Modélisation et simulation du comportement multiphysique quasiincompressible d'élastomères en déformations finies.

D. Ahose¹, S. Lejeunes², D. Eyheramendy^{1,3}, L. Zhang³

¹LMA, Aix-Marseille Univ, France, ahose@lma.cnrs-mrs.fr

² LMA, CNRS, Centrale Marseille, Aix Marseille Université, lejeunes@lma.cnrs-mrs.fr ³ LMA, Ecole Centrale Marseille, {dominique.eyheramendy, zhang.lei}@centrale-marseille.fr

Résumé — Ce travail propose un modèle de comportement thermomécanique quasi-incompressible basé sur la thermodynamique des milieux irréversibles et sur l'introduction d'une forme mixte de l'énergie libre. Nous y présentons également une formulation variationnelle associée pour une résolution monolithique des équations d'équilibres thermique et mécanique. La forme variationnelle obtenue est implémentée dans un même code de calcul utilisant deux méthodes de discrétisation : IGA (NURBS) et éléments-finis. Des exemples numériques sont présentés afin de simuler des phénomènes typiques rencontrés dans les élastomères chargés (auto-échauffement, inversion thermoélastique). Ces résultats sont discutés afin de comparer les performances des deux méthodes IGA et EF dans un cadre multiphysique.

Mots clefs — *Thermomécanique, élasticité entropique, Thermodynamique, Viscosité, Déformations finies.*

1 Contexte

Les élastomères présentent un comportement mécanique incompressible fortement couplé avec la thermique. Ceci se traduit par exemple à travers le phénomène d'inversion thermoélastique exhibé par les élastomères non chargés. Dans les approches phénoménologiques développés jusqu'alors, l'énergie libre de Helmholtz est introduite, faisant intervenir en général les variables d'état comme la déformation de Cauchy Green, la température et d'éventuelles variables internes [1][2]. Pour tenir compte de l'incompressibilité des élastomères, les auteurs décomposent l'énergie libre en deux parties, une isochore et l'autre volumique. La partie isochore fait intervenir le champ de déformation déviatorique et la partie volumique le déterminant de la transformation. L'accès au déterminant de la transformation pour alimenter les modèles lors des essais est très difficile à cause de la quasi-incompressibilité du matériau. De plus, il existe dans la littérature de différentes approches pour traiter la dilatation thermique dans un cadre incompressible ce qui peut conduire à des analyses du comportement calorimétrique différentes.

Nous proposons dans ce travail l'utilisation d'une forme mixte d'énergie libre qui fait intervenir les variables d'états et la pression hydrostatique (en lieu et place de la variation de volume). Ce travail est à rapprocher notamment des travaux de Lion et al. [3]. On peut également faire le parallèle avec les approches utilisant une transformée de Legendre partielle de l'énergie libre même si l'approche proposée est plus générale.

La forme variationnelle du modèle proposé a été implémentée dans un logiciel en langage Java développé au LMA [4]. La dépendance en temps des équations est traitée à partir d'un schéma d'Euler implicite et la non-linéarité par une linéarisation de type Newton-Raphson. Au final nous obtenons un schéma monolithique qui nous permet de qualitativement reproduire les phénomènes observés expérimentalement.

2 Cadre thermodynamique

Le concept d'états intermédiaires permet de décomposer le tenseur gradient de transformation F en deux parties, une première volumique et une seconde isochore. La partie isochore est ensuite décomposée multiplicativement en une partie visqueuse et une autre élastique. A partir de ces décompositions, nous définissons les grandeurs cinématiques comme les déterminants, les tenseurs de déformations de Cauchy-Creen droit, les taux de déformations, les gradients de vitesse liés aux états intermédiaires. En admettant que la variation de volume de la transformation vient d'une contribution purement mécanique et une autre purement thermique, on peut également décomposer multiplicativement le déterminant de la transformation en une partie mécanique et une thermique. De ces hypothèses, résultent les formules⁽¹⁾ (1).

$$= \begin{bmatrix} F = \left(J^{\frac{1}{3}}1\right). \bar{F} & J = det(F) & J = J_m J_\theta & \bar{F} = \bar{F}_e. \bar{F}_v & \bar{B} = \bar{F}\bar{F}^T \\ \bar{B}_e = \bar{F}_e. \bar{F}_e^T & L = \dot{F}. F^{-1} & D = \frac{1}{2}(L + L^T) \\ J_\theta = 1 + \alpha(\theta - \theta_0) & J_m = J(J_\theta^{-1}) \end{bmatrix}$$
(1)

 α désigne le coefficient de dilatation thermique.

Pour les raisons évoquées dans l'introduction, dans le cas d'un comportement quasiincompressible, nous proposons une forme d'énergie libre mixte. Voir équation (2).

$$\varphi(B, B_e, \theta, p) = \psi(B, B_e, \theta, J) + \beta(p, J, \theta)$$
⁽²⁾

 ψ est l'énergie libre de Helmholtz, β un potentiel lié au comportement volumique et ϕ est l'énergie libre mixte. Dans ce travail nous proposons d'utiliser la forme suivante pour l'énergie libre volumique :

$$\beta(p,J,\theta) = p(J_m - 1) + \frac{p^2 J_{\theta}}{2K_v}$$
(3)

Cette forme impose la condition de quasi-incompressibilité uniquement sur la variation de volume mécanique avec K_v le module de compressibilité du matériau. L'énergie libre de Helmholtz peut être choisie parmi les modèles courant de la littérature. Dans le cas d'un modèle de comportement viscoélastique de type Zener, nous obtenons le jeu d'équations (4) après applications des principes thermodynamiques reformulés avec la forme d'énergie libre mixte.

$$\begin{aligned}
\sigma &= 2 \frac{\mu(\theta)}{J} \bar{B}^{D} + 2 \frac{\mu_{\nu}(\theta)}{J} \bar{B}_{e}^{D} - \frac{p}{J_{\theta}} 1 \\
p &= -\frac{K_{\nu}}{J\theta} (J_{m} - 1) \\
s &= -\frac{1}{\rho_{o}} (\frac{\partial \mu}{\partial \theta} (I_{1}(\bar{B}) - 3) + (\frac{\partial \mu_{\nu}}{\partial \theta} (I_{1}(\bar{B}_{e}) - 3) + \frac{\alpha p J}{J_{\theta}^{2}} - \frac{\alpha p^{2}}{2K_{\nu}} - C_{o} \log(\frac{\theta}{\theta_{o}}) - C_{1} \frac{(\theta - \theta_{o})}{\theta_{o}} \\
\bar{B}_{e} &= L. \bar{B}_{e} + \bar{B}_{e}. L^{T} - \frac{2}{3} (1:L) \bar{B}_{e} - \frac{1}{\tau(\theta)} \bar{B}_{e}^{D}. \bar{B}_{e} \\
\rho_{o} C_{p} &= -\theta \frac{\partial^{2} \mu}{\partial \theta^{2}} (I_{1}(\bar{B}) - 3) - \theta \frac{\partial^{2} \mu_{\nu}}{\partial \theta^{2}} (I_{1}(\bar{B}_{e}) - 3) + 2 \frac{\alpha^{2} J p \theta}{J_{\theta}^{3}} + C_{o} + C_{1} \frac{\theta}{\theta_{o}} \\
I_{m} &= 2 \frac{\theta}{J} \frac{\partial \mu}{\partial \theta} \bar{B}^{D}: D + 2 \frac{\theta}{J} \frac{\partial \mu_{\nu}}{\partial \theta} \bar{B}_{e}^{D}: D - \frac{\alpha \theta p}{J_{\theta}^{2}} 1: D - (\frac{-\alpha \theta}{J_{\theta}^{2}} + \frac{\alpha \theta p}{JK_{\nu}}) \dot{p} - \frac{\theta}{J\tau(\theta)} \frac{\partial \mu_{\nu}}{\partial \theta} \bar{B}_{e}^{D}: \bar{B}_{e}^{D} \\
- \phi_{m} &= \frac{\theta}{J\tau(\theta)} \bar{B}_{e}^{D}: \bar{B}_{e}^{D}
\end{aligned}$$
(4)

σ est la contrainte de Cauchy, s l'entropie spécifique et φ la dissipation massique liée à la transformation. C_p est la capacité thermique spécifique et le terme de couplage l_m représente la chaleur latente. En plus de α et K_v , les autres paramètres matériaux sont $\mu(\theta)$, $\mu_v(\theta)$, C_o , C_1 , $\tau(\theta)$ et ρ_o .

⁽¹⁾ V_i désigne le paramètre V lié à la transformation i.

3 Formulation variationnelle

Il faut trouver (u, θ, p) tel que $\forall (\delta u, \delta \theta, \delta p) \in (U^o x T^o x L^2(\Omega_o))$, (5) soit vérifié en plus des conditions limites.

$$\int_{\Omega_{o}} (\Pi_{eq} + \Pi_{neq} + p \frac{J}{J_{\theta}} F^{-T}) : F(\delta u) d\Omega_{o} - \int_{\Omega_{o}} \rho_{0} f \cdot \delta u d\Omega_{o} - \int_{\partial \Omega_{t_{o}}} t \cdot \delta u dS = 0$$

$$\int_{\Omega_{o}} \rho_{o} C_{p} \dot{\theta} \delta \theta d\Omega_{o} - \int_{\Omega_{o}} (J \Phi_{m} + J l_{m} + \rho_{o} r) \, \delta \theta d\Omega_{o} - \int_{\Omega_{o}} J Q \cdot GRAD_{x} \delta \theta d\Omega_{0} +$$

$$\int_{\partial \Omega_{Q_{o}}} Q_{h} \cdot N \delta \theta dS = 0$$

$$\int_{\Omega_{o}} ((J_{m} - 1) - \frac{pJ_{\theta}}{K_{n}}) \, \delta p = 0$$

$$(5)$$

Pour la discrétisation temporelle, nous adoptons un schéma d'Euler implicite dans lequel on pose :

 $\dot{\theta} = (\theta_{n+1} - \theta_n)/\Delta t$, $\dot{p} = (p_{n+1} - p_n)/\Delta t$ où Δt le pas de temps défini par l'intervalle $[t_n - t_{n+1}]$.

La linéarisation du système d'équations avec la méthode de Newton Raphson donne :

 $\mathbb{L}(u^{n+1}, \theta^{n+1}, p^{n+1}, \delta u, \delta \theta, \delta p). (\Delta u, \Delta \theta, \Delta p) = -\Re(u^{n+1}, \theta^{n+1}, p^{n+1}, \delta u, \delta \theta, \delta p)$ (7)

où L est un opérateur asymétrique et linéaire en $(\Delta u, \Delta \theta, \Delta p)$ et \Re un opérateur résidu.

4. Implémentation numérique et applications

Cette formulation est implémentée dans FEMJava, plateforme orientée objet développée au LMA. Cette plateforme est bien adaptée pour le développement des formulations multi-champs et multiphysiques. Elle offre la possibilité de discrétisation avec des éléments finis comme des éléments géométriques.

Pour la discrétisation en éléments finis, nous adoptons les éléments U_2 , T_2 , P_1 (une interpolation quadratique pour le champ de déplacement, une interpolation quadratique pour le champ de température et une interpolation linéaire pour le champ de pression).

Pour l'analyse isogéométrique, la discrétisation de l'espace paramétrique est fait avec un patch de fonctions d'interpolations de degré 3 pour les champs de déplacement, de température et de pression et une multiplicité d'ordre 1 pour le champ de déplacement (Voir [5] pour le formalisme).

La figure 1 présente les résultats en traction uni-axiale adiabatique d'une bande thermoélastique. Ces résultats montrent la capacité de cette formulation à simuler le phénomène d'inversion thermoélastique. Les figures 2, 3, 4 et 5 montrent dans les deux cas (analyse isogéométrique et éléments finis), les résultats issus de la traction cyclique adiabatique d'une bande rectangulaire thermoélastique présentant deux fissures symétriques en son milieu.



Figure 1 : Inversion thermoélastique pour une traction uniaxiale adiabatique



Figure 2 : Maillage avec éléments finis



Figure 3 : Maillage avec patch isogéométrique







Figure 6 - Champ de température avec une discrétisation avec un patch isogéométrique

CONCLUSION

A travers ce travail, nous présentons un modèle de comportement thermomécanique thermodynamiquement admissible avec une approche originale basée sur l'introduction d'une forme d'énergie libre mixte. Cette formulation a permis de reproduire entre autres le phénomène d'inversion thermoélastique présenté par les élastomères non chargés. L'approche adoptée ici peut très bien être étendue à d'autres aspects multiphysiques par exemple le couplage thermo-chimio-mécanique.

5. Références

- Flory, R. J. Thermodynamicsrelations for highly elastic materials. Transactions of the faradau Spcoetu 57, 1961, 829-838.
- [2] S. Lejeunes, A. Boukamel, S. Méo Finite element implementation of nearly-incompressible rheological models based on multiplicative decompositions, Computers & Structures 89, 2011, 411-421.
- [3] A. Lion, B.Dippel, C. Liebl. Thermomechanical material modelling based on a hybrid free energy density depending on pressure, isochoric deformation and temperature, Internaltional Journal of Solids and Structures 51 (2014), 729-739.
- [4] D. Eyheramendy, D. Guibert A Java approach for Finite Elements Computational Mechanics, ECCOMAS Jyvaskyla Finland, 2004.
- [5] J.A Cottrell, T.J.R Hughes, Y. Bazilev, Isogeometric analysis : Towards integration of CAD and FEA, John Whiley & Son, 2009.