
Modélisation numérique des couplages en thermomécanique des solides

André Chrysochoos - Robert Peyroux

Laboratoire de Mécanique et Génie Civil,
UMR CNRS 5508, Université Montpellier II,
Place E. Bataillon, 34095 Montpellier cedex 05

RÉSUMÉ. Dans une première partie, nous rappelons le cadre thermodynamique dans lequel sont présentées les lois phénoménologiques de comportement des matériaux solides. Au travers d'exemples, nous présentons les différents termes du bilan d'énergie, en particulier ceux qui proviennent des couplages thermomécaniques. Dans la deuxième partie, les notions essentielles des passages micro-macro sont introduites, en se focalisant sur les aspects couplage. L'intégration des lois de comportement couplées dans un code de calcul éléments finis est ensuite abordée. Enfin, nous développons quatre exemples d'application qui illustrent les démarches présentées ci-dessus.

ABSTRACT. In a first part the thermodynamic framework used to introduced the behavioral constitutive equations of solid materials is reminded. Using illustrative examples, the different terms of the energy balance are introduced, specially those due to thermomechanical coupling mechanisms. In a second part the main concepts on multiscale approach are introduced, focussing on coupling aspects, and the way of embedding coupled constitutive equations in a finite element code is discussed. We finally present four applications to illustrate the above-mentioned approaches.

MOTS-CLÉS : thermodynamique, homogénéisation, température, couplages thermomécaniques, chaleur, localisation, polymères, alliages à mémoire de forme, composites, interface, contraintes résiduelles

KEY WORDS : thermodynamics, thermomechanics, couplings, homogenization, temperature, heat, localization, polymers, shape memory alloys, composites, interface, residual stresses

1. Introduction

L'étude des lois de comportement des matériaux solides est un domaine de recherche clé de la Mécanique des Milieux Continus. D'origine phénoménologique, les équations constitutives du comportement viennent compléter celles provenant des grands principes de conservation de la Physique (masse, mouvement, énergie). Dans la pratique, elles sont utilisées par l'ingénieur qui cherche à dimensionner une structure, à maîtriser un processus de mise en forme, à prédire la durée de vie d'un composant. Elles représentent, avec les conditions de chargement aux limites, l'essentiel de la Physique intégrée dans un code de calcul aux éléments finis.

A l'heure actuelle deux grandes voies de recherche sont envisagées pour obtenir ces relations de comportement.

Une première voie est macroscopique ; elle utilise le cadre de la Thermodynamique des Processus Irréversibles. Celui-ci offre au mécanicien "rhéologue" une structure souple et cohérente lui permettant de traduire au travers de *variables d'état internes*, les conséquences macroscopiques d'événements microstructuraux nombreux, complexes et souvent couplés. Depuis une vingtaine d'années, cette approche des lois de comportement à variables internes a fait ses preuves ! Elle a permis d'aborder, avec une certaine réussite, la modélisation des mécanismes d'écroutissage, des effets visqueux, des phénomènes de vieillissement et d'endommagement [LEM 85, GER 86, FRA 91].

Toutefois, en partie grâce à l'augmentation constante des puissances de calcul et au développement des moyens informatiques dans les Laboratoires, une autre voie d'approche, plus déductive s'est considérablement développée ces dernières années. Celle-ci part de la connaissance de paramètres et mécanismes de déformation à une échelle dite *microstructurale* ; c'est donc par un changement d'échelle, en effectuant ce qu'on appelle communément un *passage micro-macro*, que les lois de comportement macroscopique sont alors obtenues. De beaux succès sont à mettre au compte de cette nouvelle approche : description fine des mécanismes d'écroutissage de métaux, prédictions plus réalistes des caractéristiques élastiques macroscopiques des matériaux composites tels que les composites à fibres, les multicouches, etc., [CHR 79, ASH 89, GAY 89].

Parallèlement aux efforts constants réalisés par de nombreux centres de recherches pour tenter d'étendre le domaine de validité des modèles de comportement, le point de vue qui est exposé dans ce qui suit, consiste à adjoindre aux critères de validité mécanique, des critères de validité énergétique fondés sur l'observation expérimentale [CHR 89, CHR 92a, CHR 96]. L'objectif, ici, est de pouvoir tenir correctement compte dans les calculs des manifestations thermiques et énergétiques liées aux processus de déformation. Cette double approche de l'étude des lois de comportement va à l'encontre d'habitudes encore répandues en

Mécanique des Solides. En effet, pour des vitesses de sollicitation mécanique lentes (essais quasi-statiques), la chaleur volumique des matériaux solides étant très élevée (comparativement à celle des gaz), les variations de température induites par la déformation restent souvent faibles. C'est pourquoi ces processus sont encore souvent assimilés à des processus isothermes. Il convient de remarquer que cette attitude, somme toute naturelle sur un plan strictement thermique, prive du même coup le mécanicien de possibilité de contrôle sur le plan énergétique (thermodynamique) de ses modèles de comportement. En négligeant les variations de température induites par le processus de déformation, il élimine la possibilité d'effectuer des bilans complets d'énergie.

Cet article s'adresse donc aux utilisateurs de codes de calcul peu familiarisés avec le formalisme thermodynamique utilisé en Mécanique des Solides pour présenter les lois de comportement dites à variables internes.

Le cadre de travail, se fondant à la fois sur les acquis de la Mécanique des Milieux Continus et sur ceux de la Thermodynamique des Processus Irréversibles, sera précisé dans une première partie ; on cherchera à illustrer par des exemples concrets le rôle physique joué par les différents termes intervenant dans le bilan d'énergie. Chaque étape sera présentée de façon à faire apparaître progressivement dans les équations de comportement, les mécanismes de couplage thermomécanique.

Dans une deuxième partie, les concepts et outils propres aux passages micro-macro seront introduits en se focalisant, une fois encore, sur les aspects "couplage". Puis, l'intégration proprement dite de ces couplages dans un code de calcul par éléments finis ainsi que les méthodes numériques employées seront abordées. En fin d'article, quatre exemples d'application seront développés. Ils illustrent les deux démarches évoquées plus haut et ont été intitulés :

- *modélisation macroscopique de la localisation de la déformation dans des matériaux thermosensibles,*
- *modélisation macroscopique des transformations martensitiques dans les alliages à mémoire de forme,*
- *approche multiéchelle des transformations martensitiques dans les alliages à mémoire de forme,*
- *approche micro-macro des contraintes d'origine thermique dans les matériaux composites.*

2. Cadre thermodynamique

La Thermodynamique offre, pour l'étude du comportement des matériaux, un cadre de modélisation de plus en plus utilisé. De nombreux ouvrages non seulement de recherche mais aussi d'enseignement, présentent les lois de comportement dans un cadre thermomécanique [GER 83, LUB 90, MAU 92].

C'est la Thermodynamique des Processus Irréversibles (TPI) du proche équilibre qui sera utilisée ici [BOC 76, CAL 85]. D'autres formalismes existent (TPI étendue) ; nous renvoyons le lecteur intéressé à la bibliographie suivante [JOU 93, MUS 93]. Dans l'approche adoptée ici, les concepts de la thermostatique sont extrapolés à des situations hors équilibre (*méthode de l'état local*). Nous rappelons brièvement ci-dessous les principes qui sont à la base de cette théorie.

2.1. *Système thermodynamique - Variables d'état - Potentiels*

Un milieu continu est considéré comme un système thermodynamique. A toute *particule* de ce système, on associe un élément de volume que l'on suppose homogène interprété comme un sous-système thermodynamique. Pour décrire l'évolution d'un système, on introduit alors la notion de *processus*, suite continue d'états par lesquels passe ce système. Si celui-ci est globalement hors équilibre, il est alors considéré comme une réunion de sous-systèmes en état d'équilibre ; dans un tel cadre, les évolutions sont qualifiées de *quasi-statiques* c'est-à-dire, constituées d'une succession d'états d'équilibre.

A l'équilibre, un système thermodynamique est décrit par $n+1$ variables indépendantes, scalaires ou tensorielles, appelées *variables d'état*. Parmi ces $n+1$ variables certaines sont observables (par exemple la température T , la déformation \mathcal{E}). Pour caractériser complètement l'équilibre thermodynamique, il est souvent nécessaire d'introduire d'autres variables d'état ; ces variables supplémentaires sont qualifiées d'*internes*. Elles récapitulent l'*histoire* du système associée aux événements microstructuraux jusqu'à l'instant t : accroissement de la densité de dislocations, changement de phase, endommagement, microfissuration, etc. Comme variables internes, on utilise fréquemment des tenseurs comme ceux des déformations élastiques ou plastiques ; lors de changements de phase les proportions de phase des différents constituants sont souvent choisies.

On appelle potentiel thermodynamique, toute fonction réelle des variables d'état permettant de décrire, dans notre cas, les propriétés thermomécaniques des systèmes à l'équilibre. Les principes de la Thermodynamique vont introduire deux potentiels fondamentaux : l'*énergie interne* du système et son *entropie*.

2.2. *Principes de la thermodynamique*

Soit \mathcal{S} un système thermodynamique à l'équilibre ; \mathcal{S} sera souvent un élément de volume du milieu continu considéré. Pour l'instant, prenons \mathcal{S}' une partie quelconque de \mathcal{S} et notons $(\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_n)$ les $n+1$ variables d'état, D son domaine géométrique et ∂D sa frontière.

2.2.1. Conservation de l'énergie

Si E est l'énergie interne de \mathcal{S} , e son énergie interne spécifique et K son énergie cinétique dans un repère galiléen \mathcal{R} , on a alors par définition :

$$E = \int_D \rho e dx \quad , \quad K = \frac{1}{2} \int_D \rho \bar{v} \cdot \bar{v} dx \quad (1)$$

où \bar{v} et ρ désignent respectivement la vitesse d'un point courant et la masse volumique du milieu considéré.

En notant r_e la densité volumique de source de chaleur d'origine externe échangée avec le milieu extérieur, \vec{q} le vecteur courant de chaleur, alors la puissance calorifique Q' échangée par le domaine D avec l'extérieur s'écrit :

$$Q' = \int_D r_e dx - \int_{\partial D} \vec{q} \cdot \vec{n} da. \quad (2)$$

L'énergie totale \mathcal{E} du système thermomécanique \mathcal{S} est, par définition :

$$\mathcal{E} = E + K. \quad (3)$$

La loi de conservation de l'énergie s'écrit avec ces notations :

$$\frac{d\mathcal{E}}{dt} = P_e + Q', \quad (4)$$

où P_e est la puissance des efforts extérieurs exercés sur \mathcal{S} . En utilisant le théorème des puissances virtuelles, on obtient en prenant comme champ de vitesse le champ réel, une écriture du principe de conservation de l'énergie indépendante du choix du repère \mathcal{R} :

$$P_a = P_e + P_i, \quad (5)$$

avec $P_a = \int_D \rho \bar{v} \cdot \vec{\gamma} dx$ et $P_i = - \int_D \sigma : \mathbf{D} dx$ où σ est le tenseur des contraintes de Cauchy, \mathbf{D} le tenseur vitesse de déformations, P_e la puissance des quantités d'accélération $\rho \vec{\gamma}$ du système et P_i la puissance des efforts intérieurs à \mathcal{S} . Or, on a :

$$P_a = \frac{d}{dt} \left[\frac{1}{2} \int_D \rho \bar{v} \cdot \bar{v} dx \right] = \frac{dK}{dt}. \quad (6)$$

En vertu des équations (3- 6) , on obtient alors :

$$\frac{dE}{dt} = - P_i + Q' . \tag{7}$$

Si on note $p_i = -\sigma : \mathbf{D}$ la densité volumique de puissance des efforts intérieurs, on peut alors écrire :

$$\frac{d}{dt} \int_D \rho e \, dx = - \int_D p_i \, dx + \int_D r_e \, dx - \int_{\partial D} \bar{q} \cdot \bar{n} \, da . \tag{8}$$

Le principe de conservation de la masse et le théorème de la divergence nous permettent d'avoir une écriture locale de l'équation de conservation de l'énergie sous la forme suivante :

$$\rho \frac{de}{dt} = - p_i + r_e - \text{div} \bar{q} . \tag{9}$$

2.2.2. *Second principe - inégalité fondamentale*

On suppose qu'à chaque instant t et pour tout élément du système, on peut définir une fonction d'état scalaire notée s appelé *entropie spécifique* de telle sorte que l'énergie spécifique soit une fonction monotone croissante de s et que le scalaire non négatif $T = \partial e / \partial s$ représente la température ζe l'élément.

Le second principe affirme que l'entropie S d'une partie quelconque du système occupant le domaine D , vérifie lors de toute évolution réelle, l'inégalité suivante :

$$\frac{dS}{dt} = \frac{d}{dt} \int_D \rho s \, dx \geq \int_D \frac{r_e}{T} \, dx - \int_{\partial D} \frac{\bar{q}}{T} \cdot \bar{n} \, da . \tag{10}$$

En tenant compte alors de la conservation de la masse et du théorème de la divergence, cette inégalité peut être réécrite sous la forme :

$$\int_D \left(\rho \frac{ds}{dt} - \frac{r_e}{T} + \text{div} \left(\frac{\bar{q}}{T} \right) \right) dx \geq 0 . \tag{11}$$

Le domaine D étant quelconque, on peut alors exprimer localement le second principe :

$$\rho \frac{ds}{dt} - \frac{r_e}{T} + \text{div} \left(\frac{\bar{q}}{T} \right) \geq 0 . \tag{12}$$

2.2.3. Dissipations - inégalité de Clausius-Duhem

En rapprochant les équations locales (9) et (12) des deux principes de la thermodynamique et en éliminant r_e entre ces deux équations, on obtient l'inégalité classique dite de Clausius-Duhem :

$$\rho \left(T \frac{ds}{dt} - \frac{de}{dt} \right) - p_i + \frac{\bar{q}}{T} \cdot \text{grad}T \geq 0 \quad (13)$$

Rappelons que les densités e et s sont, par définition, des fonctions d'état associées à un système thermodynamique en équilibre. L'énergie interne est, par construction, une fonction monotone croissante de l'entropie et la température thermodynamique est la dérivée partielle de l'énergie interne par rapport à l'entropie :

$$\begin{cases} e = e(s, \alpha_j) \quad j = 1, \dots, n \\ \alpha_0 = s \quad \text{et} \quad T = \partial e / \partial s \end{cases} \quad (14)$$

Il est alors possible de définir une nouvelle fonction d'état ψ , appelée énergie libre spécifique (énergie libre de Helmholtz), transformée de Legendre de l'énergie interne spécifique e par rapport à la variable d'état s :

$$\begin{cases} \psi = e - Ts \\ \psi = \psi(s, \alpha_j) \quad j = 1, \dots, n \\ s = -\partial \psi / \partial T \quad \text{et} \quad \partial \psi / \partial \alpha_j = \partial e / \partial \alpha_j \end{cases} \quad (15)$$

En reportant ces relations dans (13), l'inégalité devient :

$$-p_i - \rho \frac{\partial \psi}{\partial \alpha_j} \dot{\alpha}_j - \frac{\bar{q}}{T} \cdot \text{grad}T \geq 0, \quad (16)$$

où $(\dot{\quad})$ désigne la dérivée particulière. On définit alors la dissipation intrinsèque volumique $d_1 = \sigma : D - \rho (\partial \psi / \partial \alpha_j) \dot{\alpha}_j$ et la dissipation thermique volumique $d_2 = -(\bar{q}/T) \cdot \text{grad}T$. La dissipation totale d est reliée à ce que certains Thermodynamiciens appellent la source d'entropie irréversible σ_s :

$$d = \frac{\sigma_s}{T} = d_1 + d_2 \geq 0. \quad (17)$$

Classiquement, on postule que les deux dissipations sont séparément positives : $d_1 \geq 0$, $d_2 \geq 0$. Remarquons que la dissipation est décomposable en une somme de

produits, chaque produit faisant intervenir le flux d'une variable d'état. On dit alors que la dissipation est une somme de produits force-flux. Cette constatation est importante. Elle représente l'un des points forts de l'approche thermodynamique : du choix des correspondances force-flux qui sera fait, dépendra la forme des lois complémentaires qui, avec les lois d'état, assurent la fermeture mathématique du problème et constituent pour un matériau ce que l'on appelle communément *la loi de comportement*.

Une option très répandue consiste à supposer une correspondance force-flux linéaire (TPI linéaire). Dans ce qui suit, et d'une façon générale pour les milieux solides, cette hypothèse se révèle insuffisante dès que le comportement présente des aspects plastiques ou viscoélastiques non linéaires. Un cadre commode pour les mécaniciens des solides est celui des Matériaux Standard Généralisés [HAL 75] qui suppose que les forces (ou les flux) dérivent d'un potentiel dit *potentiel de dissipation*. Nous reviendrons sur ce point au paragraphe 2.5.

2.3. Équation de la chaleur

L'équation de la chaleur est fondamentale pour le Numéricien désireux de prendre en compte les couplages thermomécaniques dans un code de calcul. Elle permet de traduire les couplages entre effets mécaniques et effets thermiques. Elle précise les origines énergétiques des sources de chaleur accompagnant le processus de déformation. Ces sources sont de natures diverses reliées aux transformations microstructurales subies par le matériau sollicité. Pour obtenir cette équation, une démarche classique consiste à partir des deux écritures du taux d'énergie interne obtenues en utilisant successivement les équations (9) et (14) :

$$\rho \dot{e} = -p_i + r_e - \text{div} \bar{q} = \rho T \dot{s} + \rho T \frac{\partial e}{\partial \alpha_j} \dot{\alpha}_j. \tag{18}$$

Or d'après (15), on a $s = -(\partial^2 \psi / \partial T^2) \dot{T} - (\partial^2 \psi / \partial T \partial \alpha_j) \dot{\alpha}_j$, $j=1, \dots, n$, et si on introduit $C_\alpha = -T \partial^2 \psi / \partial T^2$ la capacité calorifique à $(\alpha_j)_{j=1, \dots, n}$ constants, on obtient $\rho T \dot{s} = \rho C_\alpha \dot{T} - \rho T (\partial^2 \psi / \partial \alpha_j \partial T) \dot{\alpha}_j$. Compte tenu de (15) et (18), on peut alors écrire :

$$\rho C_\alpha \dot{T} + \text{div} \bar{q} = d_1 + \rho T \frac{\partial^2 \psi}{\partial \alpha_j \partial T} \dot{\alpha}_j + r_e. \tag{19}$$

C'est cette dernière relation qui sera appelée *équation de la chaleur*. Interprétons maintenant, successivement, les divers termes qui la constituent.

- *La source r_e*

Physiquement, elle peut représenter un apport de chaleur par effet Joule, par rayonnement, ect., d'une façon générale, r_e symbolise tout échange volumique de chaleur d'origine extérieure. Dans notre cas, il sera relié au rayonnement ; les autres sources (volumiques !) d'origine extérieure seront supposées nulles. Le terme r_e est, dans cette étude, indépendant du temps, ce qui est souvent le cas lorsque l'on travaille au voisinage de l'équilibre thermique dans une température ambiante stable.

- *Les termes de couplage $\frac{\partial^2 \psi}{\partial \alpha_j \partial T} \dot{\alpha}_j$*

Les termes de couplage thermomécanique sont aussi homogènes à des sources volumiques de chaleur (W.m^{-3}); ils traduisent les interactions entre la température et les autres variables d'état caractérisant le matériau.

Par exemple, pour un matériau thermoélastique linéaire isotrope, les termes correspondant aux couplages entre déformation et température $\rho T (\partial^2 \psi / \partial \epsilon_{ij} \partial T) \dot{\epsilon}_{ij}$ sont les termes dits de couplage thermoélastique. Ils rendent compte du fait qu'un matériau thermoélastique se dilate quand on le chauffe ou qu'il se refroidit lorsqu'on l'étire.

Si on considère maintenant le couplage entre la température et une variable d'état comme la fraction volumique ξ d'une phase d'un système biphasé, la chaleur associée alors au terme $\rho T (\partial^2 \psi / \partial \xi \partial T) \dot{\xi}$ sera appelée *chaleur latente de changement de phase*.

- *Le terme de dissipation d_1*

Au second membre de (19), on retrouve la dissipation intrinsèque ; cette dissipation représente la partie de la puissance des efforts intérieurs qui se transforme de façon irréversible en chaleur lors du processus ; pour des transformations plastiques ou viscoplastiques, une partie du travail des contraintes sera dissipée.

On remarque que contrairement à la dissipation intrinsèque, la dissipation thermique d_2 n'intervient pas dans le bilan thermique.

- *Les termes d'absorption $\rho C_\alpha \dot{T}$ et de fuite $\text{div} \bar{q}$*

Ces deux termes constituent le membre de gauche de (19). Ils sont classiques dans l'équation de diffusion de la chaleur : le taux de chaleur créée par les sources

(le membre de droite), contribue en partie à l'élévation de la température du point $\{\rho C_\alpha \dot{T}\}$ et diffuse par conduction dans le reste du milieu $\{\text{div} \bar{q}\}$. Dans le cas où le matériau conduit la chaleur de façon *isotrope*, on peut écrire, selon la loi de Fourier :

$$\bar{q} = -k \text{grad} T, \quad (20)$$

où k est le coefficient de conduction. Si, par ailleurs, on note T_0 le champ de température d'équilibre du système, nous aurons à l'équilibre thermique :

$$-k \Delta T_0 = r_e. \quad (21)$$

Dans ce qui suit, on adoptera la forme simplifiée suivante de l'équation de la chaleur, valable lorsque r_e est constant dans le temps :

$$\rho C_\alpha \dot{\theta} - k \Delta \theta = w'_{ch}, \quad (22)$$

où $\theta = (T - T_0)$ et où $W'_{ch} = d_1 + \rho T (\partial^2 \psi / \partial \alpha_j \partial T) \dot{\alpha}_j$, $j=1, \dots, n$, symbolise la source volumique globale de chaleur.

2.4. Bilan d'énergie

Il est maintenant possible de dresser un bilan complet d'énergie pour une transformation thermomécanique. Pour simplifier, nous nous placerons dans le cadre des petites perturbations mécaniques (*HPP*) et... thermiques $T_0^{-1} \cdot \theta \ll 1$.

2.4.1. Aspects mécaniques

La forme du bilan d'énergie dépend du comportement du matériau et donc des options prises sur le plan de la cinématique des milieux continus pour traduire ce comportement. Nous supposons dans ce qui suit que les outils classiques de cette cinématique sont connus. A toutes fins utiles, nous indiquons quelques ouvrages de référence où une présentation exhaustive et rigoureuse de la cinématique des milieux continus en grandes transformations est proposée [GER 73, SID 82].

Nous rappelons brièvement ici que pour traduire le caractère déformable d'un milieu, le Mécanicien introduit le tenseur F *gradient de déformation*. Pour saisir le rôle physique joué par ce tenseur, nous dirons simplement qu'il associe à toute fibre matérielle infinitésimale placée en $d\vec{X}$ dans la configuration de référence C_0 , son placement $d\vec{x}$ dans la configuration courante C_t à l'instant t .

$$d\bar{x} = \mathbf{F} d\bar{X}. \quad (23)$$

Plusieurs mesures de déformation sont envisageables suivant que l'on décide de travailler par rapport à telle ou telle configuration ; dans une description lagrangienne du milieu, c'est le tenseur \mathbf{G} de Green-Lagrange qui sera généralement utilisé :

$$\mathbf{G} = \frac{1}{2}(\mathbf{F}^T \mathbf{F} - \mathbf{1}). \quad (24-a)$$

Si par contre, on choisit une description eulérienne, on utilise plutôt \mathbf{A} , tenseur d'Almansi-Euler, défini par :

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2}(\mathbf{1} - \mathbf{F}^{-T} \mathbf{F}^{-1}). \quad (24-b)$$

Dans le cadre des petites perturbations, les tenseurs \mathbf{G} et \mathbf{A} se confondent pour devenir le tenseur $\boldsymbol{\varepsilon}$ des petites perturbations. Dans ce cas linéarisé, une décomposition additive des vitesses de déformation en parties thermoélastique $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{the}$ et anélastique $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_a$ est toujours possible :

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}_{the} + \boldsymbol{\varepsilon}_a = \boldsymbol{\varepsilon}_e + \mathbf{1}_{th} \mathbb{T} + \boldsymbol{\varepsilon}_a. \quad (25)$$

Dans un cas *mécaniquement* quasi-statique (quantités d'accélération négligées), la puissance mécanique des efforts intérieurs s'identifie au signe près à la puissance fournie par l'extérieur pour déformer le matériau. Par unité de volume de matériau déformé, on choisit de noter :

$$w'_{ext} = \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} = \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{the} + \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_a. \quad (26)$$

Nous appellerons puissance volumique (thermo)élastique le terme $\boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\varepsilon}_{the}$ et puissance volumique anélastique, le terme complémentaire $\boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\varepsilon}_a$. L'intégration de (26) dans le temps permet de définir les énergies correspondantes :

$$w_{ext} = w_{the} + w_a. \quad (27)$$

2.4.2. Aspects thermodynamiques

Sur le plan thermodynamique nous prenons comme variables d'état $\mathbb{T} = \alpha_0$ la température absolue, $\boldsymbol{\varepsilon} = \alpha_1$ le tenseur des déformations, $\boldsymbol{\varepsilon}_a = \alpha_2$ le tenseur des

déformations anélastiques et $(\alpha_j)_{3 \leq j \leq n}$ un ensemble de $n-2$ variables complétant la description de la microstructure du matériau.

La partition (25) des déformations s'accompagne souvent d'une décomposition additive de l'énergie libre de Helmholtz de la forme :

$$\Psi(T, \varepsilon, \varepsilon_a, \alpha_j) = \Psi_{the}(T, \varepsilon - \varepsilon_a) + \Psi_a(T, \alpha_j). \tag{28}$$

La partie Ψ_{the} de l'énergie libre correspond à l'énergie thermoélastique emmagasinée. Lorsque l'on suppose que le comportement correspondant reste linéaire et isotrope alors :

$$\rho \Psi_{the} = \frac{1}{2} \left[a : (\varepsilon - l_{th} \theta, I - \varepsilon_a) : (\varepsilon - l_{th} \theta, I - \varepsilon_a) - \left(\frac{C_\alpha}{T_0} + a : I : l_{th}^2 \right) \theta^2 \right], \tag{29}$$

où a est le tenseur d'ordre 4 d'élasticité isotrope.

Le second terme rend compte de l'énergie absorbée (stockée) par le matériau pour modifier sa microstructure. Suivant le matériau envisagé et le type de sollicitation, l'énergie Ψ_a est associée physiquement à des mécanismes très différents et peut donc prendre des formes très variées. Pour fixer les idées, nous évoquons dans ce qui suit, deux types d'évolutions microstructurales : l'écrouissage à froid des métaux et la transformation martensitique des alliages à mémoire de forme (AMF).

- *écrouissage à froid des métaux*

Dans ce cas, le comportement du matériau est plutôt du type élastoplastique indépendant du temps et c'est l'énergie *absorbée* (on dit aussi *bloquée*) durant l'écrouissage qu'il convient de décrire. La déformation anélastique s'identifie, dans ce cas, à la déformation plastique ($\alpha_2 = \varepsilon_a = \varepsilon_p$). Les essais quasi-statiques permettent d'observer, pour ce type de comportement, des variations de température relativement faibles (environ 0,5°C pour des essais purement élastiques et jusqu'à 20°C pour des essais élastoplastiques). En général, on suppose que ces "petites" variations de température n'affectent pas l'état d'écrouissage du matériau (pas de recuit induit par les auto-échauffements). En conséquence Ψ_a est indépendante de la température absolue

$$\Psi_a(T, \alpha_j) \approx \Psi_b(\alpha_j), \tag{31}$$

En rapprochant ce résultat de l'écriture générale (21) de la dissipation intrinsèque et de la décomposition cinématique (25), on obtient :

$$\dot{d}_1 = \sigma : \dot{\varepsilon}_p - \rho \frac{\partial \psi_b}{\partial \alpha_j} \dot{\alpha}_j, 2 \leq j \leq n.$$

Cette équation peut être interprétée énergétiquement de la façon suivante : l'énergie anélastique développée est partiellement transformée en chaleur, la partie complémentaire étant absorbée (bloquée) par le matériau pour modifier sa microstructure. Sous forme volumique et incrémentale, cette interprétation se traduit par :

$$w'_d = \sigma : \dot{\varepsilon}_p = d_I + \rho \dot{\psi}_b. \quad (32)$$

Si maintenant, on note w_d la quantité volumique de chaleur associée à la dissipation et $w_b = \rho \psi_b$ l'énergie bloquée par unité de volume d'échantillon, alors :

$$w_a = w_b + w_d. \quad (33)$$

L'équation de la chaleur s'écrit dans ce cas :

$$\rho C_\alpha \dot{\theta} - k \Delta \theta = \dot{d}_1 + \rho T \frac{\partial^2 \psi}{\partial \alpha_j \partial T} \dot{\alpha}_j, \quad j=1, \dots, n. \quad (34)$$

Les termes de couplage (croisés) au second membre peuvent être éliminés pour $j \geq 2$ à cause de l'hypothèse (31). Le premier terme de couplage, dû aux effets thermoélastiques, est associé à $\varepsilon = \alpha_1$. Il est parfois appelé terme *isentropique* et noté w'_{is} . Il s'écrit en tenant compte de l'équation (29) :

$$\dot{w}_{is} = \rho T \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varepsilon_{ij} \partial T} \dot{\varepsilon}_{ij} \approx -l_{th} T_0 \text{tr} \dot{\sigma}. \quad (35)$$

Au second membre de l'équation de la chaleur il n'y a plus, dans le cas élastoplastique, que deux types de sources : la dissipation intrinsèque et le terme thermoélastique. La chaleur mise en jeu se décompose alors sous la forme :

$$w_{ch} = w_d + w_{is}. \quad (36)$$

• *transformation martensitique des AMF*

En deçà d'un certain niveau de sollicitation thermique et mécanique, les AMF, lorsqu'ils sont métallurgiquement conditionnés, ont un comportement *super* (ou *pseudo*) élastique. Ils acceptent, de façon "réversible", des déformations de plusieurs pour-cent sous l'effet d'un (petit) chargement thermique ou mécanique. Les

déformations importantes obtenues sont attribuées à la transformation de phase martensitique dont ils sont le siège.

Les déformations anélastiques sont, dans ce cas, des déformations dites de transformation. Ce ne sont pas ces déformations qui seront en général prises comme variables d'état. Beaucoup d'auteurs préfèrent, en effet, prendre comme variables d'état complémentaires, les K proportions $(\xi_i, i=1..K)$ de variantes de martensite. Elles sont reliées à la déformation de transformation par $\varepsilon_a = \varepsilon_t = \sum_{i=1}^K \xi_i \beta_i$ où β_i est le tenseur d'orientation associé à la variante i . L'énergie thermoélastique prend la forme (29) en remplaçant ε par ε_t .

La partie complémentaire de l'énergie libre est liée aux mécanismes de changement de phase. Dans certains travaux, lorsque l'on ne considère que deux variantes de martensite ($K=2; n=4$), elle est écrite sous la forme [PEY 95, PEY 97] :

$$\psi_a = \psi_{ch} = \frac{D_f}{\rho} \left[(A_f - M_f) (\xi_1^2 + \xi_2^2) + (T - A_f) (\xi_1 + \xi_2) \right] + I_V(\xi_1, \xi_2), \quad (37)$$

où D_f , A_f et M_f sont des constantes phénoménologiques et où $I_V(\xi_1, \xi_2)$ est la fonction indicatrice du domaine convexe \mathcal{V} défini par :

$$\mathcal{V} = \left\{ (\xi_1, \xi_2) \in \mathbf{R}^2 / 0 \leq \xi_i \leq 1, i=1,2 \text{ et } 0 \leq \xi_1 + \xi_2 \leq 1 \right\}.$$

L'introduction d'une indicatrice dans l'énergie libre, initialement proposée par [FRE 87], permet de tenir compte des limitations physiques des variables ξ_i qui doivent, comme toute proportion, être comprises entre 0 et 1.

Au second membre de l'équation de la chaleur, il y a, en plus d'une éventuelle dissipation et du terme thermoélastique, la puissance calorifique associée à la chaleur latente de changement de phase w_l . L'équation (36) devient alors :

$$w_{ch} = w_d + w_{is} + w_l \quad (38)$$

Remarquons encore qu'avec un tel formalisme les transitions de phase du premier ordre sont interprétées comme des processus thermodynamiques stables et éventuellement irréversibles (d_1 ou $d_2 \neq 0$), ce qui n'est pas le cas dans le cadre de la Thermodynamique Classique, l'application de la règle de Maxwell menant à l'équation de Clausius-Clapeyron n'étant valable que dans le cas d'un cycle réversible [CHR 97].

$W_{ext}(t) = \int_0^t \int_{D(\tau)} \sigma : \dot{\varepsilon} dx d\tau$ <i>travail de déformation</i>	$W_b(t) = \int_0^t \int_{D(\tau)} \rho \frac{\partial \psi}{\partial \alpha_j} \dot{\alpha}_j dx d\tau$ <i>énergie bloquée</i>
$W_e(t) = \int_0^t \int_{D(\tau)} \sigma : \dot{\varepsilon}_e dx d\tau$ <i>travail élastique</i>	$W_{thm}(t) = \int_0^t \int_{D(\tau)} \rho T \frac{\partial^2 \psi}{\partial T \partial \alpha_j} \dot{\alpha}_j dx d\tau$ <i>chaleur mise en jeu par les couplages thermomécaniques ($j \geq 1$)</i>
$W_a(t) = \int_0^t \int_{D(\tau)} \sigma : \dot{\varepsilon}_a dx d\tau$ <i>travail anélastique</i>	$W_{is}(t) = \int_0^t \int_{D(\tau)} \rho T \frac{\partial^2 \psi}{\partial T \partial \varepsilon_{ij}} \dot{\varepsilon}_{ij} dx d\tau$ <i>chaleur due aux effets thermoélastiques</i>
$W_d(t) = \int_0^t \int_{D(\tau)} d_I dx d\tau$ <i>travail dissipé</i>	$W_l(t) = \int_0^t \int_{D(\tau)} \rho T \frac{\partial^2 \psi}{\partial T \partial \xi_i} \dot{\xi}_i dx d\tau$ <i>chaleur latente</i>

Tableau récapitulatif des divers termes du bilan d'énergie

2.5. Lois complémentaires - Matériaux standard généralisés

Les lois de comportement qui seront utilisées dans les exemples qui suivent, ont été établies dans le cadre de la théorie des Matériaux Standard Généralisés [HAL 75]. Ce formalisme s'appuie sur le cadre général de la Thermomécanique des Milieux Continus présenté ci-dessus. Sa spécificité vient de la façon de définir la correspondance entre forces et flux thermodynamiques.

2.5.1. Fermeture du problème - lois complémentaires

Lorsque l'on comptabilise les variables d'état *scalaires*, on obtient : $\alpha_0 = T$, $\alpha_1, \dots, \alpha_6 = \varepsilon_{kl}$ (6 variables car ε est un tenseur symétrique), $\alpha_j, j = 1, \dots, p$, p variables complémentaires caractérisant l'état interne du matériau, soit au total $n + 1 = p + 7$ variables d'état.

On se propose d'effectuer, ci-dessous, un décompte des inconnues et des équations associées à un problème thermomécanique. Pour effectuer ce décompte, on se place dans le cas où le potentiel thermodynamique constitue une *donnée du problème*. Cette donnée est importante car elle permet de définir les lois d'état qui viennent s'ajouter aux équations de conservation (masse, mouvement, énergie).

Inconnues	Nombre	Équations	Nombre
ρ : masse spécifique	1	continuité	1
\vec{u} : déplacement	3	mouvement	3
T : température	1	énergie (chaleur)	1
ϵ_{kl} : déformations	6	éq. géométriques	6
α_j : variables complémentaires	p	Ψ donnée du problème	
s : entropie	1	$s = -\frac{\partial \Psi}{\partial T}$: loi d'état	1
σ_{kl}^r : contrainte réversible	6	$\frac{\sigma_{kl}^r}{\rho} = \frac{\partial \Psi}{\partial \epsilon_{kl}}$: loi d'état	6
A_j : variables conjuguées des $\alpha_j, j = 1, \dots, p$	p	$\frac{A_j}{\rho} = \frac{\partial \Psi}{\partial \alpha_j}$: loi d'état	p
q : flux de chaleur	3	loi (complémentaire) de Fourier	3
σ_{kl} : contrainte	6		
Total "inconnues" :	$2p + 27$	Total "équations" :	$p + 21$

Le tableau ci-dessus montre qu'il manque $p + 6$ équations. Pour obtenir ces équations (ces "lois"), le Thermodynamicien choisit de fermer le problème en imposant une correspondance entre forces thermodynamiques et flux. Ces forces et flux sont définis à partir de la dissipation intrinsèque d_1 . Avec les notations introduites, cette dissipation devient :

$$d_1 = (\sigma_{kl} - \sigma_{kl}^r) \dot{\epsilon}_{kl} - A_j \dot{\alpha}_j, 1 \leq j \leq p. \tag{39}$$

Les flux sont ici $\dot{\epsilon}$ et $\dot{\alpha}_j$, les forces thermodynamiques correspondantes étant alors respectivement $\sigma^{ir} = \sigma - \sigma^r$ et $X_j = -A_j, 1 \leq j \leq p$. La contrainte σ^{ir} est appelée *contrainte irréversible*. La grandeur X_j représente la force thermodynamique associée à la variable α_j .

Le formalisme des matériaux standard généralisés postule l'existence d'une fonction $\varphi(\dot{\epsilon}_{kl}, \dot{\alpha}_j)$ convexe, positive, minimale et nulle en $(0, 0, \dots, 0)$ telle que les lois complémentaires soient définies, lorsque φ est différentiable, par :

$$\sigma_{kl}^{ir} = \frac{\partial \varphi}{\partial \dot{\epsilon}_{kl}}, \text{ (6 équations),} \tag{40}$$

$$-A_j = \frac{\partial \varphi}{\partial \dot{\alpha}_j}, \quad (p \text{ équations}). \quad (41)$$

Lorsque le potentiel de dissipation φ n'est pas régulier, les outils de l'analyse convexe permettent de généraliser la notion de différentiabilité. On écrira alors quelle que soit la régularité de φ :

$$(\sigma_{kl}^{ir}, -A_j) \in \partial \varphi(\dot{\epsilon}_{kl}, \dot{\alpha}_j) \quad (6+p) \text{ équations} \quad (42)$$

où $\partial \varphi(\dot{\epsilon}_{kl}, \dot{\alpha}_j)$ est le sous-différentiel de φ . Nous renvoyons le lecteur intéressé à la référence [SUQ 82].

2.5.2. Quelques remarques sur l'identification des lois de comportement

Le comportement du matériau est donc complètement déterminé dès que son potentiel thermodynamique et son potentiel de dissipation sont connus. La loi de comportement du matériau est en fait un ensemble de relations constitué des lois d'état et des lois complémentaires.

En fait, sur le plan pratique, l'identification expérimentale des lois de comportement ne passe jamais par la détermination directe des potentiels. Les essais mécaniques permettent, pour divers trajets de chargement, de connaître la correspondance contrainte-déformation ; ces informations sont reliées aux potentiels par l'égalité suivante :

$$\sigma_{kl} = \sigma_{kl}^r + \sigma_{kl}^{ir} = \rho \frac{\partial \psi}{\partial \epsilon_{ij}} + \frac{\partial \varphi}{\partial \dot{\epsilon}_{kl}}. \quad (43)$$

On peut aussi envisager de mesurer simultanément, durant le processus de déformation, l'évolution des températures. Dans certains cas [CHR 92b, CHR 95], ces mesures permettent, par l'intermédiaire de l'équation de la chaleur, d'estimer la quantité de chaleur globalement mise en jeu. Les données expérimentales peuvent alors être reliées aux variables du modèle par la relation :

$$w'_{ch} = d_I + \rho T \frac{\partial^2 \psi}{\partial T \partial \alpha_j} \dot{\alpha}_j, \quad j = 1, \dots, n. \quad (44)$$

Par exemple, dans le cas des métaux métalliques écrouis à froid, nous avons vu qu'il était possible de négliger les termes de couplage autres que ceux provenant de la thermoélasticité. Si ce dernier terme peut alors être calculé via une loi de comportement thermoélastique à partir des mesures mécaniques (cf. (35)), la mesure

des températures permet d'évaluer w_{ch} et par là même, d'estimer indirectement la puissance mécanique dissipée [CHR 92b]. Ces estimations sont utiles lors de la modélisation ; elles guident dans le choix de la forme à donner au potentiel de dissipation.

C'est donc au travers d'une multitude d'essais, généralement complexes, que l'on peut espérer préciser progressivement la forme à donner aux deux potentiels. Les limites des moyens expérimentaux actuels et le coût des essais sont tels que les prédictions d'une "loi de comportement" ne sont valables que pour une gamme finie de sollicitations. Il est important que l'utilisateur de codes de calcul et donc de lois de comportement garde sans cesse en mémoire "vive" cette limitation...

3. Couplages thermomécaniques et homogénéisation

Le cadre thermodynamique de travail étant posé et les lois de comportement thermomécanique qui en découlent étant maintenant accessibles, nous allons nous intéresser dans cette partie aux possibilités offertes par les techniques dites de passages micro-macro ou d'homogénéisation, bien adaptées à l'étude des matériaux hétérogènes.

Très généralement, ces techniques permettent de relier deux échelles de description du matériau, une dite macroscopique correspondant généralement à l'échelle de la structure étudiée, l'autre dite microscopique et liée à la géométrie des hétérogénéités du matériau. La description microscopique permet non seulement de saisir la complexité géométrique et matérielle du matériau, mais aussi de décrire plus correctement les phénomènes physico-chimiques présents à cette échelle, pour enfin traduire leurs effets au niveau macroscopique par une opération de moyenne qu'il conviendra de préciser. Tout l'intérêt du passage micro->macro ou homogénéisation est alors de définir un comportement "macroscopique homogène équivalent", pour pouvoir calculer la structure (par essence macroscopique) en faisant abstraction de la complexité du matériau. Suivant cette démarche, on peut même espérer, tout au long du calcul de structure macroscopique, suivre les évolutions microscopiques en certains points intéressants de la structure. C'est ce que l'on qualifiera de passage macro->micro, qui autorise le suivi simultané d'un calcul de structure à deux échelles de description.

De très nombreux travaux [CHR 79, FRA 91, GAY 89, HAS 83, MEC 93] ont été effectués sur les méthodes d'homogénéisation, et ce thème de recherche a été abordé sous des angles assez différents, s'agissant de l'importance donnée au formalisme mathématique utilisé et du domaine d'application précis visé.

Il n'est évidemment pas question ici de présenter une revue exhaustive de tous ces aspects, mais plutôt de rappeler les différentes étapes nécessaires à la réalisation de passages micro-macro pour des problèmes de thermique pure, d'élasticité pure et de thermoélasticité couplée au sens évoqué dans les parties précédentes. Nous nous limiterons, dans un premier temps, à l'étude de ces comportements, en se plaçant dans des hypothèses de petites transformations, le lecteur devant là aussi se référer aux ouvrages cités pour ce qui concerne d'autres types de comportement. Dans un deuxième temps, et à travers plusieurs applications, des comportements plus complexes seront étudiés, comme la thermo-viscoélasticité ou la thermoélasticité avec endommagement, ainsi que le comportement pseudo-élastique avec changement de phase des alliages à mémoire de forme.

3.1. Notions de passages micro-macro - Description macroscopique et description microscopique

L'échelle macroscopique correspond donc à celle de la structure S , que nous supposons être constituée d'un matériau hétérogène, la taille des hétérogénéités, reliée à l'échelle microscopique, étant très inférieure à celle de la structure. Cette structure est de plus soumise à un chargement thermomécanique quelconque. Nous cherchons à définir (figure 1) un matériau fictif, homogène équivalent au matériau réel hétérogène, au sens où les champs thermomécaniques macroscopiques sont les mêmes dans les deux matériaux. Cette définition passe par l'étude de ce que l'on appelle le volume élémentaire représentatif (noté v.e.r.), où l'hétérogénéité microscopique est décrite, et ce qui suit détaille son utilisation.



Figure 1. Milieu réel, v.e.r. et milieu homogène équivalent

En chaque point x de la structure S composée du matériau réel, on définit les champs microscopiques de déplacement u et de température τ . Soient ϵ et g , respectivement le tenseur de déformation et le vecteur gradient de température qui s'en déduisent. Enfin, soient σ et q , respectivement le tenseur de contrainte de Cauchy et le vecteur courant de chaleur sortant (ou flux de chaleur), qui sont estimés par l'intermédiaire des lois de comportement en vigueur au point considéré.

Chacune des composantes des tenseurs de déformation ou de contrainte, et des vecteurs gradient de température ou flux de chaleur a une évolution, le long de la

structure, comparable à celle présentée figure 2. Pour une description fine, (niveau micro), les fluctuations rapides sont dues aux hétérogénéités, alors que les variations plus lentes, qui apparaîtraient seules dans une description plus grossière (niveau macro), en sont la moyenne et traduisent les effets de chargement et de géométrie de la structure.

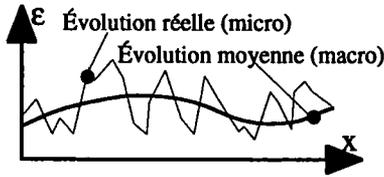


Figure 2. Fluctuations microscopiques autour de la valeur macroscopique.

On sent bien ici, apparaître une notion "d'homogénéabilité" du matériau, dépendant de l'amplitude des fluctuations microscopiques autour de la valeur moyenne, ainsi que du rapport des périodes spatiales microscopiques et macroscopiques.

On peut alors déduire des réflexions précédentes et de façon assez naturelle, en chaque point X macroscopique de la structure S , (cette fois indifféremment sur le matériau réel ou le matériau homogène équivalent), le tenseur de déformation E et le gradient de température G , ainsi que le tenseur de contrainte Σ et le flux de chaleur Q .

Précisons tout de suite que cette démarche n'est valable que sur des grandeurs pour lesquelles la moyenne arithmétique est significative de la valeur macroscopique, et ne permet pas de définir des champs de déplacement U et de température T . Ceci se fait en utilisant des résultats plus théoriques qui seront évoqués dans la suite, et qui assurent qu'il existe bien un champ de déplacement U dont dérive E , idem pour T et G .

Quoi qu'il en soit, les liaisons entre les valeurs microscopiques de déformation, de contrainte, de gradient de température et de flux de chaleur et leurs homologues macroscopiques sont établies sous la forme de relation de moyenne spatiale, moyenne s'effectuant sur le volume élémentaire représentatif. Le v.e.r., nommé Y dans la suite, prend ici tout sa signification ; *élémentaire* car il correspond à l'échelle microscopique du milieu et *représentatif* au sens que sa taille est suffisante pour décrire correctement le milieu. Cette description s'entend au sens exact si le milieu est périodique et en un sens statistique sinon. Il faut alors voir le v.e.r. comme une opération de "zoom" réalisée en chaque point macroscopique X , permettant l'accès à une échelle plus fine décrite par les points x microscopiques. De façon précise, on peut donc relier, par exemple, le tenseur de déformation microscopique ϵ à E , déformation macroscopique, par une relation du type :

$$E_{ij} = \frac{1}{|Y|} \int_Y \varepsilon_{ij} dv \quad \text{noté dans la suite : } E_{ij} = \langle \varepsilon_{ij} \rangle \quad (45)$$

où $|Y|$ désigne la mesure de Y .



Figure 3. v.e.r.

De manière générale, le v.e.r. se schématise comme sur la figure 3. On y dénombre N phases et, si sur l'exemple proposé, la phase 1 est une phase connexe, ceci ne réduit pas la généralité des équations développées dans la suite, qui sont applicables à des matériaux de type composite fibre-matrice ou des matériaux de type polycristallin.

Pour la simplicité des équations utilisées, les relations générales d'homogénéisation sont établies pour des comportements d'élasticité pure et de thermique pure. Le cas d'un comportement thermoélastique couplé est décrit dans une partie suivante.

3.2. Relations générales d'homogénéisation (cas élastique et cas thermique)

3.2.1. Cas purement élastique

Au niveau microscopique, le champ de déplacement u permet de définir le tenseur de déformation ε par :

$$\varepsilon = \text{grad}_s(u) = \frac{1}{2}(u_{i,j} + u_{j,i}) \quad (46)$$

La loi de comportement élastique, dont la matrice de rigidité $c(x)$, ou son inverse la matrice de souplesse $s(x)$, dépend de la phase du point x considéré, permet de déduire le tenseur de contrainte σ par :

$$\sigma_{ij} = c_{ijkl}(x)\varepsilon_{kl} \quad \text{ou} \quad \varepsilon_{ij} = s_{ijkl}(x)\sigma_{kl} \quad (47)$$

On utilise alors les *tenseurs de localisation* A et B , respectivement de déformation et de contrainte, qui permettent de relier les champs locaux ε et σ en chaque point x à leurs homologues macroscopiques E et Σ en un point X macroscopique. Ils sont définis par :

$$\varepsilon_{ij}(x) = A_{ijkl}(x)E_{kl}(X) \quad \text{et} \quad \sigma_{ij}(x) = B_{ijkl}(x)\Sigma_{kl}(X) \quad (48)$$

Puis, en utilisant les équations de liaisons micro-macro déjà évoquées, il vient :

$$\Sigma = \langle \sigma \rangle = \langle c\varepsilon \rangle = \langle cAE \rangle = \langle cA \rangle E \quad \text{et} \quad E = \langle \varepsilon \rangle = \langle s\sigma \rangle = \langle sB\Sigma \rangle = \langle sB \rangle \Sigma \quad (50)$$

On aboutit alors à la loi de comportement macroscopique :

$$\Sigma_{ij} = C_{ijkl}(X)E_{kl} \quad \text{ou} \quad E_{ij} = S_{ijkl}(X)\Sigma_{kl} \quad (51)$$

et à la définition des matrices de rigidité et de souplesse macroscopiques :

$$C(X) = \langle c(x)A(x) \rangle \quad \text{et} \quad S(X) = \langle s(x)B(x) \rangle \tag{52}$$

La seule connaissance des tenseurs de localisation permet donc de résoudre le problème d'homogénéisation, et toute la difficulté réside dans leur évaluation.

3.2.2. Cas purement thermique

De façon analogue au cas élastique, les caractéristiques macroscopiques de conduction de la chaleur sont déduites des données microscopiques par opération de moyenne sur les gradients de température et sur les flux de chaleur.

Le gradient de température microscopique se dérive du champ de température microscopique :

$$g = grad(\tau) \tag{53}$$

La loi de comportement microscopique, ici la loi de Fourier, s'écrit, en chaque point x microscopique :

$$q_i = -k_{ij}(x)g_j \tag{54}$$

On définit aussi des tenseurs de localisation du gradient de température et du flux, M et N , par :

$$g_i(x) = M_{ij}(x)G_j(X) \quad \text{et} \quad q_i(x) = N_{ij}(x)Q_j(X) \tag{55}$$

L'utilisation des équations de liaison micro-macro permet ici aussi d'aboutir à la loi de comportement macroscopique :

$$Q = \langle q \rangle = \langle -kg \rangle = \langle -kMG \rangle = -\langle kM \rangle G \quad \text{ou} \quad Q_i = -K_{ij}(X)G_j \tag{56}$$

$$\text{avec} \quad K(X) = \langle k(x)M(x) \rangle \tag{57}$$

Là aussi, la seule connaissance des tenseurs de localisation permet d'obtenir les caractéristiques macroscopiques de conduction.

Quelques propriétés des tenseurs de localisation.

* En utilisant la relation (45) et la définition du tenseur de localisation A :

$$E = \langle \epsilon \rangle = \langle AE \rangle = \langle A \rangle E \quad \text{d'où} \quad \langle A \rangle = Id$$

On peut montrer de même que $\langle B \rangle = Id$ et $\langle M \rangle = Id$

* On peut également montrer que, grâce aux tenseurs de localisation le problème de la dilatation thermique des matériaux hétérogènes se ramène tout simplement à un problème d'élasticité pure.

Les coefficients macroscopiques de dilatation thermique α sont donnés [PEY 90] en fonction des coefficients de dilatation thermique microscopiques α , et des autres caractéristiques élastiques, par : $\alpha_{ij} = \langle B_{pqij} \alpha_{pq} \rangle$

3.2.3. Cas du problème thermoélastique couplé

La déformation et la température sont choisies comme variables d'état, puis on considère une dissipation intrinsèque et des sources volumiques de chaleur d'origine extérieure nulles. Rappelons simplement que le couplage entre variables mécaniques et thermiques intervient dans l'équation de la chaleur par le terme de couplage thermoélastique et dans la loi de comportement élastique par le terme de dilatation thermique. (Voir plus bas le détail des équations). Ces lois se déduisent des équations (29) et (34) des parties précédentes.

La même démarche que celle utilisée pour les cas purement thermique et purement élastique peut être employée. Cependant, et ceci pour dresser un panorama aussi large que possible des méthodes d'homogénéisation, nous suivrons ici, sans développer aucune démonstration théorique, la démarche de la méthode dite asymptotique pour les milieux périodiques, [BRA 89].

La seule hypothèse supplémentaire qu'il faille rajouter est celle de la périodicité du milieu au niveau microscopique. Le v.e.r. est alors confondu avec la cellule de base du réseau périodique, et on notera de plus ω le rapport entre les échelles microscopiques et macroscopiques.

Au niveau microscopique, le système d'équation qui régit les variables thermomécaniques est le suivant :

$$\begin{cases} \sigma^\omega = c^\omega (\varepsilon^\omega - \alpha^\omega \theta^\omega Id) \\ \rho^\omega C_\alpha^\omega \dot{\theta}^\omega = \text{div}(\lambda^\omega \text{grad} \theta^\omega) - T_0 c^\omega \alpha^\omega \dot{\varepsilon}^\omega \end{cases} \quad (58)$$

où l'exposant ω identifie les valeurs microscopiques et où $\theta^\omega = T^\omega - T_0$ est l'écart de température par rapport à une température de référence T_0 .

Notons simplement que, dans (58), C^ω est la matrice de rigidité, α^ω le coefficient de dilatation thermique, ρ^ω la masse volumique, et λ^ω le tenseur de conduction, non isotrope *a priori*.

Pour homogénéiser ce problème, la méthode asymptotique propose de s'intéresser au devenir des champs microscopiques σ^ω , ε^ω et θ^ω , lorsque le petit paramètre ω tend vers zéro. Sur un plan physique, il faut considérer cette opération comme un "zoom arrière", l'opérateur prenant suffisamment de recul pour ne plus distinguer la microstructure, et ne voyant finalement qu'un milieu homogène équivalent.

Il est alors montré [BRA 89, FRA 84], que lorsque ω tend vers zéro, les champs microscopiques admettent des limites σ^0 , ε^0 et θ^0 , et que ces champs sont de bons représentants des valeurs macroscopiques.

Il est également montré, et c'est peut-être là le résultat le plus intéressant, que ces champs macroscopiques vérifient un système d'équations (59) de structure identique à (58), et qui donne les relations entre caractéristiques microscopiques et macroscopiques :

$$\begin{cases} \sigma^0 = C(\varepsilon^0 - \alpha\theta^0 Id) \\ \rho^0 C_\alpha \dot{\theta}^0 = \text{div}(\Lambda \text{grad}\theta^0) - T_0 C \alpha \dot{\varepsilon}^0 \end{cases} \quad (59)$$

Sans entrer trop dans le détail, les caractéristiques macroscopiques se déduisent de leurs homologues microscopiques par des relations de moyenne analogues à celles vues dans les paragraphes précédents, et dont l'évaluation se fait là aussi par la résolution de problèmes unitaires appropriés sur la cellule de base (voir application en 4.4). Les problèmes à résoudre sont soit purement mécanique, soit purement thermique, soit des problèmes de couplage.

3.3. Quelques techniques de résolution

Il est clair maintenant que l'obtention des tenseurs de localisation est la clé du problème d'homogénéisation. Suivant la nature du problème envisagé, mais surtout suivant la complexité géométrique du v.e.r. défini, différentes méthodes peuvent être utilisées. Les plus simples sont fondées sur des hypothèses simplificatrices sur la forme des champs microscopiques et concernent des v.e.r. simples. Les plus complexes, et les plus précises, concernent des v.e.r. riches en informations qui ne peuvent être traités, le plus souvent, que par des méthodes de type éléments finis.

Signalons enfin que tout un pan de la recherche en homogénéisation ne se contente pas d'obtenir des solutions approchées, mais tente d'aboutir à des encadrements de la solution exacte, le plus souvent par des méthodes énergétiques débouchant sur des approches variationnelles. Les bornes obtenues sont en effet plus riches d'enseignement qu'une solution approchée dont on ne sait évaluer la précision.

Dans cette partie, après avoir précisé les problèmes thermomécaniques à traiter sur le v.e.r., diverses méthodes seront brièvement exposées.

3.3.1. Conditions aux limites de type homogène

Les problèmes posés sur le v.e.r. pour déduire les champs microscopiques et donc les tenseurs de localisation sont tous du même type. Prenons par exemple le problème de thermique pure. Il convient de trouver g champ de gradient de température microscopique, lorsque le v.e.r. Y est soumis à G , valeur macroscopique du gradient de température. Ce problème est à valeur moyenne imposée, donc un problème typiquement mal posé. Il est nécessaire d'avoir une condition sur la température au bord du v.e.r., qui permette de plus de vérifier la condition de moyenne :

$$\langle g \rangle = G \quad (60)$$

Parmi toutes les conditions en température pouvant convenir, on choisit les conditions aux limites de type homogènes, qui pour ce problème précis s'écrivent :

$$\forall x \in \partial Y, T = G_k x_k$$

Il est aisé de vérifier que le champ g solution du problème ainsi posé satisfait (60) :

$$\langle g_i \rangle = \frac{1}{|Y|} \int_y g_i dx = \frac{1}{|Y|} \int_y T_i dx = \frac{1}{|Y|} \int_{\partial y} T n_i dx = \frac{1}{|Y|} \int_{\partial y} G_k x_k n_i dx = \frac{G_k}{|Y|} \int_{\partial y} x_k n_i dx$$

$$\text{donc } \langle g_i \rangle = \frac{G_k}{|Y|} \int_y x_{k,i} dx = G_i$$

On définit de même des conditions aux limites de type homogène en vecteur courant de chaleur, puis en déplacement et en vecteur contrainte pour le problème élastique :

$$\forall x \in \partial Y, q_i = Q_i \quad \text{qui assure que} \quad \langle q \rangle = Q \quad (61)$$

$$\forall x \in \partial Y, u_i = E_{ik} x_k \quad \text{qui assure que} \quad \langle \varepsilon \rangle = E \quad (62)$$

$$\forall x \in \partial Y, \sigma_{ij} n_j = \Sigma_{ij} n_j \quad \text{qui assure que} \quad \langle \sigma \rangle = \Sigma \quad (63)$$

Le problème d'homogénéisation est maintenant bien posé, et permet dans tous les cas de trouver les champs microscopiques à valeur macroscopique unitaire imposée, soit les composantes des tenseurs de localisation.

3.3.2. Méthodes de Voigt [VOI 889] et de Reuss [REU 29]

Ces deux méthodes, assez anciennes, se fondent sur des approximations "fortes" des champs microscopiques.

- Pour Voigt, le champ de déformation microscopique ε , induit par un champ de déformation macroscopique E , est en première approximation homogène dans tout le v.e.r. et égal à E .

$$\forall x \in Y, \varepsilon_{ij}(x) = E_{ij}$$

On en déduit, par (48), que le tenseur de localisation des déformations est partout égal au tenseur identité

$$\forall x \in Y, A(x) = Id \quad \text{d'où, par (52)} : \quad C_{Voigt} = \langle c \rangle \quad (64)$$

- Pour Reuss, le champ de contraintes microscopiques σ , induit par un champ de contraintes macroscopiques Σ , est en première approximation homogène dans tout le v.e.r. et égal à Σ .

On en déduit cette fois que le tenseur de localisation des contraintes B est partout égal à l'identité et par conséquent :

$$S_{Reuss} = \langle s \rangle \quad (65)$$

- Dans ces deux méthodes, on aboutit à des lois dites de mélanges sur les tenseurs de rigidité ou de souplesse. Remarquons tout de suite qu'il s'agit bien de deux approximations différentes qui conduisent à des tenseurs C_{Voigt} et S_{Reuss} qui ne sont pas inverses l'un de l'autre.

• On peut également écrire des équations analogues concernant le problème de thermique en considérant des champs microscopiques de gradient de température et de flux de chaleur homogènes et égaux aux valeurs macroscopiques imposées. On aboutit alors à des estimations de la conduction macroscopique qui sont les moyennes, soit des conductions microscopiques, soit de leurs inverses.

3.3.3. Homogénéisation périodique

Présentation générale du problème

Dans le cas de matériaux périodiques le v.e.r. se réduit à la cellule de base du réseau périodique. Les champs microscopiques de déplacement ou de température, de déformation ou de gradient, et enfin de contrainte ou de flux thermique sont des champs périodiques. Si Y est la cellule de base, il est dans les habitudes de qualifier ces champs d' Y -périodiques.

Le problème à résoudre sur Y se pose de manière classique sauf en ce qui concerne les conditions aux limites. Il faut trouver un moyen d'imposer une valeur macroscopique, que ce soit de déformation, de contrainte, de gradient ou de flux, et en même temps d'assurer que les champs obtenus seront bien Y -périodiques. On utilise alors une variante des conditions aux limites de type homogène, que nous présentons ici pour un problème d'élasticité à déformation macroscopique E imposée.

Soit u le champ microscopique solution du problème posé sur Y , et à E imposée. Le champ u , ainsi que le champ de déformation associé $\varepsilon(u)$ sont Y -périodiques, et on sait par (45), que E est la moyenne spatiale de $\varepsilon(u)$.

On peut toujours décomposer $\varepsilon(u)$ en la somme de sa moyenne et d'un terme de fluctuations $\varepsilon(v)$ par :

$$\varepsilon(u) = E + \varepsilon(v) \tag{66}$$

Or, le champ $\varepsilon(v)$ est Y -périodique et l'équation (45) nous montre qu'il est de moyenne nulle sur Y . On en déduit que v est aussi un champ Y -périodique.

Par ailleurs, la loi de comportement locale s'écrit avec (66) :

$$\sigma = c(E + \varepsilon(v))$$

et l'équation d'équilibre quasi-statique du champ de contrainte (en l'absence de forces volumiques, et en négligeant bien sûr les termes d'accélération) nous donne :

$$\operatorname{div}(c\varepsilon(v)) = -\operatorname{div}(cE) \tag{67}$$

On se ramène donc à un problème annexe consistant à trouver le champ de déplacement v Y -périodique, vérifiant (67). Les conditions aux limites de ce problème sont des conditions de périodicité des champs de déplacement aux bords de Y , et d'anti- Y -périodicité pour les vecteurs contrainte.

Une fois le champ v déterminé, le champ u se construit par :

$$u = E.x + v \tag{68}$$

et se trouve déterminé à un champ de déplacement rigide près.

La méthode la plus utilisée qui prolonge cette formulation du problème est une résolution par éléments finis.

Homogénéisation périodique par éléments finis.

Cette méthode donne des résultats précis, autant en termes de caractéristiques macroscopiques, qu'en termes d'évaluation des champs microscopiques, pour peu que la cellule de base ne soit pas trop compliquée à décrire, et donc à mailler.

La plus grande partie de la méthode, à savoir celle qui régit la discrétisation spatiale et temporelle du problème est classique et nous renvoyons le lecteur aux ouvrages et aux cours de base dans ce domaine ou à des publications plus spécifiques aux matériaux hétérogènes [SUQ 82, SUQ 85, PEY 90].

La partie spécifique à l'homogénéisation réside dans la prise en compte des conditions aux limites de type périodique. Plusieurs stratégies numériques existent, qui ne présentent pas de difficultés majeures, mais dont l'exposé pourrait apparaître un peu technique. Brièvement donc, il s'agit d'imposer des conditions égalisant des degrés de liberté de nœuds appartenant à des faces en vis-à-vis (figure 4) que l'on appelle nœuds homologues.

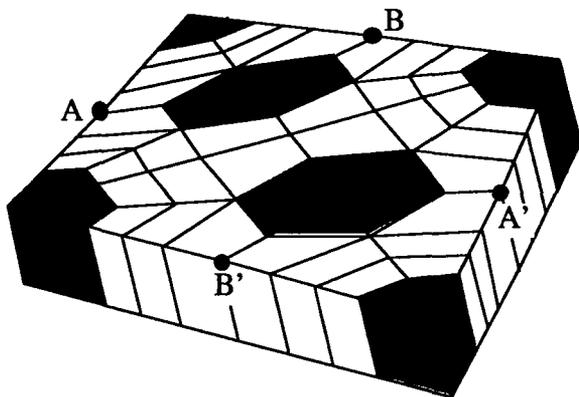


Figure 4. Maillage 3D d'une cellule de base. Cas d'un composite

- La méthode la plus simple à mettre en œuvre est une méthode d'élimination de degrés de liberté. On ne garde alors qu'un degré de liberté pour chaque couple de nœuds homologues. L'inconvénient majeur de cette méthode est qu'elle détruit la nature bande de la matrice éléments finis et impose un stockage spécifique de ses composantes (ligne de ciel ou morse). Le temps de calcul en sera augmenté dans des proportions non négligeables. Par contre, cette méthode a un gros avantage au sens où elle ne modifie pas la structure numérique classique de la méthode d'homogénéisation, et s'implante donc aisément.

- Deux autres méthodes peuvent être employées, mais qui sont d'une mise en œuvre numérique plus délicate. L'une est en fait une méthode de pénalisation et

l'autre est basée sur l'utilisation d'un multiplicateur et d'un lagrangien. Ces deux méthodes nécessitent une refonte de l'architecture numérique du problème, mais s'avèrent performantes une fois implantées.

3.3.4. *Autres techniques d'homogénéisation*

- Une autre famille de méthodes est celle basée sur les travaux d'Eshelby [ESH 57, HIL 65, MOR 73, MUR 82]. À notre connaissance, et à cette date, ces méthodes sont appliquées essentiellement pour des problèmes de mécanique de milieux hétérogènes, l'aspect thermique restant peu utilisé et peu développé.

Le point clé de toutes ces techniques est, à partir du problème posé sur le v.e.r., de savoir se ramener à une série de problèmes dits de l'inclusion, que l'on sait traiter grâce précisément aux résultats d'Eshelby.

Ces méthodes d'homogénéisation en élasticité, sont basées sur l'utilisation des tenseurs de Green en milieu élastique infini. On citera notamment le schéma auto-cohérent et la méthode de Mori-Tanaka, développés principalement dans les années 1960-1970, qui ont connu, du fait de la montée en puissance des capacités des ordinateurs et de l'apparition de logiciels de calcul formel, un certain succès depuis une dizaine d'années. Concernant la thermique, les fonctions de Green existent aussi et sont d'ailleurs souvent utilisées pour la résolution de problème de diffusion de la chaleur en milieu homogène et dans des structures à géométrie particulière (plaque semi-infinie) [CAR 59, MUR 82]. Dans ce cas, la fonction de Green donne la température en un point x et à un instant t , lorsqu'il existe, au point x' et à l'instant τ , un "point source instantané" d'amplitude unitaire. Par contre, et encore une fois à notre connaissance, aucun prolongement n'a été effectué pour l'étude de milieux hétérogènes. C'est sûrement une voie intéressante à explorer, au vu de la similitude des problèmes élastique et thermique.

- Il existe en fait beaucoup d'autres techniques d'homogénéisation qui, pour la plupart d'entre elles, sont des restrictions des techniques évoquées ci-dessus dans le cas où des particularités géométriques du matériau autorisent certaines hypothèses simplificatrices. Pour des géométries particulièrement simples, on peut même conduire les calculs analytiques assez loin, voir jusqu'au bout. Ainsi, pour des composites à renforts sphériques ou cylindriques, pour des milieux particuliers ou pour des matériaux stratifiés, on trouvera dans la littérature des méthodes variées quant à leur précision, leur rapidité et leur facilité de mise en œuvre [CHR 79, FRA 91, GAY 89, HAS 83, MEC 93].

- Enfin, et pour clore ce paragraphe, il faut évoquer tous les développements théoriques actuels autour de l'homogénéisation, qui font souvent appel à des outils mathématiques complexes, mais qui, une fois "décodés", fournissent des garde-fous intéressants pour l'utilisateur de passages micro-macro. On pourra ici citer notamment tous les travaux basés sur l'utilisation de principes variationnels débouchant sur des bornes du comportement macroscopique, [HAS 62, SUQ 96], ceci pour des comportements microscopiques complexes et non linéaires. D'autres études, [SUQ 85], ont par exemple montré qu'un mélange de matériaux

viscoélastiques de type Maxwell, n'était pas équivalent au niveau macroscopique à un matériau viscoélastique de type Maxwell. Enfin, des techniques plus originales sont en train de se développer, comme l'homogénéisation stochastique, ou l'homogénéisation par décomposition en série de fonctions (Fourier, ondelettes,...) [DUM 96, SUQ 94].

4. Applications

Dans cette partie sont présentées quatre applications qui concernent toutes des problèmes thermomécaniques couplés. L'intégration de ces couplages dans un code de calcul par éléments finis et les méthodes numériques spécifiques utilisées sont abordées. Les deux premiers exemples sont exclusivement macroscopiques et concernent les matériaux thermosensibles comme les polymères puis les alliages à mémoire de forme. Dans ces deux cas, la prise en compte des couplages thermomécaniques permet de modéliser certains comportements de manière naturelle et de plus, cohérente avec les expérimentations disponibles. Les deux dernières applications sont des approches micro-macro de problèmes couplés. La modélisation du changement de phase solide-solide dans un alliage à mémoire de forme, et ceci à l'échelle du polycristal, permet de mieux comprendre les évolutions thermomécaniques macroscopiques de cet alliage. Enfin, la prise en compte de l'évolution de la température dans un composite fibres-matrice, et ceci à l'échelle des fibres, permet de prévoir avec précision l'apparition et l'évolution des contraintes d'origine thermique dans le matériau composite.

4.1. Modélisation macroscopique de la localisation de la déformation dans des matériaux thermosensibles

Dans cette étude, nous nous intéressons au phénomène de la localisation de la déformation en nous fondant sur des expériences réalisées sur des matériaux polymères. Beaucoup de travaux existent à l'heure actuelle concernant cet axe de recherche, travaux basés sur une analyse théorique soit débouchant sur les concepts de perte d'unicité de solution et de bifurcation, soit utilisant des méthodes de perturbation. Très brièvement, ces travaux s'intéressent aux propriétés de l'opérateur d'élasticité (perte d'ellipticité) et en déduisent des directions correspondant à des modes propres de déformation sous un chargement donné. Notre analyse du problème consiste à évaluer dans quelle mesure les couplages thermomécaniques, associés à une sensibilité à la température des matériaux polymères, peuvent provoquer le phénomène de localisation de la déformation (initiation et propagation des bandes). Les paragraphes suivants présentent comment ces couplages sont tout d'abord mis en évidence au travers d'essais expérimentaux, puis sont intégrés dans une loi de comportement thermoviscoélastique à coefficient dépendant de la température.

4.1.1. Présentation des essais expérimentaux effectués

Des essais de compression ont été effectués sur une plaque de PVC trouée en son centre (plaque de 5 cm x 3,2 cm, et trou de 5 mm), et observés à l'aide d'un dispositif infrarouge permettant d'enregistrer, au cours de l'essai, des cartes de température de surface.

Au cours de l'essai, des bandes, dans lesquelles une augmentation significative de la température est notée, naissent au bord du trou, puis se propagent dans des directions voisines de 45°. Sur le plan mécanique, ces bandes se trouvent également correspondre à des régions qui sont le siège d'importantes déformations (voir figure 5).

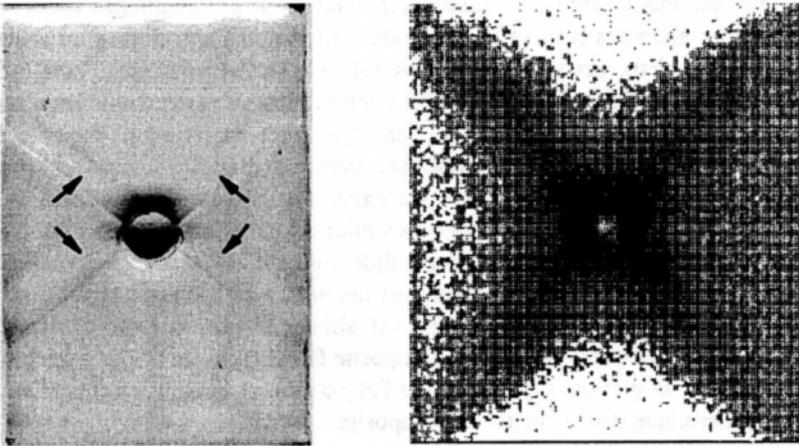


Figure 5. *Éprouvette déformée et image thermique (zoom autour du trou) en cours d'essai (la différence de température entre zones noires et zones blanches est d'environ 4°C).*

L'analyse expérimentale de l'apparition des bandes ainsi que de leur propagation permet de donner une certaine validité à ce que les spécialistes des polymères nomment cycle autocatalytique ou autoéchauffement [MEC 95] : les concentrations de contraintes et donc de déformation qui apparaissent naturellement au début de l'essai au bord du trou sont responsables, par les couplages thermomécaniques, d'un échauffement localisé. Cet échauffement peut altérer les propriétés mécaniques du matériau, provoquant un adoucissement local qui à son tour favorise l'écoulement du matériau. Le cycle autocatalytique est alors amorcé.

4.1.2. Intégration dans les lois de comportement. [MEI 96]

Pour tenter d'intégrer ce phénomène aux lois de comportement du matériau, il convient de traduire correctement deux effets : les couplages thermomécaniques et

la dépendance des caractéristiques mécaniques du matériau en fonction de la température.

Pour cette étude un matériau viscoélastique de type Kelvin-Voigt a été choisi, pour lequel le tenseur de contrainte se décompose en deux parties, une réversible, l'autre irréversible suivant :

$$\sigma = \sigma^r + \sigma^{ir} \text{ avec } \sigma^r = \rho \frac{\partial \psi}{\partial \varepsilon} \text{ et } \sigma^{ir} = \frac{\partial \varphi}{\partial \dot{\varepsilon}} \quad (69)$$

équation où $\psi(\varepsilon, T)$ et $\varphi(\dot{\varepsilon})$ représentent respectivement l'énergie libre de Helmholtz (15) et le potentiel de dissipation (40).

Un choix classique pour ψ et φ [FRA 84], associé à la démarche présentée dans les premières parties, permet d'obtenir le système d'équations couplées traduisant le comportement du matériau.

$$\begin{cases} \sigma_{ij,j} = \rho \ddot{u}_i \\ \sigma_{ij} = a_{ijkl}(\varepsilon_{kl} - \alpha_{kl}\theta) + b_{ijkl}\dot{\varepsilon}_{kl} \\ \rho C_\alpha \dot{\theta} = (k_{ij}\theta_{,j})_{,i} - T_{ref} a_{ijkl} \alpha_{kl} \dot{\varepsilon}_{ij} + b_{ijkl} \dot{\varepsilon}_{ij} \dot{\varepsilon}_{kl} \end{cases} \quad (70)$$

Le tenseur a est un tenseur de rigidité élastique classiquement déduit d'un module d'Young E et d'un coefficient de Poisson ν pour un matériau isotrope. Le tenseur b peut être qualifié de rigidité visqueuse et se construit de manière analogue au tenseur a , ceci à partir d'un coefficient de rigidité visqueuse E^v et d'un coefficient de Poisson ν^v .

En ce qui concerne la dépendance en température, seuls les tenseurs de rigidité a et de rigidité "visqueuse" b sont affectés.

Ceci implique notamment, d'après (19), que l'expression de la chaleur spécifique C_α est fonction des dérivées première et seconde de a . Ces nouveaux termes introduisent des non-linéarités sévères, qui nécessitent une approche numérique un peu différente, et nous avons en fait négligé ces termes dans le système (70).

4.1.3. Analyse numérique du problème

La méthode numérique adoptée propose une discrétisation en temps par schéma implicite et une discrétisation spatiale par éléments finis utilisant des fonctions affines par morceaux. La discrétisation spatiale repose sur la formulation variationnelle des équations couplées de la dynamique et de la chaleur. Les inconnues du problème sont les déplacements u , la température θ et leur dérivée par rapport au temps \dot{u} et $\dot{\theta}$ en chaque nœud du maillage.

La mise en œuvre de la méthode d'éléments finis est somme toute classique. Si on appelle x^k le vecteur rassemblant toutes les inconnues nodales pour le pas de temps k , soit :

$$x^k = \left[u_1^1, u_1^2, \theta_1, \dots, \underbrace{u_n^1, u_n^2, \theta_n, \dots}_{n \text{ \textcircled{e}l\text{e}m\text{e}n\text{t}s}} \right]$$

on aboutit à la formation d'un système non linéaire donnant le vecteur x^{k+1} par :

$$Ax^{k+1} + {}^t x^{k+1} D_1 x^{k+1} = S(x^k) + (\text{forces surfaciques et flux}) \tag{71}$$

Il est important de noter qu'en raison du couplage thermoélastique, la matrice A est une matrice non symétrique qui nécessite un stockage particulier (stockage ligne de ciel ici). À chaque pas de temps, la non-linéarité est traitée par une méthode de point fixe. La résolution proprement dite de ce système se fait, à chaque itération en temps, par une méthode de pivot de Gauss.

4.1.4. Simulations numériques

Les caractéristiques thermoviscoélastiques retenues sont présentées dans le tableau ci-dessous. Elles correspondent au meilleur calage que l'on puisse faire entre la matériau étudié et le modèle de Kelvin-Voigt.

E [Gpa] à 20°C	2	E ^v [10 ³ Gpa.s] à 20°C	50
α [°C ⁻¹]	6.10 ⁻³	ν	0.35
ν ^v	0.35	ρ [kg.m ⁻³]	1450
k [W.m ⁻² .°C ⁻¹]	0.01	Ca [J.kg ⁻¹ .°C ⁻¹]	148

Les simulations numériques ont été effectuées sur un quart d'éprouvette trouée. Le chargement est ici un déplacement vertical imposé u(t) en tête d'éprouvette :

$$u(t) = -4.10^{-6}.t$$

et les conditions aux limites sont de type mixte en température, caractérisées par un coefficient d'échange h et par rapport à une température extérieure T^{ext} :

$$k \frac{\partial T}{\partial x} = h(T^{ext} - T)$$

Ici nous prenons h = 25 W.m⁻².°C⁻¹ et T^{ext} = 30°C constante.

La dépendance en température de E et de E^v est tracée figure 7. Elle traduit une chute brutale de la rigidité du matériau autour d'une température de transition, ceci sur une bande en température de 10°C, comme cela est classique dans les matériaux polymères.

Sur le plan numérique, la prise en compte de cette dépendance des coefficients alourdit quelque peu la gestion informatique de la simulation. En effet, la variable thermique utilisée dans le calcul est l'écart de température par rapport à une température de référence. L'équation de la chaleur, telle que nous l'avons écrite, est valable pour des petites évolutions en température autour de cette température de référence. Des évolutions plus conséquentes, telles que l'on souhaite en obtenir,

nécessitent donc une réactualisation non seulement des modules de rigidité, mais aussi de la température de référence, ceci pour chaque élément du maillage éléments finis.



Figure 6. Maillage du quart de l'éprouvette

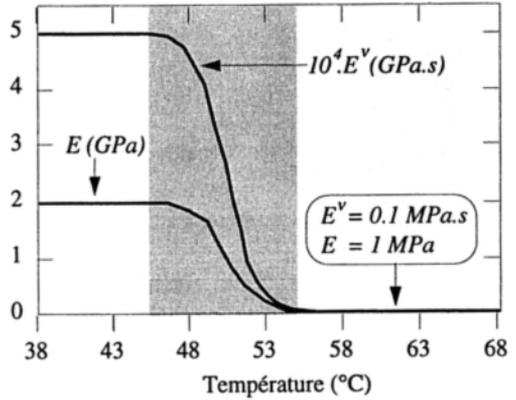


Figure 7. Dépendance en température des modules de rigidité

4.1.5. Résultats des simulations numériques

Étude initiale

Le premier résultat intéressant est que la prise en considération des couplages thermomécaniques et de la dépendance en température des modules de rigidité permet de générer, puis de propager des zones de fortes déformations. On retrouve également dans ces zones des élévations de température comparables à celles observées dans les essais (cf. figure 8). Les formes et les directions des bandes de déformation sont elles-aussi respectées (cf. figure 9).

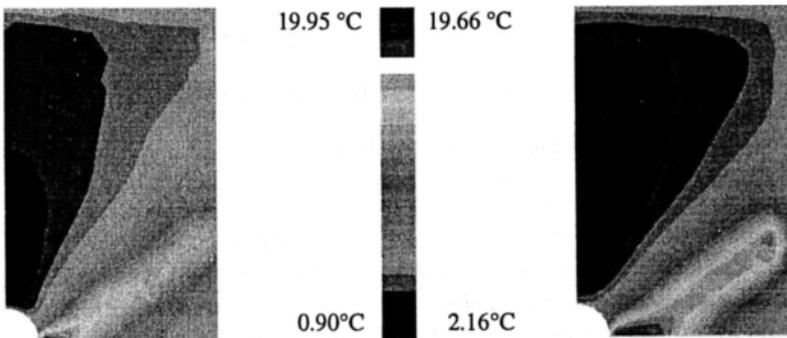


Figure 8. Cartes de température à 5 s et à 30 s.

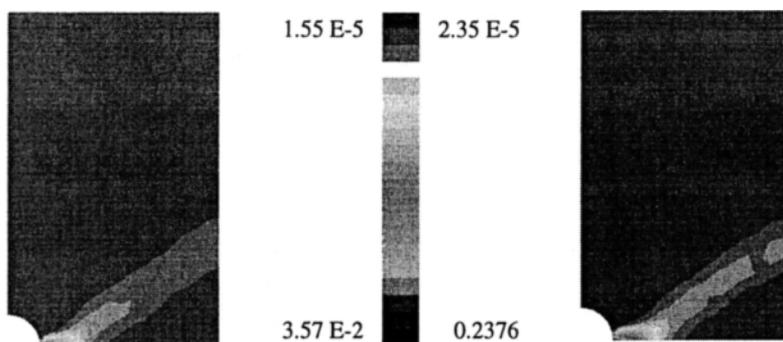


Figure 9. Cartes de déformation verticale à 5 s et à 30 s.

L'évolution des bandes au cours de l'essai numérique traduit bien le phénomène d'autoéchauffement, tel que nous l'avons décrit précédemment. Les concentrations de champs élastiques au bord du trou (compression maximum au pôle Est et cisaillement maximum à 45°), associées aux termes de couplages thermomécaniques conduisent à un échauffement local du matériau, puis à son adoucissement. Dans le cas présenté figure 9, les bandes s'initient au pôle Est du trou. La perte de rigidité qui en résulte autorise une déformation locale plus importante, qui, à son tour, accroît les mécanismes de dissipation. Lorsque l'échauffement correspond à la largeur de la bande de transition (figure 8), les modules de rigidité sont faibles et entraînent une diminution du phénomène dissipatif, qui deviendra négligeable sur le plan thermique, au-delà de cette bande de transition. De plus, la faible conductivité thermique du matériau considéré entre pour beaucoup dans la localisation de la température et, par voie de conséquence, de la déformation.

Influence de la forme donnée à la dissipation

La forme donnée au terme dissipatif dans l'équation de la chaleur dépend du tenseur de rigidité visqueuse b .

On a jusqu'ici, pour une approximation 2D du problème :

$$d_1 = b_{ij} \dot{\epsilon}_i \dot{\epsilon}_j \text{ pour } (i, j) = 1, 2, 6 \text{ avec } \dot{\epsilon}_1 = \dot{\epsilon}_{11}, \dot{\epsilon}_2 = \dot{\epsilon}_{22}, \dot{\epsilon}_6 = 2\dot{\epsilon}_{12}, \quad (72)$$

En choisissant certains termes du tenseur b nuls, on peut mettre d_1 sous la forme :

$$d_1 = \underbrace{\omega b_{11} (\dot{\epsilon}_1^2 + \dot{\epsilon}_2^2)}_{\text{sphérique}} + \underbrace{(1 - \omega) b_{66} \dot{\epsilon}_6^2}_{\text{cisaillement}} \text{ pour } \omega \in [0, 1] \quad (73)$$

Cette nouvelle expression de d_1 permet, par le choix de ω , de privilégier l'effet dissipatif dû au cisaillement ou celui créé par la pression hydrostatique. On arrive alors en ajustant le paramètre ω , à obtenir des bandes qui s'initient entre le pôle Est et le point à 45° , puis qui prennent différentes orientations quant à la propagation, comprises entre 30 et 70° (voir figures 10 et 11). Pour l'expérience décrite plus haut,

la valeur de ω qui donne les meilleures simulations est de 0.075, ce qui dénote une grande sensibilité de la dissipation au cisaillement.

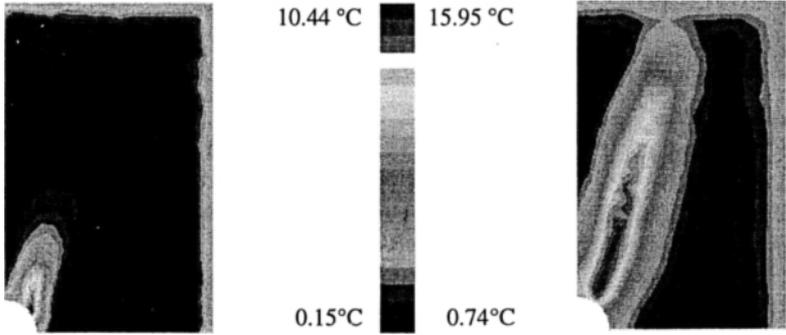


Figure 10. Cartes de température à 5 s et à 30 s pour une valeur de ω de 0

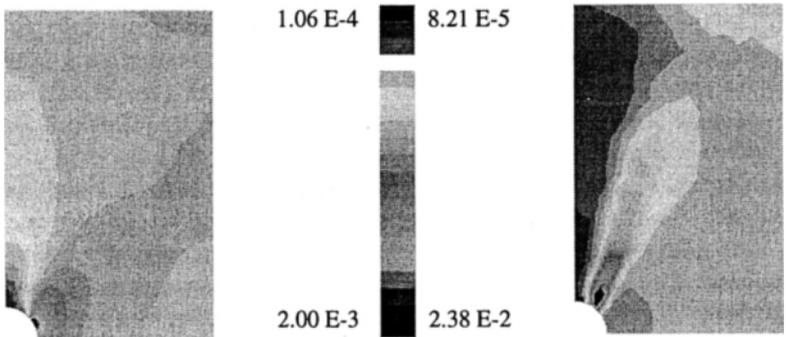


Figure 11. Cartes de déformation verticale à 5 s et à 30 s pour $\omega = 0$.

Approche par homogénéisation du problème

L'étude présentée ici est purement macroscopique. Le lien avec le niveau microscopique du matériau est toutefois sous-jacent, car les élévations de température mesurées dans une bande de quelques millimètres de large sont certes significatives, mais sûrement à considérer comme des moyennes de phénomènes intervenant à une plus petite échelle, et d'une amplitude beaucoup plus grande. Ceci paraît peut être plus évident encore pour des matériaux métalliques où les phénomènes conduisant à une localisation macroscopique se situent à l'échelle des joints de grain. L'analyse expérimentale des phénomènes thermiques et énergétiques à l'échelle macroscopique permet déjà d'obtenir des renseignements complémentaires de l'analyse mécanique traditionnelle. À titre d'exemple, on sait prévoir, par l'analyse des cartes de température et d'énergie, l'apparition d'une striction sur une éprouvette métallique, avant que les critères mécaniques traditionnels n'aient été atteints.

On imagine alors tout l'intérêt qu'il y aurait, pour ce thème de la localisation de la déformation, à savoir combiner une approche thermomécanique couplée et une approche multiéchelle capable de décrire les phénomènes physiques en jeu.

4.2. Modélisation macroscopique des transformations martensitiques dans les alliages à mémoire de forme

Comme il a déjà été dit plus haut, les alliages à mémoire de forme (AMF) ont un comportement *pseudo (ou super) élastique*. Les déformations réversibles importantes (plusieurs pour cent) produites sous l'effet d'un "petit" chargement thermique ou mécanique, sont attribuées à la transformation de phase martensitique (passage d'une phase austénite à une ou plusieurs phases de martensite).

Des expériences [LÖB 95] réalisées avec un dispositif thermomécanique (machine d'essais mécaniques équipée d'une caméra infra-rouge), ont permis de montrer le rôle fondamental joué par les variations de température induites par le processus de déformation. Ces variations sont essentiellement dues à la chaleur latente de changement de phase et une analyse détaillée des bilans d'énergie correspondants montre que l'énergie associée à la dissipation intrinsèque reste très petite devant la chaleur latente de changement de phase.

En se basant sur ces résultats, et en s'inscrivant dans le cadre thermodynamique proposé plus haut, un modèle de comportement a été établi en supposant une dissipation intrinsèque nulle et en considérant un processus de déformation anisotherme. Ce modèle [PEY 97], brièvement décrit dans la suite, prend en considération les couplages thermomécaniques et utilise deux variantes de martensite auto-accommodantes.

4.2.1. Les équations du modèle

Les variables d'état choisies sont le tenseur de déformation ε , la température T et les deux proportions de martensite formées ξ_1 et ξ_2 .

La déformation ε peut alors se décomposer en trois parties correspondant aux effets élastiques, de dilatation thermique et de changement de phase, suivant :

$$\varepsilon = \varepsilon^{el} + \alpha\theta Id + \xi_v \beta^v \quad (74)$$

où β^v représente la déformation associée au changement de phase total de la variante v . (L'exposant v dans le produit $\xi\beta$ doit être sommé sur 1 et 2)

Conformément à (28) et à (37) l'énergie libre considérée comprend une part thermoélastique classique Ψ_{the} et une partie complémentaire Ψ_a liée aux mécanismes de changement de phase :

$$\rho\Psi_{the} = \frac{1}{2} \left[a (\varepsilon - \alpha\theta - \xi_v \beta_v) (\varepsilon - \alpha\theta - \xi_v \beta_v) - (C + a\alpha\alpha) \theta^2 \right] \quad (75)$$

$$\rho\psi_a = D \left[(A - M)(\xi_1^2 + \xi_2^2) + (T - A)(\xi_1 + \xi_2) \right] + I_v(\xi_1, \xi_2) \quad (76)$$

L'utilisation d'une fonction indicatrice (cf. (37)) dans l'expression de l'énergie libre permet de tenir compte des limitations physiques naturelles sur les valeurs des proportions.

Pour satisfaire l'hypothèse d'une dissipation intrinsèque nulle, le potentiel de dissipation est choisi identiquement nul. Ceci permet en outre d'obtenir des relations supplémentaires liant le tenseur des contraintes σ à la température T . On préfère généralement exprimer ces relations entre une nouvelle variable Z , ($Z = (\sigma : \beta) / D$), qui mesure "l'intensité" du tenseur des contraintes et θ la variation de température autour d'une température de référence.

On obtient en fait des expressions définissant le domaine de transition de la transformation (figure 12). A chaque valeur de Z et de θ correspond un unique couple (ξ_1, ξ_2) .

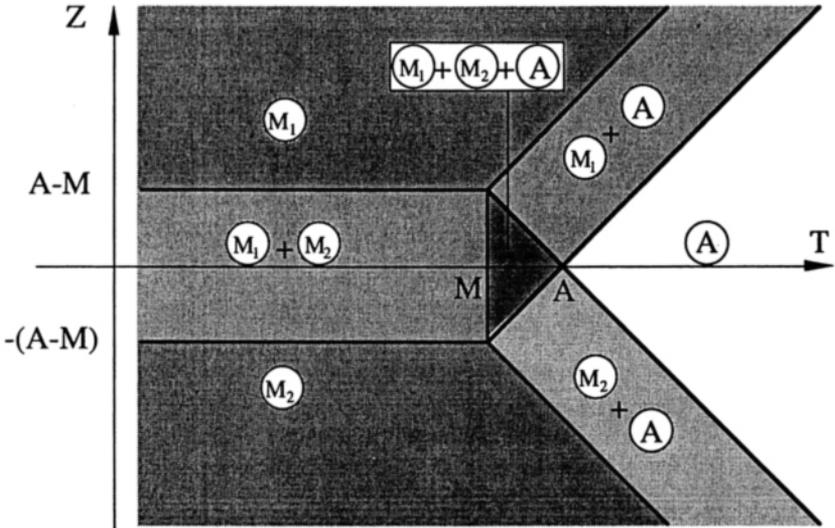


Figure 12. *Domaine de transition dans le plan (Z,T)*

De plus, pour traduire l'autoaccommodation des deux variantes et le caractère supposé isovolumique de la transformation, nous choisissons :

$$\text{Tr}(\beta^v) = 0 \quad \text{et} \quad \beta_{ij}^1 + \beta_{ij}^2 = 0, \quad \text{et notons} \quad \beta = \beta_1 + \beta_2$$

Finalement les équations retenues pour le comportement super-élastique des AMF sont les suivantes :

$$\sigma_{ij} = a_{ijkl} (\varepsilon_{kl} - \alpha_{kl} \theta - (\xi_1 - \xi_2) \beta_{kl}) \quad (78)$$

$$\frac{\rho C_c}{T_0} \dot{\theta} - \frac{\lambda}{T_0} \Delta \theta = -a_{ijkl} \alpha_{kl} \dot{\epsilon}_{ij} + \frac{\rho L}{T_0} (\dot{\xi}_1 + \dot{\xi}_2) \quad (79)$$

Avec $L = \frac{T_0}{\rho} D$ chaleur latente de changement de phase.

4.2.2. A propos de la méthode numérique

Comme précédemment, la résolution du problème repose sur une discrétisation spatiale par éléments finis (triangles à 3 nœuds et fonctions d'interpolation linéaires). Pour un problème bi-dimensionnel, chaque nœud possède trois degrés de liberté, deux pour le déplacement et un pour la température.

La discrétisation en temps utilise un schéma implicite permettant, à chaque pas de temps d'obtenir le champ de déplacement u , le champ de température θ , le champ de contrainte σ , ainsi que les valeurs des proportions de martensite ξ_1 et ξ_2 .

Dans ce qui suit, nous décrivons succinctement l'algorithme de résolution.

Le pas de temps k débute avec les champs connus σ^k, u^k, θ^k et x_v^k .

Le système discrétisé, déduit des équations (78) et (79), se ramène à un système linéaire dont la solution $u^{k'}$ et $\theta^{k'}$ est fonction de u^k, θ^k, x_v^k ainsi que des conditions de chargement.

Une valeur de $\sigma^{k'}$ peut alors être évaluée à partir de $u^{k'}, \theta^{k'}$ et x_v^k avec (78).

Une nouvelle valeur $x_v^{k'}$ peut alors être calculée en fonction de $\theta^{k'}$ et $\sigma^{k'}$ dans le diagramme de transition (figure 12).

Ce processus est itéré pour obtenir des valeurs successives de $u^{k'}, \theta^{k'}$ et $x_v^{k'}$. Ceci est fait jusqu'à convergence, la convergence étant estimée sur les valeurs de $x_v^{k'}$.

A ce moment, les valeurs calculées sont $\sigma^{k+1}, u^{k+1}, \theta^{k+1}$ et x_v^{k+1} , le pas de temps $k+1$ pouvant débiter.

Rappelons enfin que le couplage thermoélastique introduit une non symétrie du problème qui impose ici aussi, un stockage type ligne de ciel.

4.2.3. Exemples de calcul

La prise en compte des couplages thermomécaniques dans la modélisation des alliages à mémoire de forme est intéressante à plusieurs titres. Tout d'abord, la

modélisation d'essais de laboratoire sur éprouvettes peut s'avérer très riche car les essais sont très souvent complexes à piloter et à dépouiller. De plus les mesures, qu'elles soient thermiques ou mécaniques, sont quasi-exclusivement des mesures réalisées en surface, et l'éventuelle hétérogénéité en volume des champs thermomécaniques peut fausser leur interprétation. Enfin, pour des structures réalisées en AMF, il paraît important de pouvoir disposer simultanément des effets mécaniques et thermiques. Ce sont tous ces aspects qui sont illustrés dans cette partie.

Calculs sur éprouvette de laboratoire

Il s'agit ici d'évaluer la validité des mesures expérimentales de surface (pour la température) ou moyennes (pour la contrainte et la déformation) par rapport à l'hétérogénéité des champs thermomécaniques réels. Pour ce faire, les caractéristiques thermomécaniques du matériau, ainsi que les conditions aux limites sur l'éprouvette ont été soigneusement calées par rapport aux conditions expérimentales. Concernant l'aspect thermique, la conduction par les mors de la machine de traction et les échanges convectifs avec l'extérieur, sont autant de perturbations possibles.

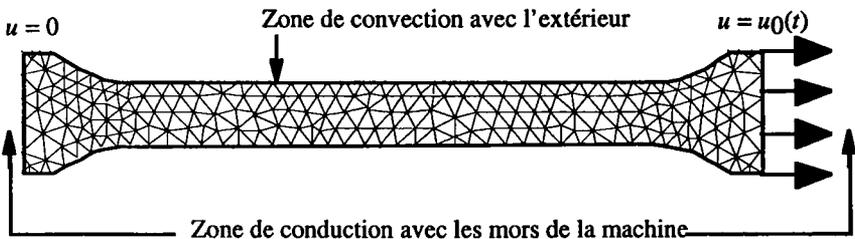


Figure 13. Maillage de l'éprouvette et conditions aux limites

Les figures 14 a, b et c montrent des isovaleurs des champs de température, de contrainte longitudinale et de proportion de martensite formée. Le caractère homogène des différents champs est rassurant pour l'expérimentateur qui doit forcément faire une hypothèse d'homogénéité dans la zone utile de l'éprouvette pour obtenir les champs thermomécaniques en fonction des données de la cellule d'effort, de l'extensomètre ou de la carte de température en surface.

On peut également espérer mieux analyser le comportement du matériau lorsqu'on dispose des résultats thermomécaniques complets. Par exemple, les résultats tracés dans le diagramme de transition (variables Z et θ) permettront d'évaluer la cinétique de changement de phase. Il apparaît alors nécessaire de ne plus regarder uniquement la réponse du matériau dans un diagramme (σ, ϵ) mais plutôt dans l'espace (σ, ϵ, T) .

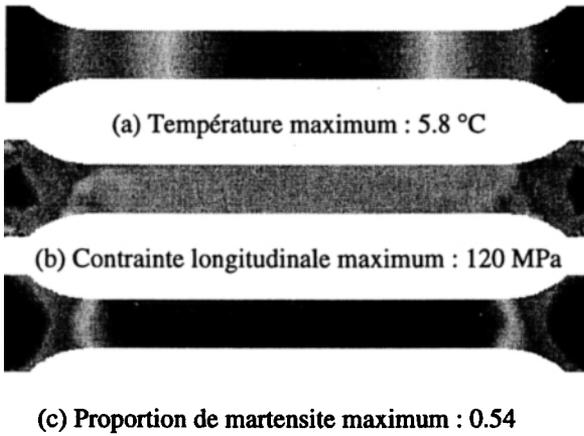


Figure 14. Isovaleurs en température (a), contrainte longitudinale (b) et proportion de martensite formée (c) en cours d'essai

Sur la figure 15 on peut aisément imaginer plusieurs trajets dans l'espace ayant même projection dans le diagramme (σ, ϵ) . Les différents essais correspondants se distingueront pourtant par des quantités d'énergie mises en jeu différentes. Pour chacun de ces essais, la projection du trajet sur le plan (σ, T) correspondra à l'évolution dans le domaine de transition.

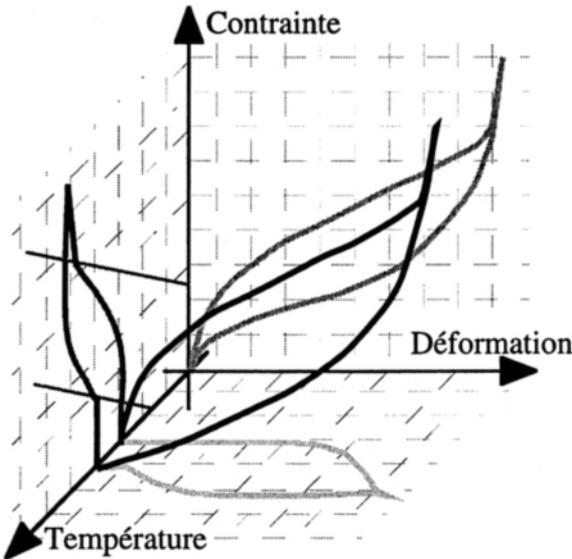


Figure 15. Évolution dans l'espace (σ, ϵ, T) et différentes projections

Calcul d'une structure en AMF

La structure proposée ici est un anneau auto-serrant. L'aptitude des AMF à se déformer fortement sous effet thermique est ici utilisée pour produire une contraction importante de l'anneau lors d'un réchauffement. La pression de serrage est importante car directement produite par une réaction élastique. La figure 16 présente le maillage initial et le maillage déformé après le réchauffement de la structure.

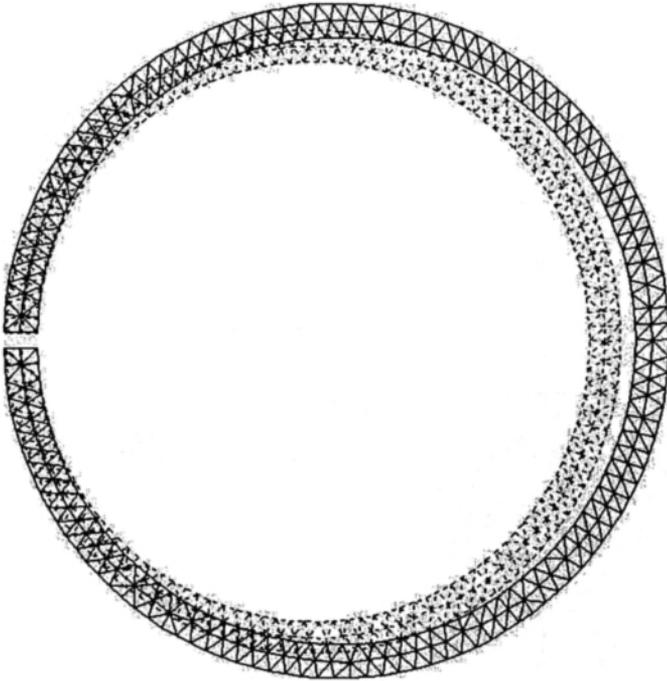


Figure 16. *Maillages de la structure avant et après déformation de contraction suite à un réchauffement (la déformée est amplifiée 5 fois)*

4.3. Approche multiéchelle des transformations martensitiques dans les alliages à mémoire de forme

Les alliages à mémoire de forme viennent d'être sommairement présentés par une loi de comportement macroscopique. Dès lors que l'on s'intéresse aux causes qui peuvent générer ce changement de phase solide-solide, et aux phénomènes qui accompagnent sa propagation, on est forcé de raisonner à une échelle proche de la cristallographie du matériau. A la base, l'apparition de martensite est liée à un

changement de réseau cristallin et ceci dans des zones localisées lorsqu'il s'agit de paillettes. Puis le phénomène se propage aux différents grains du polycristal, chacun d'entre eux réagissant en fonction de son orientation cristallographique. Tous ces phénomènes locaux se moyennent donc pour donner finalement le comportement macroscopique. Comme cela a été présenté en partie 3, il semble naturel de chercher à déduire ce comportement macroscopique à partir de l'étude de la transformation martensitique à une échelle microscopique. Dans l'étude présentée ici [MEI 97], le niveau microscopique est celui des grains du polycristal.

A ce niveau, il faut préciser que les développements théoriques en homogénéisation ne permettent pas de déboucher, pour ce type de comportement, sur des coefficients macroscopiques aussi simplement que pour le cas thermoélastique. La démarche proposée consiste alors à réaliser des essais numériques sur un échantillon de polycristal, et à regarder comment évoluent les variables macroscopiques.

Le volume élémentaire représentatif (v.e.r.) est donc ici un assemblage d'un certain nombre de grains, différenciés, dans un premier temps, par leur orientation cristallographique (figure 17). Chaque grain, dans son repère local, a donc une loi de comportement identique à celle présentée plus haut et va interagir avec les grains voisins.

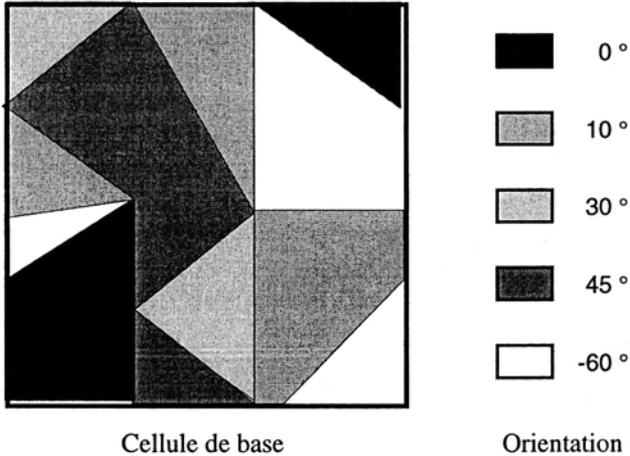


Figure 17. *V.e.r. du polycristal*

Lorsqu'on impose à ce v.e.r. une déformation macroscopique de traction, on peut suivre l'évolution des proportions de martensite formée dans chaque grain, (figure 18). Les grains dont l'orientation est la plus favorable se transforment bien sûr en premier.

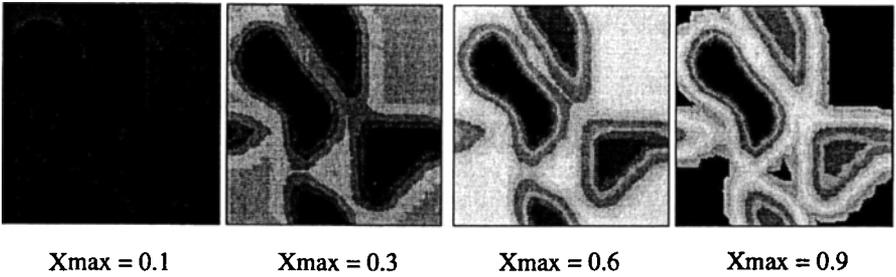


Figure 18. Isoleurs de proportions de martensite formée au cours de la traction (X_{max} représente la proportion de martensite maximum atteinte à chaque stade de l'essai)

4.4. Approche micro-macro des contraintes d'origine thermique dans les matériaux composites

Dans cette partie, nous nous intéressons aux contraintes d'origine thermique qui peuvent s'observer lors du refroidissement de matériaux composites, ceci tant au niveau macroscopique qu'au niveau microscopique. La connaissance de ces contraintes est primordiale pour comprendre et prévoir des phénomènes tels que la formation de microfissures et leur propagation, ou l'apparition d'endommagement sous cyclage thermique. Classiquement, ces contraintes sont estimées à partir des états initial et final. Connaissant la différence des coefficients de dilatation thermique des matériaux et l'amplitude du refroidissement, on obtient facilement une valeur de contrainte qualifiée de résiduelle. Une approche thermoélastique couplée permet de raffiner ce calcul, par la connaissance des champs microscopiques de température et de leur évolution.

Les applications motivant de telles études sont centrées sur la conception et l'utilisation de matériaux composites à matrice métallique ou céramique, qui, lors de leur élaboration, puis en cours d'utilisation, subissent de fortes variations de température. Les différences de propriétés thermoélastiques des matériaux constitutifs, notamment concernant la dilatation thermique et la rigidité, associées à ces évolutions en température, induisent d'importants états de contraintes aux interfaces fibre-matrice. Une connaissance détaillée de ces champs permet de prévoir les phénomènes de fissuration ou d'endommagement microscopique, puis macroscopique. D'un autre point de vue, on aboutit à une optimisation du matériau (choix des constituants, troisième corps,...) en vue de minimiser l'effet des contraintes d'origine thermique. Tous ces aspects sont présentés dans la suite, dans le cadre de la méthode d'homogénéisation périodique par éléments finis.

4.4.1. Présentation du problème

Le matériau retenu ici est un composite à matrice aluminium renforcée par des fibres de carbure de silicium, fibres supposées de grande longueur, toutes identiques, alignées dans une même direction, et enfin réparties de manière périodique dans l'espace. Le v.e.r. ou cellule de base Y (figure 19) est donc réduite à une fibre entourée de matrice et se traitera dans une approximation 2D. Les deux matériaux ont un comportement thermoélastique couplé. Leur loi de comportement a été décrite en (58).

La structure macroscopique \mathcal{S} que nous allons étudier est une plaque rectangulaire, qui sera soumise à des chargements thermomécaniques *a priori* très généraux (efforts et déplacements ainsi que température et flux imposés à la surface extérieure de \mathcal{S}), mais nous nous attacherons plus particulièrement au cas du refroidissement de la structure.

4.4.2. Passage micro->macro - Homogénéisation

La première étape de cette étude est l'obtention des caractéristiques du matériau homogène équivalent (cf. (59)). Pour cela, on résout trois problèmes sur le v.e.r. : P_E , P_G , et P_C (figure 19).

P_E est un problème purement élastique à déformation macroscopique E imposée (par l'intermédiaire de conditions aux limites homogènes en déplacement). Dans le cadre de l'élasticité plane, P_E représente un ensemble de trois problèmes purement mécaniques permettant de calculer, *via* leur solution u_E , l'expression des coefficients homogénéisés C et α .

P_G est un problème purement thermique à gradient de température macroscopique G imposé. Dans le cadre bidimensionnel, P_G représente deux problèmes purement thermiques permettant de calculer, *via* leur solution θ_G , l'expression des coefficients de conduction homogénéisés Λ .

P_C est un problème relatif au couplage thermoélastique pour lequel on impose une déformation macroscopique de dilatation thermique résultant d'une augmentation de température macroscopique de 1 degré. Sa solution est notée u_C .

Les caractéristiques du milieu homogène équivalent étant à présent déterminées par le passage micro->macro, nous nous ramenons à l'étude d'un problème P^0 de thermoélasticité couplée sur la structure fictive, notée S^0 , ayant un comportement homogène équivalent à la structure composite étudiée S^ω . Le problème P^0 est un problème classique de calcul de structure, en milieu homogène et dans un cadre thermomécanique couplé non stationnaire. Sa résolution fournit, au cours du temps, les valeurs macroscopiques de déformation E , température Θ , et de gradient thermique G , ceci en chaque point X macroscopique. Nous allons maintenant évoquer les passages macro->micro qui consistent à suivre l'évolution des champs à l'échelle microscopique "sous" un point macroscopique.

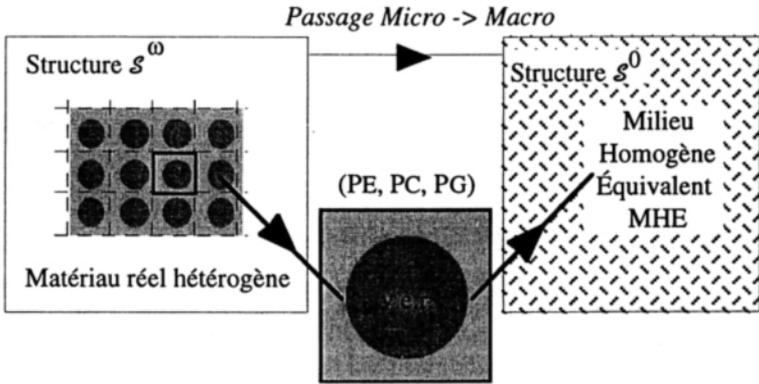


Figure 19. Schématisation de l'étape d'homogénéisation

4.4.3. Passage macro->micro - Localisation

On cherche ici à suivre simultanément en un ou plusieurs point X de la structure S^0 , (cf. figure 20), les évolutions macroscopiques et microscopiques des champs thermomécaniques. Les champs microscopiques en un point x sous X , "gommés" dans l'opération d'homogénéisation précédente, peuvent tout de même se retrouver.

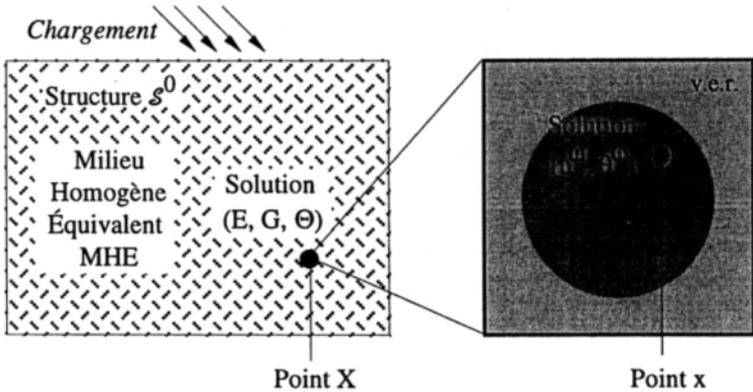


Figure 20. Schématisation de l'étape de localisation

La théorie de l'homogénéisation périodique [BRA 89] montre que la solution microscopique est en fait une combinaison linéaire des champs macroscopiques E , G , et Θ et des champs u_B , θ_G et u_C solutions des problèmes élémentaires P_E , P_G et P_C sous la forme :

$$\begin{cases} u^\omega = Eu_E + \Theta u_C + \tilde{u} \\ \theta^\omega = G\theta_G + \tilde{\theta} \end{cases} \quad (80)$$

Les champs \tilde{u} et $\tilde{\theta}$ sont des champs de correction pour des conditions initiales hétérogènes dans le problème P^0 .

4.4.4. *Quelques résultats des simulations numériques*

Les caractéristiques matérielles microscopiques des deux matériaux Aluminium et Carbure de Silicium sont rassemblées dans le tableau ci-dessous. On les supposera isotropes.

	Matrice Al	Fibre SiC
Dilatation thermique (α) [$^{\circ}\text{C}^{-1}$]	$2,400 \cdot 10^{-5}$	$4,700 \cdot 10^{-6}$
Module d'Young (E) [MPa]	$7,200 \cdot 10^4$	$4,700 \cdot 10^5$
Coefficient de Poisson (ν)	0.32	0.19
Masse volumique (ρ) [$\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$]	2700	3100
Conduct. thermique (λ) [$\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot ^{\circ}\text{C}^{-1}$]	115	138
Chaleur spécifique (C_p) [$\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot ^{\circ}\text{C}^{-1}$]	900	835

De plus, les fibres sont de section circulaire et ont une fraction volumique de 0.38. Le maillage de la cellule de base est représenté figure 21.

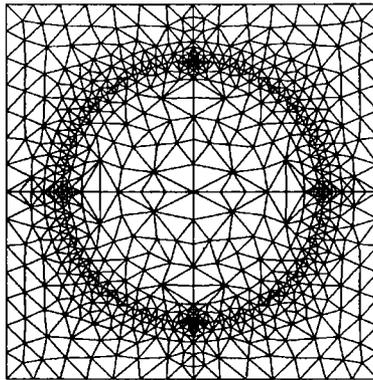


Figure 21. *Maillage de la cellule de base du composite fibre-matrice*

Le chargement imposé à la structure est ici un refroidissement de 10°C à partir d'une température T^{ref} supposée homogène dans toute la structure au début de l'essai. La vitesse de refroidissement sera un des paramètres de l'étude. Sur le plan mécanique, la structure est libre de se déformer.

Résultats d'homogénéisation

Du fait de la symétrie de la cellule de base et de l'isotropie des deux constituants, le matériau obtenu est macroscopiquement isotrope.

	m.h.e.		
Dilatation thermique (α) [$^{\circ}\text{C}^{-1}$]	1,77.10 ⁻⁵		
Matrice de rigidité (C) [MPa]	1,66.10 ⁵	6,19.10 ⁴	0
	6,19.10 ⁴	1,66.10 ⁵	0
	0	0	4,31.10 ⁴
Masse volumique (ρ) [kg.m^{-3}]	2850		
Conduct. thermique (λ) [$\text{W.m}^{-1}\text{C}^{-1}$]	123,3		
Chaleur spécifique (Cp) [$\text{J.kg}^{-1}\text{C}^{-1}$]	875		

Étude du refroidissement du matériau

- À l'échelle macroscopique tout d'abord, et bien que la structure soit libre de se déformer, certaines contraintes apparaissent, d'un niveau très faible (inférieur au dixième de Mpa). L'origine de ces contraintes est directement liée au temps de propagation de la chaleur et ce phénomène s'estompe au cours du temps pour disparaître complètement lorsque la température devient homogène dans toute la structure. Ces résultats sont classiques et les niveaux de contrainte développés ne justifient pas une analyse plus approfondie.

- À l'échelle microscopique cette fois, les niveaux de contrainte atteints sont beaucoup plus élevés.

Plusieurs phénomènes sont à noter :

- * Quel que soit le profil de refroidissement considéré, les niveaux de contraintes ne s'annulent plus même au bout d'un temps suffisamment long pour que la température soit homogène dans toute la cellule de base. On retrouve bien là la notion de contraintes résiduelles classique, l'état final ne dépendant pas du trajet en température suivi. Ces contraintes sont par ailleurs les mêmes quel que soit le point macroscopique sous lequel on se place.

- * Un autre phénomène apparaît dans le cas de profils de refroidissement rapides. L'évolution des contraintes n'est plus monotone entre une valeur nulle au départ et la valeur résiduelle à la fin, mais présente des *extrema* qui peuvent dépasser de 15 à 30 % la valeur résiduelle. Par ailleurs, ces *extrema* ne sont vraiment visibles que "sous" des points macroscopiques situés à une certaine distance du bord de la structure, et il est clair, cette fois, que leur existence est directement liée à la propagation de la chaleur. Ces valeurs sont intéressantes car classiquement, la conception de ce type de matériaux ne se fait, vis à vis du problème thermique, qu'à partir des valeurs de contraintes résiduelles. Une sous-évaluation de 30 % peut être dommageable pour le matériau, surtout lorsqu'il s'agit de contraintes de traction sur l'interface fibre-matrice, réputée zone fragile.

Influence d'un troisième corps

On considère ici une interphase (ou troisième corps) de faible épaisseur (0,25mm) intercalée entre la fibre et la matrice (figure 22).

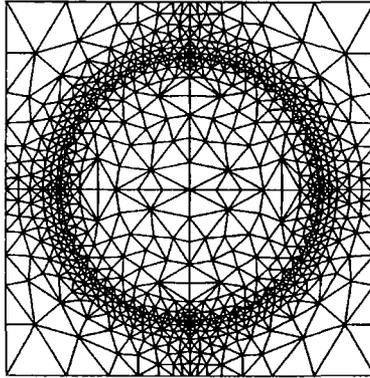


Figure 22. *Maillage de la cellule de base du composite fibre-interphase-matrice*

Les propriétés thermomécaniques de ce troisième corps peuvent être optimisées pour diminuer au mieux les niveaux de contraintes thermiques. Un compromis est à réaliser car ce troisième corps peut faire chuter les caractéristiques élastiques macroscopiques. Ce procédé d'enrobage est assez couramment utilisé dans les composites céramique-céramique pour jouer le rôle de barrière thermique.

Les simulations effectuées montrent qu'un troisième corps ayant un coefficient de dilatation thermique proche de celui de la fibre et une module d'Young proche de celui de la matrice, on peut diminuer d'un facteur deux les niveaux de contraintes atteints.

Endommagement de l'interface

Nous reprenons ici l'étude concernant le composite fibre-matrice. Connaissant la distribution d'effort à l'interface, on peut établir un critère d'endommagement simple basé sur un seuil en effort normal à l'interface. Lorsque l'effort normal en un point atteint cette valeur seuil, il y a décohésion. Sur un plan pratique, cette idée a été mise en œuvre dans la méthode de résolution par éléments finis en supposant que tous les nœuds de l'interface sont dédoublés dès le départ. La cohésion avant endommagement se traduit par une relation égalant les degrés de liberté en déplacement des deux nœuds homologues. Lorsqu'on endommage la liaison, cette condition est annulée et remplacée par des conditions de contact unilatéral. On peut alors modéliser des essais de cyclage thermique et (ou) mécanique, et observer ainsi l'évolution de l'endommagement de l'interface "sous" différents points macroscopiques.

On présente, figure 23, un état endommagé du matériau à l'échelle microscopique sous un chargement mécanique.

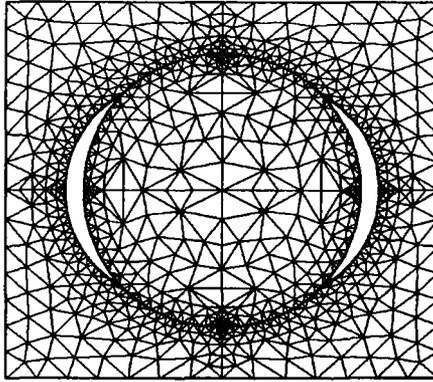


Figure 23. *Matériau micro-endommagé après décohésion d'une partie de l'interface*

Il n'y a alors aucune difficulté conceptuelle à refaire des passages micro->macro pour évaluer l'influence de l'endommagement microscopique au niveau macroscopique, et définir ainsi un endommagement macroscopique. Par contre, on a bien conscience ici de la taille des calculs à réaliser et donc de leur caractère improbable en l'état actuel (1997) des puissances des machines.

5. Perspectives

Le formalisme de la thermodynamique à variables internes représente pour le mécanicien des solides un cadre théorique cohérent et souple permettant de développer des lois de comportement capables de rendre compte des phénomènes mécaniques, thermiques et énergétiques liés aux processus de déformation. L'élargissement du domaine de validité de ces lois passe naturellement par une meilleure description des multiples phénomènes physiques et chimiques dont le matériau est le siège. Ceux-ci prennent généralement leur origine à une échelle petite par rapport à l'échelle d'utilisation du matériau. Le mécanicien peut alors utiliser des techniques de passage micro-macro pour quantifier à l'échelle macroscopique les effets de ces "micro" phénomènes. La première difficulté de la démarche, et non la moindre, est évidemment d'arriver à proposer une modélisation correcte des mécanismes physico-chimiques mis en jeu. Il doit être clair que celle-ci ne saurait être obtenue sans échange avec les autres communautés scientifiques concernées par les matériaux.

Une fois ce principe acquis, d'autres difficultés restent naturellement à vaincre. Tout d'abord, la nature des couplages entre variables, tout comme les effets de dépendance en température de certaines caractéristiques du matériau, entraînent inévitablement de fortes non-linéarités et des non-symétries. Les méthodes numériques classiques par éléments finis ne s'appliquent plus directement et doivent

être repensées. Par exemple, le traitement simultané de l'équation de la chaleur et des équations de comportement thermomécanique peut poser des problèmes de choix de pas de temps. Le pas "optimum" au sens de la thermique est directement lié au temps caractéristique de diffusion de la chaleur et dépend donc essentiellement du matériau alors que, sur le plan mécanique, le pas dépend plutôt du chargement. Dans certains problèmes, il peut donc sembler antinomique de rechercher un optimum global au problème couplé.

Enfin, il faut noter que les passages micro-macro pour des lois de comportement couplées demandent des temps de calcul qui pour l'instant peuvent apparaître déraisonnables. Là encore, il faut compter sur le développement des techniques et l'accession progressive à de nouveaux moyens de calculs comme ceux à architectures parallèles.

6. Bibliographie

- [ASH 89] ASHBEE K., Fiber reinforced composites, Technomic pub. co. inc., 1989.
- [BOC 76] BOCCARA N., *Les principes de la Thermodynamique Classique*, PUF, 1976.
- [BRA 89] BRAHIM-OTSMANE B., FRANCFORT G.A., "Homogenization in thermoelasticity", *Proceedings of Composite Materials and Random Media*, Leesburg, Virginia, dec. 7-10, 1988, ed. by R.V. KOHN, G.W. MILTON, SIAM, Philadelphia, 1989, pp 13-45.
- [CAL 85] CALLEN H., *Thermodynamics and an introduction to thermostatistics*, John Wiley & sons, 1985.
- [CAR 59] CARSLAW H.S., JAEGER J.C., *Conduction of heat in solids*, second edition, Oxford, 1959.
- [CHR 79] CHRISTENSEN R.M., *Mechanics of Composite Materials*, John Wiley & sons, 1979.
- [CHR 85] CHRYSOCHOOS A., Bilan Énergétique en Élastoplasticité Grandes Déformations, *J.M.T.A.*, Vol. 4, n° 5, 1985, p.589-614.
- [CHR 92a] CHRYSOCHOOS A., DUPRE J.C., An infrared setup for continuum thermomechanics, Quantitative Infra-Red Thermography, July 7-9, *ECP, Proceedings of the Eurotherm Seminar n° 27*, Ed. Euro. Thermique et Industrie, p.129-134, 1992.
- [CHR 92b] CHRYSOCHOOS A., BELMAHJOUB F., Thermographic Analysis of Thermo-mechanical Couplings, *Archives of Mechanics*, 44, 1992, pp.55-68.
- [CHR 95] CHRYSOCHOOS A., *Analyse du comportement thermomécanique des matériaux par thermographie infrarouge*, Photomécanique 95, Ed. Eyroles, 1995, p.1-9.
- [CHR 96] CHRYSOCHOOS A., PHAM H., MAISONNEUVE O., Energy balance of thermoelastic martensite transformation under stress, *Nuclear Engineering and Design*, 162, pp. 1-12, 1996.
- [CHR 96] CHRYSOCHOOS A., Vers une reformulation des transitions de phase du premier ordre, (accepté), *Revue Roumaine des Sciences Techniques, Mécanique Appliquée*, Académie Roumaine des Sciences, 1996.
- [DUM 96] DUMONT S., Ondelettes, homogénéisation périodique et élasticité, Thèse de Doctorat, Université Montpellier II, 1996.
- [ESH 57] ESHELBY J.D., The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion and related problems, *Proc. Roy. Soc.*, A241, 1957, pp. 376-396.

- [FRA 84] FRANCFORT G.A., Homogenization and fast oscillations in linear thermoelasticity, Numerical method for transient and coupled problems, Eds. R. LEWIS, E. HINTON, P. BETERS, B. SCHREFFER, Pineridge, Swansea, 1984, pp. 382-393.
- [FRA 91] FRANÇOIS D., PINEAU A., ZAOUÏ A., *Comportement mécanique des matériaux*, Vol. 1 et 2, Editions Hermès, 1991.
- [FRE 87] FREMOND M., Matériaux à mémoire de forme, C. R. Acad. Sci. Paris, II, n°7, 1987, pp. 239-245.
- [GAY 89] GAY D.: *Matériaux composites*, 2e édition, Editions Hermès, 1989.
- [GER 73] GERMAIN P., *Cours de Mécanique des Milieux Continus*, T1, théorie générale, Masson et Cie, 1973.
- [GER 83] GERMAIN P., NGUYEN Q.S., SUQUET P., Continuum thermodynamics, *Journal of Applied Mechanics*, Vol. 105, Ed. Transactions of the ASME, 1983
- [GER 86] GERMAIN P., *Mécanique*, Tomes 1 et 2, Ellipses, École Polytechnique, 1986.
- [HAL 75] Halphen B., NGUYEN Q.S., Sur les matériaux standards généralisés, *Journal de Mécanique*, Vol. 14, 1, 1975.
- [HAS 62] HASHIN Z., SHTRIKMAN S., A variationnal approach to the theory of the elastic behaviour of polycrystals, *J. Mech. Phys. Solids*, Vol. 10, 1962, pp. 343-352.
- [HAS 83] HASHIN Z., Analysis of composite materials : a survey, *J. of Appl. Mech.*, Vol. 50, 1983, pp. 481-505.
- [HIL 65] HILL R., A Self-Consistent mechanics of composite materials, *J. Mech. Phys. Solids*, Vol. 13, 1965, pp. 213-222.
- [JOU 93] JOU D., CASAS-VASQUEZ J., LEBON G., *Extended Thermodynamics*, Springer-Verlag, 1993.
- [LEM 85] LEMAITRE L., CHABOCHE J.-L., *Mécanique des Matériaux Solides*, Dunod, Paris, 1985.
- [LÖB 95] LÖBEL M., Caractérisation thermomécanique d'alliages à mémoire de forme de type NiTi et CuZnAl. Domaine de transition et cinétique de changement de phase, Thèse de l'Université Montpellier II, 1995.
- [LUB 90] LUBLINER J., *Plasticity Theory*, Macmillan Publishing Co., 1990.
- [MAU 92] MAUGIN G., *The thermomechanics of plasticity and fracture*, Cambridge University Press, 1992.
- [MEC 93] MECAMAT' 93, *Proceedings of International Seminar on Micromechanics of Materials*, Moret-sur-Loing, France, 6-9 juillet 1993, Collection de la Direction des Études et Recherches d'Électricité de France, Ed. Eyrolles, 1993.
- [MEC 95] École d'été MECAMAT-GFP, *Introduction à la mécanique des polymères*, Ed. C. G'SELL et J.M. HAUDIN, 1995.
- [MEI 96] MEISSONNIER F., PEYROUX R., CHRYSOCHOOS A., Finite element analysis of strain localization induced by thermomechanical couplings in a Kelvin-Voigt model, *ESDA' 96*, 1-4 juillet 1996, Montpellier, France.
- [MEI 97] MEISSONNIER F., Couplages thermomécaniques et Homogénéisation, Thèse de l'Université Montpellier II, 1996
- [MOR 73] MORI T., TANAKA K., Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions, *Acta Metallurgica*, 1973, Vol. 21, pp. 571-574.
- [MUR 82] MURAT T., *Micromechanics of defects in solids*, Martinus Nijhoff Publishers, La Hague, Boston, London, 1982.

- [MUS 93] MUSCHIK W., Non-equilibrium thermodynamics with applications to solids, CISM courses and lectures n° 336, Springer Verlag, 1993.
- [PEY 90] PEYROUX R., Caractéristiques thermoélastiques de matériaux composites à fibres courtes, Thèse de Doctorat, Université Montpellier II, 1990.
- [PEY 95] PEYROUX R., CHRYSOCHOOS A., LICHT C., LÖBEL M., Phenomenological constitutive equations for numerical simulations of SMA structures. Effects of thermomechanical couplings, *Mecamat 95*, International Seminar, May 16-19, France, Les éditions de Physique, 1995.
- [PEY 97] PEYROUX R., CHRYSOCHOOS A., LICHT C., LÖBEL M., Thermomechanical couplings and pseudoelasticity of shape memory alloys, *Int. J. of Eng. Sci.*, à paraître en 1997.
- [REU 29] REUSS A., Berechnung des Fließgrenze von Mischkristallen auf Grund der Plastizitätsbedingung für Einkristalle, *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik*, Vol. 9, 1929, pp. 49-58.
- [SID 82] SIDOROFF F., Les grandes Déformations, Greco 47 GDE, rapport n°51, 1982.
- [SUQ 82] SUQUET P., Plasticité et Homogénéisation, Thèse d'Etat, Université Pierre et Marie Curie, Paris, 1982.
- [SUQ 85] SUQUET P., in Homogenization techniques for composite media, Ed. E. SANCHEZ-PALENCIA ET A. ZAOUÏ, Berlin, Springer Verlag, 1985.
- [SUQ 94] SUQUET P., MOULINEC H., A fast numerical method for computing the linear and non linear mechanical properties of composites, *C. R. Acad. Sci. Paris*, vol. 318, 1994, pp. 1417-1423.
- [SUQ 96] SUQUET P. (Coord.), Continuum Micromechanics, Advanced School, CMSIM, Udine, 2-6 septembre 1996.
- [VOI 89] VOIGT W., Über die Beziehung zwischen den beiden Elastizitätskonstanten isotroper Körper, *Wied. Ann.*, 38, 1889, p. 573.