HAL
open science

# Modélisation numérique de l'endommagement des couches en proche surface : application aux systèmes Ni/NiO et Zr/ZrO2

Li Li, Delphine Brancherie, Jérôme Favergeon, Jean-Marc Roelandt

## To cite this version:

Li Li, Delphine Brancherie, Jérôme Favergeon, Jean-Marc Roelandt. Modélisation numérique de l'endommagement des couches en proche surface : application aux systèmes Ni/NiO et Zr/ZrO2. 10e colloque national en calcul des structures, May 2011, Giens, France. pp.Clé USB. hal-00592837

**HAL Id: hal-00592837**

**https://hal.science/hal-00592837v1**

Submitted on 3 May 2011

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

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

**CSMA 2011**
10e Colloque National en Calcul des Structures
9-13 Mai 2011, Presqu'île de Giens (Var)

# Modélisation numérique de l'endommagement des couches en proche surface : application aux systèmes Ni/NiO et Zr/ZrO2

L. Li[1], D. Brancherie[1], J. Favergeon[1], J.M. Roelandt[1]

[1] *Laboratoire Roberval UMR6253, Université de Technologie de Compiègne*
*BP 20529 60 205 Compiègne Cedex, France*
**Tel: 03 44 23 44 23 - 41 31, E-mail: li.li@utc.fr*

**Résumé** — Dans le contexte de la prévision de la tenue des matériaux, nous présentons un modèle numérique permettant de décrire les scénarios de rupture des couches d'oxyde (la fissuration traversante périodique dans la couche d'oxyde et le décollement de la couche) en utilisant une approche à discontinuités fortes couplée à des éléments d'interface. Les paramètres du modèle sont identifiés par la corrélation de la « distance interfissure moyenne » entre les essais expérimentaux et les calculs numériques.
**Mots clés** — modèle à discontinuités fortes, éléments d'interface, endommagement, analyse probabiliste.

## 1 Introduction

Le contexte général de l'étude est la modélisation du phénomène de rupture générée dans les systèmes métal/oxyde sollicités par des chargements mécaniques. La présence d'une couche de surface, qu'elle soit naturelle (oxydation à haute température, film passif en corrosion aqueuse), ou déposée (revêtement) permet de séparer un métal de son environnement externe, et donc contribue à le protéger des phénomènes de corrosion. Dès lors que cette couche est endommagée, son rôle protecteur disparaît et la corrosion de l'alliage métallique s'accélère. Par ailleurs, les phénomènes d'endommagement des couches en proche surface sont très fortement liés aux conditions d'élaboration et aux sollicitations environnementales, thermiques et mécaniques. Selon les conditions subies par le matériau, différents modes de rupture peuvent apparaître. En particulier, l'apparition de fissures traversant la couche (et éventuellement le métal) suivie de la décohésion de l'interface substrat/couche peut mener au décollement de celle-ci (voir Figures 1 [1] et 2).

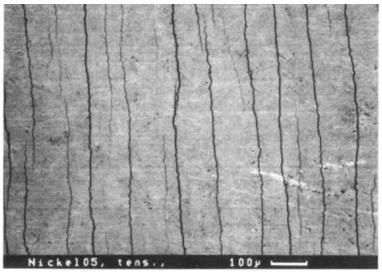



FIG. 1 – Morphologie de $NiO$ après une déformation de 1,12% à température ambiante ($h_o = 45\mu m$, $d^{\text{moy}}_{\text{interfissures}} \simeq 100\mu m$) [1]

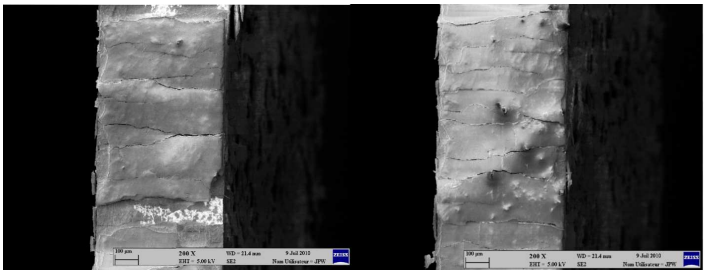


FIG. 2 – Morphologie de $ZrO_2$ après une déformation de 1,24% à température ambiante, une partie de la couche d'oxyde est décollée, ($h_o = 18\mu m$, $d^{\text{moy}}_{\text{interfissures}} \simeq 95\mu m$)

Nous utilisons une approche en endommagement basée sur une méthode à discontinuités fortes pour la modélisation des modes de rupture les plus souvent rencontrés dans les couches d'oxyde des systèmes $Ni/NiO$ et $Zr/ZrO_2$ (fissuration traversante quasi-périodique et décohésion de l'interface métal/oxyde). L'approche considérée est associée à

- un critère d'endommagement basé sur la notion de contrainte limite à rupture de l'oxyde ;
- un modèle d'interface associé à la notion de contrainte limite à rupture de décohésion métal/oxyde ;

- une démarche probabiliste basée sur l'aspect aléatoire de la distribution des valeurs des contraintes limites à rupture de la couche d'oxyde générées par des procédures numériques ;

- une prise en compte simplifiée des contraintes initiales générées lors de l'oxydation dans le système.

# 2 Cadre de l'étude et choix des modèles

## 2.1 Modèle mécanique

Dans ce travail, nous étudions, en particulier la fissuration générée dans les systèmes $Ni/NiO$ et $Zr/ZrO_2$ par des sollicitations mécaniques (traction simple) à température ambiante. La modélisation de l'oxydation n'est pas prise en compte et l'endommagement de la couche d'oxyde pendant son élaboration n'est pas étudié. La contrainte résiduelle générée dans le système métal/oxyde après l'oxydation au retour à température ambiante est prise en compte pour le système $Zr/ZrO_2$ de manière simplifiée.

La Figure 3 présente le modèle que nous avons considéré dans cette étude.

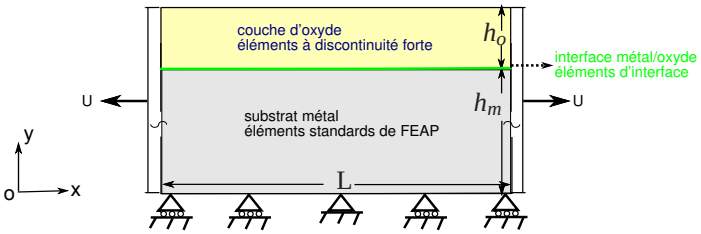



FIG. 3 – Système métal/oxyde étudié

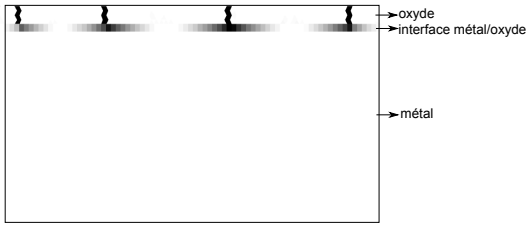



FIG. 4 – Exemple de modélisation de fissures dans la couche d'oxyde et à l'interface métal/oxyde

On note $h_o$ l'épaisseur de la couche d'oxyde, $h_m$ l'épaisseur du substrat métallique et L la longueur de l'échantillon considéré. Les chargements appliqués sont des déformations imposées supposées unidirectionnelles. L'hypothèse de déformations planes est adoptée et appliquée au domaine. La couche d'oxyde est généralement de type fragile. Dès qu'une fissure apparaît dans la couche d'oxyde, la fissure se propage instantanément en traversant toute la largeur de la couche. Pour cette raison, nous n'étudions que le profil du système métal/oxyde en 2 dimensions (voir Figure 3). Le comportement de l'oxyde est considéré élastique isotrope endommageable.

Le comportement du métal est considéré élastique pour le Nickel et élasto-plastique pour le Zirconium. En effet, d'après Nagl et al [1], à température ambiante, le Nickel reste élastique quand la couche d'oxyde s'endommage, alors que le comportement du Zirconium est de type élasto-plastique quand les couches d'oxyde s'endommagent (selon les résultats expérimentaux de notre laboratoire).

## 2.2 Choix du modèle numérique

Nous étudions dans ce travail l'endommagement des couches d'oxyde après leur création en supposant qu'avant chargement, le matériau est sain. Nous nous intéressons à l'initiation et la propagation des fissures et par conséquent nous utilisons une approche locale basée sur la mécanique de l'endommagement. Pour éviter le problème connu de la dépendance au maillage en présence d'un matériau adoucissant, et gérer automatiquement la détection et la propagation de fissures, nous avons choisi d'utiliser des éléments à discontinuités fortes pour la modélisation des fissures traversant la couche d'oxyde et des éléments d'interface pour la modélisation de la décohésion métal/oxyde.

Les éléments d'interface utilisés s'appuient sur les travaux d'Alfano et Crisfield [2]. La prise en compte des contraintes résiduelles générée après l'oxydation au retour à température ambiante est réalisée de façon simplifiée dans le système $Zr/ZrO_2$. Ces deux points ne sont pas présentés dans cet article (plus de détails sont disponibles dans [3]). Nous présentons ici uniquement les principaux ingrédients de la méthode à discontinuités fortes (voir [4], [3] pour plus de détails sur la méthode).

Les calculs et développements sont réalisés dans le code éléments finis Feap (développé par R.L.Taylor, Université de Californie Berkeley, USA).

# 3 Méthode à discontinuités fortes

Les principaux enrichissements de la méthode à discontinuités fortes réalisés dans ce travail sont la prise en compte des propriétés à rupture aléatoire, la gestion de la multifissuration qui cause du problème de bifurcation conduisant l'instabilité de la solution.

## 3.1 Cinématique

On considère un domaine $\Omega$ (un élément à discontinuités fortes) soumis à la charge appliquée $\mathbf{t_d}$ sur sa frontière $\partial_t\Omega$ et au déplacement appliqué $\mathbf{u_d}$ sur sa frontière $\partial_u\Omega$, avec $\partial_t\Omega$ et $\partial_u\Omega$ constituant une partition de $\partial\Omega$. Le domaine $\Omega$ est traversé par une surface de discontinuité $\Gamma_s$ et ainsi divisé en 2 sous domaines $\Omega^-$ et $\Omega^+$ (voir Figure 5). La discontinuité de déplacement est introduite sur $\Gamma_s$.

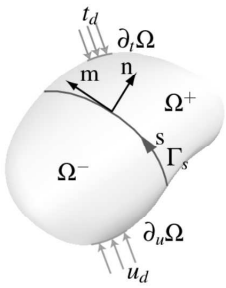



FIG. 5 – Domaine $\Omega$ traversé par une surface de discontinuité $\Gamma_s$

Le champ de déplacement et le champ de déformation s'écrivent alors :

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \bar{\mathbf{u}}(\mathbf{x}) + \bar{\bar{\mathbf{u}}}\mathcal{H}_{\Gamma_s}(\mathbf{x}) \tag{1}$$

$$\varepsilon(\mathbf{x}) = \bar{\varepsilon}(\mathbf{x}) + (\bar{\bar{\mathbf{u}}} \otimes \mathbf{n})^s \delta_{\Gamma_s}(\mathbf{x}) \tag{2}$$

où : $\bar{\mathbf{u}}(\mathbf{x})$ correspond à la partie continue du champ de déplacement et $\bar{\bar{\mathbf{u}}}$ correspond au saut de déplacement sur la surface $\Gamma_s$ ($\bar{\bar{\mathbf{u}}}$ est souvent pris constant le long de la surface $\Gamma_s$. $\mathcal{H}_{\Gamma_s}$ est la fonction de Heaviside sur $\Gamma_s$ telle que : $\mathcal{H}_{\Gamma_s}(\mathbf{x}) = \{1 \text{ si } \mathbf{x} \in \Omega^+, 0 \text{ si } \mathbf{x} \in \Omega^-\}$. $\delta_{\Gamma_s}$ est la fonction de dirac.

## 3.2 Critère d'introduction des discontinuités et lois de comportement

Au début du chargement, il n'y a pas de discontinuités (microfissures) présentes dans la couche d'oxyde. Le critère d'introduction des discontinuités dans ce travail s'appuie sur la valeur des contraintes principales : lorsque la contrainte principale maximale atteint la contrainte limite à rupture en traction notée ici $\bar{\bar{\sigma}}_f$, une discontinuité est introduite perpendiculairement à $\mathbf{n}$, vecteur propre associé à la contrainte principale maximale.

$$(\mathbf{n})\,[\boldsymbol{\sigma}]\,(\mathbf{n}) = \bar{\bar{\sigma}}_f \tag{3}$$

Le matériau n'est pas naturellement parfaitement homogène. Il existe des petits défauts (porosités, lacunes, défauts géométriques, ...) dans le matériau qui peuvent influencer les phénomènes d'endommagement. Afin de prendre en compte l'influence de ces défauts, nous avons choisi de considérer des propriétés à rupture de la couche d'oxyde aléatoires ; ainsi les contraintes limites à rupture $\bar{\bar{\sigma}}_f$ des éléments constituant la couche d'oxyde sont distribuées de façon aléatoire :

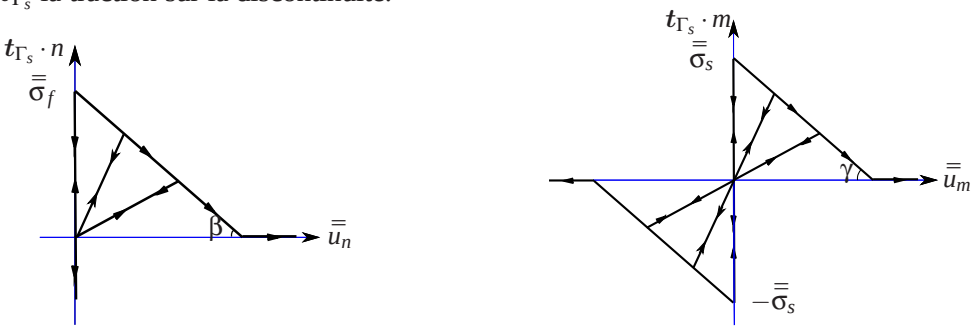
$$\bar{\bar{\sigma}}_f := \sigma_c^{ox} = \sigma_{c_0}^{ox} + \Delta\sigma_c^{ox} \times \chi \tag{4}$$

avec $\sigma_{c_0}^{ox}$ la valeur moyenne de la contrainte limite à rupture, $\chi$ une variable aléatoire qui suit une loi Gaussienne centrée réduite et $\Delta\sigma_c^{ox}$ l'écart-type associé à la variable $\sigma_{c_0}^{ox}$. Pour la modélisation de l'endommagement des systèmes $Ni/NiO$ et $Zr/ZrO_2$, nous considérons un écart-type $\Delta\sigma_c^{ox}$ égal à 10% de $\sigma_{c0}^{ox}$.

Le comportement d'un élément à discontinuités fortes est traité en deux parties : une partie sur le domaine hors discontinuité ($\Omega \setminus \Gamma_s = \Omega^- \cup \Omega^+$), une partie sur la surface de discontinuité $\Gamma_s$ :

- sur $\Omega \setminus \Gamma_s$ : la loi de comportement est une loi classique de mécanique des milieux continus, supposée élastique dans notre travail.

– sur $\Gamma_s$ : la loi de comportement est une loi de type discrète qui relie la traction $\boldsymbol{t}_{\Gamma_s}$ et le saut de déplacement $\overline{\overline{\mathbf{u}}}$.
La Figure 6 présente les lois de comportement rigide-endommageable pour les directions normale et tangentielle de la surface de discontinuité $\Gamma_s$ avec $\overline{\overline{\sigma}}_s$ la contrainte limite à rupture en cisaillement et $\boldsymbol{t}_{\Gamma_s}$ la traction sur la discontinuité.




(a) Traction en fonction de $\overline{\overline{u}}$ pour la direction normale

(b) Traction en fonction de $\overline{\overline{u}}$ pour la direction tangentielle

FIG. 6 – Lois de comportement sur $\Gamma_s$ pour les directions normale et tangentielle

### 3.3 Résolution numérique

À partir de l'équation (1), la discrétisation éléments finis du champ de déplacement dans un élément peut se mettre sous la forme :

$$\mathbf{u}^e(\mathbf{x}) = \overline{\mathbf{u}}^e(\mathbf{x}) + \overline{\overline{\mathbf{u}}}^e \mathcal{H}_{\Gamma_s}(\mathbf{x}) = \tilde{\mathbf{u}}^e(\mathbf{x}) + \overline{\overline{\mathbf{u}}}^e M^e(\mathbf{x}) \tag{5}$$

avec $\tilde{\mathbf{u}}^e(\mathbf{x})$ un champ de déplacement continu possédant les mêmes valeurs nodales que le champ de déplacement réel et $M^e$ l'enrichissement de la base des fonctions de forme : $M^e(\mathbf{x}) = \mathcal{H}_{\Gamma_s}(\mathbf{x}) - \phi^e(\mathbf{x})$, $\phi^e(\mathbf{x})$ est souvent choisie égale à $\sum_{a \in \Omega^{e+}} N_a(\mathbf{x})$.

Avec cette interpolation, la forme faible discrétisée s'écrit sous la forme d'un système de deux équations : une équation écrite au niveau global correspondant à la forme faible éléments finis classique et une équation écrite au niveau élémentaire qui permet d'obtenir les sauts de déplacement à partir des déplacements nodaux.

$$\begin{cases} \sum_{e=1}^{N_{element}} \left[ \int_{\Omega^e} \mathbf{B}^T \boldsymbol{\sigma} \mathrm{d}\Omega^e - \int_{\Omega^e} \mathbf{N}^T \mathbf{b} \mathrm{d}\Omega^e \right] = 0 \ \text{(niveau global)} \\ \int_{\Omega^e} \mathbf{G}_{\mathbf{v}}^{eT} \boldsymbol{\sigma} \mathrm{d}\Omega^e = 0 \ \ \forall e \in [1, N_{element}] \ \text{(niveau élémentaire)} \end{cases} \tag{6}$$

On note la fonction $\mathbf{G}^e$ le gradient symétrique de $M^e$. $\mathbf{G}_{\mathbf{v}}^e$ est obtenue à partir de $\mathbf{G}^e$ en imposant la verification du « patch-test » [5] : $\mathbf{G}_{\mathbf{v}}^e = \mathbf{G}^e - \frac{1}{A^e} \int_{\Omega^e} \mathbf{G}^e \mathrm{d}\Omega^e$.

La solution est obtenue, après linéarisation de (6), par la résolution du système :

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K_{dd}} & \mathbf{K_{d\overline{\overline{u}}}} \\ \mathbf{K_{\overline{\overline{u}}d}} & \mathbf{K_{\overline{\overline{u}}\overline{\overline{u}}}} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \Delta \mathbf{d} \\ \Delta \overline{\overline{\mathbf{u}}} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \Delta \mathbf{f_d} \\ 0 \end{Bmatrix} \tag{7}$$

Par condensation statique au niveau élémentaire, l'inconnue $\Delta \overline{\overline{\mathbf{u}}}$ est éliminée, le problème à résoudre s'écrit alors sous la forme classique : $[\hat{\mathbf{K}}]\{\Delta \mathbf{d}\} = \{\Delta \mathbf{f_d}\}$, où $\hat{\mathbf{K}}$ est la matrice de rigidité modifiée par la présence de discontinuités.

### 3.4 Convergence de la solution - régularisation visqueuse

Une adaptation des modèles à discontinuités fortes est nécessaire pour la description de la multi-fissuration telle que celle observée dans la couche d'oxyde. En effet, le développement simultané de plusieurs fissures peut conduire d'un point de vue numérique à des instabilités liées à la présence de points de bifurcation. La solution globale oscille entre plusieurs solutions : certaines fissures entrent en concurrence.

Pour éviter les points de bifurcation et assurer la convergence de la solution, nous avons utilisé une méthode de régularisation de type « viscosité » proposée par Olivier et Huespe [6]. À la valeur de la traction $\boldsymbol{t}_{\Gamma_s}$ obtenue par l'utilisation du modèle d'endommagement est ajouté un terme visqueux $\boldsymbol{t}^*_{\Gamma_s}$ qui s'écrit en fonction de la vitesse du saut de déplacement :

$$\boldsymbol{t}^*_{\Gamma_s} = \gamma[\![\dot{\mathbf{u}}]\!] \tag{8}$$

où $\gamma$ est le paramètre de viscosité.

Le système linéarisé (7) est alors modifié et devient :

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K}_{dd} & \mathbf{K}_{d\bar{\bar{\mathbf{u}}}} \\ \mathbf{K}_{\bar{\bar{\mathbf{u}}}d} & \mathbf{K}_{\bar{\bar{\mathbf{u}}}\bar{\bar{\mathbf{u}}}} + (\gamma/\Delta t)1 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \Delta d_{t+\Delta t} \\ \Delta \bar{\bar{\mathbf{u}}}_{t+\Delta t} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \Delta f_d \\ (\gamma/\Delta t)\Delta \bar{\bar{\mathbf{u}}}_t \end{Bmatrix} \tag{9}$$

La Figure 7 présente pour différentes valeurs du paramètre de régularisation $\gamma$, l'évolution de l'ouverture de fissures au cours des itérations d'un pas de chargement non convergé sans régularisation.

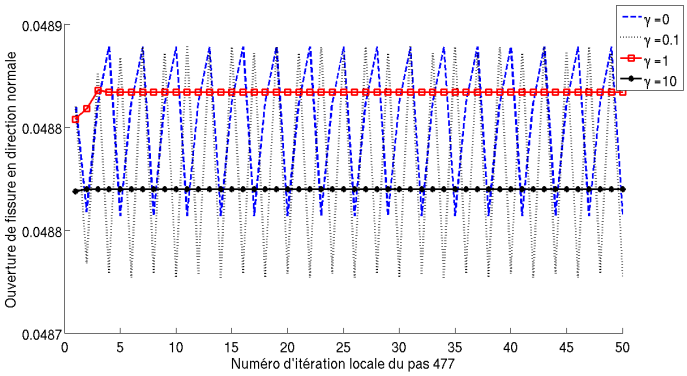



FIG. 7 – Ouverture de fissures (mode I) au cours des itérations pour différentes valeurs de $\gamma$

On constate que plus $\gamma$ est grand, moins la solution oscille et plus elle converge rapidement. Par ailleurs, $\gamma$ doit être suffisamment petit pour que la solution soit proche de la solution du problème d'origine. Le paramètre de régularisation doit offrir un compromis entre rapidité de convergence et précision. Dans notre cas, la valeur initiale de $\gamma$ est de $50 MPa \cdot m^{-1} \cdot$ pseudo $s$. Cette valeur est adaptée si nécessaire au cours du calcul.

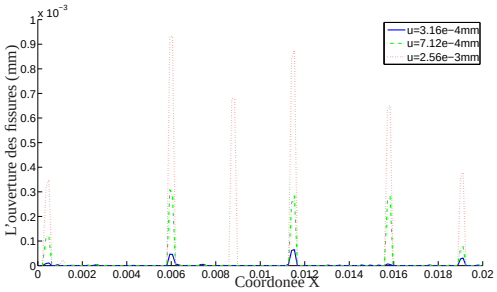
## 4 Reproduction des scénarios de rupture et la distance interfissure

Le modèle numérique est capable de reproduire les scénarios de rupture (multifissuration dans la couche et décohesion métal/oxyde) et évaluer la distance interfissure en supposant une interface métal/oxyde parfaite ou endommageable, le comportement du substrat élastique ou élasto-plastique.

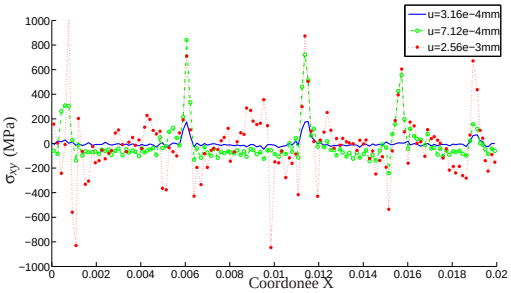
On donne ici un exemple qui décrit le scénario de rupture d'un système métal/oxyde où le substrat est supposé élastique et l'interface métal/oxyde soit parfaite (voir Figure 8) soit endommageable (voir Figure 9). Les figures décrivent l'évolution au cours du chargement de l'ouverture des fissures traversantes, du champ de contraintes de cisaillement à l'interface métal/oxyde et du champ de contraintes principales maximales.

Sous l'effet d'une augmentation du chargement appliqué, la couche d'oxyde est la première à s'endommager, l'ouverture des fissures s'accompagne d'une augmentation de la contrainte de cisaillement au droit de ces mêmes fissures. La contrainte de cisaillement augmente sans cesse en considérant une interface métal/oxyde parfaite. En revanche elle est limitée à la contrainte limite à rupture de l'interface pour une interface endommageable et diminue au cours du chargement. La contrainte principale maximale dans la couche d'oxyde, quant-à-elle, diminue jusqu'à ce que l'oxyde entre en compression. À ce stade, aucune nouvelle fissure ne pourra apparaître.

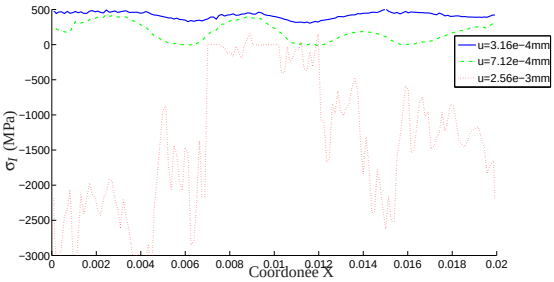
La distance interfissure moyenne est évaluée en effectuant une analyse statistique sur 50 tirages en considérant un écart-type de 10% pour $\sigma_c^{ox}$. Les résultats numériques montrent que la décohésion à l'interface métal/oxyde a pour effet de relâcher les contraintes autour des fissures périodiques dans la




(a) Évolution de l'ouverture des fissures

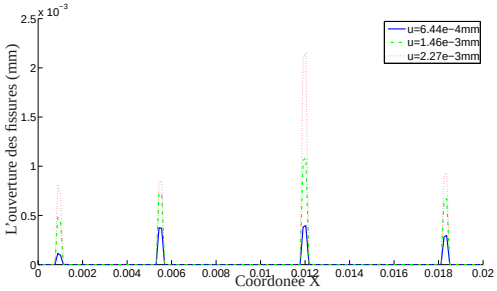



(b) Évolution de $\sigma_{xy}$ proche de l'interface métal/oxyde

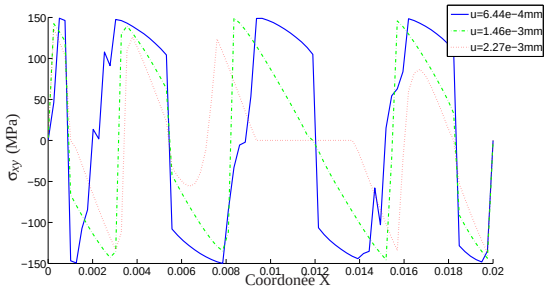



(c) Évolution de $\sigma_I$ à la surface de l'oxyde

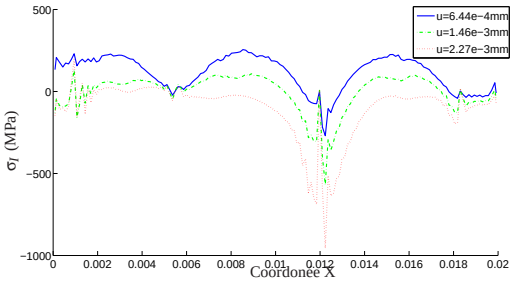
FIG. 8 – Scénario de rupture (substrat élastique, interface parfaite)




(a) Évolution de l'ouverture des fissures




(b) Évolution de $\sigma_{xy}$ à l'interface métal/oxyde




(c) Évolution de $\sigma_I$ à la surface de l'oxyde

FIG. 9 – Scénario de rupture (substrat élastique, interface endommageable)

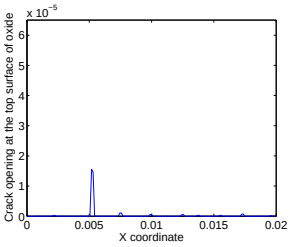
couche d'oxyde, ce qui repousse les fissures voisines plus loin et augmente la distance interfissure. Ainsi, la distance interfissure dans le cas d'une interface endommageable est plus importante que pour le cas d'une interface parfaite.

La figure 10 décrit le scénario de rupture d'un système métal/oxyde en considérant une interface métal/oxyde endommageable et un substrat élasto-plastique : l'évolution au cours du chargement de l'ouverture des fissures traversantes et la déformation plastique cumulée sont présentées. Le substrat entre dans la phase plastique dès l'apparition de la première fissure, mais la plastification reste confinée autour de celle-ci. Au cours du chargement, le nombre de fissures et leur ouverture augmentent et la plastification se généralise à tout le substrat.

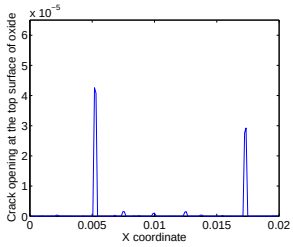
Pour le cas d'un substrat élastique, les fissures apparaissent presque simultanément, alors que pour le cas d'un substrat élasto-plastique, les fissures apparaissent successivement au cours du chargement et l'état de saturation de la fissuration est beaucoup plus long à atteindre. La distance interfissure obtenue en considérant le substrat élastique est plus petite que celle obtenue en considérant un comportement élasto-plastique du substrat pour le même chargement appliqué.

## 5 Comparaison des résulats numériques et expérimentaux, validation du modèle

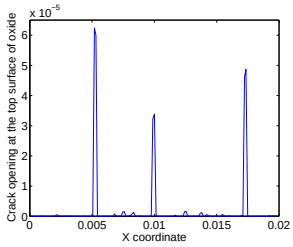
Afin de réaliser les corrélations essai/calcul en termes de « distance interfissure » de la fissuration périodique traversant la couche d'oxyde, nous avons préalablement effectué les analyses de sensibi-



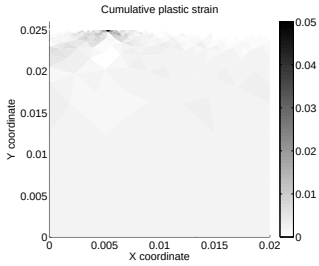

(a) $\varepsilon = 0,55\%$, 1 fissure



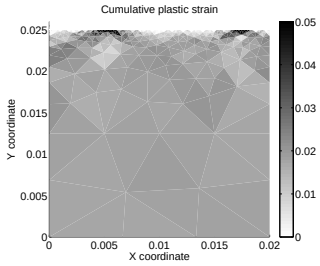

(b) $\varepsilon = 2\%$, 2 fissures, $d^{\text{moy}}_{\text{interfissures}} = 12,04\mu m$



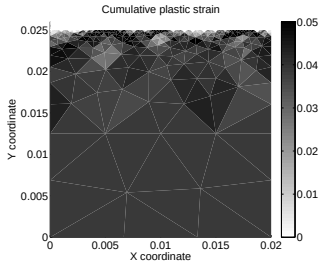

(c) $\varepsilon = 4\%$, 3 fissures, $d^{\text{moy}}_{\text{interfissures}} = 6,02\mu m$




(d) Déformation plastique cumulée, $\varepsilon = 0,55\%$




(e) Déformation plastique cumulée, $\varepsilon = 2\%$




(f) Déformation plastique cumulée, $\varepsilon = 4\%$

FIG. 10 – Évolution de l'ouverture des fissures et déformation plastique cumulée (substrat élasto-plastique, interface endommageable)

lité des paramètres du modèle sur la distance interfissure. Ainsi l'influence de l'épaisseur de la couche d'oxyde $h_o$, de la contrainte résiduelle dans l'oxyde $\sigma^{ox}_{\text{résiduel}}$, de l'énergie de fissuration $G_f$ lié à $\tan\beta$, des contraintes limites à rupture de l'oxyde et de l'interface $\sigma^{ox}_{c0}$ et $\sigma^{\text{interf}}_s$ et du comportement du substrat a été étudiée. Les influences des paramètres du modèle sur la distance interfissure sont résumées dans le tableau 1 :

| | $h_o$ | $\sigma^{ox}_{c0}$ | $\sigma^{ox}_{\text{résiduel}}$ | $G_f$ | $\sigma^{\text{interf}}_s$ |
|---|---|---|---|---|---|
| substrat élastique | $\uparrow$ | $\simeq$ | $\simeq$ | $\downarrow$ | $\downarrow$ |
| substrat élasto-plastique | $\uparrow$ | $\uparrow$ | $\uparrow$ | $\downarrow$ | $\downarrow$ |

TAB. 1 – Variation de la distance interfissure ($h_o = 18\mu m$) - $\uparrow$: $d_{\text{interfissure}}$ croît lorsque le paramètre croît, $\downarrow$: $d_{\text{interfissure}}$ décroît lorsque le paramètre croît, $\simeq$ : $d_{\text{interfissure}}$ est peu influencée par une variation du paramètre

La Figure 11 présente la fissuration de la couche d'oxyde endommagée obtenue pour un essai expérimental et par la simulation numérique.

La distance interfissure numérique $d = 100,1\mu m$ est une valeur moyenne convergée de 50 tirages aléatoires de $\sigma^{ox}_c$ (voir Figure 12) ce qui est en accord avec la distance interfissure expérimentale ($d \simeq 100\mu m$). L'écart-type de la distance interfissure est de $27,7\mu m$ soit 27,7% de $d^{\text{moy}}_{\text{interfissures}}$.

Afin de valider les valeurs des paramètres obtenues, nous avons calculé la distance interfissure moyenne numérique pour différents échantillons présentant différentes épaisseurs de couche d'oxyde, puis comparé ces résultats aux résultats expérimentaux. Pour le système $Zr/ZrO_2$, 4 paramètres ont été identifiés : $433MPa < \sigma^{ox}_c \leqslant 547MPa$, $\tan\beta = 2000MPa \cdot mm^{-1}$, $\sigma^{\text{interf}}_s = 80MPa$, et $G_f \in [47MPa \cdot mm, 76MPa \cdot mm]$. Pour le système $Ni/NiO$, les paramètres identifiés sont : $\sigma^{ox}_c \in [364MPa, 431MPa]$, $\tan\beta \simeq 2500MPa \cdot mm^{-1}$, $\sigma^{\text{interf}}_s \geqslant 129MPa$, $G_f \in [26MPa \cdot mm, 37MPa \cdot mm]$.

## 6 Conclusion et perspectives

Nous avons établi un modèle numérique permettant de décrire les scénarios de rupture des couches en utilisant une approche à discontinuités fortes couplée à des éléments d'interface. Le modèle numérique validé pour le problème spécifique traité (type de sollicitation, conditions aux limites, comportements

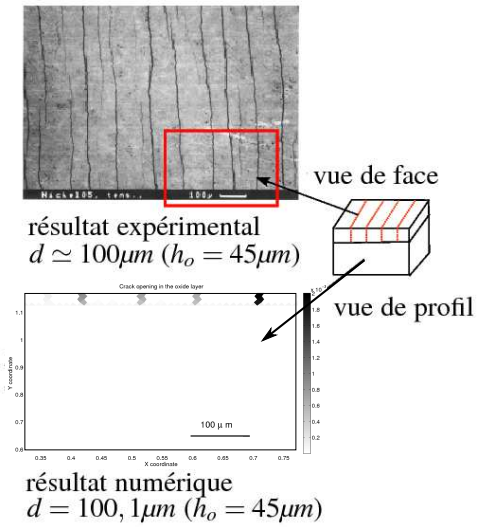



FIG. 11 – Comparaison des résultats numériques et expérimentaux

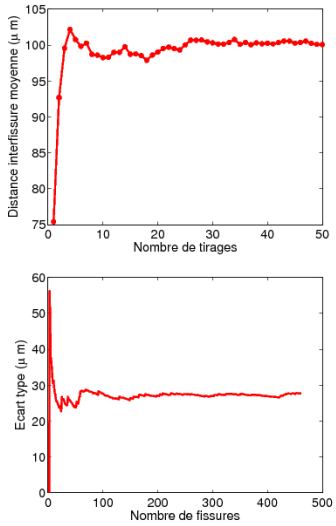



FIG. 12 – Longueur moyenne interfissure et son écart-type moyen en fonction du nombre de tirages

des matériaux ...) peut prédire l'endommagement jusqu'à la ruine de la couche de protection et, par corrélation, évaluer des paramètres difficiles à obtenir autrement.

Notre démarche a consisté essentiellement à reproduire les phénomènes d'endommagement des couches d'oxyde après leur formation. Une perspective forte est de coupler ces développements aux travaux antérieurs portant sur la modélisation de la formation des couches [7] [8] [9]. Cela doit s'accompagner d'une amélioration des outils numériques pour la prise en compte des aspects multiphysiques, notamment sur l'interaction diffusion/contrainte, la propagation du front d'oxydation et le couplage thermomécanique mais également des aspects microstructure, par exemple, la prise en compte d'anisotropie et hétérogénéité de la couche d'oxyde.

## Références


[1] M. M. Nagl, S. R. J. Saunders, W. T. Evans, and D. J. Hall. The tensile failure of nickel oxide scales at ambient and at growth temperature. *Corrosion Science*, 35 :965–977, 1993.

[2] G. Alfano and M. A. Crisfield. Finite element interface models for the delamination analysis of laminated composites : mechanical and computational issues. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 50 :1701–1736, 2001.

[3] L. Li. *Modélisation numérique de l'endommagement des couches en proche surface : application aux systèmes* $Ni/NiO$ *et* $Zr/ZrO_2$. PhD thesis, University of Technology of Compiègne, France, 2011.

[4] D. Brancherie and A. Ibrahimbegovic. Novel anisotropic continuum-discrete damage model capable of representing localized failure of massive structures. *Engineering Computations*, 26(1-2) :100–127, 2009.

[5] A. Ibrahimbegovic and E.L. Wilson. A modified method of incompatible modes. *Communication in Applied Numerical Methods*, 7 :187–194, 1991.

[6] J. Oliver and A.E. Huespe. Theoretical and computational issues in modelling material failure in strong discontinuity scenarios. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 193 :2987–3014, 2004.

[7] V. L. Lorman, L. Lahoche, S. B. Rochal, J.M. Roelandt, and N. Vallino. Duplex structure formation and adherence properties of oxide scale on a metal. *Surface and Coatings Technology*, 111 :22–28, 1998.

[8] N. Vallino, L. Lahoche, J. M. Roelandt, V. L. Lorman, S. B. Rochal, L. Gaillet, and G. Moulin. Numerical approach to the study of the stressed (001)nio/(111)ni coatings. *Computational Material Science*, 19 :329–338, 2000.

[9] J. Favergeon, T. Montesin, and G. Bertrand. Mechano-chemical aspects of high temperature oxidation : A mesoscopic model applied to zirconium alloys. *Oxidation of Metals*, 64 :253–279, 2005.