

Modélisation numérique de la thermomécanique des mécanismes dissipatifs simultanés

Y. Chemisky¹, B. Kiefer², G. Chatzigeorgiou³, F. Meraghni³

¹ Université de Bordeaux, I2M-UMR CNRS 5295, Bordeaux, France, yves.chemisky@u-bordeaux.fr

² TU Bergakademie Freiberg, Institut für Mechanik und Fluidodynamik, D-09599 Freiberg, Germany

³ Arts et Métiers, Laboratoire d'étude des Microstructures et de Mécanique des Matériaux (LEM3) CNRS, 57078 Metz, France

Résumé —

Nous proposons une méthodologie permettant d'implémenter des lois de comportement non-linéaire des matériaux intégrant des mécanismes dissipatifs pouvant apparaître simultanément. A partir de la description thermodynamique du matériau, une forme analytique du système d'EDP à résoudre est proposée, intégrant les possibles inégalités (conditions de Kuhn-Tucker). Les opérateurs tangents thermomécaniques sont décrits ainsi que les quantités énergétiques (Puissance mécaniques et thermiques). Ces formes sont adaptées à une analyse multiéchelle des matériaux hétérogènes.

Mots clés — mot clef1, mot clef2, mot clef3.

1 Instructions générales

L'étude des matériaux multifonctionnels et composites présentant un fort couplage mécanique nécessite une profonde connaissance des mécanismes physiques opérant lors de trajets de chargement thermomécaniques. Les relations entre la progression de tels mécanismes et l'évolution des quantités et variables thermodynamiques caractéristiques de l'état de la matière doivent être réalisées dans le cadre de la thermodynamique des processus irréversibles. Les lois de comportement obtenues, implémentées dans des solutions logicielles de simulation à plusieurs échelles, peuvent présenter des difficultés de résolution numérique de par la présence d'équations aux dérivées partielles et d'inégalités à satisfaire (par exemple, conditions de Kuhn-Tucker). De plus, la formulation d'opérateurs tangents et la définition des quantités thermodynamiques (bilans de puissance) est souvent une tâche complexe dépendante des mécanismes physiques modélisés. Nous proposons une méthodologie générique de définition de lois de comportement multi-physiques à partir de la définition de mécanismes contrôlant l'évolution de la microstructure du matériau, permettant d'aboutir à un schéma de résolution optimisé du point de vue numérique. Cette méthodologie est alors appliquée dans le cadre de la simulation numérique de matériaux présentant des comportements complexes (transformation de phase, effets visqueux, plasticité, endommagement). Il est montré que la formulation proposée est adaptée à la définition de modèles multi-échelles du comportement thermomécanique non-linéaire de matériaux hétérogènes.

1.1 Définition de la méthodologie

Chaque mécanisme dissipatif (dénote par l'index l) est représenté par un ensemble de variables $\{V_i^l\}$. Notons que ces variables peuvent entrer dans la définition du potentiel thermodynamique (variables internes) V_i^l ou consister en une variable d'histoire permettant d'optimiser le traitement numérique du comportement.

Le premier élément de chaque ensemble est un scalaire p^l :

$$p^l = V_1^l$$

La propriété de chaque variable p^m est que les lois d'évolution de toutes les variables V_i^l de cet ensemble peuvent s'écrire :

$$\dot{V}_i^l = \dot{p}^j \Lambda_i^l, \quad (1)$$

Dans cette équation Λ_i^l est un tenseur dont l'ordre varie en fonction de la nature de V_i^l , nommé *tenseur d'évolution*. Au sein de l'ensemble $\{V_i^l\}$, la présence d'un tenseur de déformation propre au mécanisme dissipatif l est imposée : $\varepsilon^l \in \{V_i^l\}$, de telle manière que l'on aie :

$$-\frac{\partial G}{\partial \varepsilon^l} = \sigma - \frac{\partial G^v}{\partial \varepsilon^l} \quad (2)$$

La déformation totale s'exprime

$$\varepsilon_{in} = \sum_l \varepsilon^l \quad (3)$$

pour N_l mécanismes.

1.2 Lois complémentaires

L'analyse convexe [6, 8] permet d'exprimer les lois complémentaires en considérant un état local d'accompagnement [4].

1.2.1 Phénomènes dissipatifs dépendant du temps

Pour les phénomènes dépendant du temps, une relation directe peut être déduite entre l'évolution d'une variable interne par rapport à l'expression d'un potentiel de dissipation dual (non négatif, convexe, différentiable) $\phi^*(A, \sigma, \theta, \zeta)$, en notant $A_i^l = \frac{\partial G}{\partial V_i^m}$ et ζ l'ensemble des variables internes considérées.

$$\dot{V}_i^l = \frac{\partial \phi^*}{\partial A}. \quad (4)$$

Nous pouvons alors définir le critère du mécanisme dissipatif Φ^l :

$$\Phi^l(A, \dot{\zeta}, \sigma, \theta, \zeta) = \frac{\partial \phi^{*,l}}{\partial A} - \dot{V}_i^l = 0 \quad \dot{V}_i^l \geq 0 \quad (5)$$

Notons ici que les autres équations serviront à l'évaluation des tenseurs d'évolution.

1.2.2 Phénomènes dissipatifs indépendants du temps

Dans ce cas limite, la définition d'un potentiel de dissipation mène à l'écriture d'un domaine convexe S dans l'espace des forces thermodynamiques conjuguées A , dont la frontière est définie par $\Phi^l = 0$.

$$\begin{aligned} A \in S, \quad \dot{\zeta} &= 0 \\ A \in \partial S, \quad \dot{\zeta} &= \dot{\lambda} \text{grad} \Phi, \quad \dot{\zeta}_\alpha = \dot{\lambda} \frac{\partial \Phi}{\partial A_\alpha}, \quad \dot{\lambda} \geq 0. \end{aligned} \quad (6)$$

Note : Dans le cas de lois non associées, un second pseudo potentiel S_2 peut être défini tel que $S \subseteq S_2$ avec

$$\begin{aligned} A \in S_1, \quad \dot{\zeta} &= 0 \\ A \in \partial S_1, \quad \dot{\zeta} &= \dot{\lambda} \text{grad} \Phi_2, \quad \dot{\zeta}_\alpha = \dot{\lambda} \frac{\partial \Phi_2}{\partial A_\alpha}, \quad \dot{\lambda} \geq 0 \end{aligned} \quad (7)$$

1.3 Traitement du système d'inégalités

Un mécanisme l , doit donc satisfaire aux conditions de Kuhn-Tucker suivantes. Notons ici que cette écriture est aussi adaptée à l'expression des mécanismes dissipatifs dépendant du temps

$$\Phi^l \leq 0 \quad \dot{p}^l \geq 0 \quad \Phi^l \dot{p}^l = 0. \quad (8)$$

L'utilisation des fonctions complémentaires de Fischer-Burmeister [3, 5] permet de transformer ces conditions en une équation complémentaire permettant de satisfaire ces inégalités :

$$\sqrt{(\Phi^l)^2 + (\dot{p}^l)^2} + \Phi^l - \dot{p}^l = 0 \quad (9)$$

L'utilisation de cette fonction complémentaire permet de s'affranchir des méthodes permettant de vérifier l'activation ou non des mécanismes de dissipation. Un schéma de prédiction-corrrection est toujours nécessaire afin de résoudre le système d'équations issu de la définition de multiples mécanismes. Un vecteur $\{F\}$ est introduit, dont les composantes s'expriment :

$$F^l = \sqrt{(\Phi^l)^2 + (\dot{p}^l)^2} + \Phi^l - \dot{p}^l \quad (10)$$

pour chaque mécanisme l . L'algorithme de résolution devra donc déterminer $\{F\} = \{0\}$. A titre d'exemple, une méthode de résolution de type Newton-Raphson est employée par la suite.

2 Résolution numérique du problème

Afin de déterminer une solution numérique, nous considérons un incrément n de temps Δt et une itération m sur la résolution des équations d'équilibre. La méthode itérative de résolution proposée est telle qu'à l'itération k :

$$\varepsilon_{in}^{(n+1)(m+1)(k)} = \varepsilon_{in}^{(n+1)(m+1)(k-1)} + \sum_m \delta \varepsilon_m^{(n+1)(m+1)(k)} \quad (11)$$

Considérons par la suite que les indices d'itérations seront omis, de telle manière que la quantité x représente la quantité $x^{(n+1)(m+1)(k)}$, l'incrément Δx représente l'incrément $\Delta x^{(n+1)(m+1)(k)}$, l'incrément δx représente l'incrément $\delta x^{(n+1)(m+1)(k)}$ et l'incrément $\tilde{\delta} x$ représente l'incrément $\tilde{\delta} x^{(n+1)(m+1)}$.

Plusieurs algorithmes existent pour déterminer la quantité $\varepsilon_{in}^{(n+1)(m+1)}$. L'algorithme "closest point projection" (CPP) [9, 7], définit l'évolution de la déformation inélastique comme :

$$\begin{aligned} \varepsilon_{in}^{(n+1)(m+1)(k)} &= \varepsilon_{in}^{(n+1)(m+1)(k-1)} + \sum_j \delta \Lambda_{\varepsilon}^{j, (n+1)(m+1)(k)} \delta_{S^j, (n+1)(m+1)(k-1)} \\ &\quad + \sum_j \Lambda_{\varepsilon}^{j, (n+1)(m+1)(k-1)} \delta_{S^j, (n+1)(m+1)(k)} \end{aligned} \quad (12)$$

L'algorithme "Convex Cutting Plane" (CCP) [9, 7] définit l'évolution de la déformation inélastique telle que les tenseurs d'évolution Λ_{ε}^j sont considérés constants durant l'itération (k) :

$$\begin{aligned} \varepsilon_{in}^{(n+1)(m+1)(k)} &= \varepsilon_{in}^{(n+1)(m+1)(k-1)} \\ &\quad + \sum_j \Lambda_{\varepsilon}^{j, (n+1)(m+1)(k-1)} \delta_{S^j, (n+1)(m+1)(k)} \end{aligned} \quad (13)$$

En d'autres termes les tenseurs d'évolutions sont évalués à partir de l'itération précédente. Une comparaison entre ces algorithmes a été discutée en détail par Qidwai et Lagoudas [7] pour le cas de modèles de transformation de phase martensitique, et il a été montré que l'algorithme "Convex Cutting Plane" est le plus efficace même si il nécessite plus d'itérations avant convergence lors de chargements fortement non-proportionnels. C'est cet algorithme qui est donc sélectionné dans la suite de la résolution numérique, étant entendu que la méthode proposée ici est compatible avec un algorithme CPP. La notation suivante est adoptée :

$$\varepsilon_{in, j} = \Lambda_{\varepsilon}^{j, (n+1)(m+1)(k-1)} \delta_{S^j, (n+1)(m+1)(k)} = \Lambda_{\varepsilon}^j \delta_{S^j} \quad (14)$$

A l'itération m de la résolution des équations d'équilibre (utilisant la température et le déplacement comme degrés de liberté), la déformation totale et la température sont considérés constants, donc :

$$\delta \varepsilon = \mathbf{0}, \text{ and } \delta \theta = 0 \quad (15)$$

La décomposition additive de la déformation totale s'exprime :

$$\varepsilon = \varepsilon^{el} + \varepsilon^{th} + \varepsilon^{in} \quad (16)$$

Et la relation de comportement entre la déformation élastique, la contrainte, la déformation thermique et la température nous donne :

$$\varepsilon^{el} = \mathcal{M} : \sigma, \quad \varepsilon^{th} = \alpha (\theta - \theta_0), \quad (17)$$

où \mathcal{M} est le tenseur de souplesse, σ est la contrainte, α est le tenseur d'expansion thermique, θ et θ_0 sont les températures actuelles et initiales, respectivement. Si la variation de déformation totale $\delta\varepsilon$ et de température $\delta\theta$ sont nulles surant l'itération m , il est déduit que :

$$\delta\mathcal{M} : \sigma + \mathcal{M} : \delta\sigma + \delta\alpha\theta + \delta\varepsilon^i n = 0 \quad (18)$$

La contribution de la déformation inélastique de chaque mécanisme indique :

$$-\sum_j (\delta\varepsilon^{in,j}) = \delta\mathcal{M} : \sigma + \mathcal{M} : \delta\sigma + \delta\alpha\theta \quad (19)$$

Le tenseur des souplesses et d'expansion thermique sont considérés dépendant de variables internes (ils entrent dans la définition du potentiel thermodynamique), alors :

$$\delta\mathcal{M} = \sum_j \sum_i \left(\frac{\partial \mathcal{M}}{\partial V_i^j} \delta V_i^j \right) = \sum_j \sum_i \left(\frac{\partial \mathcal{M}}{\partial V_i^j} \Lambda_i^j \delta s^j \right) \quad (20)$$

et

$$\delta\alpha = \sum_j \sum_i \left(\delta V_i^j \frac{\partial \alpha}{\partial V_i^j} \right) = \sum_j \sum_i \left(\frac{\partial \alpha}{\partial V_i^j} \Lambda_i^j \delta s^j \right) \quad (21)$$

Considérant la forme de l'équation d'évolution liant la variable de déformation inélastique et la variable scalaire associées à chaque mécanisme de déformation $\varepsilon^j = \Lambda_\varepsilon^j s^j$, il est possible de définir un tenseur d'influence lié à la contrainte, tel que :

$$\kappa^j \delta s^j = \left[\Lambda_\varepsilon^j + \sum_i \left(\frac{\partial \mathcal{M}}{\partial V_i^j} : \sigma + \frac{\partial \alpha}{\partial V_i^j} (\theta - \theta_0) \right) \right] \delta s^j \quad (22)$$

Alors, en utilisant (14), (20) et (21), l'équation (18) peut donc s'écrire :

$$\begin{aligned} \delta\varepsilon &= \delta\varepsilon^{el} + \delta\varepsilon^{th} + \delta\varepsilon^{in} \\ 0 &= \sum_j \left(\sum_i \frac{\partial \mathcal{M}}{\partial V_i^j} : \sigma \delta s^j + \mathcal{M} : \delta\sigma \right) + \Delta T \sum_j \left(\sum_i \frac{\partial \alpha}{\partial V_i^j} \delta s^j \right) + \sum_j \Lambda_\varepsilon^j \delta s^j \\ \Leftrightarrow \delta\sigma &= -\mathcal{L} : \sum_j \left[\Lambda_\varepsilon^j + \sum_i \left(\frac{\partial \mathcal{M}}{\partial V_i^j} : \sigma + \frac{\partial \alpha}{\partial V_i^j} \Delta T \right) \delta s^j \right] \end{aligned} \quad (23)$$

$$\Leftrightarrow \delta\sigma = -\mathcal{L} : \sum_j [\kappa^j \delta s^j] \quad (24)$$

Les critères Φ^j dépend des forces thermodynamiques. Ces forces, en retour, dépendent des variables (d'état et internes) et des paramètres matériaux entrant dans la définition du potentiel thermodynamique. Les critères Φ^j dépendent donc aussi des variables (d'état et internes) :

$$\Phi^j \left(\sigma, \theta, \{V_i^j\}, \{\dot{V}_i^j\}, \right) \leq 0 \quad (25)$$

Les critères peuvent aussi dépendre du taux d'évolution de ces variables internes (pour les mécanismes dépendant du temps). Du point de vue numérique, cette dépendance au taux d'évolution est considérée comme une dépendance à l'incrément de temps et aux variables :

$$\Phi^l(\boldsymbol{\sigma}, \theta, \{\mathbf{V}_i^j\}, \Delta t) \leq 0 \quad (26)$$

La différentiation des critères implique :

$$\begin{aligned} \delta\Phi^l &= \frac{\partial\Phi^l}{\partial\boldsymbol{\sigma}}\delta\boldsymbol{\sigma} + \sum_j \left[\sum_i \left(\frac{\partial\Phi^l}{\partial\mathbf{V}_i^j} \delta\mathbf{V}_i^j \right) \right] \\ \Leftrightarrow &= -\frac{\partial\Phi^l}{\partial\boldsymbol{\sigma}} : \sum_j [\boldsymbol{\kappa}^j \delta s^j] + \sum_j \left[\sum_i \left(\frac{\partial\Phi^l}{\partial\mathbf{V}_i^j} \boldsymbol{\Lambda}_i^j \right) \delta s^j \right] \\ \Leftrightarrow &= \sum_j \left[-\frac{\partial\Phi^l}{\partial\boldsymbol{\sigma}} : \boldsymbol{\kappa}^j + \mathcal{K}^{lj} \right] \delta s^j \end{aligned} \quad (27)$$

avec :

$$\mathcal{K}^{lj} \delta s^j = \sum_i \left(\frac{\partial\Phi^l}{\partial\mathbf{V}_i^j} \boldsymbol{\Lambda}_i^j \right) \delta s^j \quad (28)$$

Dans ce qui suit, nous considérons un vecteur $\mathbf{p} = \{p^j\}$, et \mathbf{B} une matrice contenant les dérivées partielles des critères Φ^l , de telle manière que $\mathcal{B}_{lj} = \sum_j \left[-\frac{\partial\Phi^l}{\partial\boldsymbol{\sigma}} \boldsymbol{\kappa}^j + \mathcal{K}^{lj} \right]$.

Pour résoudre le système $\mathbf{F} + \delta\mathbf{F} = \mathbf{0}$, les dérivées partielles des fonctions complémentaires F sont évaluées :

$$\begin{aligned} \delta F^i &= \frac{\partial F^i}{\partial\Phi^i} \frac{\partial\Phi^i}{\partial s^j} \delta s^j \\ \delta F^i &= \frac{\partial F^i}{\partial\Phi^i} \mathcal{B}_{ij} \delta s^j \end{aligned} \quad (29)$$

Le système peut alors être résolu par une méthode de type Newton-Raphson

2.1 Détermination des opérateurs tangents

Afin de pouvoir résoudre les équations d'équilibre, les opérateurs tangents suivants doivent être évalués :

$$\bar{\partial}\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{D}^\varepsilon \bar{\partial}\boldsymbol{\varepsilon} + \mathbf{D}^\theta \bar{\partial}\theta \quad (30)$$

$$\bar{\partial}r = \mathbf{R}^\varepsilon \bar{\partial}\boldsymbol{\varepsilon} + \mathbf{R}^\theta \bar{\partial}\theta \quad (31)$$

$\bar{\partial}r$ est ici considéré comme le taux de production de chaleur par unité de volume du matériau considéré. Les quantités $\bar{\partial}\boldsymbol{\sigma}$, $\bar{\partial}\gamma_{\text{loc}}$ (énergie mécanique dissipée) et $\bar{\partial}r$ (variation de la production de chaleur par unité de volume) sont évalués :

$$\bar{\partial}\boldsymbol{\sigma} = \mathcal{L} : (\bar{\partial}\boldsymbol{\varepsilon} - \bar{\partial}\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{th}} - \bar{\partial}\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{in}}), \quad (32)$$

$$\bar{\partial}\gamma_{\text{loc}} = \bar{\partial}\mathbf{A}_\zeta \frac{\Delta\zeta}{\Delta t} + \mathbf{A}_\zeta \frac{\bar{\partial}\zeta}{\Delta t} \quad (33)$$

$$\bar{\partial}r = -\bar{\partial}\theta \frac{\Delta\eta}{\Delta t} - \theta \frac{\bar{\partial}\eta}{\Delta t} + \bar{\partial}\gamma_{\text{loc}} \quad (34)$$

Afin de déterminer ces quantités, considérons le sous-ensemble de processus dissipatifs actifs où (l'indice l va maintenant se référer seulement aux processus actifs) :

$$\bar{\partial}\Phi^l = 0 \quad (35)$$

Dans ce cas, la relation entre la variation des critères actifs, de la variation de la contrainte et des variables s'exprime :

$$\begin{aligned} \delta\Phi^l &= \frac{\partial\Phi^l}{\partial\sigma} : \left(\mathcal{L}(\delta\varepsilon - \alpha\delta\theta) - \sum_j [\kappa^j \delta p^j] \right) + \frac{\partial\Phi^l}{\partial\theta} \delta\theta + \sum_j \mathcal{K}^{lj} \delta p^j = 0 \\ \sum_j \left[\frac{\partial\Phi^l}{\partial\sigma} \kappa^j - \mathcal{K}^{lj} \right] \delta p^j &= \frac{\partial\Phi^l}{\partial\sigma} : \mathcal{L} : \delta\varepsilon + \left(\frac{\partial\Phi^l}{\partial\theta} - \frac{\partial\Phi^l}{\partial\sigma} : \mathcal{L} : \alpha \right) \delta\theta \end{aligned} \quad (36)$$

Ce système d'équations aux dérivées partielles peut se mettre sous une forme matricielle :

$$\hat{B}p = C \quad (37)$$

Les composantes de cette matrice jacobienne réduite \hat{B} s'expriment :

$$\hat{B}^{lj} = \frac{\partial\Phi^l}{\partial\sigma} : \kappa^j - \mathcal{K}^{lj}. \quad (38)$$

Les composantes du vecteur C prennent la forme :

$$C^l = \frac{\partial\Phi^l}{\partial\sigma} : \mathcal{L} : \delta\varepsilon + \left(\frac{\partial\Phi^l}{\partial\theta} - \frac{\partial\Phi^l}{\partial\sigma} : \mathcal{L} : \alpha \right) \delta\theta \quad (39)$$

En isolant les composantes dépendant de la variation de la déformation totale et de la température, la variations des variables internes scalaires δp devient :

$$\delta p = \hat{B}^{-1} \left[\frac{\partial\Phi}{\partial\sigma} : \mathcal{L} : \delta\varepsilon \right] + \hat{B}^{-1} \left[\frac{\partial\Phi}{\partial\theta} - \frac{\partial\Phi}{\partial\sigma} : \mathcal{L} : \alpha \right] \delta\theta, \quad (40)$$

pouvant s'écrire sous une pour chaque mécanisme p^j qui fait apparaitre un tenseur d'influence de la déformation bmP_ε^j et de la température P_θ^j :

$$\delta p^j = P_\varepsilon^j \delta\varepsilon + P_\theta^j \delta\theta \quad (41)$$

Ce système peut s'écrire sous une forme plus compacte, en adoptant une notation de Voigt et en définissant un vecteur de déformation totale $\tilde{\varepsilon} = \{\varepsilon_{11}, \varepsilon_{22}, \varepsilon_{33}, 2\varepsilon_{12}, 2\varepsilon_{13}, 2\varepsilon_{23}\}^T$:

$$\begin{aligned} \delta p &= P_\varepsilon \delta\varepsilon + P_\theta \delta\theta \\ P_\varepsilon &= \hat{B}^{-1} \left\{ \frac{\partial\Phi}{\partial\sigma} : \mathcal{L} \right\} \quad P_\theta = \hat{B}^{-1} \left(\frac{\partial\Phi}{\partial\theta} - \frac{\partial\Phi}{\partial\sigma} : \mathcal{L} : \alpha \right) \end{aligned} \quad (42)$$

En insérant la relation entre variation de la déformation totale et variation de la contrainte, une forme analytique des modules tangents mécanique et thermique est obtenue :

$$\begin{aligned} \delta\sigma &= \mathcal{L}(\delta\varepsilon - \alpha\delta\theta) - \kappa^j \delta p^j \\ \delta\sigma &= \left(\mathcal{L} - \sum_j \kappa^j P_\varepsilon^j \right) \delta\varepsilon + \left(-\mathcal{L}\alpha - \sum_j \kappa^j P_\theta^j \right) \delta\theta \\ D^\varepsilon &= \left(\mathcal{L} - \sum_j \kappa^j P_\varepsilon^j \right), \quad D^\theta = \left(-\mathcal{L}\alpha - \sum_j \kappa^j P_\theta^j \right). \end{aligned} \quad (43)$$

L'énergie mécanique dissipée durant l'incrément s'exprime :

$$\delta\gamma_{\text{loc}} = \delta A_i^j \frac{\Delta V_i^j}{\Delta t} + A_i^j \frac{\delta V_i^j}{\Delta t} \quad (44)$$

$$\begin{aligned} \delta A_i^j &= \frac{\partial A_i^j}{\partial \sigma} : \delta \sigma + \frac{\partial A_i^j}{\partial \theta} : \delta \theta + \frac{\partial A_i^j}{\partial V_p^q} : \delta V_p^q \\ &= \frac{\partial A_i^j}{\partial \sigma} : D^\varepsilon \delta \varepsilon + \left(\frac{\partial A_i^j}{\partial \theta} + \frac{\partial A_i^j}{\partial \sigma} : D^\theta \right) \delta \theta + \sum_{p,q} \left(\frac{\partial A_i^j}{\partial V_p^q} : \Lambda_p^q \right) (\mathcal{P}_\varepsilon^q \delta \varepsilon + \mathcal{P}_\theta^q \delta \theta) \\ &= \left(\frac{\partial A_i^j}{\partial \sigma} : D^\varepsilon + \sum_{p,q} \frac{\partial A_i^j}{\partial V_p^q} : \Lambda_p^q \mathcal{P}_\varepsilon^q \right) \delta \varepsilon + \left(\frac{\partial A_i^j}{\partial \theta} + \frac{\partial A_i^j}{\partial \sigma} : D^\theta + \sum_{p,q} \frac{\partial A_i^j}{\partial V_p^q} : \Lambda_p^q \mathcal{P}_\theta^q \right) \delta \theta \\ A_i^j \frac{\delta V_i^j}{\Delta t} &= A_i^j \Lambda_i^j \frac{\delta p^j}{\Delta t} \\ A_i^j \frac{\delta V_i^j}{\Delta t} &= \frac{A_i^j}{\Delta t} \Lambda_i^j (\mathcal{P}_\varepsilon^j \delta \varepsilon + \mathcal{P}_\theta^j \delta \theta) \end{aligned} \quad (45)$$

Finalement, cette énergie mécanique prend la forme :

$$\begin{aligned} \delta\gamma_{\text{loc}} &= \left[\left(\frac{\partial A_i^j}{\partial \sigma} : D^\varepsilon + \sum_{p,q} \frac{\partial A_i^j}{\partial V_p^q} : \Lambda_p^q \mathcal{P}_\varepsilon^q \right) \frac{\Delta V_i^j}{\Delta t} + \frac{A_i^j}{\Delta t} \Lambda_i^j \mathcal{P}_\varepsilon^j \right] \delta \varepsilon \\ &+ \left[\left(\frac{\partial A_i^j}{\partial \theta} + \frac{\partial A_i^j}{\partial \sigma} : D^\theta + \sum_{p,q} \frac{\partial A_i^j}{\partial V_p^q} : \Lambda_p^q \mathcal{P}_\theta^q \right) \frac{\Delta V_i^j}{\Delta t} + \frac{A_i^j}{\Delta t} \Lambda_i^j \mathcal{P}_\theta^j \right] \delta \theta \\ &= \mathbf{\Gamma}^\varepsilon : \delta \varepsilon + \mathbf{\Gamma}^\theta \delta \theta \end{aligned} \quad (46)$$

Puisque la quantité δr s'exprime [1] :

$$\delta r = -\delta \theta \frac{\Delta \eta}{\Delta t} - \theta \frac{\delta \eta}{\Delta t} + \delta\gamma_{\text{loc}} \quad (47)$$

En considérant les deux premiers termes liés respectivement à la variation de la température et à l'incrément d'entropie $\Delta \eta$ et à la variation d'entropie, en adoptant la notation $A_\theta = -\frac{\partial G}{\partial \theta} = \eta$:

$$\begin{aligned} -\delta \theta \frac{\Delta \eta}{\Delta t} - \theta \frac{\delta \eta}{\Delta t} &= -\delta \theta \frac{\Delta \eta}{\Delta t} + \frac{\theta}{\Delta t} (-\delta A_\theta) \\ &= -\delta \theta \frac{\Delta \eta}{\Delta t} + \frac{\theta}{\Delta t} \left(-\frac{\partial A_\theta}{\partial \sigma} \delta \sigma - \frac{\partial A_\theta}{\partial \theta} \delta \theta - \sum_{i,j} \frac{\partial A_\theta}{\partial V_i^j} \delta V_i^j \right) \\ &= -\delta \theta \frac{\Delta \eta}{\Delta t} + \frac{\theta}{\Delta t} \left(-\frac{\partial A_\theta}{\partial \sigma} (D_\varepsilon \delta \varepsilon + D_\theta \delta \theta) - \frac{\partial A_\theta}{\partial \theta} \delta \theta - \sum_{i,j} \frac{\partial A_\theta}{\partial V_i^j} \Lambda_i^j (\mathcal{P}_\varepsilon^j \delta \varepsilon + \mathcal{P}_\theta^j \delta \theta) \right) \\ &= \frac{\theta}{\Delta t} \left(-\frac{\partial A_\theta}{\partial \sigma} D_\varepsilon - \sum_{i,j} \frac{\partial A_\theta}{\partial V_i^j} \Lambda_i^j \mathcal{P}_\varepsilon^j \right) \delta \varepsilon + \frac{1}{\Delta t} \left(-\frac{\partial A_\theta}{\partial \sigma} D_\theta - \Delta \eta - \theta \frac{\partial A_\theta}{\partial \theta} - \theta \sum_{i,j} \frac{\partial A_\theta}{\partial V_i^j} \Lambda_i^j \mathcal{P}_\theta^j \right) \delta \theta \\ &= \frac{\theta}{\Delta t} \left(-\frac{\partial A_\theta}{\partial \sigma} D_\varepsilon - \sum_{i,j} \frac{\partial A_\theta}{\partial V_i^j} \Lambda_i^j \mathcal{P}_\varepsilon^j \right) \delta \varepsilon + \frac{1}{\Delta t} \left(-\theta \frac{\partial A_\theta}{\partial \sigma} D_\theta - \Delta \eta - \rho c_p - \theta \sum_{i,j} \frac{\partial A_\theta}{\partial V_i^j} \Lambda_i^j \mathcal{P}_\theta^j \right) \delta \theta \\ &= \mathcal{N}^\varepsilon : \delta \varepsilon + \mathcal{N}^\theta \delta \theta \end{aligned} \quad (48)$$

Finalement, les quantités tangentes liées à δr s'expriment :

$$\begin{aligned} \mathbf{R}^\varepsilon &= \mathbf{\Gamma}^\varepsilon + \mathcal{N}^\varepsilon \\ \mathbf{R}^\theta &= \mathbf{\Gamma}^\theta + \mathcal{N}^\theta \end{aligned} \quad (49)$$

L'évaluation des incréments de travaux mécaniques et thermiques, dénotés par ΔW_m (énergie mécanique) ΔW_m^r (énergie mécanique stockée/recouvrable), ΔW_m^{ir} (énergie mécanique stockée non recouvrable), ΔW_m^d (énergie mécanique dissipée), ΔW_t (énergie thermique), ΔW_t^r (énergie thermique recouvrable) et ΔW_t^{ir} (énergie thermique non recouvrable) est obtenue en utilisant une valeur moyenne des quantités entrant dans leur définition :

$$\begin{aligned}
\Delta W_m^{(n+1)(m+1)} &= \frac{\sigma^{(n+1)(m+1)} + \sigma^{(n)}}{2} \Delta \varepsilon \\
\Delta W_m^{r(n+1)(m+1)} &= \frac{1}{2} \left(\sigma^{(n)} + \sigma^{(n+1)(m+1)} \right) \Delta \varepsilon + \sum_{i,j} \frac{1}{2} \left(\left(\frac{\partial G^r}{\partial V_i^j} \right)^{(n)} + \left(\frac{\partial G^r}{\partial V_i^j} \right)^{(n+1)(m+1)} \right) \Delta V_i^j \\
\Delta W_m^{ir(n+1)(m+1)} &= \sum_{i,j} \frac{1}{2} \left(\left(\frac{\partial G^{ir}}{\partial V_i^j} \right)^{(n)} + \left(\frac{\partial G^{ir}}{\partial V_i^j} \right)^{(n+1)(m+1)} \right) \Delta V_i^j \\
\Delta W_m^d(n+1)(m+1) &= - \sum_{i,j} \frac{1}{2} \left(\left(\frac{\partial G^r}{\partial V_i^j} \right)^{(n)} + \left(\frac{\partial G^r}{\partial V_i^j} \right)^{(n+1)(m+1)} \right) \Delta V_i^j \\
&\quad - \sum_{i,j} \frac{1}{2} \left(\left(\frac{\partial G^{ir}}{\partial V_i^j} \right)^{(n)} + \left(\frac{\partial G^{ir}}{\partial V_i^j} \right)^{(n+1)(m+1)} \right) \Delta V_i^j \\
\Delta W_t^{(n+1)(m+1)} &= \frac{\theta^{(n+1)(m+1)} + \theta^{(n)}}{2} \Delta \eta \\
\Delta W_t^{r(n+1)(m+1)} &= \frac{\theta^{(n+1)(m+1)} + \theta^{(n)}}{2} \Delta \eta^r \\
\Delta W_t^{ir(n+1)(m+1)} &= \frac{\theta^{(n+1)(m+1)} + \theta^{(n)}}{2} \Delta \eta^{ir}
\end{aligned} \tag{50}$$

3 Conclusion

La méthodologie développée permet de mettre en oeuvre l'implémentation de lois de comportements lorsque plusieurs mécanismes dissipatifs, de nature variée, agissent simultanément. Le système d'inégalité classiquement obtenu est traité à l'aide d'égalités complémentaires. Une forme analytique des quantités tangentes nécessaires à la résolution d'un problème aux limites thermomécaniques est donnée. Plusieurs exemples d'implémentation seront présentés, pour des mécanismes variés tels la viscoélasticité, l'endommagement et les transformation de phase martensitique [2]

Références

- [1] George Chatzigeorgiou, Nicholas Charalambakis, Yves Chemisky, et Fodil Meraghni. *Thermomechanical behavior of dissipative composite materials*. ISTE Press - Elsevier, 2018.
- [2] Y. Chemisky. *Contribution à la simulation numérique du comportement thermomécanique de matériaux composites et fonctionnels*. Habilitation à diriger des recherches, 2016.
- [3] A. Fischer. A special newton-type optimization method. *Optimization*, 24(3-4) :269–284, jan 1992.
- [4] P Germain. *Cours de Mécanique des Milieux Continus : Tome I-Théorie Générale*. Masson Et Cie, Paris, 1973.
- [5] B. Kiefer, T. Bartel, et A. Menzel. Implementation of numerical integration schemes for the simulation of magnetic SMA constitutive response. *Smart Materials and Structures*, 21(9) :094007, sep 2012.
- [6] J J Moreau. Sur les lois de frottement, de plasticité et de viscosité. *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences, Series A*, 271 :608–611, 1970.
- [7] M A Qidwai et D C Lagoudas. On the Thermodynamics and Transformation Surfaces of Polycrystalline {N}i{T}i Shape Memory Alloy Material. *International Journal of Plasticity*, 16 :1309–1343, 2000.
- [8] T Rockafellar. *Convex Analysis*. Princeton, New Jersey, USA, 1970.
- [9] J.C. Simo et T.J.R. Hughes. *Computational Inelasticity*, volume 7 of *Interdisciplinary Applied Mathematics*. Springer-Verlag, New York, 1998.