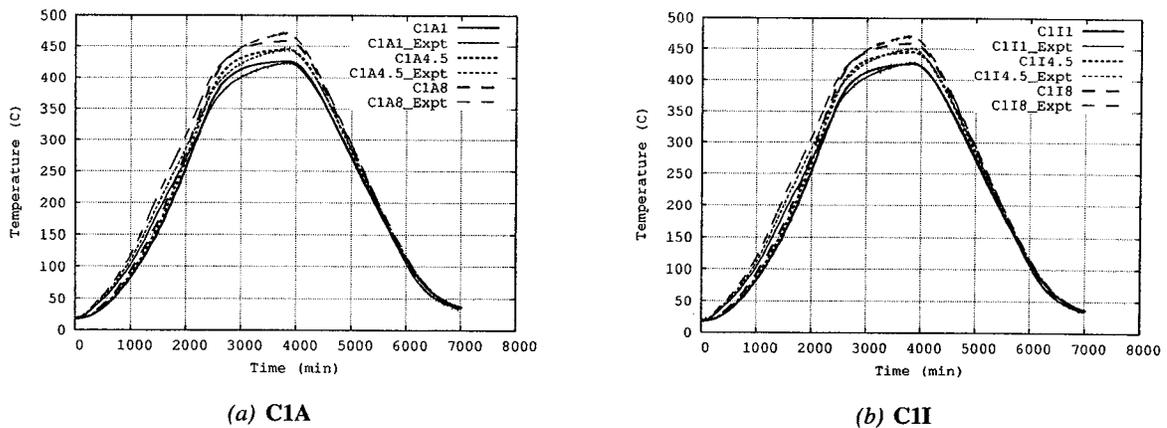


Figure 5.15: Évolution de la température lors de l'essai de validation, carbone gauche C1

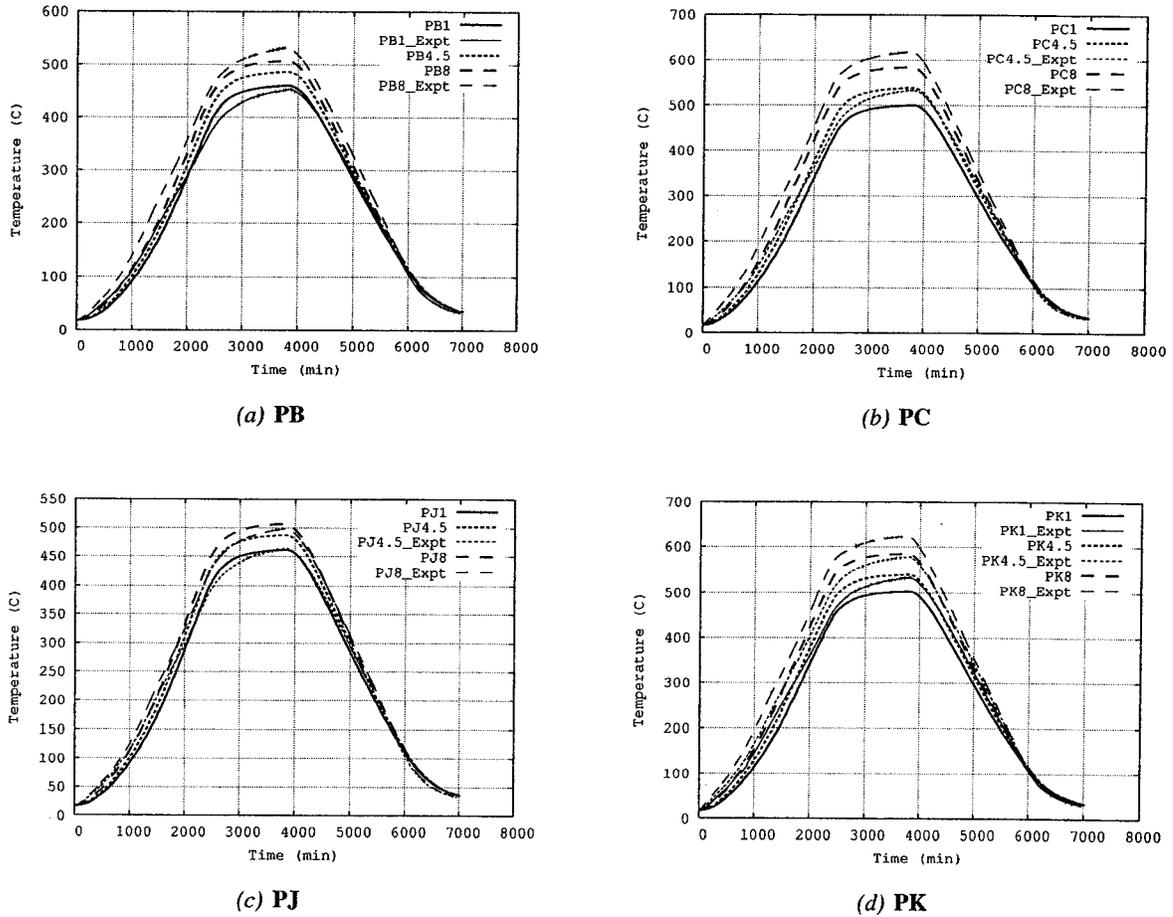


Figure 5.16: Évolution de la température lors de l’essai de validation, pâte à brasquer P

L’évolution de la conductivité de la pâte étant mal connue, l’équation (5.1) a été posée.

$$\mathbf{K}(T, x, \mathbf{E}^P) \approx (k_{\text{crué}}(T) + xk_x) \mathbf{1} \quad (5.1)$$

La variable interne x représente le degré de cuisson de la pâte, et son évolution est donnée par D’Amours (2004). La fonction $k_{\text{crué}}(T)$ est la conductivité de la pâte verte, alors que k_x constitue le gain de conductivité dû à la cuisson. La relation a été posée linéaire en première approximation.

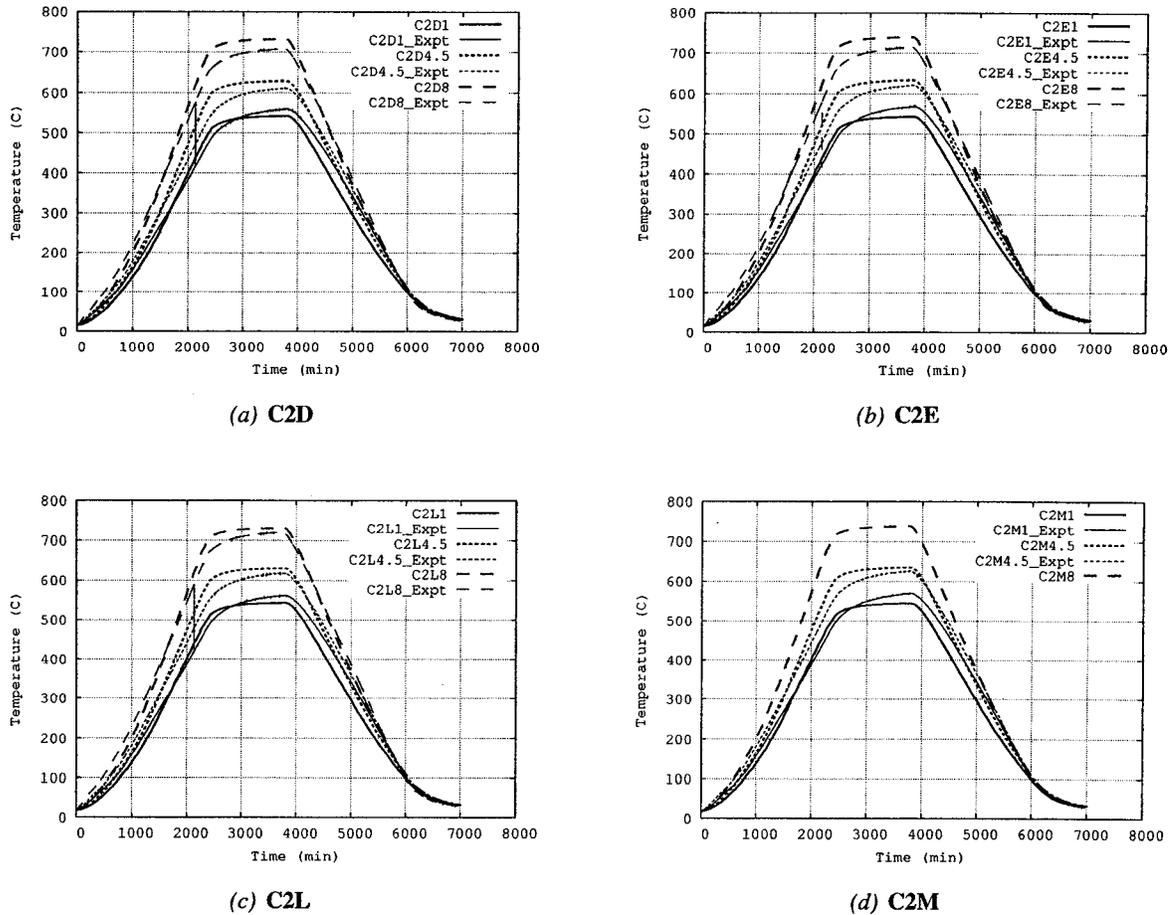


Figure 5.17: Évolution de la température lors de l'essai de validation, carbone central C2

L'évolution de la température dans le carbone central est très sensible à l'échange avec le four ; on remarque que lors du plateau, il semble y avoir un effet transitoire mesuré plus important que ce que prédit le modèle, et ce, malgré la température constante du four (figure 5.14(a)). Il est possible que les réfractaires du chapeau chauffant (figure 5.1) absorbent suffisamment de chaleur lors de la montée en régime pour réduire l'échange effectif avec le carbone. Le comportement du four lui-même n'a pas été pris en compte lors de nos simulations. Par contre, un coefficient d'échange variable a été utilisé, afin de représenter grossièrement l'effet du rayonnement, selon l'équation (5.2).

$$h(T) = 20.0 \exp[T/300] - 20.0 \exp[T/300] \mathbb{H}(T - 812.415) + 300 \mathbb{H}(T - 812.415) \quad (5.2)$$

où \mathbb{H} est la fonction de Heaviside. Cela fait varier le coefficient de 20 à 300 W/m^2K .

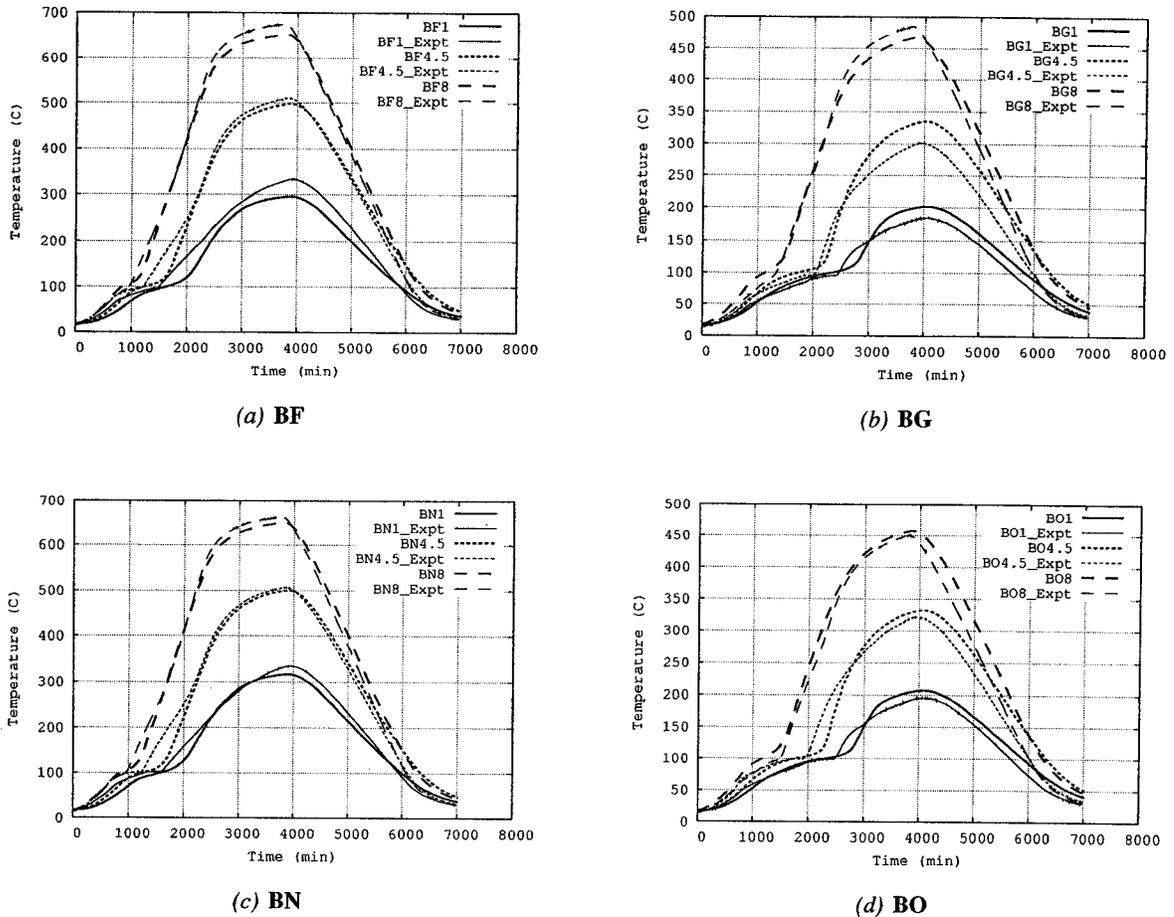


Figure 5.18: Évolution de la température lors de l’essai de validation, béton B

Il est tout à fait évident que l’évaporation de l’eau libre a un impact majeur sur l’évolution de la température dans le béton, comme le montrent les plateaux mesurés à 100°C. Le modèle utilisé amortit ce puits de chaleur sur une plage de température d’environ 20°C, ce qui explique la faible pente positive du plateau numérique. Par contre, étant donnée la simplicité de ce modèle, cela semble être une approximation valable. De plus, la diffusivité thermique du béton étant mal connue, les résultats obtenus semblent encourageants.

La capacité calorifique utilisée est donnée par l’équation (2.21). En première approximation, la conductivité thermique quant à elle passe de la valeur obtenue au jeune âge (section 2.2.4.1) à la valeur après traitement thermique donnée par le fabricant (k_{sk}) selon l’équation (5.3).

$$\mathbf{K}(T, w, \mathbf{E}^p, \xi, \phi) \approx (k_{sk}(T) + w k_w) \mathbf{1} \quad (5.3)$$

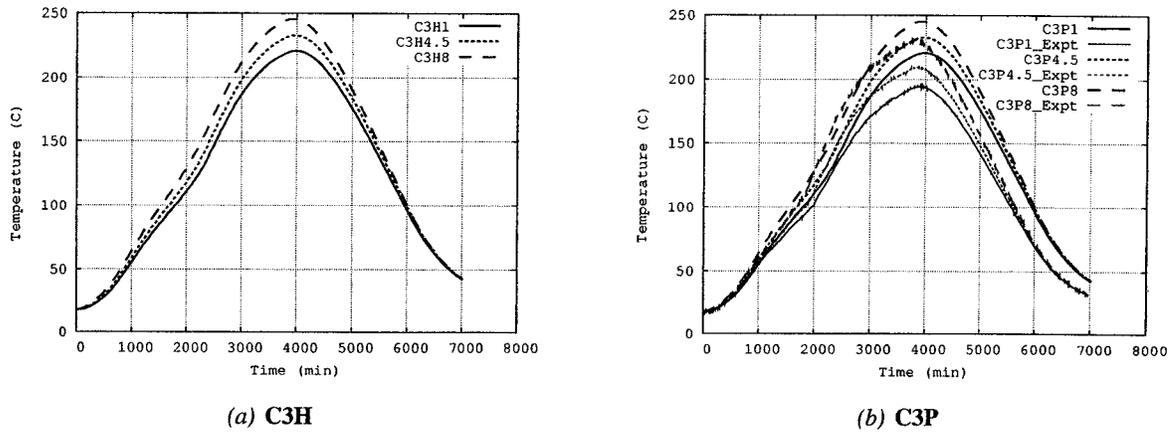


Figure 5.19: Évolution de la température lors de l'essai de validation, carbone droit C3

Des thermocouples avaient aussi été placés dans les briques de chargement (**BRO / BIL**) ainsi que sur une plaque d'acier sous le carbone central. Les résultats de simulation sont comparés aux températures mesurées à la figure 5.20(a) pour les briques et à la figure 5.20(b) pour la plaque d'acier.

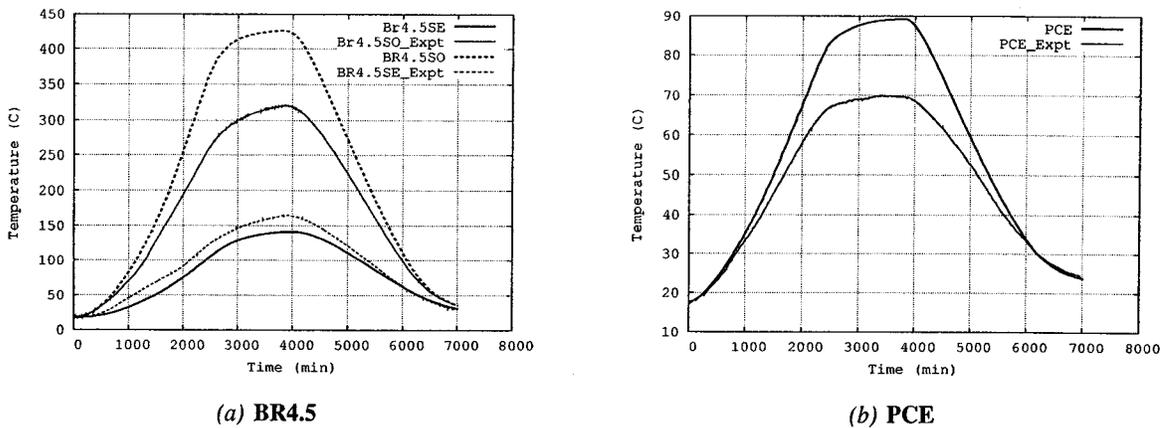


Figure 5.20: Évolution de la température lors de l'essai de validation, revêtement du banc BERTA

La répartition des pertes de chaleur entre le côté pâte (**BR4.5SO**) et le côté béton (**BR4.5SE**) n'est pas tout à fait exacte, comme le témoignent les températures dans les briques (**BRO / BIL**) de la figure 5.20(a). Un ajustement plus fin des conductances de contact et des conditions aux frontières serait nécessaire afin de caler ces températures. Par contre, la température simulée dans la plaque d'acier sous le carbone central (figure 5.20(b)) est assez proche de celle mesurée – environ 20°C d'écart – ce qui suggère que le flux simulé à cet endroit est raisonnable.

5.3.3 Comportement de la pâte à brasquer

Le comportement de la pâte à brasquer est passablement complexe, tel que le montre D'Amours (2004). Il est toutefois nécessaire d'avoir en tête certaines de ses particularités afin de bien interpréter les simulations thermomécaniques complètes de la section 5.3.4.

La pâte *verte* est un mélange d'agrégats de carbone et d'un liant à base de brai de goudron et d'huiles carbochimiques. Il s'agit donc d'un matériau réactif analogue à un béton jeune. Des réactions chimiques transforment sa microstructure lorsqu'elle est chauffée. Par conséquent, sa résistance à la rupture et sa rigidité augmentent selon son *index de cuisson*, tel que défini par D'Amours (2004). En effet, l'auteur utilise ce concept pour caractériser une réaction chimique équivalente au sens mécanique. L'index de cuisson évolue ainsi entre une valeur initiale donnée et un.

Les changements microstructuraux entraînent aussi des déformations chimiques irréversibles, tel que le montre la figure 5.21. Notez que la déformation chimique a été normalisée par le même facteur que pour la figure 2.15.

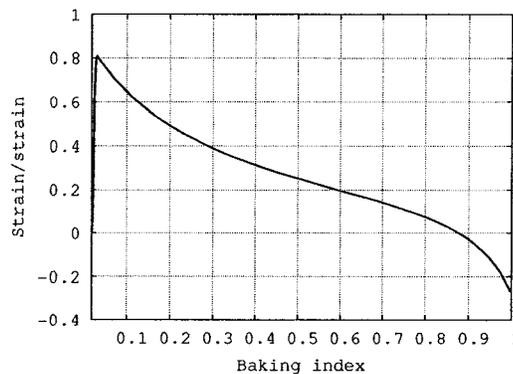


Figure 5.21: Déformation chimique irréversible normalisée de la pâte à brasquer selon D'Amours (2004)

Il apparaît clairement à la figure 5.21 que la pâte subit une forte expansion lorsqu'elle est la plus malléable ; selon Sørliet et Øye (1994), elle serait l'effet du dégagement de volatiles et d'hydrogène ainsi que de la relaxation de contraintes résiduelles. Toujours selon Sørliet et Øye (1994), la contraction chimique subséquente serait plutôt causée par une réorganisation de la microstructure due à la cokéfaction du liant.

La simulation thermique de la section 5.3.2 nous permet d'obtenir une carte de cuisson de la pâte ; l'évolution de l'index de cuisson dans le haut du bloc de pâte est montrée à la figure 5.22. La courbe x_{EH} correspond au côté près du carbone central C2 alors que la courbe x_{OH} correspond au côté près du carbone de gauche C1. En se référant à la figure 5.21 on peut donc voir clairement que la pâte subit une *augmentation* nette de volume après chauffage, puisque sa cuisson demeure incomplète.

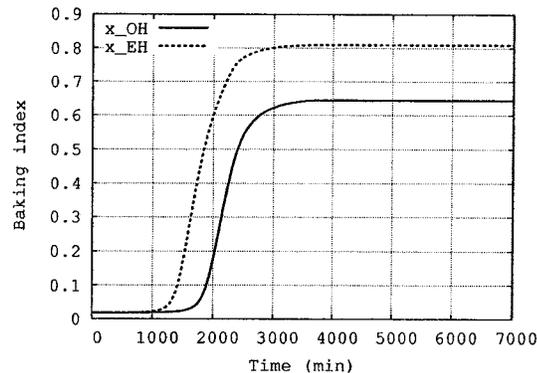


Figure 5.22: Évolution de l'index de cuisson de la pâte à brasquer lors de l'essai de chauffage

5.3.4 Simulation thermomécanique complète

La simulation complète consiste maintenant à résoudre un problème thermomécanique sur les éléments de l'enceinte (figure 5.7(c)) et un problème thermique sur les éléments du banc d'essai (figure 5.7(b)). Le déplacement de mise en précharge est imposé en dix pas de 0.1 seconde, puis le chauffage du four est démarré. Le problème thermomécanique est résolu de manière découplée avec recouplage itératif sur la base du même pas de temps, tel qu'expliqué par Goulet (2004). Les pas de temps sont adaptés selon le nombre d'itérations souhaitées pour un pas, et un mécanisme de bisection est utilisé lorsque la solution d'un pas ne converge pas.

Deux simulations ont d'abord été réalisées : dans la première, tous les matériaux sont considérés thermo-chimio-élastiques (TC-E) alors que dans la seconde, tous les matériaux sont considérés thermo-chimio-élastoplastiques (TC-EP). Dans les deux cas, le fluage a donc volontairement été négligé. La comparaison de l'évolution de la charge lue par la cellule du banc **BERTA** avec celle simulée par éléments finis est très révélatrice, tel que le montre la figure 5.23.

En effet, la distribution de l'index de cuisson final obtenue dans la pâte indique une augmentation nette de volume, tel que montré à la section 5.3.3 ; de plus, les températures atteintes dans le béton (figure 5.18) n'entraînent pas de retrait suffisant pour compenser cette augmentation de volume. Cela explique donc la charge résiduelle de la cellule de charge simulée (figure 5.23(a)) lorsque tous les matériaux sont thermo-chimio-élastiques. Étant donné qu'en chauffage le volume total est donc toujours croissant, il est tout à fait normal de constater une augmentation constante de la charge pour ce cas (toujours la figure 5.23(a)).

Lorsque le comportement élastoplastique des matériaux est ajouté (figure 5.23(b)), la charge simulée augmente même plus rapidement que pour le cas thermo-chimio-élastique, étant donné le caractère *dilatant* de l'écoulement plastique pour la pâte et le béton, ainsi que la phase d'écrouissage dans laquelle ils se trouvent. Ainsi, l'élastoplasticité ne parvient pas à expliquer la *diminution* de la charge observée lors de l'essai. Cet effet ne peut être que la conséquence d'un mécanisme de relaxation des contraintes.

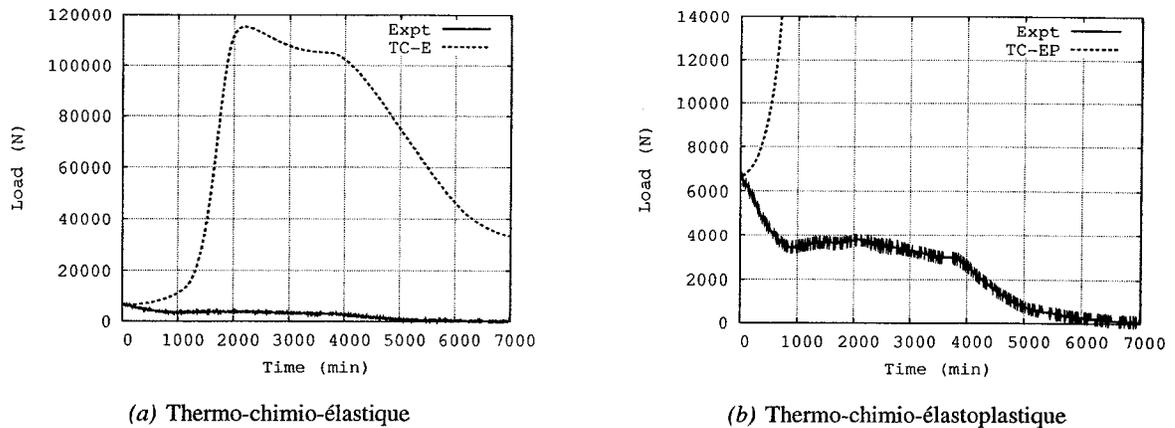


Figure 5.23: Évolution de la charge lors de l'essai de validation, sans les aspects visqueux

À cette fin, la pâte a d'abord été considérée élastoplastique (EP), le béton, visco-élastoplastique (VEP), et le carbone, élastique (E) ; la charge simulée obtenue pour cette combinaison, dénotée (TC-VEP1), est montrée à la figure 5.24.

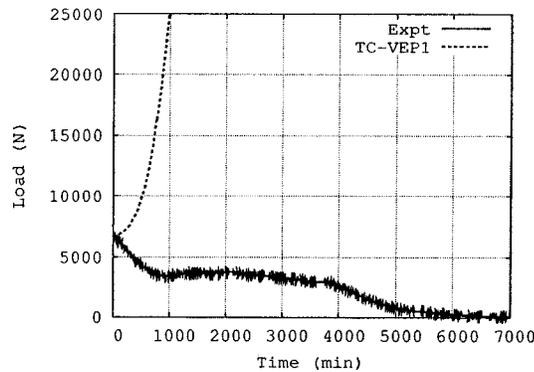


Figure 5.24: Évolution de la charge lors de l'essai de validation, avec les aspects visqueux : Béton VEP, Pâte EP, Carbone E

Le béton étant encore froid, son taux de fluage est faible, tel que montré à la figure 2.15(a). Ainsi, la charge simulée est encore ascendante lors du chauffage. La seule explication possible de la diminution de la charge observée réside donc dans le fluage de la pâte à brasquer. Par conséquent, le fluage de la pâte est sans contredit le mécanisme dominant lors de l'essai étudié.

Malheureusement, étant données les difficultés expérimentales inhérentes aux essais à chaud sur de la pâte à brasquer – évolution d'hydrogène, de HAP et d'hydrocarbures condensables – couplées aux difficultés des essais de fluage à chaud – monopolisation d'un four durant de longues périodes,

mesure du déplacement, etc. – un seul essai a pu être réalisé par D'Amours (2004). Attendu que la pâte verte est très malléable et qu'elle devient semblable au carbone précuit des cathodes après traitement thermique, son taux de fluage est fortement dépendant de son état de cuisson ; les paramètres du modèle de Burger pour la pâte ont donc été ensuite grossièrement ajustés manuellement pour s'approcher de la charge mesurée. Les résultats d'une simulation avec la pâte visco-élastoplastique (VEP), le béton élastique (E) et le carbone élastique (E), dénotée TC-VEP2, sont montrés à la figure 5.25.

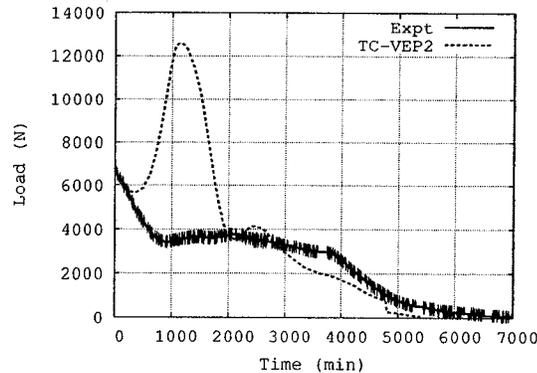


Figure 5.25: Évolution de la charge lors de l'essai de validation, avec les aspects visqueux : Béton E, Pâte VEP, Carbone E

Il est frappant de constater que toutes nos simulations présentent une forte augmentation de la charge résultante lors du début de la cuisson de la pâte (figures 5.23, 5.24 et 5.25), en raison de sa forte expansion chimique initiale (figure 5.21). La charge observée lors de l'essai ne présente pas ce comportement, ce qui nous laisse perplexe quant aux mécanismes réels d'expansion chimique de la pâte.

Tel que mentionné à la section 5.3.3, la forte expansion chimique initiale serait causée par l'effet des gaz alors que la pâte est très malléable. Il est plausible de penser qu'un confinement mécanique puisse empêcher partiellement ou même totalement cette expansion, alors qu'il n'affecterait pas significativement la contraction due à la réorganisation de la microstructure.

En effet, la littérature portant sur d'autres matériaux réactifs nous renseigne sur le couplage entre la dilatation irréversible causée par un changement de microstructure et l'état de contraintes. Par exemple, tel que mentionné à la section 2.2.2.2, le béton semble présenter un "fluage instantané" lorsque chauffé sous contrainte (voir par exemple Khoury *et coll.* (1985a,b)). De la même manière, la mécanosorption est en fait une composante de déformation supplémentaire apparaissant lorsque des changements d'humidité dans le bois sont vécus sous contrainte (voir par exemple Omarsson *et coll.* (2002) ou encore Svensson et Toratti (2002)). Il est possible que le même effet soit présent dans une pâte à brasquer cuite sous contrainte.

5.4 Conclusion

Un montage instrumenté représentatif du chargement thermique vécu par la pâte à brasquer, le béton réfractaire et le carbone précuit a été réalisé dans le banc d'essais **BERTA**. Afin de s'assurer du contact initial entre les matériaux, une phase de mise en charge a précédé la mise en température. Un modèle d'éléments finis détaillé a été construit à partir du travail de Even (2003) ; la mise en charge a été simulée de manière purement mécanique pour déterminer le déplacement du poussoir mobile à maintenir tout au long du chauffage. Par la suite, les propriétés thermophysiques, les conditions aux limites et les propriétés de contact ont été ajustées manuellement afin de caler les températures mesurées. Finalement, la simulation thermomécanique complète a été réalisée, en utilisant différentes combinaisons de simplifications dans les lois de comportement des matériaux réactifs (pâte et béton).

Il a été démontré à la section 5.3.4 que le fluage de la pâte à brasquer est le mécanisme dominant ce type de problème ; malheureusement, des contraintes de temps, de budget et d'équipement n'ont permis à D'Amours (2004) de ne réaliser qu'un seul essai de relaxation sur ce matériau. Par conséquent, les paramètres du modèle de Burger, choisi pour représenter ce phénomène, ont dû être ajustés manuellement pour se rapprocher de la charge observée durant l'essai. Il nous apparaît clairement que des essais de fluage ou de relaxation sur de la pâte à différents niveaux de cuisson devront être faits pour simuler correctement le préchauffage d'une cuve de Hall-Hérault.

De plus, toutes nos simulations présentent une forte augmentation de la charge résultante lors du début de la cuisson de la pâte en raison de sa forte expansion chimique. Par contre, la charge observée lors de l'essai ne présente pas ce comportement. Cela nous laisse perplexe quant aux mécanismes réels d'expansion chimique de la pâte. Les essais de dilatométrie classique étant réalisés sur des échantillons libres, il serait intéressant de tenter un essai de dilatométrie sous contrainte. En ayant déjà identifié les paramètres de fluage et de dilatométrie libre, il sera possible de vérifier si un effet analogue au "fluage instantané" du béton ou de la mécanosorption dans le bois se produit dans la pâte lorsqu'elle subit un changement de microstructure sous contrainte.

L'absence d'augmentation de la charge lors de l'expérience devrait être une source d'inquiétude : l'expansion nette prédite par un essai de dilatométrie libre de la pâte ne pourrait donc pas être considérée comme une garantie de l'étanchéité du revêtement d'une cuve.

Par conséquent, le manque de données expérimentales sur le fluage de la pâte ne nous aura pas permis de valider complètement la loi constitutive développée pour le béton. Cependant, la démonstration du caractère dominant de ce phénomène représente en soi une originalité par rapport à l'approche classique utilisée dans l'industrie de l'aluminium (voir par exemple Dupuis et Tabsh (1994a); Hiltmann et Meulemann (2000); Arkhipov et Pingin (2001); Sun *et coll.* (2003, 2004)).

Finalement, la simulation de cet essai nous aura tout de même permis de démontrer la capacité des structures informatiques développées à traiter des problèmes industriels complexes – thermo-chimio-mécaniques couplés, non linéaires, transitoires, avec contact – et de tailles appréciables.

Chapitre 6

Conclusion

6.1 Rétrospective et conclusions

Le programme de recherche **START-CUVE** constitue le premier pas dans l'étude systématique du comportement thermomécanique du revêtement d'une cuve de Hall-Héroult lors de sa mise en opération. Cette thèse, réalisée au sein de ce programme, se consacre essentiellement :

- Au choix ou au développement de lois de comportement thermomécaniques adéquates pour les matériaux non carbonés, ainsi qu'à l'identification des paramètres correspondants, tel que détaillé au chapitre 2 ;
- À l'implémentation et à l'intégration de toutes les lois de comportement dans un code d'éléments finis, *FESh++*, tel que détaillé au chapitre 3 pour les formes variationnelles globales, et au chapitre 4 pour les aspects locaux ;
- À la validation du simulateur thermo-chimio-mécanique à l'aide de résultats expérimentaux, tel que montré au chapitre 5.

La cuve P-155 contenant un grand nombre de matériaux non carbonés, ceux du côté de la cuve et en particulier ceux faisant directement face aux blocs cathodiques, ont été considérés importants au point de vue mécanique. La majorité des efforts ont été dirigés vers le béton réfractaire – réactif et quasi-fragile, détaillé à la section 2.2 – et dans une moindre mesure, vers les isolants poreux cellulaires (section 2.3). Une loi de comportement thermo-chimio-mécanique relativement simple, incluant pourtant les phénomènes les plus importants, a pu être dégagée pour le béton. Par exemple, trois variables internes sont utilisées pour représenter les changements microstructuraux irréversibles subis par ce matériau, à savoir la teneur en eau libre, l'état d'hydratation et le degré de frittage. À ces variables internes sont associées des cinétiques de réaction, ce qui permet de tenir compte de l'effet du temps et de la température dans leur évolution. Les comportements élastoplastique et visqueux

ont aussi été considérés, et les paramètres de la loi constitutive ont été calés sur des résultats expérimentaux (section 2.3.4). Une loi élastoplastique tirée de la mécanique des sols a pu être utilisée pour approcher le comportement des isolants poreux cellulaires pour des chemins de chargement pas trop loin de la compression uniaxiale. Pour les autres matériaux, une loi de comportement probable a été proposée. Dans la mesure où très peu de travaux ont été consacrés aux aspects mécaniques du comportement des cuves de Hall-Hérault, il s'agit là d'aspects originaux dans le domaine.

Du point de vue informatique, plusieurs défis se posaient : la gestion adéquate de nombreux matériaux, l'implémentation de lois de comportement mécaniques variées et complexes comportant des couplages avec des phénomènes thermiques et chimiques, entre autres par variables internes, la combinaison de déformations permanentes instantanées (élastoplasticité) et temporelles (fluage), ainsi que l'intégration numérique efficace de ces lois. Des bibliothèques de gestion des variables internes, des lois constitutives et des matériaux ont donc été conçues puis implémentées avec succès dans le code FESh++. Des concepts rationnels issus de la thermodynamique ont guidé le processus de conception, menant à la création de structures maximisant la réutilisation de code et permettant l'ajout de couplages ou de phénomènes à des objets déjà existants. En particulier, des objets de cinétique, permettant de faire évoluer temporellement une variable interne scalaire, ont été créés (section 4.5). Cet aspect est original vis-à-vis la littérature sur le sujet. De plus, la flexibilité des structures proposées a été démontrée ; les concepts d'*intégreur de contraintes* et de *composantes de déformation* permettent d'utiliser les mêmes lois constitutives dans un contexte multiphysique en tenant correctement compte des couplages indirects entre les phénomènes (section 4.6). Ainsi, la séparation des lois constitutives et des matériaux permet de traiter efficacement les problèmes multiphysiques de manière couplée ou découplée. En effet, dans le code FESh++, les matériaux agissent comme des conteneurs intelligents de lois constitutives, de cinétiques, de capacités, et de leurs paramètres, ce qui leur permet d'ajouter les bons couplages à ces objets (section 4.7). Par le fait même, les matériaux constituent de réels modèles de comportement multiphysique construits à partir d'objets existants. Cela constitue aussi un aspect original.

Finalement, un essai de validation thermo-chimio-mécaniques couplé, non linéaire, transitoire, et de taille appréciable, a été simulé avec le code FESh++ ; les résultats numériques ont été comparés aux résultats expérimentaux des points de vue thermique (section 5.3.2) et mécanique (section 5.3.4). Les matériaux y étaient mis en contact thermomécanique, ce qui se distingue de l'approche classique utilisée dans l'industrie. Malheureusement, un manque de données sur le fluage de la pâte à brasquer nous a empêché de valider complètement la loi constitutive développée pour le béton réfractaire. Par contre, l'utilisation de lois constitutives adéquates, tenant compte de l'irréversibilité et des couplages entre phénomènes, ainsi que la démonstration du caractère dominant du fluage de la pâte dans ce type de problèmes, sont originales par rapport à l'approche classique utilisée dans l'industrie.

De ces travaux, nous posons les conclusions et interprétations suivantes.

Aspects logiciels

- Le paradigme de conception Orientée-Objet a permis d'implémenter avec succès des lois constitutives complexes en prenant correctement en compte les couplages entre phénomènes physiques de différentes natures ;
- Ceci a été possible grâce au recours aux concepts de la thermodynamique des processus irréversibles pour concevoir les structures d'objets à créer et leurs interactions ;
- Les concepts originaux d'*intégrateur de contraintes* et de *composantes de déformation* sont la clef permettant d'ajouter un nombre infini de couplages à une loi constitutive mécanique en petites déformations ;
- Ces concepts ont aussi permis de développer une méthodologie originale de traitement générique du fluage, tel qu'illustré par l'implémentation des modèles de Maxwell et de Burger ;
- La série d'outils élastoplastiques développée ainsi qu'une loi élastoplastique en petites déformations générique a permis l'implémentation rapide et efficace de modèles complexes.

Béton réfractaire

- À chaud, il flue de manière significative ;
- Les réactions au sein de sa microstructure – hydratation et déshydratation, évaporation d'eau libre et frittage – entraînent toutes des retraits irréversibles importants ;
- Sous les 110°C, le taux de chauffe a une grande influence sur son comportement ;
- Sa teneur en eau libre a une grande influence sur son comportement, tel que montré par Parent (2001) et Akande (2003b) ;
- Même en conditions contrôlées de mise en place, il y a une grande variabilité de ses propriétés effectives, entre autres en raison du développement de fissures en cours d'hydratation et de la migration d'eau vers les isolants poreux cellulaires, tel que montré par Akande (2003b).

Autres matériaux non carbonés

- Les isolants poreux cellulaires peuvent subir de très grandes déformations ; il sera important de mieux caractériser leur comportement pour la simulation de la période au bain et au métal ;
- Le fluage des réfractaires devra être étudié pour la simulation de la période au bain et au métal.

Pâte à brasquer

- La relaxation de ses contraintes est le mécanisme dominant le type de problème que représente le préchauffage d'une cuve ;
- Les mécanismes d'expansion chimique lorsque cuite sous contraintes ne sont pas clairs.

6.2 Recommandations et pistes de recherche

Étant données les contraintes de temps, de budget, de ressources humaines et d'équipement propres à la vie réelle, il fut impossible de réaliser tous les travaux prévus initialement. De plus, certaines limitations des lois constitutives développées dans le cadre de cette thèse sont apparues clairement. Par conséquent, il semble approprié de conclure cette thèse par quelques recommandations et quelques pistes de recherche particulièrement porteuses.

Aspects logiciels

- La méthodologie de traitement du fluage développée dans cette thèse pourrait être généralisée à l'assemblage arbitraire d'éléments de Maxwell et de Kelvin-Voigt ; de cette manière, le modèle de fluage serait construit à l'exécution du programme, permettant ainsi d'ajouter n'importe quel comportement en fluage à n'importe quel prédicteur de contraintes. Une méthode de résolution générique du système d'équations reliant les composantes de déformation visqueuses devra être développée à cette fin.
- L'adaptation des structures développées dans FESh++ au traitement des grandes déformations pourrait être étudiée ;
- Une méthode de gestion des identificateurs des variables internes dans FESh++ devrait être envisagée.

Béton réfractaire

- Il serait important d'un point de vue scientifique d'explorer un modèle plus complexe pour la migration d'eau ; en effet, une approche multi-constituantes, *i.e.* distinguant les différents types d'eau évaporable (libre, capillaire et physiquement adsorbée), prenant en compte la consommation d'eau par la réaction d'hydratation ainsi que les phénomènes de transport, pourrait être étudiée ;
- La cause de l'augmentation de la résistance entre 110°C et 200 °C devrait être mieux cernée ;
- La cause de l'augmentation de la résistance entre 350°C et 500 °C devrait être mieux cernée ;
- Les effets mécaniques des réactions de frittage devraient être mieux étudiés ;
- Le "fluage instantané" lors d'un chauffage sous contrainte devrait être étudié ;
- L'évolution de ses propriétés thermophysiques avec l'évolution de sa microstructure devrait être étudiée ;
- L'effet des fissures sur sa conductivité thermique "effective" devrait être étudié.
- Le contrôle de la recette devrait faire partie du suivi de qualité lors du montage des cuves ;
- La quantité d'eau à utiliser dans le mélange devrait être étudiée ;
- L'ajout dans les cuves d'une membrane imperméable pour empêcher la migration d'eau vers les isolants poreux cellulaires devrait être envisagé ;
- Le remplacement du béton utilisé par un autre matériau devrait même être considéré.

Autres matériaux non carbonés

- Des essais multiaxiaux selon la température devraient être réalisés sur les briques réfractaires afin d'adapter le modèle élastoplastique pour les matériaux granulaires détaillé à l'annexe A.4 ;
- De plus, des essais de fluage à chaud devraient aussi être réalisés sur ce matériau pour caractériser son comportement visqueux ;
- Des essais multiaxiaux devraient être réalisés sur les isolants poreux cellulaires, particulièrement dans la région du cap ;
- L'effet sur les comportements mécanique et thermique de l'eau absorbée provenant du béton réfractaire devrait être étudié.

Pâte à brasquer

- Des essais de fluage ou de relaxation à différents niveaux de cuisson devront être faits pour simuler correctement le préchauffage d'une cuve de Hall-Héroult ;
- Des essais de dilatométrie sous contraintes devraient être tentés afin de vérifier l'existence de phénomènes analogues à la mécanosorption dans le bois ;
- Les interactions entre le confinement mécanique et l'expansion chimique devraient être étudiées ;
- L'évolution de ses propriétés thermophysiques avec l'évolution de sa microstructure devrait être étudiée ;
- L'effet des fissures sur sa conductivité thermique "effective" devrait être étudiée.

Interfaces

Les interfaces de contact sont omniprésentes dans une cuve de Hall-Héroult ; en effet, une cuve n'est rien d'autre qu'un empilement précis de matériaux dans un caisson d'acier. On distingue principalement trois types d'interfaces : de mortier, cohésifs, et secs. La caractérisation de ces interfaces a néanmoins dû être abandonnée dans le cadre de cette thèse. Il serait donc intéressant de s'attarder un peu plus à cet aspect. Par exemple :

- L'état du contact acier-béton à l'interface avec la barre collectrice devrait être étudié ; certaines indications, dont les travaux de Labonté (1991), nous laissent croire qu'un contact cohésif pourrait s'établir ;
- Les joints entre le caisson et les matériaux du côté sont par ailleurs très importants : en plus de leur rôle de joint d'étanchéité, ils assurent un bon transfert de chaleur vers l'extérieur. La conductance de contact selon la pression devrait donc être étudiée.

Généralisation à d'autres types de cuves

Plusieurs technologies utilisent de la maçonnerie de briques réfractaires et isolantes pour construire le revêtement des cuves. Les briques sont assemblées grâce à des joints de mortier. En raison de ces joints, une structure de maçonnerie est donc à la fois hétérogène et anisotrope. Dans certains types de chargement, en particulier hors du plan, le comportement d'une structure dépend presque entièrement de la réponse des joints, tel que le montre bien la figure 6.1.

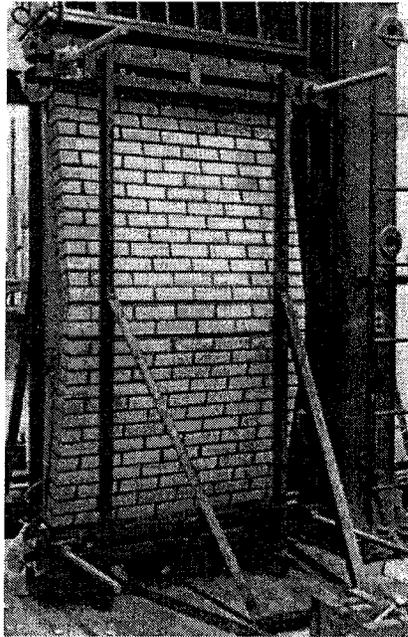


Figure 6.1: Comportement hors du plan d'un mur de maçonnerie, tiré de Yokel *et coll.* (1971)

Les chercheurs dans ce domaine ont tenté de mieux comprendre le comportement global de la maçonnerie en analysant le comportement des interfaces mortier/brique ; les travaux de Lotfi (1994, 1992) montrent qu'une loi de comportement pour une telle interface doit pouvoir reproduire la dilatation du mortier en compression, l'initiation et la propagation de fissures en cisaillement et leur dépendance à la contrainte normale, ainsi que la rupture en traction. Les travaux de Lourenço et Rots (1997) ajoutent la possibilité de rupture en compression. Les deux groupes traitent cet interface en pseudo-élastoplasticité non associée, et ramènent en deux dimensions l'interface tridimensionnel.

Dans le cas de structures imposantes, le coût de la modélisation de chaque interface est tout simplement prohibitif ; par exemple, dans une cuve de Hall-Hérault, l'empilement d'isolants et de réfractaires sous la cathode représente une quantité astronomique d'interfaces discrètes. Par conséquent, différentes méthodes d'homogénéisation ont été proposées au cours des années.

Ainsi, on peut distinguer des approches en élasticité linéaire (Anthoine, 1995; Bati *et coll.*, 1999; Cecchi et Di Marco, 2000) basées sur des *éléments de volume représentatifs* ("Representative Volume Elements"), conceptuellement proches de la mécanique des composites et de la micromécanique. Ces approches sont par contre limitées : elles ne permettent pas de bien représenter la réponse d'une structure au-delà du régime élastique. D'autres travaux connexes tiennent aussi compte de l'endommagement (par exemple Luciano et Sacco, 1998) ; cependant, la procédure d'intégration de la loi de comportement semble rendre la réponse dépendante du pas de chargement.

D'un autre côté, certains travaux davantage phénoménologiques sont basés sur l'élastoplasticité classique (voir par exemple Sayed-Ahmed et Shrive, 1996; Lourenço *et coll.*, 1997; Lourenço et Rots,

1997; Lourenço *et coll.*, 1998; Lourenço, 2000). Par contre, ils permettent de représenter correctement le comportement différent en traction et en compression, les déformations permanentes ainsi que l'endommagement. Lourenço *et coll.* (1997) utilisent une surface d'écoulement composite afin de tenir compte de la différence du comportement en traction et en compression : une surface de Rankine (traction, isotrope) et une surface de Hill (compression, anisotrope). Un écrouissage non linéaire en compression et un adoucissement exponentiel en traction a par la suite été ajouté au modèle par Lourenço (2000).

Par conséquent, pour simuler le comportement mécanique des cuves contenant beaucoup de maçonnerie, les pistes suivantes sont proposées :

- Adapter les travaux de Lourenço *et coll.* (1997) et Lourenço (2000) pour tenir compte de l'expansion thermique des réfractaires et du fluage ;
- Adapter ces mêmes travaux lorsque le "mur" a plus d'une épaisseur de briques maçonnées ;
- Adapter ces mêmes travaux lorsque le "mur" comporte des briques de propriétés différentes ;
- Réaliser des essais prioritairement avec l'assemblage de briques du piédestal dans le côté de la cuve pour caler les paramètres de la loi adaptée précédemment ;
- Implémenter la loi dans le code FESh++ en ajoutant une surface de plasticité et une classe d'écrouissage.

Bibliographie

- AKANDE, H., 2003a. Caractérisation du comportement visqueux du béton réfractaire isolant Kast-O-Lite. START-Cuve, Confidentiel.
- AKANDE, H., 2003b. *Caractérisation thermomécanique du béton Kast-O-Lite*. Mémoire de maîtrise, Université Laval, Québec (Québec), Canada.
- ALLAIRE, C., 1992. Refractory lining for alumina electrolytic cells. *J. Am. Ceram. Soc.*, **75** (8), 2308–2311.
- ALLAIRE, C., 1993. Effect of collector bars and monolithic mix on thermomechanical stresses induced in the carbon blocks of aluminum reduction cells. Dans *Proc. TMS Light Metals*, pages 341–348. The Minerals, Metals & Materials Society, The Minerals, Metals & Materials Society, Warrendale, USA.
- ALLAIRE, C., 1994. Effect of the type of brick and mortar on the resistance to deflection of the flue walls in horizontal flue carbon baking furnaces. Dans *Proc. TMS Light Metals*, pages 551–564. The Minerals, Metals & Materials Society, The Minerals, Metals & Materials Society, Warrendale, USA.
- ANTHOINE, A., 1995. Derivation of the in-plane elastic characteristics of masonry through homogenization theory. *Int. J. Solids Structures*, **32** (2), 137–163.
- ARCHER, G., 1996. *Object-Oriented Finite Element Analysis*. Thèse de doctorat, University of California at Berkeley, Berkeley, California, USA.
- ARCHER, G., FENVES, G., THEWALT, C., 1999. A new object-oriented finite element analysis program architecture. *Computers and Structures*, **70** (1), 63–75.
- ARKHIPOV, G., PINGIN, V., 2001. Investigating cathode strained-stressed state in the aluminium electrolysis cell. Dans *Proc. TMS Light Metals*, pages 763–769. The Minerals, Metals & Materials Society, The Minerals, Metals & Materials Society, Warrendale, USA.
- ASADI, G., TOMLINSON, S., 1995. Impact of steel aging on the deformation of cathode shells. Dans *Proc. TMS Light Metals*, pages 381–385. The Minerals, Metals & Materials Society, The Minerals, Metals & Materials Society, Warrendale, USA.

- BALAY, S., GROPP, W. D., MCINNES, L. C., SMITH, B. F., 2002. PETSc Users Manual. Rapport technique ANL-95/11 - Revision 2.1.3, Argonne National Laboratory.
- BAO, Y., 1999. *An object-oriented implementation of die design problems in metal forging processes using the Finite Element Method*. Mémoire de maîtrise, Cornell University, USA.
- BARSTOW, M., RIPOSAN, J., CHISAMERA, M., 1997. Efficient cast iron microstructure for anode-collars in gray or ductile irons. Dans *Proc. TMS Light Metals*, pages 619–623. The Minerals, Metals & Materials Society, The Minerals, Metals & Materials Society, Warrendale, USA.
- BATHE, K.-J., 1996. *Finite Element Procedures*. Prentice-Hall Inc.
- BATI, S., RANOCCHIALI, G., ROVERO, L., 1999. Suitability of micromechanical model for elastic analysis of masonry. *ASCE J. Engrg. Mech.*, **125** (8), 922–929.
- BATOZ, J., DHATT, G., 1992. *Modélisation des structures par éléments finis*, tome 1, 2 & 3. Hermès, Paris, France.
- BAŽANT, Z., ADLEY, M., CAROL, I., JIRÁSEK, M., AKERS, A., ROHANI, B., CARGILE, J., CANER, F., 2000a. Large strain generalization of microplane model for concrete and application. *ASCE J. Engrg. Mech.*, **126** (9), 971–980.
- BAŽANT, Z., CANER, F., ADLEY, M., AKERS, A., 2000b. Fracturing rate effect and creep in microplane model for dynamics. *ASCE J. Engrg. Mech.*, **126** (9), 962–966.
- BAŽANT, Z., CANER, F., CAROL, I., ADLEY, M., AKERS, A., 2000c. Microplane model M4 for concrete. I : Formulation with work-conjugate deviatoric stress. *ASCE J. Engrg. Mech.*, **126** (9), 944–953.
- BEALL, M., SHEPHARD, M., 1989. An object-oriented framework for reliable numerical simulations. *Engineering with Computers*, **15** (1), 61–72.
- BENTZEN, H., HVISTENDAHL, J., JENSEN, M., MELÅS, J., SØRLIE, M., 1991. Gas preheating and start of Söderberg cells. Dans *Proc. TMS Light Metals*, pages 741–747. The Minerals, Metals & Materials Society, The Minerals, Metals & Materials Society, Warrendale, USA.
- BESSON, J., FOERCH, R., 1997. Large scale object-oriented finite element code design. *Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg.*, **142** (1-2), 165–187.
- BITTENCOURT, M., 2000. Using C++ templates to implement finite element classes. *Engineering Computations*, **17** (7), 775 – 788.
- BOGGS, J., GRESHEL, T., PORTER, W., SCHACHT, C., 1992. Thermal mechanical effects on the structural integrity and service life of ladle refractories in secondary metallurgical processes. *Iron and Steelmaker*, **19** (6), 33–37.
- BOURGEOIS, E., 1997. *Mécanique des milieux poreux en transformation finie : formulation des problèmes et méthodes de résolution*. Thèse de doctorat, École Nationale des Ponts et Chaussées, Champs-sur-Marne, France.

- BRAY, D., SMYTH, J., MCGEE, T., 1982. Thermal/strain history effects on creep of refractory concrete. *J. Am. Ceram. Soc.*, **65** (6), 275–280.
- BROCCA, M., 1999. *Material modeling and structural analysis with the microplane constitutive model*. Thèse de doctorat, Northwestern University, Evanston, Illinois, USA.
- BRUNK, F., 1994. Corrosion and behaviour of fireclay bricks of varying chemical composition used in the bottom lining of reduction cells. Dans *Proc. TMS Light Metals*, pages 477–482. The Minerals, Metals & Materials Society, The Minerals, Metals & Materials Society, Warrendale, USA.
- BUYUKOZTURK, O., SARWAR SHAREEF, S., 1985. Constitutive modeling of concrete in finite element analysis. *Computers and Structures*, **21** (3), 581–610.
- BUYUKOZTURK, O., TSENG, T.-M., 1982. Thermomechanical behaviour of refractory concrete linings. *J. Am. Ceram. Soc.*, **65** (6), 301–307.
- BUYUKOZTURK, O., TSENG, T.-M., 1983. Heat conduction through layered refractory linings. *ASCE J. Engrg. Mech.*, **109** (4), 1000–1015.
- CANER, F., BAŽANT, Z., 2000. Microplane model M4 for concrete. II : Algorithm and calibration. *ASCE J. Engrg. Mech.*, **126** (9), 954–961.
- CARNEGLIA, S., BARNA, G., 1992. *Handbook of industrial refractories technology. Principles, types, properties and applications*. Noyes Publications, New York, USA.
- CECCHI, A., DI MARCO, R., 2000. Homogenization of masonry walls with a computation oriented procedure. Rigid or elastic block ? *Euro. J. Mech. A/Solids*, **19**, 535–546.
- CERVERA, M., OLIVER, J., PRATO, T., 1999a. Thermo-chemo-mechanical model for concrete I : Hydration and aging. *ASCE J. Engrg. Mech.*, **125** (9), 1018–1027.
- CERVERA, M., OLIVER, J., PRATO, T., 1999b. Thermo-chemo-mechanical model for concrete II : Damage and creep. *ASCE J. Engrg. Mech.*, **125** (9), 1028–1039.
- CHEN, E., BUYUKOZTURK, O., 1985a. Methodology for thermomechanical analysis of brittle systems. *Am. Ceram. Soc. Bull.*, **64** (7), 982–988.
- CHEN, E., BUYUKOZTURK, O., 1985b. Thermomechanical behaviour and design of refractory linings for slagging gasifier. *Am. Ceram. Soc. Bull.*, **64** (7), 988–994.
- CHIEN, Y.-T., LEE, T.-F., KO, Y.-C., 1982. Thermal conductivity of fireclay and high-alumina refractory brick. *Ceramic Bulletin*, **61** (7), 718–723.
- CLELLAND, C., KENIRY, J., WELCH, B., 1982. A study of some aspects of the influence of cell operation on cathode life. Dans *Proc. TMS Light Metals*, pages 299–309. The Minerals, Metals & Materials Society, Metallurgical Society of AIME, New York, USA.
- COMMEND, S., ZIMMERMANN, T., 2001. Object-oriented nonlinear finite element programming : a primer. *Advances in Engineering Software*, **32** (8), 611–628.

- CONCAS, G., GREGU, F., SOLETTA, G., 1989. The importance of pot shell design on the life of electrolytic cells. Dans *Proc. TMS Light Metals*, pages 1041–1046. The Minerals, Metals & Materials Society, The Minerals, Metals & Materials Society, Warrendale, USA.
- COUSSY, O., 1995. *Mechanics of porous continua*. John Wiley & Sons Ltd., Chichester, UK.
- CRISFIELD, M., 1991. *Non-linear finite element analysis of solids and structures*, tome 1 : Essentials. John Wiley & Sons Ltd., Chichester, UK, quatrième édition.
- CRISFIELD, M., 1997. *Non-linear finite element analysis of solids and structures*, tome 2 : Advanced Topics. John Wiley & Sons Ltd., Chichester, UK.
- CROSS, M., PERICLOUS, K., LÉBOUCHER, L., CROFT, T., BOJAREVICS, V., WILLIAMS, A., 2000. Multi-physics modelling of aluminum reduction cells. Dans *Proc. TMS Light Metals*, pages 285–289. The Minerals, Metals & Materials Society, The Minerals, Metals & Materials Society, Warrendale, USA.
- DAM, C., BREZNY, R., GREEN, D., 1990. Compressive behaviour and deformation-mode map of an open cell alumina. *J. Mater. Res.*, **5** (1), 163–171.
- D'AMOURS, G., 2004. *Développement de lois constitutives thermomécaniques pour les matériaux à base de carbone lors du préchauffage d'une cuve d'électrolyse*. Thèse de doctorat, Université Laval, Québec (Québec), Canada.
- D'AMOURS, G., FAFARD, M., GAKWAYA, A., 2003a. Modèle d'élastoplasticité pour matériaux carbonés. Rapport technique GCT-03-06, Université Laval, Faculté des sciences et de génie ; pour Alcan International Limitée.
- D'AMOURS, G., FAFARD, M., GAKWAYA, A., MIRCHI, A., 2003b. Multi-Axial mechanical behavior of the carbon cathode : understanding, modeling and identification. Dans *Proc. TMS Light Metals*, pages 633–639. Metallurgical Society of AIME, Metallurgical Society of AIME, Warrendale, USA.
- DAS, S., MITRA, A., PODDAR, P., 1996. Thermal analysis of hydrated calcium aluminates. *Journal of Thermal Analysis*, **47**, 765–774.
- DE BORST, R., 1987. Smearing cracking, plasticity, creep and thermal loading – a unified approach. *Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg.*, **62**, 89–110.
- DE BORST, R., MÜHLHAUS, H., 1992. Gradient-dependent plasticity : formulation and algorithmic aspects. *Int. J. Num. Meth. Engrg.*, **35**, 521–539.
- DE BORST, R., PAMIN, J., 1996. Some novel developments in finite element procedures for gradient-dependent plasticity. *Int. J. Num. Meth. Engrg.*, **39**, 2477–2505.
- DE BORST, R., PAMIN, J., GEERS, M., 1999. On coupled gradient-dependent plasticity and damage theories with a view to localization analysis. *Euro. J. Mech. A/Solids*, **18**, 939–962.

- DE BORST, R., PEETERS, P., 1989. Analysis of concrete structures under thermal loading. *Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg*, **77**, 293–310.
- DE SCHUTTER, G., TAERWE, L., 1996. Degree of hydration-based description of mechanical properties of early age concrete. *Materials and Structures/Matériaux et Constructions*, **29**, 335–344.
- DELL, M., 1985. Potlining failure modes. Dans *Proc. TMS Light Metals*, pages 957–966. Metallurgical Society of AIME, Metallurgical Society of AIME, New York, USA.
- DHATT, G., TOUZOT, G., 1984. *Une présentation de la méthode des éléments finis*. UTC Maloine, Compiègne, France, deuxième édition.
- DUNN, M., GALADARI, Q., 1997. An analysis of the electrical preheat technique based on the Start-Up of the CD200 prototype at Dubai Aluminium Co. Ltd. Dans *Proc. TMS Light Metals*, pages 247–251. The Minerals, Metals & Materials Society, The Minerals, Metals & Materials Society, Warrendale, USA.
- DUPUIS, M., 2001. Usage of a full 3D transient thermo-electric F.E. model to study the thermal gradient generated in the lining during a coke preheat. Dans *Proc. TMS Light Metals*. The Minerals, Metals & Materials Society, The Minerals, Metals & Materials Society, Warrendale, USA.
- DUPUIS, M., ASADI, G., READ, C., KOBOS, A., JAKUBOWSKI, A., 1991. Cathode shell stress modelling. Dans *Proc. TMS Light Metals*, pages 427–430. The Minerals, Metals & Materials Society, The Minerals, Metals & Materials Society, Warrendale, USA.
- DUPUIS, M., ASADI, G., READ, M., THELLEND, R., TOMLINSON, S., TABSH, I., 1993. Thermal study of the coke preheating for Hall-Héroult cell. Dans *Light metals processing and applications : proceedings of the International Symposium on Light Metals Processings and Applications*, pages 93–100. Metallurgical Society of CIM. Light Metals Section, Canadian Institute of Mining, Metallurgy and Petroleum, Québec City, Canada.
- DUPUIS, M., TABSH, I., 1994a. Evaluation of thermal stresses due to coke preheat of a Hall-Héroult cell. Dans *ANSYS, Inc. Conference and Exhibition Proceedings*, pages 3.15–3.23. SAS IP, SAS IP, Pittsburgh, USA.
- DUPUIS, M., TABSH, I., 1994b. Thermo-Electric Analysis of the Grande-Baie Aluminum Reduction Cell. Dans *Proc. TMS Light Metals*, pages 339–342. The Minerals, Metals & Materials Society, The Minerals, Metals & Materials Society, Warrendale, USA.
- ETSE, G., WILLAM, K., 1994. A fracture energy-based constitutive formulation for inelastic behaviour of plain concrete. *ASCE J. Engrg. Mech.*, **120** (9), 1983–2011.
- ETSE, G., WILLAM, K., 1996. Integration algorithms for concrete plasticity. *Engineering Computations*, **13** (8), 38–65.
- EUSTACHE, P., MEUNIER, G., COULOMB, J., 1996. Finite Element Toolbox for Generic Coupling (magnetic, thermal, etc.). *IEEE Transactions on Magnetics*, **32** (3), 1461–1464.

- EVEN, D., 2003. Modélisation thermo-mécanique du banc d'essais BERTA et identification de paramètres par la méthode des éléments finis. Rapport technique, Université Laval, Faculté des sciences et de génie ; pour Alcan International Limitée et l'Université de Technologie de Compiègne (France).
- FAFARD, M., BOUDJELAL, M., BISSONNETTE, B., CLOUTIER, A., 2001. Three-dimensional viscoelastic model with nonconstant coefficients. *ASCE J. Engrg. Mech.*, **127** (8), 808–815.
- FALLAH, N., BAILEY, C., CROSS, M., TAYLOR, G., 2000. Comparison of finite element and finite volume methods application in geometrically nonlinear stress analysis. *Applied Mathematical Modelling*, **24** (7), 439–455.
- FEENSTRA, P., DE BORST, R., 1995. Constitutive model for reinforced concrete. *ASCE J. Engrg. Mech.*, **121** (5), 587–595.
- FEENSTRA, P., DE BORST, R., 1996. A composite plasticity model for concrete. *Int. J. Solids Structures*, **707–730** (33), 5.
- FOERCH, R., BESSON, J., CAILLETAUD, G., PILVIN, P., 1997. Polymorphic constitutive equations in finite element codes. *Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg.*, **141** (3-4), 355–372.
- FREDMAN, T., SAXÉN, H., 1998. Model for temperature profile estimation in the refractory of a metallurgical ladle. *Metallurgical and Materials Trans. /B*, **29B**, 651–659.
- GAJDA, J., MCGEE, T., 1997. Elastic properties of a calcium aluminate-cement-based concrete. *Am. Ceram. Soc. Bull.*, **76** (4), 81–85.
- GIBSON, L., 1989. Modelling the mechanical behaviour of cellular materials. *Materials science & engineering A : Structural materials : Properties, microstructure & processing*, **A110** (1-2), 1–36.
- GIBSON, L., ASHBY, M., 1997. *Cellular solids – structure and properties*. Cambridge Solid State Science Series. Cambridge University Press, Cambridge, UK, deuxième édition.
- GIBSON, L., ASHBY, M., SCHAJER, G., 1982a. The mechanics of three-dimensional cellular materials. *Proc. Roy. Soc. London A*, **382**, 43–59.
- GIBSON, L., ASHBY, M., SCHAJER, G., 1982b. The mechanics of two-dimensional cellular materials. *Proc. Roy. Soc. London A*, **382**, 25–42.
- GOULET, P., 2004. *Modélisation du comportement thermo-électro-mécanique des interfaces de contact d'une cuve de Hall-Héroult*. Thèse de doctorat, Université Laval, Québec (Québec), Canada.
- GREENWOOD, R., URU, W., 1990. Development of electrolytic cell pre-heating (bake-out) at NZAS. Dans *CHEMECA '90, Australasian Chemical Engineering Conference*, pages 24–31. Auckland University Centre for Continuing Education, Auckland, N.Z.
- GRJOTHEIM, K., KVANDE, H., 1993. *Introduction to aluminium electrolysis*. Aluminium-Verlag, Düsseldorf, Germany, deuxième édition.

- GUILLIATT, I., CHANDLER, H., 1977. Stress analysis in carbon beams during electrolysis. Dans *Proc. TMS Light Metals*, tome 1, page 437. Metallurgical Society of AIME, Metallurgical Society of AIME, New York, USA.
- HAASE, R., 1990. *Thermodynamics of irreversible processes*. Dover, New York, USA. Republication of 1969 Addison-Wesley's translation of the 1963 German original book. Corrected and slightly enlarged.
- HALE, W., 1989. Improving the useful life of aluminum industry cathodes. *JOM*, pages 20–25.
- HELLMICH, C., ULM, F., MANG, A., 1999. Consistent linearization in finite element analysis of coupled chemo-thermal problems with exo- or endothermal reactions. *Comp. Mech.*, **24**, 238–244.
- HILTMANN, F., MEULEMANN, K., 2000. Ramming paste properties and cell performance. Dans *Proc. TMS Light Metals*, pages 405–411. The Minerals, Metals & Materials Society, The Minerals, Metals & Materials Society, Warrendale, USA.
- HOLMAN, J., 1997. *Heat transfer*. McGraw-Hill, New York, USA, 8^e édition.
- HOLZAPFEL, G., 2000. *Nonlinear solid mechanics. A continuum approach for engineering.*. John Wiley & Sons Ltd., Chichester, England.
- HOMSI, P., PEYNEAU, J., REVERDY, M., 2000. Overview of process control in reduction cells and potlines. Dans *Proc. TMS Light Metals*, pages 223–230. The Minerals, Metals & Materials Society, The Minerals, Metals & Materials Society, Warrendale, USA.
- HUANG, J., GIBSON, L., 1991. Fracture toughness of brittle foams. *Acta metall. mater.*, **39** (7), 1627–1636.
- JIRÁSEK, M., 2001. *Continuous and Discontinuous Modelling of Cohesive Frictional Materials*, tome 568 de *Lecture Notes in Physics*, chapitre Modeling of localized damage and fracture in quasibrittle materials, pages 17–29. Springer, Berlin, Germany.
- JOHANSSON, S., 1995. Chemical processes in cathode refractories and insulation during pot life. Dans *Proc. TMS Light Metals*, pages 479–492. The Minerals, Metals & Materials Society, The Minerals, Metals & Materials Society, Warrendale, USA.
- JOHNSON, W., 1971. Observations of the relationship between bake out uniformity and potlife for a monolithic pot line at Mead Works. Dans *Proc. TMS Light Metals*, pages 437–442. Metallurgical Society of AIME, Metallurgical Society of AIME, New York, USA.
- KANG, H., WILLAM, K., 1999. Localization characteristics of triaxial concrete model. *ASCE J. Engrg. Mech.*, **125** (8), 941–950.
- KHOURY, G., GRAINGER, B., SULLIVAN, P., 1985a. Strain of concrete during first heating to 600°C under load. *Magazine of Concrete Research*, **37** (133), 195–215.
- KHOURY, G., GRAINGER, B., SULLIVAN, P., 1985b. Transient thermal strain of concrete : litterature review, conditions within specimen and behaviour of individual constituents. *Magazine of Concrete Research*, **37** (132), 131–144.

- KONG, X., CHEN, D., 1995. An object-oriented design of FEM programs. *Computers and Structures*, **57** (1), 157–166.
- KUHL, E., RAMM, E., DE BORST, R., 2000. An anisotropic gradient damage model for quasi-brittle materials. *Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg*, **183**, 87–103.
- LABONTÉ, J., 1991. *Étude expérimentale du coefficient de friction entre le béton et acier*. Mémoire de maîtrise, Université Laval, Ste-Foy, Québec, Canada.
- LOTFI, H., 1992. *Finite element analysis of fracture of concrete and masonry structures*. Thèse de doctorat, University of Colorado, Boulder, USA.
- LOTFI, H., 1994. Interface model applied to fracture of masonry structures. *ASCE J. Engrg. Mech.*, **120** (1), 63–80.
- LOURENÇO, P., 2000. Anisotropic softening model for masonry plates and shells. *ASCE J. Struct. Engrg.*, **126** (9), 1008–1016.
- LOURENÇO, P., DE BORST, R., ROTS, J., 1997. A plane stress softening plasticity model for orthotropic materials. *Int. J. Num. Meth. Engrg*, **40**, 4033–4057.
- LOURENÇO, P., ROTS, J., 1997. Multisurface interface model for analysis of masonry structures. *ASCE J. Engrg. Mech.*, **123** (7), 660–668.
- LOURENÇO, P., ROTS, J., BLAAUWENDRAAD, J., 1998. Continuum model for masonry : parameter estimation and validation. *ASCE J. Struct. Engrg.*, **124** (6), 642–652.
- LUCIANO, R., SACCO, E., 1998. A damage model for masonry structures. *Euro. J. Mech. A/Solids*, **17** (2), 285–303.
- MAHARAJ, D., IMERY, J., ZÁRATE, J., LAZARDE, J., 1991. Investigation on early cathode failure. Dans *Proc. TMS Light Metals*, pages 483–487. The Minerals, Metals & Materials Society, The Minerals, Metals & Materials Society, Warrendale, USA.
- MAI, W., HENNEBERGER, G., 2000. Object-Oriented Design of Finite Element Calculations with Respect to Coupled Problems. *IEEE Transactions on Magnetics*, **36** (4), 1677–1681.
- MAITI, S., GIBSON, L., ASHBY, M., 1984a. Deformation and energy absorption diagrams for cellular solids. *Acta Metall.*, **32** (11), 1963–1975.
- MAITI, S., GIBSON, L., ASHBY, M., 1984b. Fracture toughness of brittle cellular solids. *Scripta Metallurgica*, **18**, 213–217.
- MARCEAU, D., 2001. *Modélisation du contact tridimensionnel avec frottement en grandes transformations et son application à l'étude des dispositifs d'ancrages multitorons*. Thèse de doctorat, Université Laval, Québec (Québec), Canada.

- MEGAHED, M., SAYED, S., HASAN, M., MOHAMMAD, S., 1996. Finite element modeling for structural analysis of shells of reduction cells. Dans *Proc. TMS Light Metals*, pages 375–381. The Minerals, Metals & Materials Society, The Minerals, Metals & Materials Society, Warrendale, USA.
- MOHAMMED, S., ABDULWAHAB, M., ARIF, A., DAHAB, O., 1997. Mathematical modelling for coke bed preheating of aluminum reduction cell. Dans *Proc. TMS Light Metals*, pages 457–461. The Minerals, Metals & Materials Society, The Minerals, Metals & Materials Society, Warrendale, USA.
- MOHANTY, B., SATAYAYUT, J., 1992. Dynamic model for ladle preheater performance evaluation. *Int. J. Energy. Res.*, **16**, 51–60.
- NONNET, E., LEQUEUX, N., BOCH, P., 1999. Elastic properties of high alumina cement castables from room temperature to 1600°C. *J. Eur. Ceram. Soc.*, **19**, 1575–1583.
- OMARSSON, S., PETERSSON, H., DAHLBLOM, O., 2002. Finite Element Simulations of Moisture Transport and Moisture-Related Warping in Wooden Products. Fifth World Congress on Computational Mechanics, July 7-12, 2002, Vienna, Austria.
- PARENT, J., 2001. Caractérisation préliminaire du béton réfractaire isolant. Rapport de stage de premier cycle, START-Cuve.
- PATZÁK, B., BITTNAR, Z., 2001. Design of object oriented finite element code. *Advances in Engineering Software*, **32** (10-11), 759–767.
- PERETZ, P., 1983. *Mullite matrix refractories : mechanical properties and thermal shock damage*. Thèse de doctorat, Pennsylvania State University, USA.
- PÉREZ-FOGUET, A., 2000. *Numerical modelling of complex geomechanical problems*. Thèse de doctorat, Universitat Politècnica de Catalunya – Escola Tècnica Superior d’Enginyers, Barcelona, Spain.
- PÉREZ-FOGUET, A., HUERTA, A., 1999. Plastic flow potential for cone region of MRS-Lade model. *ASCE J. Engrg. Mech.*, **125** (3), 364–366.
- PÉREZ-FOGUET, A., RODRÍGUEZ-FERRAN, A., HUERTA, A., 2000a. Numerical differentiation for local and global tangent operators in computational plasticity. *Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg*, **189** (1), 277–296.
- PÉREZ-FOGUET, A., RODRÍGUEZ-FERRAN, A., HUERTA, A., 2000b. Numerical differentiation for non-trivial consistent tangent matrices : An application to the MRS-Lade model. *Int. J. Num. Meth. Engrg*, **48** (2), 159–184.
- PEYNEAU, J., 1989. Design of highly reliable pot linings. Dans *Proc. TMS Light Metals*, pages 175–181. The Minerals, Metals & Materials Society, The Minerals, Metals & Materials Society, Warrendale, USA.

- REDDY, N., MUKERJI, J., 1991. Silicon nitride-silicon carbide refractories produced by reaction bonding. *J. Am. Ceram. Soc.*, **74** (5), 1139–1141.
- RENDÓN, J., RAO, M., 1998. Characterization of mechanical properties and microstructures of the grey cast iron melt utilized for the assembly of the anodes. Dans *Proc. TMS Light Metals*, pages 627–635. The Minerals, Metals & Materials Society, The Minerals, Metals & Materials Society, Warrendale, USA.
- RÉSEAU TRANS-AL, GOUVERNEMENT DU CANADA, 2000. Carte routière technologique de l'industrie canadienne de l'aluminium.
- RICHARD, D., 2000. *Conception des tourillons d'anode en usage dans une cuve de Hall-Héroult à l'aide de la méthode des éléments finis*. Mémoire de maîtrise, Université Laval, Québec (Québec), Canada.
- RICHARD, D., FAFARD, M., DÉSILETS, M., 2003a. Thermo-chemo-mechanical aspects of refractory concrete used in a Hall-Héroult cell. Dans *Proc. TMS Light Metals*, pages 283–290. The Minerals, Metals & Materials Society, The Minerals, Metals & Materials Society, Warrendale, USA.
- RICHARD, D., FAFARD, M., LACROIX, R., CLÉRY, P., MALTAIS, Y., 2000. Thermo-electro-mechanical modeling of the contact between steel and carbon cylinders using the finite element method. Dans *Proc. TMS Light Metals*, pages 523–528. The Minerals, Metals & Materials Society, The Minerals, Metals & Materials Society, Warrendale, USA.
- RICHARD, D., FAFARD, M., LACROIX, R., CLÉRY, P., MALTAIS, Y., 2001. Aluminum reduction cell anode stub hole design using weakly coupled thermo-electro-mechanical finite element models. *Finite Elements in Analysis and Design*, **37** (4), 287–304.
- RICHARD, D., FAFARD, M., LACROIX, R., CLÉRY, P., MALTAIS, Y., 2003b. Carbon to cast iron electrical contact resistance constitutive model for finite element analysis. *Journal of Material Processing Technology*, **132** (1–3), 119–131.
- RICKARDS, W., YOUNG, P., KENIRY, J., SHAW, P., 1983. Thermal bake-out of reduction cell cathodes - advantages and problem areas. Dans *Proc. TMS Light Metals*, pages 857–866. The Minerals, Metals & Materials Society, Metallurgical Society of AIME, New York, USA.
- RUSSELL, R., HALLUM, G., CHEN, E., 1993. Thermomechanical studies of obround ladles during preheating and use. *Iron and Steelmaker*, **20** (6), 37–43.
- SAHA, J., AJMANI, S., CHATTERJEE, A., 1991. Mathematical model for determining preheating schedule of dolomite ladles in melt shops. *Iron and Steelmaker*, **18** (6), 417–422.
- SAYED, H., MEGAHED, M., DAWI, F., ABDALLA, S., 1997. Identification of the nonlinear swelling pressure distribution of the aluminum reduction cell. Dans *Proc. TMS Light Metals*, pages 303–308. The Minerals, Metals & Materials Society, The Minerals, Metals & Materials Society, Warrendale, USA.

- SAYED-AHMED, E., SHRIVE, N., 1996. Non-linear finite-element model of hollow masonry. *ASCE J. Engrg. Mech.*, **122** (6), 683–690.
- SCHACHT, C., 1984. Structural behaviour of teeming ladles lined with high-alumina refractories. *Iron and Steel Engineer*, **61** (8), 33–40.
- SCHACHT, C., 1987. Lining life of ladles as related to shell flexing and lining properties. *Iron and Steel Engineer*, **64** (6), 48–52.
- SCHACHT, C., 1993. Improved mechanical material property definition for predicting the thermomechanical behavior of refractory linings of teeming ladles. *J. Am. Ceram. Soc.*, **76** (1), 202–206.
- SCHACHT, C., 1995. *Refractory linings. Thermomechanical design and applications*, tome 95 de *Mechanical Engineering. A series of textbooks and reference books*. Marcel Dekker Inc., New York, USA.
- SCHACHT, C., 1997. Thermomechanical design considerations for castable linings. *Canadian Ceramics Quarterly*, **66** (3), 175–182.
- SCHMITT, N., BERTHAUD, Y., POIRIER, J., 2000. Tensile behaviour of magnesia carbon refractories. *J. Euro. Ceram. Soc.*, **20**, 2239–2248.
- SCHØNING, C., GRANDE, T., SILJAN, O., 1999. Cathode refractory materials for aluminum reduction cell. Dans *Proc. TMS Light Metals*, pages 231–238. The Minerals, Metals & Materials Society, The Minerals, Metals & Materials Society, Warrendale, USA.
- SERCOMBE, J., HELLMICH, C., ULM, F., MANG, H., 2000a. Modeling of early-age creep of shotcrete. I. Model and model parameters. *ASCE J. Engrg. Mech.*, **126** (3), 284–291.
- SERCOMBE, J., HELLMICH, C., ULM, F., MANG, H., 2000b. Modeling of early-age creep of shotcrete. II : Application to tunneling. *ASCE J. Engrg. Mech.*, **126** (3), 292–299.
- SHREYER, H., ZUO, Q., MAJI, A., 1994. Anisotropic plasticity model for foams and honeycombs. *ASCE J. Engrg. Mech.*, **120** (9), 1913–1930.
- SIMO, J., HUGHES, T., 1998. *Computational inelasticity*, tome 7 de *Interdisciplinary applied mathematics*. Springer-Verlag, New York, USA.
- SIMO, J., TAYLOR, R., 1985. Consistent tangent operators for rate-independent elastoplasticity. *Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg.*, **48**, 101–118.
- SØRLIE, M., GRAN, H., ØYE, H., 1995. Property change of cathode lining materials during cell operation. Dans *Proc. TMS Light Metals*, pages 497–505. The Minerals, Metals & Materials Society, The Minerals, Metals & Materials Society, Warrendale, USA.
- SØRLIE, M., ØYE, H., 1982. A survey on deterioration of carbon linings in aluminum reduction cells. *Metallwissenschaft und Technik*, **36** (6), 635–641.
- SØRLIE, M., ØYE, H., 1994. *Cathodes in aluminium electrolysis*. Aluminium-Verlag, Düsseldorf, Germany, deuxième édition.

- SØRLIE, M., ØYE, H., HVISTENDAHL, J., 1993. Early failure mechanisms in aluminium cell cathodes. Dans *Proc. TMS Light Metals*, pages 299–308. The Minerals, Metals & Materials Society, The Minerals, Metals & Materials Society, Warrendale, USA.
- STROUSTRUP, B., 1991. *The C++ programming language*. Addison-Wesley, deuxième édition.
- SUN, Y., FORSLUND, K., SØRLIE, M., ØYE, H., 2004. 3-D modelling of thermal and sodium expansion in Soderberg aluminium reduction cells. Dans *Proc. TMS Light Metals*, pages 587–592. The Minerals, Metals & Materials Society, The Minerals, Metals & Materials Society, Warrendale, USA.
- SUN, Y., WANG, Q., RYE, K., SØRLIE, M., ØYE, H., 2003. Modelling of thermal and sodium expansion in prebaked aluminium reduction cells. Dans *Proc. TMS Light Metals*, pages 603–610. The Minerals, Metals & Materials Society, The Minerals, Metals & Materials Society, Warrendale, USA.
- SVENSSON, S., TORATTI, T., 2002. Mechanical response of wood perpendicular to grain when subjected to changes of humidity. *Wood science and technology*, **36**, 145–156.
- TABEREAUX, A., 1982. Thermal insulation materials for reduction cell cathodes. Dans *Proc. TMS Light Metals*, pages 571–593. The Minerals, Metals & Materials Society, Metallurgical Society of AIME, Warrendale, USA.
- TABEREAUX, A., 1992. Reviewing advances in cathode refractory materials. *JOM*, pages 20–26.
- THELANDERSSON, S., 1987. Modeling of combined thermal and mechanical action in concrete. *ASCE J. Engrg. Mech.*, **113** (6), 893–906.
- TOIA, G., SOLETTA, G., 1979. Application of a mathematical model to ensure optimum potshell design. Dans *Proc. TMS Light Metals*, pages 495–516. Metallurgical Society of AIME, Metallurgical Society of AIME, New York, USA.
- TRIANTAFILLOU, T., GIBSON, L., 1990a. Constitutive modeling of elastic-plastic open-cell foams. *ASCE J. Engrg. Mech.*, **116** (12), 2772–2778.
- TRIANTAFILLOU, T., GIBSON, L., 1990b. Multiaxial failure criteria for brittle foams. *Int. J. Mech. Sci.*, **32** (6), 479–496.
- ULM, F., ACKER, P., LÉVY, M., 1999a. The "Chunnel" fire. II : Analysis of concrete damage. *ASCE J. Engrg. Mech.*, **125** (3), 283–289.
- ULM, F., COUSSY, O., 1995. Modeling of thermochemomechanical couplings of concrete at early age. *ASCE J. Engrg. Mech.*, **121** (7), 785–794.
- ULM, F., COUSSY, O., 1996. Strength growth as chemo-plastic hardening in early age concrete. *ASCE J. Engrg. Mech.*, **122** (12), 1123–1132.
- ULM, F., COUSSY, O., BAŽANT, Z., 1999b. The "Chunnel" fire. I : Chemoplastic softening in rapidly heated concrete. *ASCE J. Engrg. Mech.*, **125** (3), 272–282.

- WALTON, C., 1983. *Manuel des fontes moulées*. Éditions techniques des industries de la fonderie. Translated from Gray and Ductile iron castings handbook ; including data on gray, ductile, white, and high alloy irons.
- WARD, S., CROSS, H., 1955. *Elevated temperature properties of carbon steels*. Numéro 180 dans ASTM special technical publication. American Society for Testing Materials, Philadelphia, USA. Joint Committee on Effect of Temperature on the Properties of Metals. Data and Publications Panel.
- WEI, M., 1986. Design of refractory lining and steel shell for caster ladles. *Iron and Steel Engineer*, **63** (4), 58–69.
- WITASSE, R., 2000. *Contribution à la compréhension du comportement d'une coque d'aérofrigorant vieilli*. Thèse de doctorat, INSA, UGRC-Structures, Lyon, France.
- WOODILLA, D., BUONOMO, M., BAR-ON, I., KATZ, R., WHALEN, T., 1993. Elevated temperature behavior of high-strength silicon carbide. *J. Am. Ceram. Soc.*, **76** (1), 249–252.
- YOKEL, F., MATHEY, R., DIKKERS, R., 1971. Strength of Masonry Walls Under Compressive and Transverse Loads. Rapport technique 34, National Bureau of Standards, Building Science Series, Washington DC, USA.
- YOUHEI, W., SHIHUAN, Y., 1991. Optimum investigation on structure of aluminum reduction cell potshell. Dans *Proc. TMS Light Metals*, pages 431–434. The Minerals, Metals & Materials Society, The Minerals, Metals & Materials Society, Warrendale, USA.
- ZABARAS, N., SRIKANTH, A., 1999a. An object-oriented programming approach to the Lagrangian FEM analysis of large inelastic deformations and metal-forming processes. *Int. J. Num. Meth. Engrg.*, **45**, 399–445.
- ZABARAS, N., SRIKANTH, A., 1999b. Using objects to model finite deformation plasticity. *Engineering with computers*, **15**, 37–60.
- ZHAO, J., ZHANG, Z., WANG, W., LIU, G., CHENG, Z., 2000. The properties of Si_3N_4 -bonded SiC material for aluminium reduction cell. Dans *Proc. TMS Light Metals*, pages 443–447. The Minerals, Metals & Materials Society, The Minerals, Metals & Materials Society, Warrendale, USA.

Annexe A

Modèles élastoplastiques

A.1 Invariants des tenseurs de second ordre

Les invariants d'un tenseur de second ordre \mathbf{A} sont définis de (A.1) à (A.3).

$$I_1 = \text{tr}[\mathbf{A}] \quad (\text{A.1})$$

$$I_2 = \frac{1}{2} (\mathbf{A}_{11}\mathbf{A}_{22} - \mathbf{A}_{12}\mathbf{A}_{21} + \mathbf{A}_{22}\mathbf{A}_{33} - \mathbf{A}_{23}\mathbf{A}_{32} + \mathbf{A}_{11}\mathbf{A}_{33} - \mathbf{A}_{13}\mathbf{A}_{31}) \quad (\text{A.2})$$

$$I_3 = \det[\mathbf{A}] \quad (\text{A.3})$$

Les invariants du tenseur déviateur de \mathbf{A} , défini par l'équation (A.4), sont donnés par les équations (A.5) et (A.6).

$$\mathbf{A}' = \mathbf{A} - \frac{1}{3}I_1\delta \quad (\text{A.4})$$

$$J_2 = I_2(\mathbf{A}') = \frac{1}{3} (\mathbf{A}_{11}^2 + \mathbf{A}_{22}^2 + \mathbf{A}_{33}^2 - \mathbf{A}_{11}\mathbf{A}_{22} - \mathbf{A}_{11}\mathbf{A}_{33} - \mathbf{A}_{22}\mathbf{A}_{33} + 3\mathbf{A}_{12} + 3\mathbf{A}_{13} + 3\mathbf{A}_{23}) \quad (\text{A.5})$$

$$J_3 = I_3(\mathbf{A}') = \det[\mathbf{A}'] \quad (\text{A.6})$$

A.2 Élastoplasticité classique

A.2.1 Généralités

D'abord, les postulats de l'élastoplasticité classique, à savoir l'existence d'une surface de plasticité f , d'un potentiel d'écoulement g et d'un potentiel d'écrouissage h sont adoptés. Les travaux de Crisfield (1991, 1997) ou encore de Simo et Hughes (1998) pourront, entre autres, être consultés pour plus de détails sur les fondements de l'élastoplasticité classique. Ensuite, une décomposition additive des déformations est considérée, tel que montré en (A.7).

$$d\mathbf{E} = \overbrace{d\mathbf{E}^e}^{\text{élastique}} + \overbrace{d\mathbf{E}^P}^{\text{pseudo-plastique}} + \overbrace{\sum_{i=1}^n d\mathbf{E}_i^{\text{additionnelle}}}_{\text{autres}} \quad (\text{A.7})$$

En posant la loi de Hooke, les contraintes s'écrivent selon (A.8).

$$d\mathbf{S} = \mathcal{H} : \left(d\mathbf{E} - d\mathbf{E}^P - \sum_{i=1}^n d\mathbf{E}_i^{\text{additionnelle}} \right) \quad (\text{A.8})$$

Un vecteur de forces d'écrouissage $\tilde{\zeta}$ pousse les variables d'écrouissage $\tilde{\chi}$. Leur loi d'écoulement et celle des déformations plastiques s'écrivent selon les équations (A.9) et (A.10).

$$d\tilde{\chi} = d\lambda \frac{\partial h}{\partial \tilde{\zeta}} \quad (\text{A.9})$$

$$d\mathbf{E}^P = d\lambda \frac{\partial g}{\partial \mathbf{S}} = d\lambda \mathbf{m} \quad (\text{A.10})$$

Le terme $d\lambda$ est le *multiplicateur plastique*. Nous suivrons ici le formalisme de Coussy (1995) pour les développements suivants. Soit $d_S f$ la différentielle du critère de plasticité $f(\mathbf{S}, \tilde{\zeta}(\tilde{\chi}))$ à contraintes constantes, tel montré à l'équation (A.11).

$$d_S f = \frac{\partial f}{\partial \tilde{\zeta}} \frac{\partial \tilde{\zeta}}{\partial \tilde{\chi}} d\tilde{\chi} \quad (\text{A.11})$$

En introduisant (A.9) dans (A.11), on obtient l'équation (A.12).

$$d_S f = \frac{\partial f}{\partial \tilde{\zeta}} \frac{\partial \tilde{\zeta}}{\partial \tilde{\chi}} \frac{\partial h}{\partial \tilde{\zeta}} d\lambda = -A d\lambda \quad (\text{A.12})$$

Le terme A est le module d'érouissage, obtenu de l'équation (A.12), et il est défini par l'équation (A.13).

$$A = -\frac{\partial f}{\partial \tilde{\zeta}} \frac{\partial \tilde{\zeta}}{\partial \tilde{\chi}} \frac{\partial h}{\partial \tilde{\zeta}} \quad (\text{A.13})$$

Les conditions classiques de Kuhn-Tucker se lisent tel qu'en (A.14).

$$\begin{aligned} d\lambda &\geq 0 \\ f &\leq 0 \\ f d\lambda &= 0 \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

De plus, la condition de persistance, exprimée selon (A.15), doit être respectée.

$$d f d\lambda = 0 \quad (\text{A.15})$$

Cette condition implique que la différentielle totale $df = d f_S + d f_{\tilde{\zeta}}$ doit être nulle (A.15) lorsque $d\lambda$ ne l'est pas ; par conséquent, $d f_{\tilde{\zeta}} - A d\lambda = 0$, ce qui implique l'équation (A.16).

$$d f = \frac{\partial f}{\partial \mathbf{S}} : d\mathbf{S} - A d\lambda = 0 \quad (\text{A.16})$$

En remplaçant $d\mathbf{S}$ par sa définition en (A.8) et en utilisant (A.10) on obtient l'équation (A.17).

$$\begin{aligned} d f &= \frac{\partial f}{\partial \mathbf{S}} : \mathcal{H} : \left(d\mathbf{E} - d\mathbf{E}^P - \sum_{i=1}^n d\mathbf{E}_i^{\text{additionnelle}} \right) - A d\lambda = 0 \\ d f &= \frac{\partial f}{\partial \mathbf{S}} : \mathcal{H} : \left(d\mathbf{E} - \sum_{i=1}^n d\mathbf{E}_i^{\text{additionnelle}} \right) - d\lambda \left(\frac{\partial f}{\partial \mathbf{S}} : \mathcal{H} : \frac{\partial g}{\partial \mathbf{S}} + A \right) \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

Cela nous permet d'identifier $d\lambda$ selon (A.18).

$$d\lambda = \frac{\frac{\partial f}{\partial \mathbf{S}} : \mathcal{H} : \left(d\mathbf{E} - \sum_{i=1}^n d\mathbf{E}_i^{\text{additionnelle}} \right)}{\frac{\partial f}{\partial \mathbf{S}} : \mathcal{H} : \frac{\partial g}{\partial \mathbf{S}} + A} = \frac{\mathbf{n} : \mathcal{H} : d\mathbf{E}^m}{\mathbf{n} : \mathcal{H} : \mathbf{m} + A} \quad (\text{A.18})$$

où $d\mathbf{E}^m$ est l'incrément de déformation mécanique.

Il est clair que la valeur de $d\lambda$ est une fonction complexe des contraintes ; elle est donc calculée numériquement de manière itérative.

A.2.2 Intégration de Euler implicite

Il existe plusieurs algorithmes pour rabattre numériquement les contraintes lors de l'intégration d'un incrément de déformation élastoplastique. Tel qu'expliqué par Simo et Taylor (1985), les algorithmes implicites de type "return mapping" ont démontré leur grande robustesse et leur efficacité dans le cas de la plasticité classique. Géométriquement, il s'agit de trouver le point de projection le plus près d'un ensemble convexe. Algorithmiquement, la méthodologie proposée par Crisfield (1997) implique une prédiction élastique, puis un retour (correction) vers la surface de charge. Ce concept est illustré à la figure A.1.

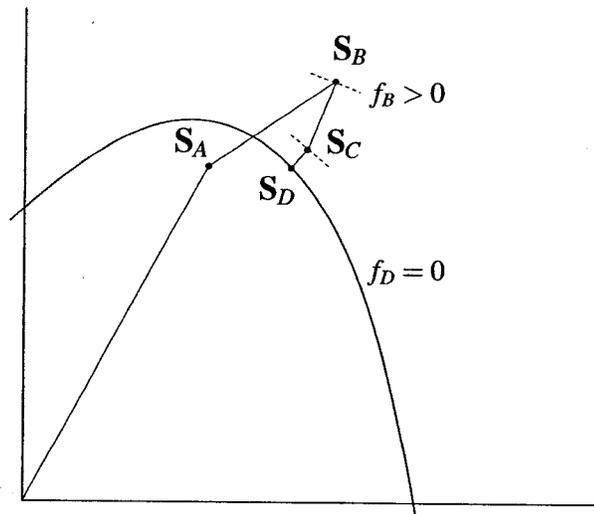


Figure A.1: Concept de prédiction/correction pour un point d'essai élastique, tel qu'illustré par Crisfield (1997)

Le point \mathbf{S}_A est l'état de contraintes au début du pas de chargement, représenté dans un plan de l'espace de Haigh-Westergaard ; le point \mathbf{S}_B est le point d'essai élastique, donné par l'équation (A.19).

$$\mathbf{S}_B = \mathcal{H} : (\mathbf{E}^m - \mathbf{E}_A^P) \quad (\text{A.19})$$

Notez que \mathbf{E}_A^P est la déformation plastique au début du pas de chargement. Il est important de calculer la contrainte d'essai élastique de manière *totale*, étant donné que le tenseur \mathcal{H} peut varier de manière arbitraire d'un pas de chargement à l'autre.

Lorsque $f_B > 0$, il y a plastification et le point \mathbf{S}_B est situé hors du domaine élastique. Les contraintes doivent donc être rabattues afin de les ramener sur la surface, *i.e.* rendre le critère f nul. Une expansion en série de Taylor du premier ordre est faite sur le critère f , et l'équation (A.16) y est introduite, ce qui donne l'équation (A.20).

$$f = f_B + df = f_B + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{S}} : d\mathbf{S} - A d\lambda = 0 \quad (\text{A.20})$$

En posant que la variation des contraintes n'est maintenant due qu'à l'écoulement plastique, et à l'aide des équations (A.8) et (A.10), l'équation (A.20) s'exprime maintenant selon (A.21).

$$f = f_B + df = f_B - d\lambda \mathbf{n}_B : \mathcal{H} : \mathbf{m}_B - A_B d\lambda = 0 \quad (\text{A.21})$$

Il est donc possible de calculer un premier multiplicateur plastique et de faire une première correction telle que montré à l'équation (A.22).

$$d\lambda = \frac{f_B}{\mathbf{n}_B : \mathcal{H} : \mathbf{m}_B + A_B} \quad (\text{A.22})$$

ce qui nous amène au point \mathbf{S}_C de la figure A.1. Les contraintes sont maintenant données par l'équation (A.23).

$$\mathbf{S}_C = \mathbf{S}_B - d\lambda \mathcal{H} : \mathbf{m}_B \quad (\text{A.23})$$

De manière générale, le critère f_C n'est pas nul après cette première correction, c'est pourquoi une procédure itérative est mise en place pour amener le point \mathbf{S}_C au point \mathbf{S}_D de la figure A.1. Le résidu d'équilibre montré à l'équation (A.24) est donc construit.

$$\mathbf{r} = \mathbf{S}_C - (\mathbf{S}_B - d\lambda \mathcal{H} : \mathbf{m}_C) = 0 \quad (\text{A.24})$$

Une expansion en série de Taylor est ensuite faite et tronquée au premier ordre, ce qui permet d'obtenir l'équation (A.25).

$$\mathbf{r}_n = \mathbf{r}_o + \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \mathbf{S}_C} : \delta \mathbf{S}_C + \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial d\lambda} \delta d\lambda = \mathbf{r}_o + \left[I + d\lambda \mathcal{H} : \frac{\partial \mathbf{m}_C}{\partial \mathbf{S}_C} \right] \delta \mathbf{S}_C + \mathcal{H} : \mathbf{m}_C \delta d\lambda = 0 \quad (\text{A.25})$$

La correction itérative des contraintes peut donc être identifiée à partir de l'équation (A.25) pour obtenir l'équation (A.26).

$$\delta \mathbf{S}_C = \left[I + d\lambda \mathcal{H} : \frac{\partial \mathbf{m}_C}{\partial \mathbf{S}_C} \right]^{-1} : (\mathbf{r}_o + \mathcal{H} : \mathbf{m}_C \delta d\lambda) \quad (\text{A.26})$$

Une expansion en série de Taylor du premier ordre est faite sur le critère f au point \mathbf{S}_C ce qui donne l'équation (A.27).

$$f_{C,n} = f_{C,o} + \frac{\partial f_C}{\partial \mathbf{S}_C} : \delta \mathbf{S}_C - A \delta d\lambda = f_{C,o} + \mathbf{n}_C : \delta \mathbf{S}_C - A_C \delta d\lambda = 0 \quad (\text{A.27})$$

La correction itérative du multiplicateur plastique peut donc être isolée de (A.27) en introduisant la correction des contraintes obtenue à l'équation (A.26), ce qui donne finalement l'équation (A.29).

$$x_{ep} = \left[I + d\lambda \mathcal{H} : \frac{\partial \mathbf{m}_C}{\partial \mathbf{S}_C} \right]^{-1} \quad (\text{A.28})$$

$$\delta d\lambda = \frac{f_{C,o} - \mathbf{n}_C : x_{ep} : \mathbf{r}_o}{\mathbf{n}_C : x_{ep} : \mathcal{H} : \mathbf{m}_C + A_C} \quad (\text{A.29})$$

La mise en oeuvre algorithmique et informatique est présentée à l'algorithme 4.3 de la section 4.6.3.2.

A.2.3 Opérateur tangent consistant

L'aspect numérique de l'intégration des lois constitutives mécaniques est d'une importance capitale afin de préserver le taux de convergence quadratique de l'algorithme global de Newton-Raphson, tel que montré par Simo et Taylor (1985). Ainsi, les auteurs montrent que l'opérateur tangent local

intervenant dans la forme variationnelle (voir la section 3.3.2) doit être obtenu par la linéarisation *consistante* du problème local de l'intégration des contraintes. Par consistante, il faut entendre dérivée à partir de l'algorithme d'intégration des contraintes utilisé.

À cette fin, le problème local est considéré dans sa forme discrétisée, et non plus dans sa forme continue. Un incrément de contraintes est donc relié à un incrément de déformation par une relation non linéaire générique, tel que monté à l'équation (A.30).

$$d\mathbf{S}_{n+1} \longrightarrow \left(\mathbf{S}_n, \mathbf{E}_n, d\mathbf{E}_{n+1}^m, \tilde{\zeta}_n \right) \quad (\text{A.30})$$

dont les quantités \mathbf{S}_n , \mathbf{E}_n et $\tilde{\zeta}_n$ sont connues au temps n . L'opérateur tangent local est donné par l'équation (A.31).

$$c_{n+1} = \frac{\partial \mathbf{S}_{n+1} \left(\mathbf{S}_n, \mathbf{E}_n, d\mathbf{E}_{n+1}^m, \tilde{\zeta}_n \right)}{\partial \mathbf{E}_{n+1}} \quad (\text{A.31})$$

Les contraintes algorithmiques au point \mathbf{S}_C de l'équation (A.32) sont construites à partir de la correction itérative donnée au point (A.26).

$$\mathbf{S}_{C,n+1} = \mathbf{S}_{C,n} + \Delta \mathbf{S}_{C,n+1} = \mathbf{S}_{C,n} + \chi_{ep} (\mathbf{r}_o + \mathcal{H} : \mathbf{m}_C \delta d\lambda) \quad (\text{A.32})$$

En remplaçant la correction itérative $\delta d\lambda$ de l'équation (A.29) dans l'équation (A.32), l'équation (A.33) est obtenue.

$$\mathbf{S}_{C,n+1} = \mathbf{S}_{C,n} + \chi_{ep} \left(\mathbf{r}_o + \mathcal{H} : \mathbf{m}_C \frac{f_{C,o} - \mathbf{n}_C : \chi_{ep} : \mathbf{r}_o}{\mathbf{n}_C : \chi_{ep} : \mathcal{H} : \mathbf{m}_C + A_C} \right) \quad (\text{A.33})$$

Il faut bien comprendre que dans le contexte de la résolution itérative, toutes les quantités de l'équation (A.33) sont connues de l'itération précédente, donc sont indépendantes de la déformation \mathbf{E}_{n+1} . Aussi, à convergence, $f_{C,o}$ doit être nul. L'opérateur tangent algorithmique s'exprime donc maintenant selon l'équation (A.34).

$$c_{n+1} = \frac{\overset{0}{\partial \mathbf{S}_{C,n}}}{\partial \mathbf{E}_{n+1}} + \frac{\partial \left[\chi_{ep} \left(\mathbf{r}_o + \mathcal{H} : \mathbf{m}_C \frac{f_{C,o} - \mathbf{n}_C : \chi_{ep} : \mathbf{r}_o}{\mathbf{n}_C : \chi_{ep} : \mathcal{H} : \mathbf{m}_C + A_C} \right) \right]}{\partial \mathbf{E}_{n+1}} \quad (\text{A.34})$$

De plus, le résidu itératif \mathbf{r}_o est obtenu de l'équation (A.24), et sa dérivée est donnée par l'équation (A.35).

$$\frac{\partial \mathbf{r}_o}{\partial \mathbf{E}_{n+1}} = \frac{\partial \mathbf{S}_{C,n+1}^i - (\mathbf{S}_{C,n} + \mathcal{H} : d\mathbf{E}_{n+1}^m - d\lambda^i \mathcal{H} \mathbf{m}_C^i)}{\partial \mathbf{E}_{n+1}} = \mathcal{H} \quad (\text{A.35})$$

En remplaçant la dérivée de \mathbf{r}_o définie à l'équation (A.35) dans l'équation (A.34), l'opérateur tangent algorithmique est donc finalement donné par l'équation (A.36).

$$C_{n+1} = \mathcal{H} \chi_{ep} - \frac{\mathcal{H} \chi_{ep} : \mathbf{n} \mathbf{m} : \mathcal{H} \chi_{ep}}{\mathbf{n} : \mathcal{H} \chi_{ep} : \mathbf{m} + A} \quad (\text{A.36})$$

A.3 Métaux

A.3.1 Potentiel plastique

Il s'agit ici du modèle de plasticité associée en J2 classique avec écrouissage non linéaire isotrope. Les travaux de Crisfield (1991) ou encore de Simo et Hughes (1998) pourront être consultés pour plus de détails. La surface de charge f est définie par l'équation (A.38).

$$q = \sqrt{3J_2} \quad (\text{A.37})$$

$$f = q - \zeta(\chi, T) \quad (\text{A.38})$$

où ζ représente la limite élastique évoluant avec la déformation plastique équivalente (travail plastique) χ et la température. Le modèle est complètement associé, *i.e.* $f = g = h$.

A.3.2 Écrouissage

La forme classique d'écrouissage isotrope est définie par l'équation (A.39).

$$\zeta(\chi, T) = S_{y,0}(T) + H(\chi) \quad (\text{A.39})$$

avec $S_{y,0}(T)$ étant la limite élastique initiale, et $H(\chi)$, une fonction positive de la déformation plastique équivalente.

A.3.3 Dérivées

La dérivée première du potentiel par rapport aux contraintes est calculée de manière analytique selon (A.40).

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{S}} &= \frac{\partial f}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial \mathbf{S}} + \frac{\partial f}{\partial q} \frac{\partial q}{\partial \mathbf{S}} + \frac{\partial f}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial \mathbf{S}} \\ &= \frac{1}{2q} \begin{bmatrix} 2\mathbf{S}_{11} - \mathbf{S}_{22} - \mathbf{S}_{33} & 6\mathbf{S}_{12} & 6\mathbf{S}_{13} \\ 6\mathbf{S}_{12} & 2\mathbf{S}_{22} - \mathbf{S}_{11} - \mathbf{S}_{33} & 6\mathbf{S}_{23} \\ 6\mathbf{S}_{13} & 6\mathbf{S}_{23} & 2\mathbf{S}_{33} - \mathbf{S}_{11} - \mathbf{S}_{22} \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (\text{A.40})$$

La dérivée de la surface de charge par rapport à la force d'érouissage est donnée par l'équation (A.41).

$$\frac{\partial f}{\partial \zeta} = -1 \quad (\text{A.41})$$

A.3.4 Retour radial

L'algorithme de Euler implicite peut être simplifié dans le cas de la plasticité de von Mises, puisque la direction d'écoulement de la prédiction élastique est la même que celle une fois l'incrément de contraintes intégré, ce qui s'exprime par l'équation (A.42). En effet, il n'y a aucune composante en pression hydrostatique (I_1) ou selon l'angle de Lode (J_3), ce qui implique que l'écoulement se fait de manière *radiale* dans le plan pression-cisaillement. Ceci étant connu, la quantité montrée à l'équation (A.43) utilisée dans le rabattement des contraintes (voir l'équation (A.22)) devient constante.

$$\frac{\partial f}{\partial \mathbf{S}_B} = \frac{\partial f}{\partial \mathbf{S}_C} \quad (\text{A.42})$$

$$\frac{\partial f}{\partial \mathbf{S}_B} : \mathcal{H} : \frac{\partial f}{\partial \mathbf{S}_B} = \frac{\partial f}{\partial \mathbf{S}_C} : \mathcal{H} : \frac{\partial f}{\partial \mathbf{S}_C} = 3\mu \quad (\text{A.43})$$

L'algorithme de Euler implicite détaillé à la section A.2.2 peut donc être simplifié en découplant la partie hydrostatique de la partie déviatrice de contraintes ; l'équation (A.40) illustre bien que l'écoulement plastique ne se fait qu'en direction déviatrice, ce qui implique que la pression hydrostatique au point d'essai élastique est la même qu'au point rabattu. La partie déviatrice peut donc être rabattue indépendamment, en la multipliant par une valeur scalaire α .

La première correction est donc obtenue selon l'équation (A.44).

$$d\lambda = \frac{f_B}{3\mu + A_B} \quad (\text{A.44})$$

La correction itérative est obtenue selon les équations (A.45) à (A.49).

$$p_B = \frac{1}{3} I_{1,B} \quad (\text{A.45})$$

$$\mathbf{S}'_B = \mathbf{S}_B - p_B \mathbf{1} \quad (\text{A.46})$$

$$\alpha = 1 - \frac{3\mu d\lambda}{q_B} \quad (\text{A.47})$$

$$\mathbf{S}_C = p_B \mathbf{1} + \alpha \mathbf{S}'_B \quad (\text{A.48})$$

$$\delta d\lambda = \frac{f_C}{3\mu + A_C} \quad (\text{A.49})$$

Les itérations impliquent donc uniquement le calcul de quantités scalaires et la reconstruction du tenseur des contraintes \mathbf{S}_C pour le calcul du critère f_C . Cela se traduit par un temps de calcul réduit par rapport à l'algorithme de Euler implicite présenté à la section A.2.2. La mise en oeuvre algorithmique et informatique est présentée à l'algorithme 4.4 de la section 4.6.3.2.

A.4 Matériaux quasifragiles

A.4.1 Potentiels plastiques

Il s'agit ici de l'adaptation d'un modèle de béton développé par Etse et Willam (1994) qu'ont réalisée D'Amours *et coll.* (2003a). Les explications et les équations de cette section sont entièrement extraites de D'Amours (2004).

Le modèle est non associé à la fois pour l'écoulement et pour l'érouissage. La surface de charge est représentée par une fonction unique avec une trace déviatrice elliptique, et est définie selon les équations (A.50) à (A.55).

$$p = \frac{1}{3} I_1 \quad (\text{A.50})$$

$$\rho = \sqrt{2J_2} \quad (\text{A.51})$$

$$\cos 3\theta = \frac{\sqrt{27}}{2} \frac{J_3}{J_2^{3/2}} \quad (\text{A.52})$$

$$e_r(p) = 1 - \frac{1}{2} \frac{(p_0 - c_e)}{(p - c_e)} \quad (\text{A.53})$$

$$r(\theta, e_r) = \frac{4(1 - e_r^2) \cos^2 \theta + (2e_r - 1)^2}{2(1 - e_r^2) \cos \theta + (2e_r - 1) \sqrt{4(1 - e_r^2) \cos^2 \theta + 5e_r^2 - 4e_r}} \quad (\text{A.54})$$

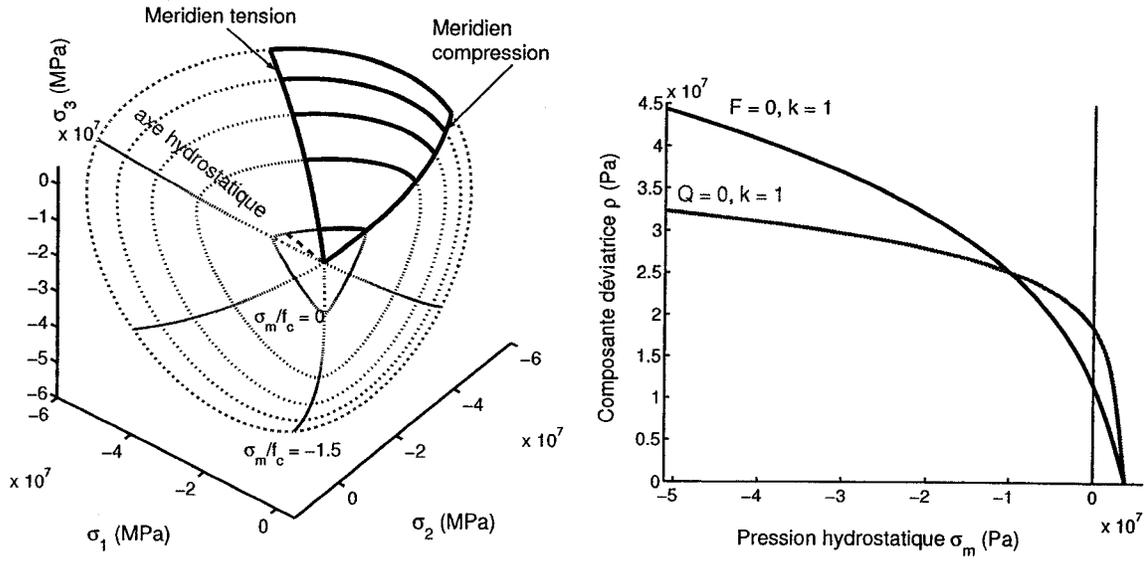
$$f = \left\{ (1 - k) \left[\frac{p}{f_c} + \frac{\rho r(\theta)}{b_f f_c} \right]^2 + a^{\frac{1}{\alpha_f}} \frac{\rho r(\theta)}{f_c} \right\}^{\alpha_f} + \frac{k^{\beta_f} m_f}{f_c} \left[p + \frac{\rho r(\theta)}{b_f} \right] - k^{\beta_f} c = 0 \quad (\text{A.55})$$

où $r(\theta)$ est la coordonnée polaire telle que donnée par Willam & Warnke (voir par exemple Etse et Willam (1994)), f_c est la valeur absolue de la résistance à la rupture en compression uniaxiale, alors que a_f , b_f , m_f , α_f et β_f sont des constantes. e_r est défini comme le ratio d'excentricité, *i.e.* le rapport du méridien tension sur le méridien compression ; pour $e_r = 1$, l'ellipse dégénère en un cercle pour retrouver la trace déviatrice du critère de von Mises ou de Drucker-Prager, alors que pour $e_r \approx \frac{1}{2}$, la trace déviatrice devient presque triangulaire pour retrouver le critère de la contrainte maximale en tension de Rankine. La force d'érouissage k est bornée entre k_0 , qui permet de représenter le domaine élastique initial, et 1 ; en phase d'érouissage, la force d'adoucissement c est maintenue à sa valeur maximale, soit 1.

L'équation de la surface d'écoulement, donnée par l'équation (A.56), prend la même forme que celle de la surface de charge, avec les constantes a_g , b_g , m_g , α_g et β_g .

$$g = \left\{ (1 - k) \left[\frac{p}{f_c} + \frac{\rho r(\theta)}{b_g f_c} \right]^2 + a^{\frac{1}{\alpha_g}} \frac{\rho r(\theta)}{f_c} \right\}^{\alpha_g} + \frac{k^{\beta_g} m_g}{f_c} \left[p + \frac{\rho r(\theta)}{b_g} \right] - k^{\beta_g} c = 0 \quad (\text{A.56})$$

Ces surfaces sont représentées à la figure A.2, avec F désignant f et Q désignant g , telles que reproduites de D'Amours *et coll.* (2003a).



(a) Sections déviatoriques de la surface de charge dans l'espace de Haigh-Westergaard

(b) Surfaces de charge et d'écoulement à la rupture dans le plan pression-cisaillement

Figure A.2: Potentiels plastiques pour un matériau quasifragile, tirés de D'Amours *et coll.* (2003a)

A.4.2 Écrouissage

La force d'écrouissage k est exprimée par une fonction quadratique de la variable d'écrouissage χ_h et d'une mesure de la ductilité, d_h , représentant la valeur du paramètre d'écrouissage à la rupture, tel que montré à l'équation (A.57).

$$k = k_0 + (1 - k_0) \sqrt{\frac{\chi_h}{d_h} \left(2 - \frac{\chi_h}{d_h} \right)} \quad (\text{A.57})$$

La ductilité d_h dépend de la pression hydrostatique, ce qui permet de capturer l'augmentation de la capacité du matériau à se déformer avant la rupture avec l'augmentation du confinement. Le

paramètre d'érouissage χ_h est donné par l'équation (A.58).

$$d\chi_h = \sqrt{d\mathbf{E}^P : d\mathbf{E}^P} = d\lambda \|\mathbf{m}\| \quad (\text{A.58})$$

La force d'adoucissement c , bornée entre 0 et 1, est fonction du paramètre d'adoucissement χ_s , et est donnée par les équations (A.59) à (A.61).

$$N = \begin{cases} 1 & \text{pour } \frac{p}{\rho} \geq \frac{1}{\sqrt{6}} \\ \sqrt{2} \left(\frac{-\sqrt{3}p}{\rho} + \frac{1}{\sqrt{2}} \right) \left(1 - \cos \left(\theta + \frac{\pi}{6} \right) \right) (N_{uc} - 1) + 1 & \text{pour } \frac{p}{\rho} < \frac{1}{\sqrt{6}} \end{cases} \quad (\text{A.59})$$

$$dw = \frac{l_c}{N} d\chi_s \quad (\text{A.60})$$

$$c = \frac{1}{\exp[(\delta_s w^2)]} \quad (\text{A.61})$$

où N représente le nombre de fissures formées dans un élément de volume représentatif en mode de rupture mixte, N_{uc} est une constante, w est relié au déplacement d'ouverture de la fissure lors d'un essai de traction directe, l_c est une longueur caractéristique du matériau sur laquelle la rupture est homogénéisée, alors que δ_s est une constante contrôlant la rapidité de la décroissance de la résistance en traction résiduelle.

Le paramètre d'adoucissement χ_s est donné par l'équation (A.62).

$$d\chi_s = \sqrt{\langle d\mathbf{E}_1^P \rangle^2 + \langle d\mathbf{E}_2^P \rangle^2 + \langle d\mathbf{E}_3^P \rangle^2} = d\lambda \|\langle \mathbf{m} \rangle\| \quad (\text{A.62})$$

où $\langle \rangle$ sont les crochets de Macauley et $\mathbf{E}_i^P, i = 1, 3$ sont les déformations plastiques principales (valeurs propres). Ainsi, les incréments de χ_s doivent avoir lieu seulement s'il y a ouverture des microfissures existantes, donc s'il y a au moins une valeur propre positive.

A.4.3 Dérivées

Les dérivées premières des potentiels par rapport aux contraintes sont calculées de manière analytique, selon (A.63) et (A.64).

$$\frac{\partial f}{\partial \mathbf{S}} = \frac{\partial f}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial \mathbf{S}} + \frac{\partial f}{\partial \rho} \frac{\partial \rho}{\partial \mathbf{S}} + \frac{\partial f}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial \mathbf{S}} \quad (\text{A.63})$$

$$\frac{\partial g}{\partial \mathbf{S}} = \frac{\partial g}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial \mathbf{S}} + \frac{\partial g}{\partial \rho} \frac{\partial \rho}{\partial \mathbf{S}} + \frac{\partial g}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial \mathbf{S}} \quad (\text{A.64})$$

Les dérivées de p , ρ et r par rapport aux contraintes sont montrées aux équations (A.65) à (A.71).

$$\frac{\partial p}{\partial \mathbf{S}} = \frac{1}{3} \mathbf{1} \quad (\text{A.65})$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial \mathbf{S}} = \frac{1}{3\rho} \begin{bmatrix} 2\mathbf{S}_{11} - \mathbf{S}_{22} - \mathbf{S}_{33} & 3\mathbf{S}_{12} & 3\mathbf{S}_{13} \\ 3\mathbf{S}_{12} & 2\mathbf{S}_{22} - \mathbf{S}_{11} - \mathbf{S}_{33} & 3\mathbf{S}_{23} \\ 3\mathbf{S}_{13} & 3\mathbf{S}_{23} & 2\mathbf{S}_{33} - \mathbf{S}_{11} - \mathbf{S}_{22} \end{bmatrix} \quad (\text{A.66})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial r}{\partial \theta} = & -2 \frac{(4 - 4e_r^2) \cos(\theta) \sin(\theta)}{(2 - 2e_r^2) \cos(\theta) + (2e_r - 1) \sqrt{C_2 + 5e_r^2 - 4e_r}} \\ & - \left(C_2 + (2e_r - 1)^2 \right) \left(- (2 - 2e_r^2) \sin(\theta) - \frac{(2e_r - 1)(4 - 4e_r^2) \cos(\theta) \sin(\theta)}{\sqrt{C_2 + 5e_r^2 - 4e_r}} \right) \\ & \times \left((2 - 2e_r^2) \cos(\theta) + (2e_r - 1) \sqrt{C_2 + 5e_r^2 - 4e_r} \right)^{-2} \end{aligned} \quad (\text{A.67})$$

$$\begin{aligned} a_1 = & -2/3 \left(3/2 \frac{\sqrt{3}C_{10}}{(J_2)^{3/2}} - 9/4 \frac{\sqrt{3}J_3(2/3\mathbf{S}_{11} - 1/3\mathbf{S}_{22} - 1/3\mathbf{S}_{33})}{(J_2)^{5/2}} \right) \frac{1}{\sqrt{4 - 27 \frac{(J_3)^2}{(J_2)^3}}} \\ a_2 = & -2/3 \left(3/2 \frac{\sqrt{3}C_{11}}{(J_2)^{3/2}} - 9/4 \frac{\sqrt{3}J_3(-1/3\mathbf{S}_{11} + 2/3\mathbf{S}_{22} - 1/3\mathbf{S}_{33})}{(J_2)^{5/2}} \right) \frac{1}{\sqrt{4 - 27 \frac{(J_3)^2}{(J_2)^3}}} \\ a_3 = & -2/3 \left(3/2 \frac{\sqrt{3}C_{12}}{(J_2)^{3/2}} - 9/4 \frac{\sqrt{3}J_3(-1/3\mathbf{S}_{22} + 2/3\mathbf{S}_{33} - 1/3\mathbf{S}_{11})}{(J_2)^{5/2}} \right) \frac{1}{\sqrt{4 - 27 \frac{(J_3)^2}{(J_2)^3}}} \\ a_4 = & -2/3 \left(3/2 \frac{\sqrt{3}(-4/3\mathbf{S}_{11}\mathbf{S}_{23} + 2/3\mathbf{S}_{22}\mathbf{S}_{23} + 2/3\mathbf{S}_{33}\mathbf{S}_{23} + 2\mathbf{S}_{12}\mathbf{S}_{13})}{(J_2)^{3/2}} - 9/2 \frac{\sqrt{3}J_3\mathbf{S}_{23}}{(J_2)^{5/2}} \right) \frac{1}{\sqrt{4 - 27 \frac{(J_3)^2}{(J_2)^3}}} \\ a_4 = & -2/3 \left(3/2 \frac{\sqrt{3}(2\mathbf{S}_{12}\mathbf{S}_{23} + 2/3\mathbf{S}_{13}\mathbf{S}_{11} - 4/3\mathbf{S}_{13}\mathbf{S}_{22} + 2/3\mathbf{S}_{13}\mathbf{S}_{33})}{(J_2)^{3/2}} - 9/2 \frac{\sqrt{3}J_3\mathbf{S}_{13}}{(J_2)^{5/2}} \right) \frac{1}{\sqrt{4 - 27 \frac{(J_3)^2}{(J_2)^3}}} \end{aligned}$$

$$a_6 = -2/3 \left(3/2 \frac{\sqrt{3}(2/3 \mathbf{S}_{12} \mathbf{S}_{22} - 4/3 \mathbf{S}_{12} \mathbf{S}_{33} + 2/3 \mathbf{S}_{12} \mathbf{S}_{11} + 2 \mathbf{S}_{13} \mathbf{S}_{23})}{(J_2)^{3/2}} - 9/2 \frac{\sqrt{3} J_3 \mathbf{S}_{12}}{(J_2)^{5/2}} \right) \frac{1}{\sqrt{4 - 27 \frac{(J_3)^2}{(J_2)^3}}}$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial \mathbf{S}} = \begin{bmatrix} a_1 & a_4 & a_5 \\ a_4 & a_2 & a_6 \\ a_5 & a_6 & a_3 \end{bmatrix} \quad (\text{A.68})$$

$$\frac{\partial r}{\partial e_r} = \frac{-8e_r (\cos(\theta))^2 + 8e_r - 4}{(2 - 2e_r^2) \cos(\theta) + (2e_r - 1) \sqrt{C_2 + 5e_r^2 - 4e_r} - (C_2 + (2e_r - 1)^2) (-4e_r \cos(\theta) + 2\sqrt{C_2 + 5e_r^2 - 4e_r} + 1/2 \frac{(2e_r - 1) (-8e_r (\cos(\theta))^2 + 10e_r - 4)}{\sqrt{C_2 + 5e_r^2 - 4e_r}})} \times \left((2 - 2e_r^2) \cos(\theta) + (2e_r - 1) \sqrt{C_2 + 5e_r^2 - 4e_r} \right)^{-2} \quad (\text{A.69})$$

$$\frac{\partial e_r}{\partial p} = 1/2 \left(\frac{p_0}{f_c} - c_e \right) \left(\frac{p}{f_c} - c_e \right)^{-2} f_c^{-1} \quad (\text{A.70})$$

$$\frac{\partial r}{\partial \mathbf{S}} = \frac{\partial r}{\partial e_r} \frac{\partial e_r}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial \mathbf{S}} + \frac{\partial r}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial \mathbf{S}} \quad (\text{A.71})$$

avec les constantes C_2, C_{10}, C_{11} et C_{12} telles que définies aux équations (A.72) à (A.75).

$$C_2 = (4 - 4e_r^2) (\cos(\theta))^2 \quad (\text{A.72})$$

$$C_{10} = -2/9 \mathbf{S}_{11} \mathbf{S}_{22} - 2/9 \mathbf{S}_{33} \mathbf{S}_{11} + 2/9 \mathbf{S}_{11}^2 - 1/9 \mathbf{S}_{22}^2 + 4/9 \mathbf{S}_{22} \mathbf{S}_{33} - 1/9 \mathbf{S}_{33}^2 - 2/3 \mathbf{S}_{23}^2 + 1/3 \mathbf{S}_{12}^2 + 1/3 \mathbf{S}_{13}^2 \quad (\text{A.73})$$

$$C_{11} = -1/9 \mathbf{S}_{11}^2 - 2/9 \mathbf{S}_{11} \mathbf{S}_{22} + 4/9 \mathbf{S}_{33} \mathbf{S}_{11} + 2/9 \mathbf{S}_{22}^2 - 2/9 \mathbf{S}_{22} \mathbf{S}_{33} - 1/9 \mathbf{S}_{33}^2 + 1/3 \mathbf{S}_{23}^2 + 1/3 \mathbf{S}_{12}^2 - 2/3 \mathbf{S}_{13}^2 \quad (\text{A.74})$$

$$C_{12} = -1/9 \mathbf{S}_{11}^2 + 4/9 \mathbf{S}_{11} \mathbf{S}_{22} - 2/9 \mathbf{S}_{33} \mathbf{S}_{11} - 1/9 \mathbf{S}_{22}^2 - 2/9 \mathbf{S}_{22} \mathbf{S}_{33} + 2/9 \mathbf{S}_{33}^2 + 1/3 \mathbf{S}_{23}^2 - 2/3 \mathbf{S}_{12}^2 + 1/3 \mathbf{S}_{13}^2 \quad (\text{A.75})$$

Les dérivées des surfaces de charge par rapport aux contraintes sont définies par les équations

(A.76) à (A.79), où l'indice s et la surface s réfèrent indifféremment à la surface de charge f ou d'écoulement g .

$$C_1 = (1-k) \left(\frac{p}{f_c} + \frac{\rho r}{b_s f_c} \right)^2 + \frac{a_s^{\alpha_s - 1} \rho r}{f_c} \quad (\text{A.76})$$

$$\frac{\partial s}{\partial p} = 2 C_1^{\alpha_s} \alpha_s (1-k) \left(\frac{p}{f_c} + \frac{\rho r}{b_s f_c} \right) f_c^{-1} C_1^{-1} + \frac{k^{\beta_s} m_s}{f_c} \quad (\text{A.77})$$

$$\frac{\partial s}{\partial \rho} = C_1^{\alpha_s} \alpha_s \left(2 (1-k) \left(\frac{p}{f_c} + \frac{\rho r}{b_s f_c} \right) r b_s^{-1} f_c^{-1} + \frac{a_s^{\alpha_s - 1} r}{f_c} \right) C_1^{-1} + \frac{k^{\beta_s} m_s r}{b_s f_c} \quad (\text{A.78})$$

$$\frac{\partial s}{\partial r} = C_1^{\alpha_s} \alpha_s \left(2 (1-k) \left(\frac{p}{f_c} + \frac{\rho r}{b_s f_c} \right) \rho b_s^{-1} f_c^{-1} + \frac{a_s^{\alpha_s - 1} \rho}{f_c} \right) C_1^{-1} + \frac{k^{\beta_s} m_s \rho}{b_s f_c} \quad (\text{A.79})$$

Les dérivées des surfaces de charge par rapport à la force d'écrouissage sont définies par les équations (A.80) et (A.81).

$$\frac{\partial s}{\partial k} = -C_1^{\alpha_s} \alpha_s \left(\frac{p}{f_c} + \frac{\rho r}{b_s f_c} \right)^2 C_1^{-1} + \beta_s k^{\beta_s - 1} m_s \left(p + \frac{\rho r}{b_s} \right) f_c^{-1} - \beta_s k^{\beta_s - 1} c \quad (\text{A.80})$$

$$\frac{\partial s}{\partial c} = -1 \quad (\text{A.81})$$

Les dérivées des forces d'écrouissage par rapport à leur variable d'écrouissage sont données par les expressions (A.82) et (A.83).

$$\frac{\partial k}{\partial \chi_h} = 1/2 (1-k_0) \left(\left(2 - \frac{\chi_h}{d_h} \right) d_h^{-1} - \frac{\chi_h}{d_h^2} \right) \frac{1}{\sqrt{\chi_h \left(2 - \frac{\chi_h}{d_h} \right) d_h^{-1}}} \quad (\text{A.82})$$

$$\frac{\partial c}{\partial \chi_s} = 2 \delta_s w \frac{l_c}{N} \exp [-\delta_s w^2] \quad (\text{A.83})$$

Les dérivées secondes sont données explicitement dans D'Amours *et coll.* (2003a).

A.5 Isolants poreux cellulaires

A.5.1 Potentiels plastiques

Il s'agit d'une version modifiée du modèle classique à deux surfaces Cone-Cap pour tenir compte de la cohésion initiale en triextension du matériau, $p_{c,0}$; on peut voir le modèle présenté ici comme un cas limite du modèle de MRS-Lade modifié tel que proposé par Pérez-Foguet (2000) en posant que les surfaces sont indépendantes de l'angle de Lode θ .

Afin d'éviter les problèmes de définition de la direction d'écoulement à l'intersection des deux surfaces, un écoulement non associé tel que proposé par Pérez-Foguet et Huerta (1999) sera utilisé ; l'écoulement volumétrique est non associé dans la région du cône, alors que l'écoulement déviateur dans cette zone et l'écoulement total dans la zone du cap sont associés. La définition de l'écoulement non associé permet d'avoir une direction d'écoulement unique à l'intersection des deux surfaces, qu'elle soit approchée par le cap ou par le cône. Il n'est donc pas nécessaire d'avoir un algorithme spécial afin de traiter cette singularité. La figure A.3 illustre ce principe.

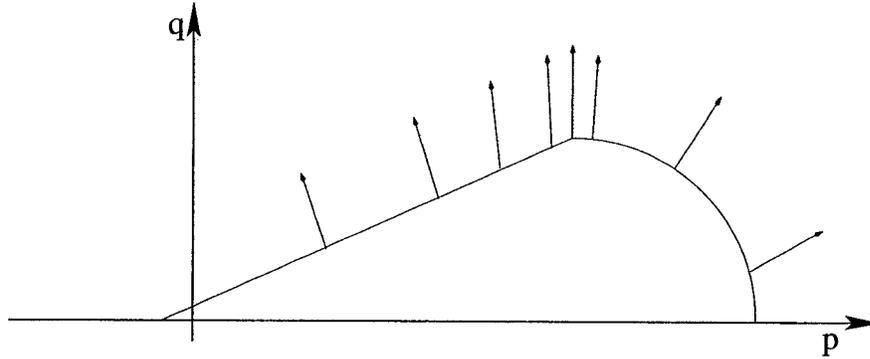


Figure A.3: Écoulement non associé pour le modèle Cone-Cap dans le plan pression-cisaillement

Les deux surfaces sont définies selon les équations (A.84) à (A.87).

$$p = \frac{1}{3}I_1 \quad (\text{A.84})$$

$$q = \sqrt{3J_2} \quad (\text{A.85})$$

$$f_{\text{cône}} = q - \eta(p - p_c) = 0 \quad (\text{A.86})$$

$$f_{\text{cap}} = \left(\frac{p - p_c - \alpha p_{\text{cap}}}{p_{\text{cap}} - \alpha p_{\text{cap}}} \right)^2 + \left(\frac{q}{\eta \alpha p_{\text{cap}}} \right)^2 - 1 = 0 \quad (\text{A.87})$$

Les potentiels d'écoulement plastique sont montrés en (A.88) et (A.89).

$$g_{cone} = q - \gamma \eta (2\alpha p_{cap} \ln [\alpha p_{cap} + p - p_c] - p), \gamma \geq 0 \quad (\text{A.88})$$

$$g_{cap} = f_{cap} \quad (\text{A.89})$$

Les paramètres constants p_c et α représentent respectivement la cohésion en triextension et la position de l'intersection entre le cône et le cap. La pression maximale en compression triaxiale est représentée par le paramètre p_{cap} , et l'angle de friction du cône, par le paramètre η ; ces paramètres évoluent avec l'écrouissage.

A.5.2 Écrouissage

Les variables d'écrouissage sont κ_{cone} et κ_{cap} , et leur évolution est montrée aux équations (A.90) à (A.92).

$$dw^p = d\lambda \left(\mathbf{S} : \frac{\partial g}{\partial \mathbf{S}} - p_c \text{tr} \left[\frac{\partial g}{\partial \mathbf{S}} \right] \right) \quad (\text{A.90})$$

$$d\kappa_{cone} = \frac{1}{C_{cone} p_a} \left(\frac{p + p_c}{p_a} \right)^{-l} dw^p \quad (\text{A.91})$$

$$d\kappa_{cap} = \frac{1}{C_{cap} p_a} \left(\frac{p_{cap,0}}{p_a} \right)^{-r} dw^p \quad (\text{A.92})$$

Les expressions pour les lois d'écrouissage sont définies de (A.93) à (A.96).

$$B = \frac{1}{C_2 + C_2 C_1} + \frac{\varepsilon C_3}{1 + \varepsilon(1 + \varepsilon - C_3)} \quad (\text{A.93})$$

$$A = \exp[B] \left(\frac{1}{1 + C_1} \right)^{1/C_2} \left(1 - \frac{C_3}{1 + \varepsilon} \right) \bar{\eta}_0 \quad (\text{A.94})$$

$$\eta(\kappa_{cone}) = \begin{cases} A \exp[-B \kappa_{cone}] (C_1 + \kappa_{cone})^{1/C_2} + C_3 \bar{\eta}_0 \frac{\kappa_{cone} + D}{\kappa_{cone} + D + \varepsilon} & \kappa_{cone} \leq E \\ A \exp[-B \kappa_{cone}] (C_1 + \kappa_{cone})^{1/C_2} + C_3 \bar{\eta}_0 \frac{\kappa_{cone} + D}{\kappa_{cone} + D + \varepsilon} + \overbrace{C_4 (\kappa_{cone} - E)^\beta}^{\text{terme de consolidation}} & \kappa_{cone} > E \end{cases} \quad (\text{A.95})$$

$$p_{cap}(\kappa_{cap}) = p_{cap,0} \left(1 + \kappa_{cap}^{1/r} \right) \quad (\text{A.96})$$

Notez qu'un terme de consolidation ainsi qu'un décalage D pour le second terme ont été ajoutés à la fonction pour le cône de Pérez-Foguet (2000). La fonction originale a été conçue pour représenter des sols, il a donc fallu l'adapter aux matériaux poreux cellulaires, tels que le silicate de calcium. L'évolution typique de cette fonction est montrée à la figure A.4.

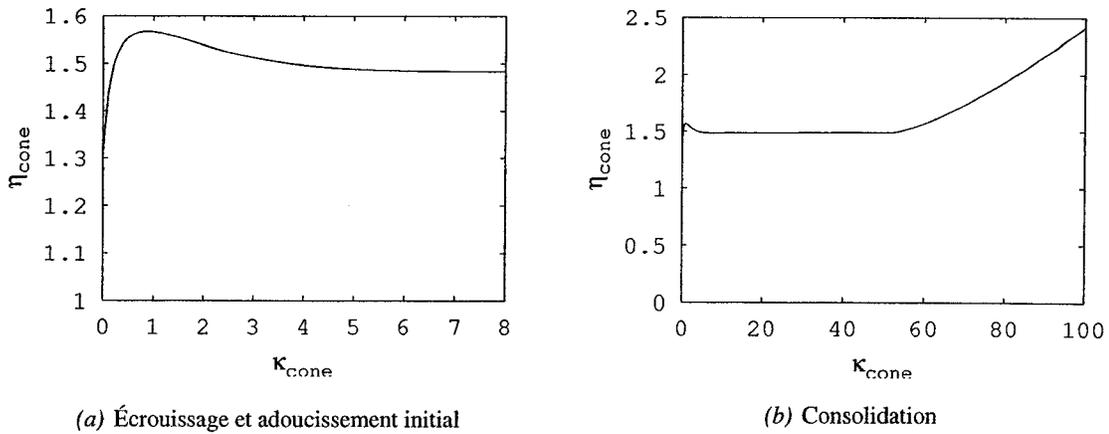


Figure A.4: Évolution de l'angle de friction interne du cône

A.5.3 Dérivées

Les dérivées premières des potentiels par rapport aux contraintes sont calculées de manière analytique, selon (A.97) et (A.98).

$$\frac{\partial f_*}{\partial \mathbf{S}} = \frac{\partial f_*}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial \mathbf{S}} + \frac{\partial f_*}{\partial q} \frac{\partial q}{\partial \mathbf{S}} \quad (\text{A.97})$$

$$\frac{\partial g_*}{\partial \mathbf{S}} = \frac{\partial g_*}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial \mathbf{S}} + \frac{\partial g_*}{\partial q} \frac{\partial q}{\partial \mathbf{S}} \quad (\text{A.98})$$

où l'indice $*$ réfère indifféremment au cône ou au cap.

Les dérivées de p et de q par rapport aux contraintes sont montrées en (A.99) et (A.100).

$$\frac{\partial p}{\partial \mathbf{S}} = \frac{1}{3} \mathbf{1} \quad (\text{A.99})$$

$$\frac{\partial q}{\partial \mathbf{S}} = \frac{1}{2q} \begin{bmatrix} 2\mathbf{S}_{11} - \mathbf{S}_{22} - \mathbf{S}_{33} & 3\mathbf{S}_{12} & 3\mathbf{S}_{13} \\ 3\mathbf{S}_{12} & 2\mathbf{S}_{22} - \mathbf{S}_{11} - \mathbf{S}_{33} & 3\mathbf{S}_{23} \\ 3\mathbf{S}_{13} & 3\mathbf{S}_{23} & 2\mathbf{S}_{33} - \mathbf{S}_{11} - \mathbf{S}_{22} \end{bmatrix} \quad (\text{A.100})$$

Les dérivées des surfaces de charge par rapport aux contraintes sont définies par les équations (A.101) à (A.104).

$$\frac{\partial f_{c\text{one}}}{\partial p} = -\eta \quad (\text{A.101})$$

$$\frac{\partial f_{c\text{ap}}}{\partial p} = -2 \frac{p + p_c - \alpha p_{c\text{ap}}}{(1 - \alpha)^2 p_{c\text{ap}}^2} \quad (\text{A.102})$$

$$\frac{\partial f_{c\text{one}}}{\partial q} = 1 \quad (\text{A.103})$$

$$\frac{\partial f_{c\text{ap}}}{\partial q} = \frac{2q}{(\eta \alpha p_{c\text{ap}})^2} \quad (\text{A.104})$$

Les dérivées des surfaces d'écoulement par rapport aux contraintes sont définies par les équations (A.105) à (A.108).

$$\frac{\partial g_{c\text{one}}}{\partial p} = -\gamma \eta \frac{p + p_c - \alpha p_{c\text{ap}}}{p + p_c + \alpha p_{c\text{ap}}} \quad (\text{A.105})$$

$$\frac{\partial g_{c\text{ap}}}{\partial p} = \frac{\partial f_{c\text{ap}}}{\partial p} \quad (\text{A.106})$$

$$\frac{\partial g_{c\text{one}}}{\partial q} = \frac{\partial f_{c\text{one}}}{\partial q} \quad (\text{A.107})$$

$$\frac{\partial g_{c\text{ap}}}{\partial q} = \frac{\partial f_{c\text{ap}}}{\partial q} \quad (\text{A.108})$$

Les dérivées des surfaces de charge par rapport à la force d'écrouissage sont définies par les équations (A.109) et (A.110).

$$\frac{\partial f_{cone}}{\partial \zeta} = \frac{\partial h_{cone}}{\partial \zeta} = \frac{1}{C_{cone} p_a} \left(\frac{p + p_c}{p_a} \right)^{-l} \left(\mathbf{S} : \frac{\partial g_{cone}}{\partial \mathbf{S}} - p_c \operatorname{tr} \left[\frac{\partial g_{cone}}{\partial \mathbf{S}} \right] \right) \quad (\text{A.109})$$

$$\frac{\partial f_{cap}}{\partial \zeta} = \frac{\partial h_{cap}}{\partial \zeta} = \frac{1}{C_{cap} p_a} \left(\frac{p_{cap,0}}{p_a} \right)^{-r} \left(\mathbf{S} : \frac{\partial g_{cap}}{\partial \mathbf{S}} - p_c \operatorname{tr} \left[\frac{\partial g_{cap}}{\partial \mathbf{S}} \right] \right) \quad (\text{A.110})$$

Les dérivées secondes des potentiels (hessiens) sont calculées numériquement, tel que proposé par Pérez-Foguet *et coll.* (2000a,b).

Annexe B

Modèles visqueux

B.1 Maxwell

B.1.1 Modèle

Rappelons d'abord le modèle rhéologique d'un modèle de Maxwell généralisé, tiré de Fafard *et coll.* (2001) et représenté à la figure B.1, défini par l'équation (B.1).

$$\mathcal{G}^{-1,\nu} : \mathbf{E}^\nu = \mathbf{S} \tag{B.1}$$

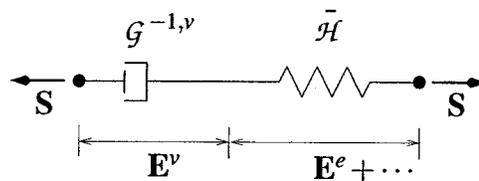


Figure B.1: Représentation rhéologique du modèle de fluage de Maxwell généralisé

où le paramètre $\mathcal{G}^{-1,\nu}$ est un tenseur de quatrième ordre défini positif de même topologie que le tenseur élastique classique, tel que le montre l'équation (B.2). Le tenseur \mathcal{H} représente le tenseur constitutif sécant. Dans le cas viscoélastique, il est confondu avec le tenseur d'élasticité ; par contre,

dans le cas de l'ajout de couplages – expansion thermique, retrait chimique – ou de comportement plastique, il s'agit plutôt d'une rigidité apparente instantanée.

$$\mathcal{G}^{\nu,-1} = \kappa_\nu \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} + 2G_\nu \left(I - \frac{1}{3} \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} \right) \quad (\text{B.2})$$

Le module de “compressibilité visqueuse” κ_ν et de “cisaillement visqueux” G_ν sont définis respectivement par les équations (B.3) et (B.4).

$$\kappa_\nu = \frac{E_\nu}{3(1 - 2\nu_\nu)} \quad (\text{B.3})$$

$$G_\nu = \frac{E_\nu}{2(1 + \nu_\nu)} \quad (\text{B.4})$$

où les coefficients E_ν – le module de Young visqueux – et ν_ν – le coefficient de Poisson visqueux – sont des paramètres à identifier par des essais de fluage ou de relaxation.

Les déformations sont supposées additives et sont données par l'équation (B.5).

$$\mathbf{E}^{\text{total}} = \mathbf{E}^{\text{élastique}} (+\mathbf{E}^P + \dots) + \mathbf{E}^\nu + \sum_{i=1}^n \mathbf{E}_i^{\text{additionnelle}} \quad (\text{B.5})$$

où \mathbf{E}^ν est la composante de déformation visqueuse permanente.

En posant la loi de Hooke, les contraintes sont donc telles que montrées à l'équation (B.6).

$$\mathbf{S} = \mathcal{H} : \left(\mathbf{E}^{\text{total}} (-\mathbf{E}^P - \dots) - \sum_{i=1}^n \mathbf{E}_i^{\text{additionnelle}} - \mathbf{E}^\nu \right) \quad (\text{B.6})$$

B.1.2 Discrétisation et linéarisation

En discrétisant en temps par un schéma de différence finie avant, il est possible d'exprimer l'incrément de déformation visqueuse selon les équations (B.7) à (B.9).

$$\chi_\nu = \mathcal{G}^{-1,\nu} + \Delta t \mathcal{H} \quad (\text{B.7})$$

$$\bar{\mathbf{E}}_{t+\Delta t}^{ve} = \left(\mathbf{E}_{t+\Delta t}^{\text{total}} (-\mathbf{E}_{t+\Delta t}^P - \dots) - \sum_{i=1}^n \mathbf{E}_{i,t+\Delta t}^{\text{additionnelle}} \right) \quad (\text{B.8})$$

$$\Delta \mathbf{E}_{t+\Delta t}^v = \chi_v^{-1} : [\Delta t \mathcal{H} : (\bar{\mathbf{E}}_{t+\Delta t}^{ve} - \mathbf{E}_t^v)] \quad (\text{B.9})$$

Le tenseur $\bar{\mathbf{E}}_{t+\Delta t}^{ve}$ représente les déformations viscoélastiques d'essai.

L'opérateur tangent consistant est obtenu en prenant la dérivée de l'équation (B.6) par rapport à la déformation au pas de temps en cours de calcul, tel qu'illustré par l'équation (B.10).

$$\mathcal{C} = \frac{\partial \mathbf{S}_{t+\Delta t}}{\partial \mathbf{E}_{t+\Delta t}} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{E}_{t+\Delta t}} \left[\overbrace{\mathcal{H} : \left(\mathbf{E}^{\text{total}} (-\mathbf{E}^P - \dots) - \sum_{i=1}^n \mathbf{E}_i^{\text{additionnelle}} \right)}^{\bar{\mathcal{C}}} \right] - \frac{\partial}{\partial \mathbf{E}_{t+\Delta t}} [\mathcal{H} : \mathbf{E}_{t+\Delta t}^v] \quad (\text{B.10})$$

où $\bar{\mathcal{C}}$ représente l'opérateur tangent correspondant aux déformations $\mathbf{E}^e + \dots$ de la figure B.1. La correction à l'opérateur est donc obtenue en dérivant l'équation (B.9) par rapport à $\mathbf{E}_{t+\Delta t}$, ce qui se traduit par l'équation (B.11).

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \mathbf{E}_{t+\Delta t}} [\mathcal{H} : \mathbf{E}_{t+\Delta t}^v] &= \Delta t \mathcal{H}^T \chi_v^{-1} \overbrace{\frac{\partial}{\partial \mathbf{E}_{t+\Delta t}} [\mathcal{H} : \bar{\mathbf{E}}_{t+\Delta t}^{ve}]}^{\bar{\mathcal{C}}} - \overbrace{\frac{\partial}{\partial \mathbf{E}_{t+\Delta t}} [\Delta t \mathcal{H} : \mathbf{E}_t^v]}^{=0} \\ &= \Delta t \mathcal{H}^T \chi_v^{-1} \bar{\mathcal{C}} \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

La contribution à l'équation (B.11) est non symétrique ; il est possible de la symétriser en remplaçant \mathcal{H} par $\bar{\mathcal{C}}$, pour obtenir l'équation (B.12).

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{E}_{t+\Delta t}} [\mathcal{H} : \mathbf{E}_{t+\Delta t}^v] \approx \Delta t \bar{\mathcal{C}}^T \chi_v^{-1} \bar{\mathcal{C}} \quad (\text{B.12})$$

L'opérateur tangent algorithmique total s'exprime donc maintenant selon l'équation (B.13).

$$\mathcal{C} = \bar{\mathcal{C}} - \Delta t \mathcal{H}^T \chi_v^{-1} \bar{\mathcal{C}} \quad (\text{B.13})$$

$$\approx \bar{\mathcal{C}} - \Delta t \bar{\mathcal{C}}^T \chi_v^{-1} \bar{\mathcal{C}} \quad (\text{B.14})$$

B.1.3 Exemples

Tel qu'expliqué à la section 4.6.3.1, l'implémentation faite dans le code FESh++ permet d'ajouter un comportement visqueux de Maxwell à n'importe quelle loi de comportement intégrant une contrainte. Les simulations suivantes ont donc été réalisées à l'aide de la loi constitutive tensorielle de la classe FEShCstvLawViscousMaxwell.

Un essai de fluage simple a d'abord été reproduit numériquement, à l'aide d'un seul élément hexaédrique. Des conditions de symétrie sont posées de sorte que l'élément représente un huitième d'un prisme rectangulaire de 2 X 2 X 2 mètres. Une interpolation de Lagrange quadratique et le schéma d'intégration numérique direct à quatorze points (voir par exemple Dhatt et Touzot (1984)) ont été utilisés.

Le critère de convergence global est basé sur la norme infinie relative des déplacements ($\|\Delta \tilde{u} / \tilde{u}\|$), qui doit être inférieure à 10^{-6} . Une loi élastique (Hooke) et une loi élastoplastique en J_2 (voir la section A.3) ont été utilisées tour à tour comme prédicteurs de contraintes.

Les propriétés utilisées sont montrées au tableau B.1.

Tableau B.1: Propriétés matérielles pour une simulation de fluage (modèle de Maxwell)

PROPRIÉTÉ	VALEUR
Élasticité	
E	200 GPa
ν	0.3
Maxwell	
E_v	1000.0 GPa · s
ν_v	0.15
Élastoplasticité	
Modèle	von Mises associé (voir la section A.3)
Algorithme d'intégration	Retour radial (voir la section A.3.4)
Tolérance d'intégration	10^{-8}
Écrouissage	$200 + 66666.67 \chi$ MPa

La simulation consiste en l'application d'une charge de 205 MPa sur une unité de temps, charge maintenue jusqu'à 10 unités, puis finalement relâchée sur une unité de temps. La charge est appliquée dans la direction axiale à l'aide d'une pression de surface constante sur la face de l'élément.

Les réponses viscoélastique et visco-élastoplastique sont montrées à la figure B.2.

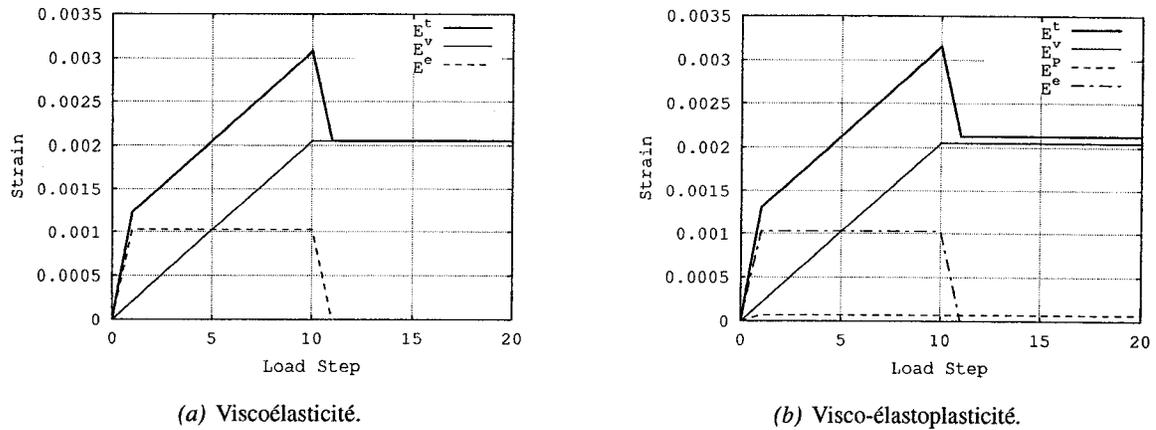


Figure B.2: Évolution des composantes de déformation lors d'une simulation de fluage (modèle de Maxwell)

Notez que la composante de déformation visqueuse permanente E^v et la composante élastique E^e sont bien identiques dans les deux cas.

L'impact d'utiliser la correction de l'opérateur tangent algorithmique originale non symétrique de l'équation (B.13) plutôt que la version symétrisée de l'équation (B.14) est montré au tableau B.2.

Tableau B.2: Normes de convergence d'un pas visco-élastoplastique pour un modèle de Maxwell

ITÉRATION	NORME DE CONVERGENCE RELATIVE	
	Correction originale (équation (B.13))	Correction symétrisée (équation (B.14))
1	1.000000e+00	1.000000e+00
2	6.457117e-02	5.722363e-02
3	8.597636e-03	2.643834e-04
4	1.130493e-03	4.072874e-07
5	1.454556e-04	-
6	1.691854e-05	-

L'impact du pas de temps sur la réponse viscoélastique a aussi été étudié ; la figure B.3(a) montre la réponse originale pour différents pas de temps, alors que la figure B.3(b) montre la réponse après la première unité de temps. Il est facile de voir que la réponse diffère uniquement lors de l'application de la charge, ce qui est normal compte tenu du très fort taux de chargement de 205 MPa / unité de temps.

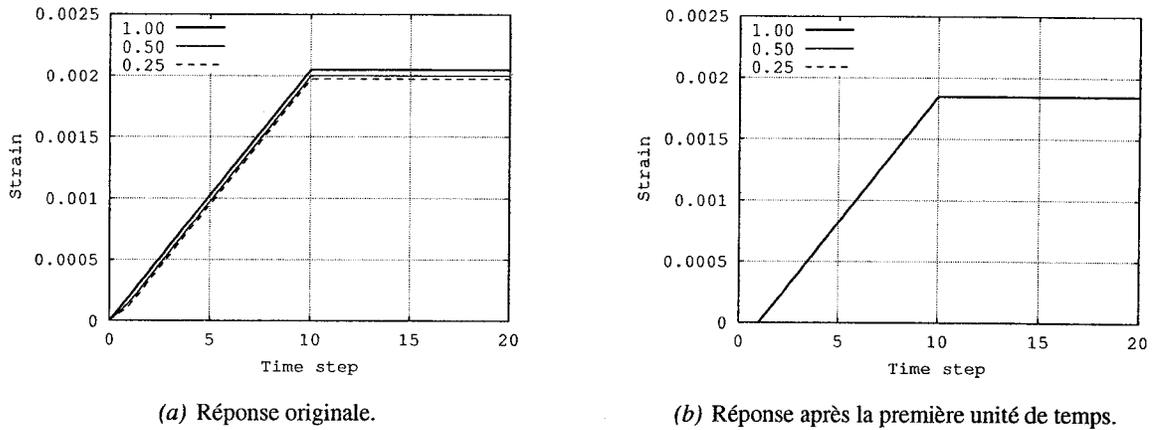


Figure B.3: Évolution de la déformation visqueuse lors d'une simulation de fluage pour différents pas de temps (modèle de Maxwell)

Du point de vue local, un algorithme d'intégration des déformations visqueuses similaire à celui pour le modèle de Burger, détaillé à l'algorithme 4.2, a été utilisé. Il s'agit essentiellement de la substitution successive d'une prédiction viscoélastique suivie d'un rabattement des contraintes ; la convergence est atteinte lorsque la norme relative de l'incrément des déformations visqueuses est inférieure à une tolérance donnée, tel que le montre l'équation (B.15). Les normes de convergence pour la première itération du premier pas de l'exemple précédent sont illustrées au tableau B.3 ; la tolérance utilisée est de 10^{-4} .

$$\frac{\|\mathbf{E}_{new,t+\Delta t}^v - \mathbf{E}_{old,t+\Delta t}^v\|}{\|\mathbf{E}_{old,t+\Delta t}^v\|} \leq \text{tol} \quad (\text{B.15})$$

Tableau B.3: Normes de convergence locales pour un modèle de Maxwell

ITÉRATION	NORME DE CONVERGENCE RELATIVE	
	Viscoélastique	Viscoélastoplastique
1	1.000000e+00	1.000000e+00
2	0.000000e+00	1.497325e-02
3	-	1.749172e-03
4	-	2.040490e-04
5	-	2.379934e-05

Tel qu'attendu, deux itérations seulement sont nécessaires pour le cas viscoélastique, puisque le problème local est linéaire. Le problème visco-élastoplastique local converge rapidement, malgré l'inefficacité relative de la méthode de substitution successive.

Un autre cas test a été réalisé avec la même configuration, cette fois en appliquant une charge de 205 MPa sur une unité de temps, en augmentant ensuite cette charge linéairement sur 10 unités jusqu'à 389.5 MPa, puis finalement en la relâchant sur une unité de temps. Les réponses viscoélastique et visco-élastoplastique sont montrées à la figure B.4.

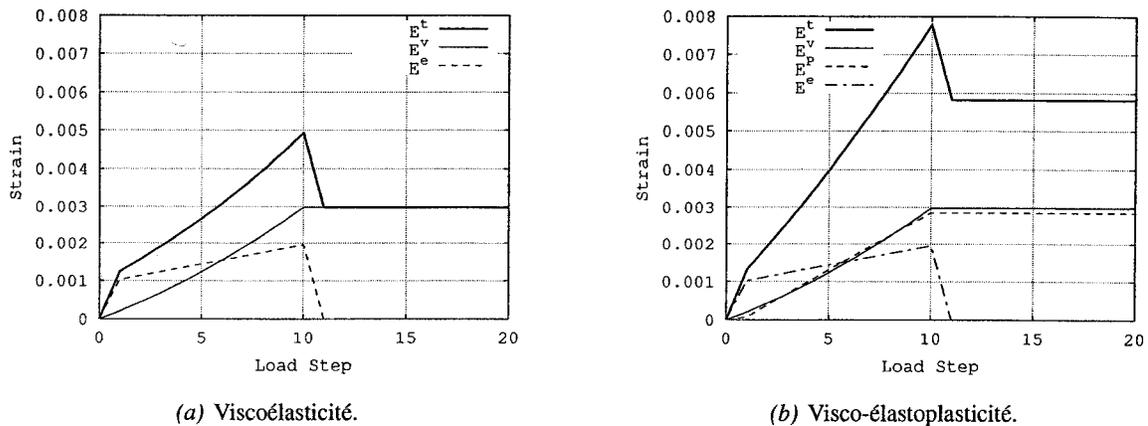


Figure B.4: Évolution des composantes de déformation lors d'une simulation de compression uniaxiale avec précharge (modèle de Maxwell)

Dans les deux cas, l'augmentation du taux de fluage avec la contrainte est facilement visible. Les pas visco-élastoplastiques ont été résolus en 4 itérations de Newton, et les pas viscoélastiques, en 2.

B.2 Burger

B.2.1 Modèle

Rappelons d'abord le modèle rhéologique d'un modèle de Burger généralisé, tiré de Fafard *et coll.* (2001) et représenté à la figure B.5, défini par l'équation (B.16).

$$\begin{aligned}\mathcal{G}^{-1,a} : \dot{\mathbf{E}}^a + \mathcal{H}^a : \mathbf{E}^a &= \mathbf{S} \\ \mathcal{G}^{-1,v} : \dot{\mathbf{E}}^v &= \mathbf{S}\end{aligned}\tag{B.16}$$

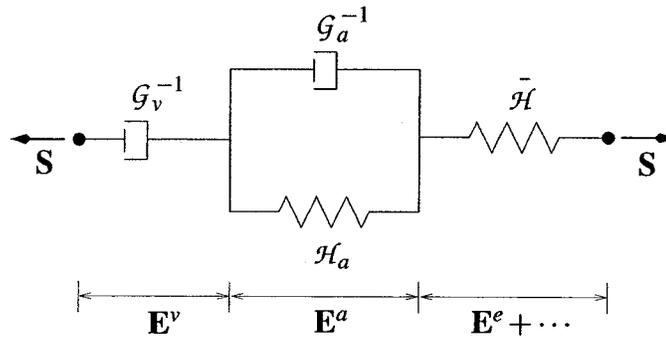


Figure B.5: Représentation rhéologique du modèle de fluage de Burger généralisé

où $\mathcal{G}^{-1,a}$, \mathcal{H}^a et $\mathcal{G}^{-1,v}$ sont des tenseurs de quatrième ordre définis positifs de même topologie que le tenseur d'élasticité classique, tels que définis par l'équation (B.17).

$$\begin{aligned}\mathcal{G}^{a,-1} &= \kappa_{va} \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} + 2G_{va} \left(I - \frac{1}{3} \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} \right) \\ \mathcal{H}^a &= \kappa_a \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} + 2G_a \left(I - \frac{1}{3} \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} \right) \\ \mathcal{G}^{v,-1} &= \kappa_v \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} + 2G_v \left(I - \frac{1}{3} \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} \right)\end{aligned}\tag{B.17}$$

Les modules de "compressibilité visqueuse" κ_v et κ_a et de "cisaillement visqueux" G_v et G_a sont définis respectivement par les équations (B.18) et (B.19).

$$\kappa_{va} = \frac{E_{va}}{3(1 - 2\nu_{va})}$$

$$\begin{aligned}\kappa_a &= \frac{E_a}{3(1-2\nu_a)} \\ \kappa_v &= \frac{E_v}{3(1-2\nu_v)}\end{aligned}\tag{B.18}$$

$$\begin{aligned}G_{va} &= \frac{E_{va}}{2(1+\nu_{va})} \\ G_a &= \frac{E_a}{2(1+\nu_a)} \\ G_v &= \frac{E_v}{2(1+\nu_v)}\end{aligned}\tag{B.19}$$

Les coefficients E_{va} , E_v et E_a – les modules de Young visqueux – et ν_{va} , ν_v et ν_a – les coefficients de Poisson visqueux – sont des paramètres à identifier par des essais de fluage ou de relaxation.

Les déformations sont supposées additives et sont données par l'équation (B.5).

$$\mathbf{E}^{\text{total}} = \mathbf{E}^{\text{élastique}} (+\mathbf{E}^P + \dots) + \mathbf{E}^v + \mathbf{E}^a + \sum_{i=1}^n \mathbf{E}_i^{\text{additionnelle}}\tag{B.20}$$

où \mathbf{E}^v est la composante de déformation visqueuse permanente, et \mathbf{E}^a la composante de déformation visqueuse réversible.

En posant la loi de Hooke, les contraintes sont donc telles que montrées à l'équation (B.21).

$$\mathbf{S} = \mathcal{H} : \left(\mathbf{E}^{\text{total}} (-\mathbf{E}^P - \dots) - \sum_{i=1}^n \mathbf{E}_i^{\text{additionnelle}} - \mathbf{E}^v - \mathbf{E}^a \right)\tag{B.21}$$

B.2.2 Discrétisation et linéarisation

En discrétisant en temps par un schéma de différence finie avant, il est possible d'exprimer l'incrément de déformation visqueuse selon les équations (B.22) à (B.25).

$$\chi_v = \mathcal{G}^{-1,v} + \Delta t \mathcal{H}\tag{B.22}$$

$$\chi_a = \mathcal{G}^{-1,a} + \Delta t (\mathcal{H}^a + \mathcal{H})\tag{B.23}$$

$$\bar{\mathbf{E}}_{t+\Delta t}^{ve} = \mathbf{E}_{t+\Delta t}^{\text{total}} (-\mathbf{E}_{t+\Delta t}^P - \dots) - \sum_{i=1}^n \mathbf{E}_{i,t+\Delta t}^{\text{additionnel}} \quad (\text{B.24})$$

$$\begin{bmatrix} \chi_a & \Delta t \mathcal{H} \\ \Delta t \mathcal{H} & \chi_v \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \Delta \mathbf{E}_{t+\Delta t}^a \\ \Delta \mathbf{E}_{t+\Delta t}^v \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \Delta t \mathcal{H} : (\bar{\mathbf{E}}_{t+\Delta t}^{ve} - \mathbf{E}_t^v - \mathbf{E}_t^a) - \Delta t \mathcal{H}^a : \mathbf{E}_t^a \\ \Delta t \mathcal{H} : (\bar{\mathbf{E}}_{t+\Delta t}^{ve} - \mathbf{E}_t^v - \mathbf{E}_t^a) \end{Bmatrix} \quad (\text{B.25})$$

Le tenseur $\bar{\mathbf{E}}_{t+\Delta t}^{ve}$ représente les déformations viscoélastiques d'essai.

L'opérateur tangent consistant est dérivé en prenant la dérivée de l'équation (B.21) par rapport à la déformation au pas de temps en cours de calcul, tel qu'illustré par l'équation (B.26).

$$\mathbf{C} = \frac{\partial \mathbf{S}_{t+\Delta t}}{\partial \mathbf{E}_{t+\Delta t}} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{E}_{t+\Delta t}} \left[\overbrace{\mathcal{H} : \left(\mathbf{E}^{\text{total}} (-\mathbf{E}^P - \dots) - \sum_{i=1}^n \mathbf{E}_i^{\text{additionnelle}} \right)}^{\bar{\mathbf{c}}} \right] - \frac{\partial}{\partial \mathbf{E}_{t+\Delta t}} [\mathcal{H} : \mathbf{E}_{t+\Delta t}^v] - \frac{\partial}{\partial \mathbf{E}_{t+\Delta t}} [\mathcal{H} : \mathbf{E}_{t+\Delta t}^a] \quad (\text{B.26})$$

où $\bar{\mathbf{c}}$ représente l'opérateur tangent correspondant aux déformations $\mathbf{E}^e + \dots$ de la figure B.5. La correction à l'opérateur est donc obtenue en dérivant l'équation (B.25) par rapport à $\mathbf{E}_{t+\Delta t}$, en suivant la même méthode qu'à la section B.1.2. Les composantes de déformation n'étant pas indépendantes, les équations (B.27) et (B.28) sont donc obtenues.

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{E}_{t+\Delta t}} [\mathbf{E}_{t+\Delta t}^a] = \Delta t \chi_a^{-1} \left(\bar{\mathbf{c}} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{E}_{t+\Delta t}} [\mathcal{H} : \mathbf{E}_{t+\Delta t}^v] \right) \quad (\text{B.27})$$

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{E}_{t+\Delta t}} [\mathbf{E}_{t+\Delta t}^v] = \Delta t \chi_v^{-1} \left(\bar{\mathbf{c}} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{E}_{t+\Delta t}} [\mathcal{H} : \mathbf{E}_{t+\Delta t}^a] \right) \quad (\text{B.28})$$

Ce système d'équations peut être résolu, et une fois les contributions combinées et réarrangées, s'exprime selon les équations (B.29) à (B.33).

$$\chi_{va} = \chi_v - (\Delta t)^2 \mathcal{H} \chi_a^{-1} \mathcal{H} \quad (\text{B.29})$$

$$\chi_{av} = \chi_a - (\Delta t)^2 \mathcal{H} \chi_v^{-1} \mathcal{H} \quad (\text{B.30})$$

$$\chi_{aa} = \mathbf{I} - \Delta t \mathcal{H} \chi_a^{-1} \quad (\text{B.31})$$

$$x_{vv} = I - \Delta t \mathcal{H} x_v^{-1} \quad (\text{B.32})$$

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{E}_{t+\Delta t}} [\mathcal{H} : (\mathbf{E}_{t+\Delta t}^a + \mathbf{E}_{t+\Delta t}^v)] = \Delta t \mathcal{H} (x_{va}^{-1} x_{aa} + x_{av}^{-1} x_{vv}) \bar{C} \quad (\text{B.33})$$

L'opérateur tangent algorithmique total s'exprime donc maintenant selon l'équation (B.34).

$$C = \bar{C} - \Delta t \mathcal{H} (x_{va}^{-1} x_{aa} + x_{av}^{-1} x_{vv}) \bar{C} \quad (\text{B.34})$$

Encore une fois, suivant la section B.1.2, le tenseur élastique est remplacé par l'opérateur tangent local dans l'équation (B.34), pour donner l'équation (B.35).

$$C \approx \bar{C} - \Delta t \bar{C} (x_{va}^{-1} x_{aa} + x_{av}^{-1} x_{vv}) \bar{C} \quad (\text{B.35})$$

B.2.3 Exemples

Tel qu'expliqué à la section 4.6.3.1, l'implémentation faite dans le code FESh++ permet d'ajouter un comportement visqueux de Burger à n'importe quelle loi de comportement intégrant une contrainte. Les simulations suivantes ont donc été réalisées à l'aide de la loi constitutive tensorielle de la classe FEShCstvLawViscousBurger.

Un essai de fluage simple a d'abord été reproduit numériquement, dans les mêmes conditions que pour l'analyse du modèle de Maxwell (B.1.3). Les propriétés utilisées sont montrées aux tableaux B.4 et B.5.

Tableau B.4: Propriétés matérielles pour une simulation de fluage (modèle de Burger)

PROPRIÉTÉ	VALEUR
Élasticité	
E	200 GPa
ν	0.3
Burger, permanent	
E_v	1000.0 GPa · s
ν_v	0.15

Tableau B.5: Propriétés matérielles pour une simulation de fluage (modèle de Burger, suite)

PROPRIÉTÉ	VALEUR
Burger, réversible	
E_a	60.0 GPa
ν_a	0.3
E_{va}	100.0 GPa · s
ν_{va}	0.4
Élastoplasticité	
Modèle	von Mises associé (voir la section A.3)
Algorithme d'intégration	Retour radial (voir la section A.3.4)
Tolérance d'intégration	10^{-8}
Écrouissage	$200 + 66666.67 \chi$ MPa

Les réponses viscoélastique et visco-élastoplastique sont montrées à la figure B.6.

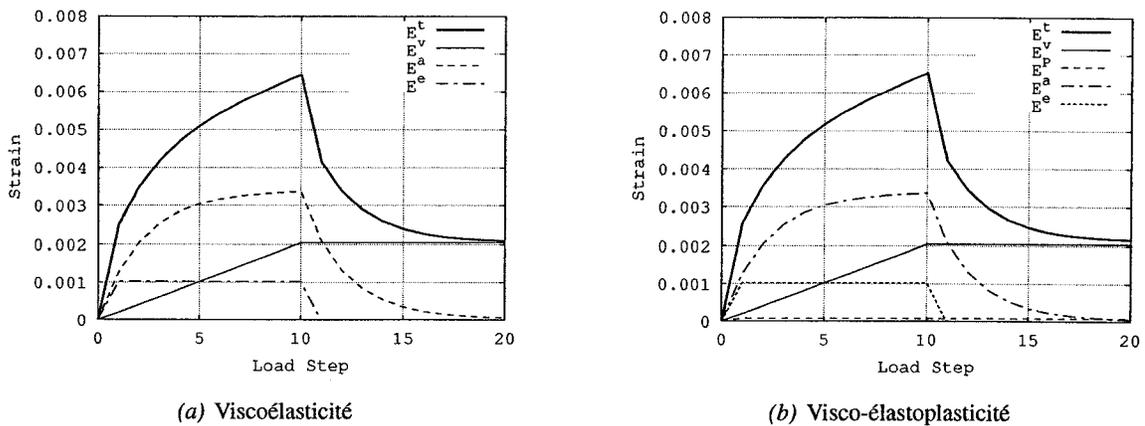


Figure B.6: Évolution des composantes de déformation lors d'une simulation de fluage (modèle de Burger)

Notez que la composante de déformation visqueuse permanente E^v et la composante élastique E^e sont bien identiques dans les deux cas, et qu'elles sont identiques à celle obtenue avec le modèle de Maxwell (voir la figure B.2). La composante visqueuse réversible E^a est quant à elle identique dans les deux cas.

Du point de vue local, l'algorithme d'intégration des déformations visqueuses permanentes et réversibles détaillé à l'algorithme 4.2 a été utilisé. Il s'agit essentiellement de la substitution successive d'une prédiction viscoélastique suivie d'un rabattement des contraintes ; la convergence est atteinte lorsque la norme relative de l'incrément des déformations visqueuses est inférieure à une tolérance donnée, tel que le montre l'équation (B.36).

$$\max \left(\frac{\|\mathbf{E}_{new,t+\Delta t}^a - \mathbf{E}_{old,t+\Delta t}^a\|}{\|\mathbf{E}_{old,t+\Delta t}^a\|}, \frac{\|\mathbf{E}_{new,t+\Delta t}^v - \mathbf{E}_{old,t+\Delta t}^v\|}{\|\mathbf{E}_{old,t+\Delta t}^v\|} \right) \leq \text{tol} \quad (\text{B.36})$$

Les normes de convergence locales pour la première itération du premier pas de l'exemple précédent sont illustrées au tableau B.3 ; la tolérance utilisée est de 10^{-4} .

Tableau B.6: Normes de convergence locales pour un modèle de Burger

ITÉRATION	NORME DE CONVERGENCE RELATIVE	
	Viscoélastique	Viscoélastoplastique
1	1.000000e+00	1.000000e+00
2	0.000000e+00	7.610137e-03
3	-	3.541106e-03
4	-	1.644639e-03
5	-	7.631732e-04
6	-	3.539969e-04
7	-	1.641701e-04
8	-	7.612911e-05

Tel qu'attendu, deux itérations seulement sont nécessaires pour le cas viscoélastique, puisque le problème local est linéaire. Le problème visco-élastoplastique local converge moins rapidement que pour le modèle de Maxwell (voir le tableau B.3), étant donnée la plus grande non-linéarité du modèle de Burger. Évidemment, la méthode de substitution successive demeure relativement inefficace ; par contre, elle permet de découpler complètement le calcul des déformations visqueuses permanentes et réversibles de l'élastoplasticité, ce qui rend l'implémentation très flexible (voir la section 4.6.3.1).

Tel que mentionné à la section B.2.2, la correction à l'opérateur tangent peut être symétrisée en remplaçant le tenseur élastique par l'opérateur tangent du prédicteur de contraintes (équation (B.35)). L'effet de cette symétrisation est montré à la figure B.7, alors que l'évolution de la norme de convergence globale lors du premier pas de chargement de l'exemple précédent est comparée pour la correction originale (**HC**), pour la symétrisation avec le tenseur élastique (**HH**) et pour la symétrisation proposée avec l'opérateur tangent (**CC**).

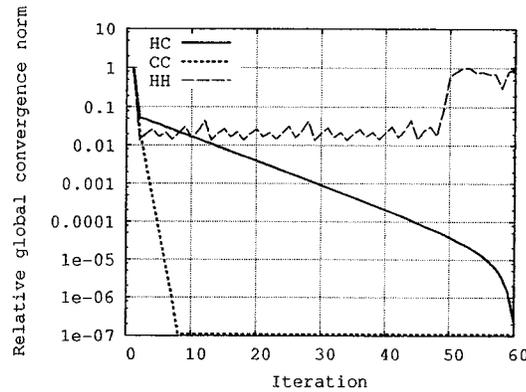


Figure B.7: Norme de convergence relative globale pour le premier pas d'une simulation de fluage (modèle de Burger)

La symétrisation avec le tenseur élastique (**HH**) néglige complètement le couplage entre les déformations visqueuses et plastiques, ce qui mène à un comportement oscillatoire de la solution. La correction originale montre un taux de convergence quasi-linéaire, ce qui est cohérent avec la nature de l'algorithme d'intégration locale des déformations visqueuses (substitution successive). Par contre, la symétrisation proposée avec l'opérateur tangent (**CC**) permet de conserver le taux de convergence quadratique de l'algorithme global de Newton-Raphson, en renforçant le couplage entre les déformations visqueuses et plastiques.

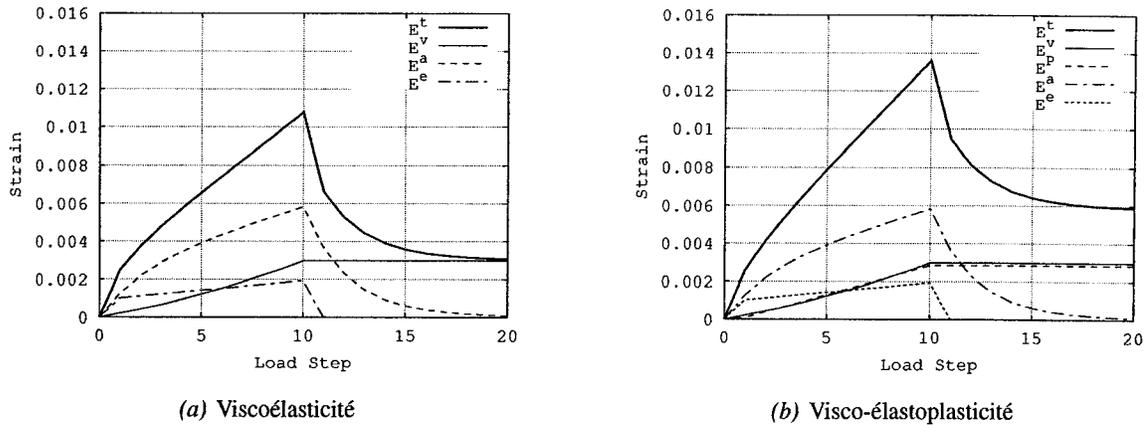


Figure B.8: Évolution des composantes de déformation lors d'une simulation de compression uniaxiale avec précharge (modèle de Burger)

Le cas test de compression uniaxiale suivant une précharge de la section B.1.3 a aussi été réalisé. Les réponses viscoélastique et visco-élastoplasticité sont montrées à la figure B.8.

Annexe C

Convection naturelle équivalente

Il est possible de calculer un coefficient de transfert de chaleur équivalent, tenant compte à la fois de la convection et du rayonnement. La convection est considérée comme étant “naturelle”, et le rayonnement, celui d’un corps gris dans une enceinte isotherme. De cette manière, les flux de chaleur peuvent être simplement exprimés selon les équations (C.1) à (C.3).

$$q_{\text{conv}} = h_{\text{conv}} (T - T_{\text{conv},\infty}) \quad (\text{C.1})$$

$$q_{\text{rad}} = h_{\text{rad}} (T - T_{\text{rad},\infty}) \quad (\text{C.2})$$

$$q_{\text{total}} = q_{\text{conv}} + q_{\text{rad}} = h_{\text{eqv}} (T - T_{\text{conv},\infty}) \quad (\text{C.3})$$

Le calcul des coefficients de transfert de chaleur h_{conv} et h_{rad} sera détaillé respectivement aux sections C.1 et C.2.

C.1 Convection naturelle

La convection naturelle est le transport de chaleur par un fluide mis en mouvement par le changement de densité résultant de l’augmentation de sa température ; le fluide froid près d’une paroi chaude s’échauffe, ce qui entraîne généralement la diminution de sa densité, et le mettra donc en mouvement. Il est bien connu que pour une grande variété de configurations, le nombre de Nusselt Nu_f peut être obtenu d’une relation fonctionnelle telle que montrée à l’équation (C.4). Un manuel de transfert thermique de base, tel que celui de Holman (1997), pourra être consulté pour plus de détails.

$$Nu_f = \frac{h_{\text{conv}} L_c}{k_f} = C Ra_f^m = C (Gr_f Pr_f)^m \quad (\text{C.4})$$

où l'indice f indique que la quantité doit être évaluée à la température moyenne du fluide T_f , *i.e.* selon l'équation (C.5).

$$T_f = \frac{1}{2} (T + T_{\text{conv},\infty}) \quad (\text{C.5})$$

Les paramètres C et m sont des constantes, alors que le nombre adimensionnel de Raleigh Ra_f est le produit des nombres adimensionnels de Grashof Gr_f et de Prantl Pr_f , définis respectivement par les équations (C.6) et (C.7).

$$Gr_f = \frac{g}{T_{f,K}} (T - T_{\text{conv},\infty}) \frac{L_c^3}{\nu_f^2} \quad (\text{C.6})$$

$$Pr_f = \frac{\nu_f}{\alpha_f} \quad (\text{C.7})$$

La température $T_{f,K}$ est celle du fluide, exprimée en Kelvin. La quantité g est tout simplement l'accélération gravitationnelle, L_c est une longueur caractéristique, ν est la viscosité cinématique, et α , la diffusivité. Le coefficient de transfert de chaleur résultant est donné par l'équation (C.8).

$$h_{\text{conv}} = \frac{k_f}{L_c} C Ra_f^m \quad (\text{C.8})$$

Toutes les propriétés du fluide, soit sa conductivité thermique k , sa diffusivité α et sa viscosité ν sont des fonctions de la température, et peuvent être trouvées dans un manuel de base – encore une fois, voir par exemple Holman (1997) – de même que la valeur des coefficients C et m . Pour plus de précision, une distinction doit être faite entre le régime laminaire et le régime turbulent, par le biais d'une valeur critique du nombre de Raleigh. Les coefficients utilisés dans le cadre de cette thèse sont montrés au tableau C.1.

Tableau C.1: Coefficients pour les corrélations de convection naturelle

ORIENTATION DE LA SURFACE	C	m
Horizontale, vers le haut		
laminaire, $Ra \leq 2 \times 10^7$	0.54	1/4
turbulent, $Ra > 2 \times 10^7$	0.133	1/3
Horizontale, vers le bas	0.27	1/4
Verticale		
laminaire, $Ra \leq 10^9$	0.59	1/4
turbulent, $Ra > 10^9$	0.105	1/3

C.2 Rayonnement

Le transfert thermique par rayonnement est un sujet fort complexe. L'approche la plus simple est de considérer un *corps gris* – i.e. un corps dont l'émission de rayonnement est indépendante de la longueur d'onde – dans une enceinte isotherme. Un manuel de base, tel que celui de Holman (1997) pourra être consulté pour plus de détails. Le flux de chaleur par rayonnement s'exprime selon l'équation (C.9); une fois réarrangé, il peut prendre la même forme que le flux de chaleur par convection, avec un coefficient équivalent défini par l'équation (C.10).

$$q_{\text{rad}} = \sigma \epsilon (T^4 - T_{\text{rad},\infty}^4) \quad (\text{C.9})$$

$$= h_{\text{rad}} (T - T_{\text{rad},\infty})$$

$$h_{\text{rad}} = \sigma \epsilon \frac{T^4 - T_{\text{rad},\infty}^4}{T - T_{\text{conv},\infty}} \quad (\text{C.10})$$

avec σ la constante de Stephan-Boltzmann ($5.6697 \times 10^8 \text{ W/m}^2\text{K}^4$) et ϵ , l'émissivité de la surface. L'émissivité dépend fortement du fini de surface, et des valeurs typiques sont données dans les manuels de transfert de chaleur (voir par exemple Holman (1997)).

C.3 Convection équivalente

Le coefficient de transfert de chaleur équivalent, tenant compte à la fois de la convection naturelle et du rayonnement, peut être obtenu à partir des équations (C.8) et (C.10); il s'exprime finalement

selon l'équation (C.11).

$$h_{\text{conv}} = \frac{k_f}{L_c} CRa_f^m + \sigma \varepsilon \frac{T^4 - T_{\text{rad},\infty}^4}{T - T_{\text{conv},\infty}} \quad (\text{C.11})$$