



HAL
open science

Comportement à la rupture et caractérisation mécanique des caoutchoucs cristallisants sous contrainte

Joachim Guilie

► **To cite this version:**

Joachim Guilie. Comportement à la rupture et caractérisation mécanique des caoutchoucs cristallisants sous contrainte. Mécanique des solides [physics.class-ph]. Ecole Polytechnique X, 2014. Français. NNT: . pastel-00978212

HAL Id: pastel-00978212

<https://pastel.hal.science/pastel-00978212v1>

Submitted on 13 Apr 2014

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

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

THÈSE

présentée pour obtenir le titre de DOCTEUR en
Mécanique des Solides

COMPORTEMENT À LA RUPTURE ET CARACTÉRISATION MÉCANIQUE DES CAOUTCHOUCS CRISTALLISANTS SOUS CONTRAINTÉ

Joachim Guilié

Soutenue publiquement le 31/03/14 devant un jury composé de :

<i>Rapporteur</i>	Patrick Massin, Mathias Brieu
<i>Examineur</i>	Marc Bonnet, Christian Miehe
<i>Directeur de thèse</i>	Patrick Le Tallec
<i>Co-encadrant de thèse</i>	Patrice Hauret

Thèse réalisée au Laboratoire de Mécanique des Solides

Sous la direction de Patrick Le Tallec

Co-encadrement Patrice Hauret

Financement CIFRE

Résumé

L'objet du travail exposé dans ce mémoire de thèse de Doctorat est d'obtenir une loi de comportement anisotrope représentative de la cristallisation sous contrainte dans le caoutchouc, de l'intégrer dans un calcul macroscopique éléments finis, et de comprendre l'influence de ce phénomène sur la propagation de fissures dans ce matériau par un critère de taux de restitution d'énergie. Le problème modèle qui motive cette étude est celui de l'endurance des pneumatiques.

Après une introduction générale des difficultés qui se posent dans l'endurance des pneumatiques, nous rappelons en première partie quelques notions essentielles sur le cadre mécanique. La partie II est l'occasion de s'intéresser au cadre de calcul du taux de restitution d'énergie par des méthodes de dérivation par rapport au domaine. Nous proposons alors une extension formelle de ce type de méthode au cas du comportement viscoplastique. Cette extension est proposée dans un premier cas où les processus dissipatifs et le processus de rupture sont découplés. Elle est alors testée et validée par différences finies sur des cas de calculs élastoplastiques. On propose ensuite une méthode de calcul du taux de restitution d'énergie dans le cas couplé par un état adjoint. Cette méthode est testée sur un problème viscoélastique simple. Dans la partie III, on se propose de construire une loi de comportement constitutive de la cristallisation sous contrainte. Le point de départ est une analyse microscopique que l'on passe à l'échelle macroscopique dans le cadre du modèle de micro-sphère qui nous permet de caractériser la relation contrainte-déformation, l'anisotropie des réponses locales et les effets localement induits par la cristallisation en fond de fissure. Cette construction se fonde sur des observations expérimentales de base en insistant sur les aspects constitutifs du comportement cyclique. La loi obtenue est ensuite comparée à plusieurs mesures expérimentales sur un panel exhaustif de chargements. Cela nous permet de montrer une bonne reproductibilité des résultats expérimentaux notamment en ce qui concerne les chargements cycliques et l'évolution de l'anisotropie. Pour finir, la partie IV aborde le problème de l'impact de la cristallisation sur la rupture du caoutchouc par les méthodes proposées dans les deux parties précédentes. On montre alors qu'on peut obtenir un profil de fissure et une zone cristallisée très semblable à ceux obtenus expérimentalement. De plus, l'extension du taux de restitution d'énergie proposée est appliquée à une éprouvette Pure Shear présentant de la cristallisation. L'évolution du taux de restitution d'énergie avec le chargement appliqué à l'éprouvette est alors comparée à l'évolution de la vitesse de propagation en fatigue.

Abstract

The following Ph D dissertation first objective is to develop a tractable anisotropic constitutive equation for strain induced-crystallizing rubber. This equation is developed at a microscopic level and then intergrated in a macroscopic framework in a finite element code. Finally the influence of strain induced crystallization on crack propagation

is assessed using an associated energy release rate. The underlying goal of this study is to address the problem of tyres' endurance.

After introducing the difficulties linked to tyres' endurance, basic notions on the mechanical framework at play are introduced in the first part. Part II deals with energy release rate calculations using domain's derivation methods. We then propose a formal extension of this kind of method to viscoplastic behaviour. A first case is treated where dissipative processes and failure mechanisms are uncoupled. This extension is then tested and validated on cases of elastoplastic computations. Another method to calculate the energy release rate in the coupled case is constructed using an adjoint state. This is then tested with a simple viscoelastic problem. The purpose of part III is to construct a constitutive equation for strain induced crystallizing rubber in a micro-sphere framework, so that it is possible to characterize stress strain relation, anisotropy of the local response and effects of crystallization at the crack tip. The approach is based on state-of-the-art experimental observations, with emphasis on the constitutive aspects of cyclic behaviour. The constitutive law is then compared with many experimental measurements, for a large panel of loading characteristics. It is shown that experimental data are well reproduced, especially these where cyclic loading and anisotropy evolution are at play. Finally, part IV deals with impact of crystallization on rubber failure, using the methods introduced in the two previous parts. The predicted failure profile and crystallized zone are quite similar to data retrieved from experiments. Moreover, the proposed extension of the energy release rate has been applied to a pure shear test sample where crystallization is happening. The evolution of energy release rate with loading is then compared to the evolution of crack propagation speed in fatigue.

Remerciements

Tout d’abord, je tiens à remercier Patrick Massin et Mathias Brieu pour avoir accepté de rapporter cette thèse et pour l’exhaustivité des dits rapports qui me sont aujourd’hui d’une grande aide pour les dernières corrections. Je remercie également Christian Miehé pour avoir accepté de faire partie de mon jury, et bien sûr Marc Bonnet pour m’avoir fait l’honneur de présider ce dernier.

Le travail présenté doit énormément à l’attention toujours constante de mon directeur de thèse, Patrick Le Tallec, qui a toujours su se rendre disponible. J’ai énormément appris de lui et de sa manière de travailler. La consistance de son approche des problématiques scientifiques, sa pédagogie et la confiance qu’il porte à ces étudiants en fait un professeur exceptionnel. Un grand merci également à toute l’équipe du Laboratoire de Mécanique des Solides que dirige Patrick Le Tallec.

Un immense merci également à Patrice Hauret mon co-directeur de thèse, responsable de l’équipe de Mécanique Numérique au Centre de Technologies de la MFPM à Ladoux sans qui cette thèse n’aurait pas été possible. Je tiens à te remercier, Patrice, pour ta présence amicale depuis cinq ans, pour ton humanité, et bien sûr pour ton sens politique au service de tes collaborateurs sans lequel de nombreux projets passés et à venir n’auraient pas été possibles. Je tiens également à remercier toute l’équipe de Mécanique Numérique pour son accueil ainsi que les chercheurs du Centre de Technologies qui ont fait progresser ce travail : Julien Caillard, Gabriela Bilbie, Jérôme Calipel, Jean-Michel Vacherand, Etienne Münch pour n’en citer que quelques-uns.

Ce travail a été avant tout un travail d’équipe car il a bénéficié de très importantes collaborations. Je tiens donc à remercier ici Daniel Berghezan, Vincent Chiarutinni et Thien Nga Le pour leur soutien et pour leur implication dans cette thèse qui n’aurait pas abouti sans eux. Je remercie également Bertrand Huneau, Pierre Rublon et Vincent Riolo pour leur participation.

Enfin, un immense merci à ceux qui sont à la source de ce projet :

- mes parents pour leur soutien depuis tant d’années,
- Pierre Lapoumeroulie et Pascal Landereau qui m’ont accueilli à la MFPM pour la première fois,
- ma femme, Lucile, qui a toujours été là et qui a vécu pleinement ce projet avec moi.

Table des matières

Remerciements	iii
Table des matières	v
1 Introduction	1
1.1 Quelques enjeux de la modélisation du comportement à la rupture et de la caractérisation mécanique des caoutchoucs cristallisants sous contrainte	2
1.2 Contributions	3
Cadre mécanique	9
2 Formulation du problème mécanique	13
2.1 Cinématique	13
2.2 Lois de conservation	18
2.3 Entropie	20
2.4 Matériaux standards généralisés	21
3 Lois de comportement	25
3.1 Hyperélasticité	25
3.2 Loi de comportement élastoplastique en grandes déformations	27
3.3 Exemple d'une loi de comportement viscoélastique en grandes déformations	31
3.4 Cadre linéarisé	33
Calcul de taux de restitution d'énergie	35
4 Construction d'une grandeur caractéristique de la rupture par perturbation de domaine	39
4.1 Méthodologie de perturbation	39

4.2	Formulation de la grandeur caractéristique dans les cas indépendants du temps	46
5	Extension de la construction d'une grandeur caractéristique de la rupture pour un problème couplé	55
5.1	Description du problème posé	55
5.2	Problème d'évolution couplé à une variation de domaine	58
5.3	Linéarisation du problème d'évolution contraint	61
5.4	Construction du problème adjoint	66
6	Comparaison des grandeurs explicites et couplées pour le problème de flexion trois points	69
6.1	Fissure en flexion trois points : Géométrie, loi de comportement et approximation	69
6.2	Problème d'évolution linéarisé	73
6.3	Grandeur caractéristique & problème adjoint	76
6.4	Discrétisation et premiers résultats de calcul d'une grandeur caractéristique	79
6.5	Conclusion	81
7	Calcul numérique du taux de restitution d'énergie	83
7.1	Représentation variationnelle du taux de restitution d'énergie	83
7.2	Mise en oeuvre de la formulation continue	84
7.3	Outils numériques	87
7.4	Description de la méthode de résolution	92
8	Cas de calculs explicites de la grandeur caractéristique	97
8.1	Cas explicites non-singuliers	97
8.2	Cas explicites singuliers	106
8.3	Conclusion	128
	Modélisation constitutive de la cristallisation sous contrainte dans le caoutchouc	129
9	Observations expérimentales et mécanismes en cristallisation sous contrainte	133
9.1	Expériences fondamentales	133
9.2	Comportement du caoutchouc cristallisant sous contrainte (réseau semi-cristallin)	161
9.3	Analyse des mécanismes proposés - phénoménologie	163

10	Modèle constitutif du caoutchouc cristallisant sous contrainte	169
10.1	Loi 1D pour la cristallisation sous contrainte	169
10.2	Modèle simplifié	176
10.3	Effets visqueux	181
10.4	Construction d'un modèle à directions : la micro-sphère	182
11	Méthode numérique pour la loi de cristallisation sous contrainte anisotrope	187
11.1	Comportements 1D	187
11.2	Intégration à la micro-sphère	192
11.3	Intégration au code élément finis orienté objets	198
12	Tests numériques homogènes	205
12.1	Calcul 1D de validation	205
12.2	Calcul 3D uniaxial	214
12.3	Calcul 3D homogène biaxial	230
12.4	Conclusion	232
	Fissure en présence de cristallisation sous contrainte	233
13	Cristallisation en pointe de fissure	237
13.1	Etat de l'art	237
13.2	Cas expérimental de référence	238
13.3	Test numérique	245
13.4	Conclusion	255
14	Caractérisation de la fissuration en fatigue pour un matériau cristallisant :	
	Premières tendances	257
14.1	Etude expérimentale de l'influence de la cristallisation sur la propagation de fissure en fatigue	257
14.2	Cas expérimental de référence	263
14.3	Modélisation de l'influence de la cristallisation sur la vitesse de propaga- tion de fissure en fatigue	267
14.4	Conclusion	271
15	Conclusion	273
	Bibliographie	275

Chapitre 1

Introduction

L'objet de cette thèse est d'obtenir une loi de comportement anisotrope représentative de la cristallisation sous contrainte dans le caoutchouc, de l'intégrer dans un calcul macroscopique éléments finis, et de comprendre l'influence de ce phénomène sur la propagation de fissures dans ce matériau par un critère de taux de restitution d'énergie. Néanmoins, nous devons préciser que nous n'irons pas jusqu'à valider des résultats expérimentaux mais nous allons mettre en avant une modélisation de ce phénomène intégrable dans un cadre industriel et l'illustrer grâce à plusieurs expériences.

Cette étude, réalisée en partenariat avec la Manufacture Française des Pneumatiques Michelin doit permettre de développer des méthodologies et des critères de durée de vie applicables à la conception et d'améliorer notre compréhension du phénomène de rupture dans les élastomères. On peut donc proposer le problème de la caractérisation de la propagation de fissure en fatigue en présence de cristallisation sous contrainte comme problématique cadre de cette étude. Dans ce cadre, les difficultés d'obtention de ces méthodologies et de ces critères sont liées au couplage de phénomènes variés en pointe de fissure.

On fait d'abord état de quelques uns des enjeux de la modélisation du comportement du caoutchouc pour les problèmes industriels en se reposant sur l'étude faite pour l'ANR AMUFISE (Analyse Multi-échelles de la FISsuration dans les Elastomères chargés). Ensuite, nous soulignons les propriétés intrinsèques au matériau et les caractéristiques du besoin exprimé qui rendent cette étude délicate. Enfin, on résume les contributions apportées par thème aussi indépendamment que possible comme cela a été fait dans ce mémoire.

1.1 Quelques enjeux de la modélisation du comportement à la rupture et de la caractérisation mécanique des caoutchoucs cristallisants sous contrainte

1.1.1 Caractérisation de la propagation de fissure dans le pneumatique par une grandeur mécanique

Dans le pneumatique, le caoutchouc doit répondre à un cahier des charges de plus en plus exigeant. Pour des raisons de sécurité et d'autonomie, la quantité de caoutchouc dans le pneumatique diminue ce qui représente un nouveau défi pour sa longévité et sa fiabilité. La connaissance et la caractérisation efficace et précise de la résistance à la propagation de fissure est donc essentielle. Alors que la fissuration commence à être bien connue et comprise dans un certain nombre de matériaux comme les alliages de métaux ou les polymères vitreux, nous ne disposons que de très peu d'outils et de comparaison théorie-expérience pour les élastomères. De plus, les grandes déformations et la présence systématique de dissipation non-confinée en pointe de fissure rendent la modélisation de la rupture difficile. Il s'avère donc essentiel avant même de proposer un critère de rupture de pouvoir développer une grandeur caractéristique de la rupture qui pourra s'appliquer à ces problèmes.

1.1.2 Caoutchoucs cristallisants

Le second enjeu réside dans l'étude des différences entre le caoutchouc naturel (NR) et le caoutchouc synthétique (IR). Dans l'industrie du pneu, 60% des caoutchoucs utilisés sont des caoutchoucs synthétiques fabriqués à partir d'hydrocarbures d'origine pétrolière, le caoutchouc naturel restant cependant nécessaire pour les 40% restants. Le caoutchouc synthétique possède de bonnes propriétés viscoélastiques, ce qui en fait un matériau de grand intérêt pour la fabrication de pneus adhérents. Il apporte également d'autres propriétés spécifiques en particulier dans le domaine de l'usure et de la résistance au roulement. Quant au caoutchouc naturel, c'est un matériau dont les capacités de cristallisation sous tension n'ont jamais pu être égalées. Ces capacités améliorent généralement les propriétés mécaniques, en particulier la résistance à la fatigue ou à la déchirure. Pour améliorer les propriétés globales du pneumatique, l'étude comparative entre le NR et le IR est essentielle ainsi que l'étude des sollicitations particulières sous lesquelles le NR cristallise. De plus, dans le contexte de la conception industrielle, le comportement de l'élastomère utilisé est de première importance. En effet, certains dommages sont considérés comme dimensionnant pour le pneu et l'utilisation du NR et ses propriétés de cristallisation sont importantes pour la conception. Or, les tests de fatigue et a fortiori, ceux comportant de la cristallisation sous contrainte, demandent des moyens techniques

et un temps considérables. La modélisation et le calcul s'avèrent donc indispensables durant la phase de conception pour modéliser ce comportement.

1.2 Contributions

Nous esquissons ici la démarche adoptée et présentons le contenu des parties en mettant en relief les contributions. De plus, puisque ce manuscrit a fait l'objet de plusieurs collaborations et qu'il contient de longues parties bibliographiques, nous indiquons pour chaque partie ce qui relève d'une contribution personnelle et originale de l'auteur. En préambule, la partie I rappelle quelques notions essentielles sur le cadre mécanique.

1.2.1 Calcul de taux de restitution d'énergie (Partie II)

Il est maintenant bien établi que lorsqu'on cherche une grandeur caractéristique associée à la propagation d'une fissure, on peut représenter cette propagation par une perturbation de la configuration de la structure. Ensuite, on peut construire la grandeur caractéristique grâce aux méthodes de dérivation par rapport au domaine [96].

L'objet de cette partie a donc été d'utiliser et d'étendre **formellement** ce type de méthode lorsque le solide a un comportement viscoplastique. Dans ce cadre de travail, la difficulté principale vient de la dépendance en temps du problème.

Dans un premier temps, on s'est donc proposé d'introduire le temps physique dans la définition même de la perturbation et d'examiner plusieurs hypothèses nous permettant de découpler la perturbation et l'évolution inélastique (chapitre 4). Les deux hypothèses de découplage reviennent à fixer ou à convecter exactement la zone dissipative avec la perturbation de domaine. Ces hypothèses associées à la construction thermodynamique de grandeurs caractéristiques pour une fissure fragile dans un milieu dissipatif proposée par Dormieux [109, 110] nous ont permis de proposer une grandeur caractéristique de la rupture sous la forme d'une intégrale de volume calculée avec les informations du problème mécanique dans l'état non-perturbé.

On a examiné également le cas où la perturbation et le processus d'évolution inélastique restent couplés (chapitre 5). Ce dernier cas donne lieu à un calcul de grandeur caractéristique par une méthode d'état adjoint. Des choix concrets de grandeurs caractéristiques ainsi que les détails pratiques de mise en oeuvre du calcul sont enfin étudiés dans :

- le chapitre 6 pour la mise en oeuvre du calcul de grandeur par la méthode adjointe,
- le chapitre 7 pour la mise en oeuvre numérique de la variation de domaine,
- le chapitre 8 pour les cas de grandeurs explicites.

Cette partie a également fait l'objet de plusieurs publications sous les formes suivantes :

1. Chiaruttini, V., Guilie, J., Riolo, V. (2013). Fast and efficient stress intensity factors computations for 3D cracked structures Application to unstructured conform meshes or XFEM discretizations. In preparation.

2. Guilie, J., Chiaruttini, V., Le Tallec, P. (2013). Numerical investigations of a crack driving force in elastic-plastic materials with hardening. Submitted.
3. Chiaruttini, V., Guilie, J., Frédéric, F., Bonnet, M., Le Tallec, P. (2011). Approches par maillage conforme en mécanique non-linéaire de la rupture : méthode G-theta et modèle de zone cohésive. 10e colloque national en calcul des structures.
4. Chiaruttini, V., Feyer, F., Rannou, J. and Guilie, J. (2011). An hybrid optimal approach for crack propagation : mixing conform remeshing and crack front enrichment. XFEM 2011 29th June - 1st July 2011, Cardiff University, UK ECCOMAS / IACM Special Interest Conference.
5. Guilie, J., Le Tallec, P. (2012). On the coupling between shape variation and material dissipation for computation of the crack driving force. ECCOMAS 2012.
6. Riolo, V., Chiaruttini, V., Feyer, F., Guilie, J. (2013). Intégrale invariante pour la propagation de fissure en élastoplasticité sous chargement de fatigue. 11e colloque national en calcul des structures.

Contributions personnelles et originales de l'auteur :

- la méthode de calcul d'un taux de restitution d'énergie par méthode adjointe couplant dissipation et perturbation de domaine,
- l'application de cette méthode à un problème de flexion simple.

1.2.2 Modélisation constitutive de la cristallisation sous contrainte dans le caoutchouc (Partie III)

Le comportement sous chargement cyclique du caoutchouc naturel reste difficile à cerner du fait de sa faculté à cristalliser sous contrainte. Cette évolution de la microstructure s'accompagne d'une importante amélioration de la durée de vie des pièces en fatigue. Même si le phénomène de cristallisation sous contrainte de ce matériau est encore mal connu, certains travaux ont apporté un éclairage sur ce phénomène ([68], [132], [12]). Ces travaux ont concerné aussi bien les sollicitations monotones (cristallisation sous chargement et sa disparition lors de la décharge, rôle de la relaxation moléculaire, influence sur les chaînes amorphes), que cycliques (cumul des cristaux au cours des cycles, influence du rapport de charge, dissipation). On note les propriétés suivantes :

- L'alignement des chaînes polymères lors de la déformation influe sur la température de fusion du caoutchouc et crée le phénomène de cristallisation sous contrainte [48].
- Il y a cumul des cristaux sous chargements cycliques et plus particulièrement pour un rapport de charge positif et élevé ([132], [12]).
- La cristallisation modifie fortement la propagation d'une fissure en fatigue [132].

L'objet de cette partie a donc été d'obtenir une loi de comportement constitutive de la cristallisation sous contrainte dans le cadre du modèle de micro-sphère [53] qui nous permet de caractériser :

- la relation contrainte-déformation (effet relaxant et durcissant, hystérèse),
- l’anisotropie des réponses locales en prenant en compte l’histoire locale des directions principales de déformation,
- les effets localement induits par la cristallisation en fond de fissure.

Dans ce cadre de travail, la difficulté principale vient de l’absence de loi de comportement constitutive thermodynamiquement cohérente et pouvant s’appliquer à des simulations 3D comportants un grand nombre de degrés de liberté. On peut néanmoins citer deux tentatives de construction d’un modèle constitutif contemporaines de ce manuscrit ([74] qui se base sur une cinétique de nucléation appliquée à une chaîne représentative dans chaque direction de l’espace et [119] qui cherche une représentation mésomécanique d’une cristallite dans un réseau chargé). De plus, les différents mécanismes constitutifs proposés dans la littérature diffèrent sur de nombreux points [68].

Dans un premier temps, on s’est proposé de faire un état de l’art des observations expérimentales en insistant sur les aspects constitutifs du comportement cyclique (chapitre 9). La méthode utilisée pour faire cet état de l’art nous a permis de mettre en exergue les mécanismes de relaxation de la phase amorphe, de durcissement du réseau par variation de la morphologie des cristallites et par création de nouvelles nano-charges (les cristallites) ainsi que la présence d’une hystérèse dont l’évolution a été observée sur plusieurs types de chargement cyclique.

Ensuite, au chapitre 10, on a construit une loi de comportement 1D thermodynamiquement cohérente basée sur les mécanismes constitutifs que l’on a extrait des observations précédentes et sur l’introduction d’une variable interne représentant la cristallinité efficace. Cette loi a été développée dans un cadre thermodynamique cohérent et intégrée au concept de micro-sphère pour lui donner son aspect anisotrope dans des simulations 3D. Une version simplifiée de la loi 1D a également été développée et testée analytiquement de manière à comprendre simplement les différents éléments constituant la loi et à proposer une loi de comportement à coût faible pour certains calculs industriels.

Au chapitre 11, on détaille l’ensemble des procédures numériques ainsi que l’organisation du code source. La procédure de calcul se fonde notamment sur une résolution par direction de la loi d’évolution 1D par une version modifiée de l’algorithme de retour radial permettant de gérer correctement les points de saturation de la cristallinité.

Enfin, au chapitre 12, on a comparé la loi à plusieurs mesures expérimentales sur un panel exhaustif de chargements :

- un calcul 1D avec comparaison simultanée de la cristallinité, de la contrainte et de l’élongation locale de la partie amorphe du réseau en fonction de l’élongation pour un cycle charge-décharge. Ce calcul a montré une bonne reproductibilité des résultats expérimentaux.
- un calcul 1D pour plusieurs cycles à décharges partielles qui montre les limites du modèle 1D.
- plusieurs calculs 3D homogènes uniaxiaux et bi-axiaux permettant d’analyser le comportement résultant de l’intégration par direction et d’étudier en détails l’apport de la micro-sphère à la problématique des cycles partiels.

- un calcul 3D homogène uniaxial puis biaxial associé à une mesure quantitative de l'évolution de l'orientation des cristallites lors d'un cycle charge-décharge comparé avec l'expérience. Ce calcul a également montré une bonne reproductibilité des résultats expérimentaux.

Cette partie a également fait l'objet de plusieurs publications sous les formes suivantes :

1. Guilie, J., Le, TN, Le Tallec, P. (2012). Thermodynamic model for strain-induced crystallization. ECCOMAS 2012.
2. Guilie, J., Le, TN, Le Tallec, P. (2013). Micro-sphere model for strain-induced crystallization in rubber. ECCMR 2013.

Contributions personnelles et originales de l'auteur :

- le modèle de cristallisation à base d'une analyse des mécanismes constitutifs associés à la cristallisation, thermodynamiquement cohérent,
- sa mise en oeuvre dans un code éléments finis,
- l'application de ce modèle à plusieurs types de chargement.

1.2.3 Fissure en présence de cristallisation sous contrainte (Partie IV)

L'étude de la propagation de fissure en fatigue dans les élastomères est d'une importance majeure pour l'industrie du pneu. Elle permet d'améliorer la durée de vie des pièces. Le caoutchouc naturel en particulier montre une tenue exceptionnelle à la fatigue en comparaison du caoutchouc synthétique pour certaines conditions de chargement (déchirure en traction, rapport de charge positif en fatigue). Cette propriété ne peut être expliquée en considérant uniquement les mécanismes d'endommagement classiques. En effet, les fissures dans les matériaux caoutchoutiques présentent un fort émoussement dont la cause semble difficile à appréhender en considérant un matériau purement élastique [67]. Parallèlement à cet émoussement, on peut même observer dans le caoutchouc naturel la création de fissures se propageant à partir des lèvres de l'entaille initiale et parallèlement au chargement [50]. Un mécanisme de renforcement fortement anisotrope doit être pris en compte pour pouvoir proposer un critère de fatigue capable de prédire ces propriétés particulières. Le mécanisme de renforcement, qui est supposé jouer un rôle majeur dans les propriétés de rupture du caoutchouc, est justement la cristallisation sous contrainte à travers la dissipation mais aussi à travers le rôle des nano-renforcements que créent les cristallites dans le réseau.

L'objet de cette partie n'a donc pas été de proposer un critère de fatigue mais plutôt de rendre compte de l'impact de la cristallisation sur la rupture du caoutchouc par les méthodes proposées dans les deux parties précédentes : une loi de comportement anisotrope de la cristallisation sous contrainte et une grandeur caractéristique de la rupture prenant en compte qualitativement l'effet de la dissipation.

Dans un premier temps (chapitre 13), on s'est proposé de montrer que la loi de comportement anisotrope nous permet d'obtenir un profil de fissure et une zone de cristallisation en pointe de fissure sensiblement équivalents à ceux obtenus dans l'expérience. Pour cela, un travail en commun avec Pierre Rublon [128, 129, 130] a été réalisé. Il a s'agit de reproduire complètement la procédure expérimentale développée par Pierre Rublon dans la simulation en réalisant successivement :

- une simulation hétérogène d'éprouvette non-fissurée 3D permettant de recalculer la loi de comportement sur les mesures expérimentales,
- une simulation hétérogène sur une éprouvette maillée finement avec la loi de comportement précédente qui a nécessité l'optimisation du code source de la loi de comportement en terme de nombres d'opérations et d'accès mémoire.
- une exploitation des résultats suivant la méthode expérimentale qui a nécessité le code d'outils de post-processing spécifiques à ce cas test.

Malgré la complexité de la discussion sur les différentes échelles de temps à l'oeuvre dans ce cas test (vitesse de sollicitation de l'éprouvette non-fissurée, fissurée et dépendance de la cinétique de cristallisation à l'élongation) et les hypothèses fortes qui ont été faites pour appliquer la loi de comportement, nous avons pu obtenir des résultats étonnamment proches de l'expérience. De plus, ce calcul souligne :

- l'utilité de la loi de comportement 1D simplifiée en terme de stratégie de calcul,
- l'importance de l'optimisation du code source des lois avec l'approche micro-sphère,
- la robustesse de la loi de comportement dans un cas de simulation 3D complexe.

Ensuite, au chapitre 14, c'est l'évolution observée expérimentalement de la vitesse de fissuration en fatigue en fonction du rapport de charge et du type de matériau (cristallisant ou non) que l'on a comparé à l'évolution de la grandeur caractéristique construite précédemment. Ceci nous a permis d'étudier la différence entre un caoutchouc cristallisant et un caoutchouc non-cristallisant du point de vue du réseau amorphe puis du réseau semi-cristallin à travers deux grandeurs caractéristiques. Cette étude nous a permis de montrer que la méthode proposée était capable de traduire qualitativement la différence de vitesse de propagation entre fissure dans un matériau cristallisant ou non grâce à la prise en compte de la dissipation dans la grandeur caractéristique et de la distinction réseau amorphe/réseau semi-cristallin. Pour finir, l'évolution de la vitesse de propagation avec le rapport de charge n'a pu être modélisée. En effet, le test expérimental montre que le volume cristallisé en haut du cycle augmente avec le rapport de charge alors même que l'élongation maximale n'augmente pas. Or, notre modèle de cristallisation sous contrainte n'est pas capable de reproduire cet effet.

Cette partie a également fait l'objet de plusieurs publications sous les formes suivantes :

1. Guilie, J., Le, TN, Le Tallec, P. (2013). Micro-sphere model for strain-induced crystallization : Application to 3D behavior of rubber. Submitted to Journal of the Mechanics and Physics of Solids.
2. Guilie, J., Le, TN, Le Tallec, P. (2013). Influence of strain-induced crystallization on the crack driving force in fracture behavior of rubber. ECCMR 2013.

Contributions personnelles et originales de l'auteur :

- l'application du modèle de cristallisation à une éprouvette fissurée,
- l'interprétation en terme de taux de restitution d'énergie du rôle de la partie amorphe du réseau dans la fissuration des élastomères.

1.2.4 Applications pratiques à la simulation du pneumatique

Cette thèse a par ailleurs été l'occasion d'un transfert de méthodes vers la MFPM, et de leur implémentation au sein du code de calcul BIBMEF. L'implémentation réalisée comprend :

- un cadre de travail pour des lois utilisateurs à variables internes,
- l'application du cadre précédent aux lois hyperélastiques directionnelles affines et non-affines, aux lois hyperélastiques à invariants ainsi qu'aux lois directionnelles dissipatives telle que la loi de cristallisation sous contrainte,
- un code Matlab pour le calcul du taux de restitution d'énergie dans un cadre dissipatif tel que proposé au chapitre 6 dans le cas de structure 2D ou 2D axisymétrique.

Ces aspects font l'objet d'une note technique interne.

1.2.5 Etude interne MFPM sur le comportement cyclique du caoutchouc cristallisant sous contrainte

En marge de cette thèse, mentionnons que les interactions avec Thien Nga Le et Etienne Munch ont été l'occasion de se pencher sur le problème de la propriété de mémoire interne ponctuelle. La présence de cette propriété, très bien connue dans les matériaux à mémoire de forme [15], a été vérifiée en partie lors d'une étude expérimentale réalisée par l'auteur à la MFPM (figure 12.2.8) en parallèle aux essais de Nicolas Candau sur les charges partielles [20]. A la suite de cette étude, la modélisation de cette propriété a été proposée dans le cadre de la microsphère (section 12.2.2) et grâce à une généralisation du cadre de travail de Bouvet [15] (Rapport interne confidentiel [58]).

Cadre mécanique

Afin de faciliter la lecture, on présente dans cette partie le cadre mécanique qui va nous servir de base de travail. Elle comprend, tout d'abord, un rappel de la cinématique des milieux continus. Ensuite, on présente les lois de conservation et le second principe de la thermodynamique. Enfin, pour compléter ce cadre, mention est faite de plusieurs lois de comportement en grandes déformations. Pour tout détail complémentaire en ce qui concerne la mécanique des milieux continus, on pourra consulter les ouvrages de référence suivants [84, 145, 107] ainsi que [11, 140].

Chapitre 2

Formulation du problème mécanique

2.1 Cinématique

Cette section vise à introduire les notations et rappeler brièvement le cadre mécanique des milieux continus en déformations finies dans lequel on se place. Pour cela, on construit tout d'abord les configurations dans lesquelles le mouvement du corps matériel est décrit. Ensuite, on détaille plusieurs mesures de la déformation. Enfin, on explicite les dérivées des quantités décrivant la cinématique par rapport au temps. On peut se référer à [84] et à [133] pour un développement complet de la cinématique.

2.1.1 Tenseurs

Les vecteurs et tenseurs sont notés en caractère gras, quelque soit leur ordre. Leurs composantes dans une base cartésienne donnée seront notées G_i pour un tenseur d'ordre 1, G_{ij} pour un tenseur d'ordre deux, G_{ijkl} pour un tenseur d'ordre 4. On utilisera la convention de sommation implicite sur les indices répétés. Le simple point dénotera suivant le contexte le produit simplement contracté

$$\mathbf{T} \cdot \mathbf{G} = T_{ij} G_{jk} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_k, \quad (2.1.1)$$

avec $\{\mathbf{e}_i\}_{i=1,2,3} \in \mathbb{R}^3$ la base vectorielle utilisée et \otimes le produit tensoriel, ou l'action d'un gradient dans une direction, ceci indépendamment de l'ordre du tenseur concerné. Ainsi $\frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial \mathbf{Y}} \cdot \delta \mathbf{Y}$ dénote l'action de la dérivée de \mathbf{Z} par rapport à la variable \mathbf{Y} sur la perturbation $\delta \mathbf{Y}$ et $\nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\theta}$ dénote l'action du gradient en \mathbf{X} de \mathbf{K} sur le vecteur $\boldsymbol{\theta}$.

Le double point dénotera suivant le contexte le produit de dualité entre tenseurs (quelque soit leur ordre), ou le produit doublement contracté d'un tenseur d'ordre 4 par un tenseur d'ordre 2. Si \mathbf{T} , \mathbf{G} et \mathbf{C} dénotent respectivement des tenseurs d'ordre 2 et un tenseur d'ordre 4, on aura ainsi

$$\mathbf{T} : \mathbf{G} = T_{ij} G_{ij}, \quad (2.1.2)$$

et

$$(\mathbf{C} : \mathbf{G})_{ij} = C_{ijkl} G_{kl} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j. \quad (2.1.3)$$

Si \mathbf{T} et \mathbf{G} sont des tenseurs d'ordre 1, leur produit scalaire sera noté indifféremment $\mathbf{T} \cdot \mathbf{G}$ ou $\mathbf{T} : \mathbf{G}$, la deuxième notation ayant l'avantage de pouvoir s'utiliser même quand on ne spécifie pas les ordres des tenseurs \mathbf{T} et \mathbf{G} .

Notons enfin, qu'on utilisera le signe \times pour le produit vectoriel.

2.1.2 Mouvement d'un corps matériel

Un corps matériel B occupe un domaine continu dans un espace Euclidien tri-dimensionnel \mathbb{R}^3 . Il est constitué d'une infinité de points matériels $P \in B$. Le mouvement du corps B dans \mathbb{R}^3 est alors déterminé par la transformation

$$\chi_t(P) : \begin{cases} B \rightarrow B_{\mathbf{x}} \subset \mathbb{R}^3 \\ P \rightarrow \mathbf{x} = \chi_t(P) \end{cases} \quad (2.1.4)$$

entre un point matériel P et sa position $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$ à l'instant t . Lorsqu'on considère le mouvement d'un solide déformable, il est naturel d'introduire au temps initial $t = t_0$ une configuration de référence (Figure 2.1.1) choisie de manière arbitraire. En règle générale, elle est néanmoins dans un état non-déformé libre de contrainte. De la même manière qu'en (2.1.4), on l'associe à la transformation

$$\chi_{t_0}(P) : \begin{cases} B \rightarrow B_{\mathbf{X}} \subset \mathbb{R}^3 \\ P \rightarrow \mathbf{X} = \chi_{t_0}(P) \end{cases} . \quad (2.1.5)$$

Dans ce qui suit, la notation $B_{\mathbf{X}} = \chi_{t_0}(B)$ est donc introduite pour décrire la configuration lagrangienne (configuration matérielle ou de référence) et la notation $B_{\mathbf{x}} = \chi_t(B)$ est choisie pour décrire la configuration eulérienne (configuration actuelle, spatiale). Les positions de référence et actuelle d'un point matériel P dans l'espace sont également notées $\mathbf{X} = \chi_{t_0}(P) \in B_{\mathbf{X}}$ et $\mathbf{x} = \chi_t(P) \in B_{\mathbf{x}}$ respectivement. Une description lagrangienne du mouvement du solide est enfin définie par la transformation

$$\varphi(\mathbf{X}, t) : \begin{cases} B_{\mathbf{X}} \times \mathcal{T} \rightarrow B_{\mathbf{x}} \\ (\mathbf{X}, t) \rightarrow \mathbf{x} = \varphi(\mathbf{X}, t) = \chi_t \circ \chi_{t_0}^{-1}(\mathbf{X}). \end{cases} \quad (2.1.6)$$

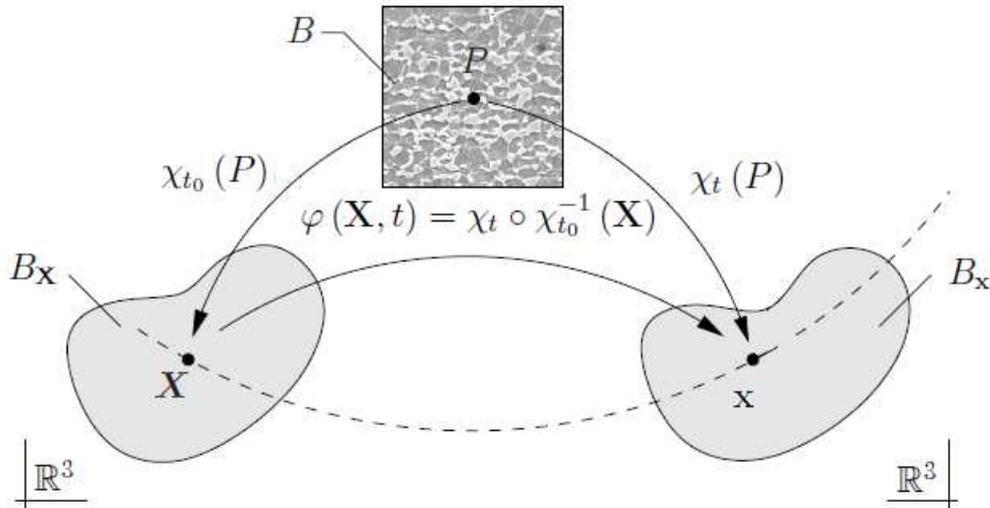


FIGURE 2.1.1: Mouvement d'un corps matériel

2.1.3 Déformation

Gradient de déformation

Le gradient de déformation \mathbf{F} se définit par (figure 2.1.2)

$$\mathbf{F} = \nabla_{\mathbf{X}}\varphi(\mathbf{X}, t) = \frac{\partial\varphi(\mathbf{X}, t)}{\partial\mathbf{X}}. \quad (2.1.7)$$

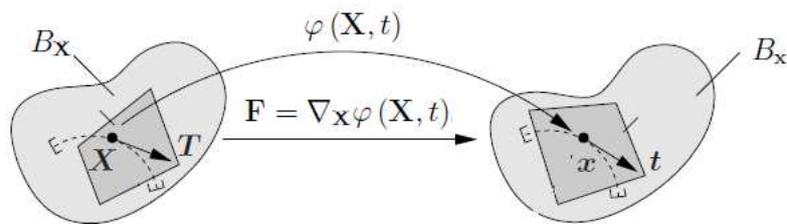


FIGURE 2.1.2: Gradient de déformation (figure tirée de [165]) avec \mathbf{T} un vecteur tangent à une courbe matérielle et \mathbf{t} un vecteur tangent à une courbe spatiale.

Transport d'un élément d'aire et d'un élément de volume

Considérons ensuite un élément de surface matérielle $d\mathbf{S}_X$. Il est défini par le produit vectoriel de deux éléments linéiques matériels

$$d\mathbf{S}_X = d\mathbf{X}^1 \times d\mathbf{X}^2 = dS_X \mathbf{N}, \quad (2.1.8)$$

avec \mathbf{N} la normale lagrangienne orientant l'élément de surface. Son homologue eulérien s'écrit

$$d\mathbf{S}_x = dx^1 \times dx^2 = dS_x \mathbf{n}, \quad (2.1.9)$$

avec \mathbf{n} la normale eulérienne orientant l'élément de surface. Par calcul différentiel direct, on a

$$d\mathbf{S}_x = \text{cof}(\mathbf{F}) \cdot d\mathbf{S}_X = \det(\mathbf{F}) \mathbf{F}^{-\top} \cdot d\mathbf{S}_X. \quad (2.1.10)$$

Considérons enfin un parallélépipède matériel qui représente un élément de volume matériel infinitésimal $dV_{\mathbf{X}}$ sous la forme du produit scalaire d'un élément de surface et d'un élément linéique

$$dV_{\mathbf{X}} = d\mathbf{S}_X \cdot d\mathbf{X}. \quad (2.1.11)$$

Son homologue eulérien s'écrit

$$dV_x = d\mathbf{S}_x \cdot dx. \quad (2.1.12)$$

Le lien entre le volume matériel $dV_{\mathbf{X}}$ et le volume spatial dV_x est alors obtenu grâce au jacobien J

$$dV_x = \det(\mathbf{F}) dV_{\mathbf{X}}. \quad (2.1.13)$$

Le jacobien impose des restrictions au gradient de déformation. En effet, pour garantir une relation bijective entre \mathbf{X} et \mathbf{x} , J doit être différent de zéro. Pour prévenir l'interpénétration du matériau, J doit être également plus grand que zéro. Enfin, dans le cas incompressible $J = 1$.

Mesures de la déformation

Considérons maintenant une direction matérielle \mathbf{T} tangente au point \mathbf{X} avec $|\mathbf{T}| = \sqrt{\mathbf{T} \cdot \mathbf{T}^\top} = 1$. On peut alors définir le vecteur d'élongation $\boldsymbol{\lambda}$ par rapport à \mathbf{T}

$$\boldsymbol{\lambda} = \mathbf{F} \cdot \mathbf{T}. \quad (2.1.14)$$

L'élongation elle-même s'écrit donc

$$\lambda = \sqrt{\boldsymbol{\lambda} \cdot \boldsymbol{\lambda}^\top} = \sqrt{(\mathbf{F} \cdot \mathbf{T}) \cdot (\mathbf{F} \cdot \mathbf{T})^\top}. \quad (2.1.15)$$

Cette relation montre que les élongations sont caractérisées par le tenseur de Cauchy-Green à droite défini par $\mathbf{C} = \mathbf{F}^\top \cdot \mathbf{F}$. L'inverse de l'élongation

$$\frac{1}{\lambda} = \sqrt{(\mathbf{F}^{-1} \cdot \mathbf{t})^\top \cdot (\mathbf{F}^{-1} \cdot \mathbf{t})} \quad (2.1.16)$$

est caractérisée par le tenseur de Cauchy-Green à gauche $\mathbf{c} = \mathbf{F}^{-\top} \cdot \mathbf{F}^{-1}$. Si on veut mesurer les déformations en un point matériel, on peut également comparer la longueur d'un élément linéique en configuration matérielle et spatiale

$$\delta = \frac{1}{2} \left[|\mathrm{d}\mathbf{x}|^2 - |\mathrm{d}\mathbf{X}|^2 \right] = \mathrm{d}\mathbf{X}^\top \cdot \mathbf{E} \cdot \mathrm{d}\mathbf{X}, \quad (2.1.17)$$

avec $\mathbf{E} = \frac{1}{2} (\mathbf{C} - \mathbf{1})$ le tenseur de déformation de Green Lagrange.

2.1.4 Dérivation des quantités décrivant la cinématique par rapport au temps

Vitesses

On peut définir à partir de la transformation (2.1.6) la vitesse matérielle $\mathbf{V}(\mathbf{X}, t)$ comme la dérivée partielle de φ par rapport à t pour des positions matérielles fixées

$$\mathbf{V}(\mathbf{X}, t) = \frac{\partial}{\partial t} \varphi(\mathbf{X}, t). \quad (2.1.18)$$

On peut remarquer que \mathbf{V} fait référence à la configuration $B_{\mathbf{x}}$ puisqu'elle caractérise une variation de mouvement du corps matériel dans le temps. Par contraction avec la transformation φ_t^{-1} , où φ_t représente la transformation φ à t fixé, on peut changer le paramétrage de la vitesse matérielle et obtenir la vitesse spatiale $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{V}(\mathbf{X}, t) \circ \varphi_t^{-1}(\mathbf{x}). \quad (2.1.19)$$

Dérivation par rapport au temps d'un champ

Considérons un champ eulérien $f(\mathbf{x}, t)$. Ce champ est défini dans une configuration dépendante du temps. Sa dérivée par rapport au temps à point matériel fixé (dérivée matérielle) est donc formée de deux termes :

- une dérivée partielle par rapport au temps $\frac{\partial f}{\partial t}$,
- un terme de convection $\nabla_{\mathbf{x}} f \cdot \mathbf{v}$.

L'expression de la dérivée de f par rapport au temps à point matériel fixé s'écrit alors

$$\frac{d}{dt} f = \frac{\partial f}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} f \cdot \mathbf{v}. \quad (2.1.20)$$

Si on considère maintenant un champ lagrangien $F(\mathbf{X}, t)$, la même dérivée matérielle s'écrit simplement

$$\frac{d}{dt} F = \frac{\partial F}{\partial t}. \quad (2.1.21)$$

On verra dans le chapitre 4 qu'on peut avoir besoin de construire des variations de la position de référence d'un point matériel. Dans ce cas là, la configuration matérielle peut également devenir dépendante du temps.

Gradients de vitesse

En dérivant le vecteur élongation défini en (2.1.14) par rapport au temps

$$\frac{d\boldsymbol{\lambda}}{dt} = \frac{d\mathbf{F}}{dt} \cdot \mathbf{T}, \quad (2.1.22)$$

on peut introduire le gradient de vitesse matériel

$$\mathbf{L} = \frac{d\mathbf{F}}{dt}. \quad (2.1.23)$$

En dérivant le vecteur élongation défini en (2.1.14) en fonction de $\boldsymbol{\lambda}$

$$\frac{d\boldsymbol{\lambda}}{dt} = \frac{d\mathbf{F}}{dt} \cdot (\mathbf{F}^{-1} \cdot \boldsymbol{\lambda}), \quad (2.1.24)$$

on peut également introduire le gradient de vitesse spatial

$$\mathbf{l} = \frac{d\mathbf{F}}{dt} \cdot \mathbf{F}^{-1} = \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{v}. \quad (2.1.25)$$

On peut enfin appliquer le raisonnement (2.1.20) à la dérivation en temps de l'intégrale d'un champ eulérien sur $\mathcal{P}_{B_{\mathbf{x}}} \subset B_{\mathbf{x}}$

$$\mathbf{F} = \int_{\mathcal{P}_{B_{\mathbf{x}}}} f dV_{\mathbf{x}}. \quad (2.1.26)$$

On obtient

$$\frac{d}{dt} \mathbf{F} = \int_{\mathcal{P}_{B_{\mathbf{x}}}} \frac{\partial}{\partial t} f dV_{\mathbf{x}} + \int_{\partial \mathcal{P}_{B_{\mathbf{x}}}} f \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dS_{\mathbf{x}}, \quad (2.1.27)$$

avec \mathbf{n} la normale sortante à $\partial \mathcal{P}_{B_{\mathbf{x}}}$.

2.2 Lois de conservation

Le but de cette section est de rappeler les lois de conservation dans un domaine matériel donné $B_{\mathbf{x}}$ de frontière $\partial B_{\mathbf{x}}$ que l'on suit dans son mouvement. Ces lois sont d'abord écrites sous forme intégrale et puis elles sont transformées en leur homologue local.

2.2.1 Conservation de la masse

En posant ρ_0 la densité de masse dans $B_{\mathbf{x}}$, la loi de conservation de la masse s'écrit

$$\frac{d}{dt} \mathbf{M} = 0, \quad (2.2.1)$$

avec

$$\mathbf{M} = \int_{B_{\mathbf{X}}} \rho_0 \, dV_{\mathbf{X}}. \quad (2.2.2)$$

Comme cette équation est valable quelque soit $B_{\mathbf{X}}$, le théorème de localisation nous permet alors d'écrire

$$\frac{\partial \rho_0}{\partial t} = 0 \quad \forall \mathbf{X} \in B_{\mathbf{X}}. \quad (2.2.3)$$

2.2.2 Conservation du moment linéaire de quantité de mouvement

La conservation de la quantité de mouvement s'écrit

$$\frac{d}{dt} \mathbf{V} = \mathbf{C}, \quad (2.2.4)$$

avec :

- $\mathbf{V} = \int_{B_{\mathbf{X}}} \rho_0 \mathbf{V} \, dV_{\mathbf{X}}$, le vecteur moment linéaire,
- $\mathbf{C} = \int_{B_{\mathbf{X}}} \mathbf{b} \, dV_{\mathbf{X}} + \int_{\partial B_{\mathbf{X}}} \mathbf{T} \, dS_{\mathbf{X}}$, la résultante du chargement appliqué, \mathbf{b} étant le chargement volumique et \mathbf{T} la traction sur la frontière par unité de surface non déformée.

Par application du théorème de localisation et en utilisant l'égalité $\mathbf{T} = \mathbf{P} \cdot \mathbf{N}$ rapporté en configuration de référence à l'aide du tenseur de Piola $\mathbf{P} = J \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{F}^{-\top}$ du théorème de Cauchy, on obtient en configuration de référence

$$\rho_0 \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} = \text{div}(\mathbf{P}) + \mathbf{b} \quad \forall \mathbf{X} \in B_{\mathbf{X}}, \quad (2.2.5)$$

$$\mathbf{P} \cdot \mathbf{N} = \mathbf{T} \quad \forall \mathbf{X} \in \partial B_{\mathbf{X}}. \quad (2.2.6)$$

L'équilibre spatial au sens faible s'écrit alors en multipliant (2.2.5) par une fonction test $\hat{\mathbf{v}}$, en intégrant par partie, et en utilisant la condition aux limites (2.2.6)

$$\int_{B_{\mathbf{X}}} \rho_0 \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} \cdot \hat{\mathbf{v}} \, dV_{\mathbf{X}} + \int_{B_{\mathbf{X}}} \mathbf{P} : \nabla_{\mathbf{X}} \hat{\mathbf{v}} - \mathbf{b} \cdot \hat{\mathbf{v}} \, dV_{\mathbf{X}} - \int_{\partial B_{\mathbf{X}}} \mathbf{T} \cdot \hat{\mathbf{v}} \, dS_{\mathbf{X}} = 0 \quad \forall \hat{\mathbf{v}} \in \mathcal{V}, \quad (2.2.7)$$

avec $\tilde{\mathbf{v}}$ suffisamment régulier pour que les intégrales aient un sens et \mathcal{V} l'espace des fonctions cinématiquement admissible.

2.2.3 Conservation du moment angulaire de quantité de mouvement

La conservation du moment angulaire s'écrit

$$\frac{d}{dt} \mathbf{V}^{\diamond} = \mathbf{C}^{\diamond}, \quad (2.2.8)$$

avec

- $V^\diamond = \int_{B_{\mathbf{X}}} \mathbf{x} \times \rho_0 \mathbf{V} dV_{\mathbf{X}}$, le vecteur moment angulaire,
- $C^\diamond = \int_{B_{\mathbf{X}}} \mathbf{x} \times \mathbf{b} dV_{\mathbf{X}} + \int_{\partial B_{\mathbf{X}}} \mathbf{x} \times \mathbf{T} dS_{\mathbf{X}}$, la résultante du couple appliqué.

Ceci nous permet d'obtenir la symétrie du second tenseur de Piola-Kirchhoff $\mathbf{S} = \mathbf{F}^{-1} \cdot \mathbf{P}$, $\mathbf{S} = \mathbf{S}^\top$, ou de manière équivalente la symétrie du tenseur de Cauchy.

2.2.4 Conservation de l'énergie

En utilisant les équations d'équilibre sous forme faible, la puissance mécanique développée par les efforts extérieurs s'écrit

$$W = \int_{B_{\mathbf{X}}} \mathbf{b} \cdot \mathbf{V} dV_{\mathbf{X}} + \int_{\partial B_{\mathbf{X}}} \mathbf{T} \cdot \mathbf{V} dS_{\mathbf{X}} = \int_{B_{\mathbf{X}}} \mathbf{P} : \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial t} + \rho_0 \mathbf{V} \cdot \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} dV_{\mathbf{X}}. \quad (2.2.9)$$

Cette égalité exprime le théorème de l'énergie cinétique. Si on considère la puissance thermique provenant de sources externes \mathbf{Q} , on a

$$Q = \int_{B_{\mathbf{X}}} -R dV_{\mathbf{X}} + \int_{\partial B_{\mathbf{X}}} Q dS_{\mathbf{X}} = \int_{B_{\mathbf{X}}} -\text{div}(\mathbf{Q}) - R dV_{\mathbf{X}}, \quad (2.2.10)$$

en notant R la source de chaleur volumique prescrite. En notant $E = \int_{B_{\mathbf{X}}} E + \rho_0 \frac{\mathbf{V}^2}{2} dV_{\mathbf{X}}$ l'énergie totale, on obtient l'équation de conservation

$$\frac{d}{dt} E = W + Q. \quad (2.2.11)$$

Cette équation est connue sous le nom de *Premier Principe de la Thermodynamique*. Par application du théorème de localisation écrit dans la configuration matérielle où l'on a $\frac{\partial E}{\partial t} = \frac{dE}{dt}$, on obtient l'expression correspondante

$$\frac{dE}{dt} = \mathbf{P} : \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial t} + \text{div}(-\mathbf{Q}) + R \quad \forall \mathbf{X} \in B_{\mathbf{X}}. \quad (2.2.12)$$

La variation locale d'énergie interne est la somme du travail développé par les efforts intérieurs et de la quantité de chaleur apportée par l'extérieur.

2.3 Entropie

L'entropie totale S dans $B_{\mathbf{X}}$ s'écrit en fonction de l'entropie volumique s

$$S = \int_{B_{\mathbf{X}}} s dV_{\mathbf{X}}. \quad (2.3.1)$$

L'entropie apportée par les sources de chaleur s'écrit (en notant T la température absolue)

$$\mathbf{Q}_T = \int_{B_{\mathbf{X}}} -\frac{R}{T} dV_{\mathbf{X}} + \int_{\partial B_{\mathbf{X}}} \frac{Q}{T} dS_{\mathbf{X}}. \quad (2.3.2)$$

La seconde loi de la thermodynamique établit que la production d'entropie est toujours positive ou nulle. Si on note $S_c = \int_{B_{\mathbf{X}}} s_c dV_{\mathbf{X}}$ l'entropie créée, elle s'écrit

$$S_c = \frac{d}{dt} S - \mathbf{Q}_T \geq 0. \quad (2.3.3)$$

Par application du théorème de localisation écrit en configuration matérielle où $\frac{\partial s}{\partial t} = \frac{ds}{dt}$, il vient

$$s_c = \frac{ds}{dt} - \frac{1}{T} \left[-\text{div}(\mathbf{Q}) + R + \frac{\mathbf{Q}}{T} \cdot \nabla_{\mathbf{X}} T \right] \geq 0 \quad \forall \mathbf{X} \in B_{\mathbf{X}}. \quad (2.3.4)$$

2.4 Matériaux standards généralisés

On introduit la densité volumique d'énergie libre (définie par unité de volume de la configuration de référence)

$$\psi = E - sT, \quad (2.4.1)$$

et on suppose que c'est une fonction connue du point \mathbf{X} , du tenseur \mathbf{F} , des variables internes \mathbf{k} et de la température T .

2.4.1 Lois de comportement

Pour un matériau standard généralisé, l'équation constitutive sur la contrainte de Piola-Kirchhoff, est prise de la forme

$$\mathbf{P} = \frac{\partial \psi(\mathbf{X}, \mathbf{F}, \mathbf{k}, T)}{\partial \mathbf{F}}, \quad (2.4.2)$$

avec ψ une fonction objective de \mathbf{F} , i.e. une fonction de $\mathbf{F}^T \cdot \mathbf{F}$. Pour l'équation constitutive sur la température, l'hypothèse des matériaux standards généralisés suppose que l'on a

$$s = -\frac{\partial \psi(\mathbf{X}, \mathbf{F}, \mathbf{k}, T)}{\partial T} \quad (2.4.3)$$

afin d'annuler toute création d'entropie dans un processus réversible. On introduit enfin la variable duale sur les variables internes

$$\mathbf{K} = -\frac{\partial \psi(\mathbf{X}, \mathbf{F}, \mathbf{k}, T)}{\partial \mathbf{k}}. \quad (2.4.4)$$

2.4.2 Equilibre configurationnel dans le cas quasistatique

On peut établir en écrivant un pull-back de la forme forte de l'équilibre, l'équilibre configurationnel

$$\begin{cases} (\mathbf{F}^\top - \mathbf{1}) \cdot \text{div}(\mathbf{P}) = -(\mathbf{F}^\top - \mathbf{1}) \cdot \mathbf{b} \quad \forall \mathbf{X} \in B_{\mathbf{X}}, \\ (\mathbf{F}^\top - \mathbf{1}) \cdot (\mathbf{P} \cdot \mathbf{N}) = (\mathbf{F}^\top - \mathbf{1}) \cdot \mathbf{T} \quad \forall \mathbf{X} \in \partial B_{\mathbf{X}}. \end{cases} \quad (2.4.5)$$

Or, le terme en $(\mathbf{F}^\top - \mathbf{1}) \cdot \text{div}(\mathbf{P})$ s'écrit également

$$(\mathbf{F}^\top - \mathbf{1}) \cdot \text{div}(\mathbf{P}) = \text{div}((\mathbf{F}^\top - \mathbf{1}) \cdot \mathbf{P}) - \mathbf{P} : \nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{F}. \quad (2.4.6)$$

En utilisant la loi de comportement (2.4.2) et avec ψ fonction du point \mathbf{X} , du tenseur \mathbf{F} , des variables internes \mathbf{k} et de la température T , il vient

$$\mathbf{P} : \nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{F} = \nabla_{\mathbf{X}} \psi + \mathbf{K} : \nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{k} + s \nabla_{\mathbf{X}} T - \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{X}}_{|\mathbf{F}, T, \mathbf{k}}. \quad (2.4.7)$$

L'équation (2.4.5) s'écrit alors

$$\text{div}((\mathbf{F}^\top - \mathbf{1}) \cdot \mathbf{P}) - \text{div}(\psi \mathbf{1}) - \mathbf{K} : \nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{k} - s \nabla_{\mathbf{X}} T + \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{X}}_{|\mathbf{F}, T, \mathbf{k}} = -(\mathbf{F}^\top - \mathbf{1}) \cdot \mathbf{b}. \quad (2.4.8)$$

En introduisant le tenseur d'eshelby $\Sigma = \psi \mathbf{1} - (\mathbf{F}^\top - \mathbf{1}) \cdot \mathbf{P}$, on aboutit aux deux relations définissant l'équilibre configurationnel

$$\begin{cases} \text{div}(\Sigma) = -\mathbf{K} : \nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{k} - s \nabla_{\mathbf{X}} T + \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{X}}_{|\mathbf{F}, T, \mathbf{k}} + (\mathbf{F}^\top - \mathbf{1}) \cdot \mathbf{b} \quad \forall \mathbf{X} \in B_{\mathbf{X}}, \\ \Sigma \cdot \mathbf{N} = \psi \mathbf{N} - (\mathbf{F}^\top - \mathbf{1}) \cdot \mathbf{T} \quad \forall \mathbf{X} \in \partial B_{\mathbf{X}}. \end{cases} \quad (2.4.9)$$

2.4.3 Dissipation (cas quasistatique)

On calcule dans cette section la dissipation totale D . Pour cela, on multiplie par T le second principe (2.3.4) et on obtient

$$T \frac{ds}{dt} + \text{div}(\mathbf{Q}) - R - \frac{\mathbf{Q}}{T} \cdot \nabla_{\mathbf{X}} T \geq 0 \quad \forall \mathbf{X} \in B_{\mathbf{X}}. \quad (2.4.10)$$

Cette expression introduit deux dissipations :

- la dissipation conductive : $d^{cond} = -\frac{\mathbf{Q}}{T} \cdot \nabla_{\mathbf{X}} T$ qui sera positive pour un choix adéquat de la loi de comportement sur Q ,
- la dissipation locale : $d^{loc} = T \frac{ds}{dt} + \text{div}(\mathbf{Q}) - R$ que l'on calcule à partir du potentiel ϕ .

En prenant en compte (2.4.1), on peut réécrire la dissipation locale

$$d^{loc} = \frac{dT s}{dt} - s \frac{dT}{dt} + \operatorname{div}(\mathbf{Q}) - R, \quad (2.4.11)$$

puis par introduction de l'énergie libre

$$d^{loc} = \frac{dE}{dt} - \frac{d\psi}{dt} - s \frac{dT}{dt} + \operatorname{div}(\mathbf{Q}) - R. \quad (2.4.12)$$

Par la conservation d'énergie (2.2.12), on obtient ensuite

$$d^{loc} = \mathbf{P} : \frac{d\mathbf{F}}{dt} - \frac{d\psi}{dt} - s \frac{dT}{dt}. \quad (2.4.13)$$

D'après la construction de ψ , les lois de comportement et la construction de la variable duale, on a

$$\frac{d\psi}{dt} = \mathbf{P} : \frac{d\mathbf{F}}{dt} - \mathbf{K} : \frac{d\mathbf{k}}{dt} - s \frac{\partial T}{\partial t}, \quad (2.4.14)$$

ce qui nous permet finalement d'obtenir (avec $\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{dT}{dt}$ en configuration matérielle)

$$d^{loc} = \mathbf{K} : \frac{d\mathbf{k}}{dt}, \quad (2.4.15)$$

il faut donc vérifier que l'on a d^{loc} positif ou nul dans tout processus admissible.

Chapitre 3

Lois de comportement

Dans ce chapitre, on présente plusieurs exemples de lois de comportement simples dont on se sert dans les chapitres suivants. On détaille :

- une loi de comportement hyperélastique isotrope,
- une loi de comportement plastique en grandes déformations semblable à la plasticité de Von-Mises en petits déplacements,
- une loi de comportement viscoélastique basée sur une représentation rhéologique.

3.1 Hyperélasticité

3.1.1 Energie libre

L'hypothèse d'élasticité consiste à supposer que le tenseur des contraintes de Piola-Kirchhoff \mathbf{P} à l'instant $t \in [0, T]$ et au point matériel $\mathbf{X} \in B_{\mathbf{X}}$ ne dépend que des propriétés du matériau au point $\mathbf{X} \in B_{\mathbf{X}}$ et du tenseur gradient de déformation \mathbf{F} . On note ainsi $\mathbf{P}(t, \mathbf{X}) = \mathbf{f}(\mathbf{F}(t, \mathbf{X}), \mathbf{X})$. On restreint encore ce cadre en introduisant l'hypothèse d'hyperélasticité, c'est-à-dire en supposant qu'aucune énergie n'est emmagasinée dans le matériau lors des cycles de charge-décharge. Dans ce cadre (décrit dans [83]), il existe une fonctionnelle d'énergie libre

$$\psi : \mathbb{R}^{3 \times 3} \times B_{\mathbf{X}} \rightarrow \mathbb{R}, \quad (3.1.1)$$

continûment différentiable par rapport à son deuxième argument, telle que $\forall \mathbf{X} \in B_{\mathbf{X}}$ et $\forall t \in [0, T]$

$$\mathbf{P}(t, \mathbf{X}) = \mathbf{f}(\mathbf{F}(t, \mathbf{X}), \mathbf{X}) = \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{F}}(\mathbf{F}(t, \mathbf{X}), \mathbf{X}), \quad \forall (t, \mathbf{X}) \in [0, T] \times B_{\mathbf{X}}. \quad (3.1.2)$$

3.1.2 Symétrie

Nous pouvons en outre préciser la forme de l'énergie libre ψ du matériau hyperélastique dans le cadre d'hypothèses physiques adaptées. En particulier, il importe que l'énergie libre soit définie en chaque point d'une façon indépendante du choix du référentiel. On dit alors que l'énergie libre est indépendante du référentiel si pour toute rotation $\mathbf{Q} \in SO^+(3)$, on a $\forall \mathbf{X} \in B_{\mathbf{X}}$

$$\psi(\mathbf{Q} \cdot \mathbf{F}, \mathbf{X}) = \psi(\mathbf{F}, \mathbf{X}), \quad \forall \mathbf{F}, \det \mathbf{F} > 0. \quad (3.1.3)$$

Cette condition nous permet d'écrire l'énergie libre en fonction du tenseur de Cauchy-Green à droite $\mathbf{C} = \mathbf{F}^T \cdot \mathbf{F}$ et de \mathbf{X}

$$\psi(\mathbf{F}, \mathbf{X}) = \psi(\mathbf{C}, \mathbf{X}). \quad (3.1.4)$$

Le tenseur des contraintes de Piola-Kirchhoff s'écrit alors sous la forme

$$\mathbf{P} = \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{F}}(\mathbf{F}, \mathbf{X}) = 2\mathbf{F} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{C}}(\mathbf{C}, \mathbf{X}), \quad \forall \mathbf{X} \in B_{\mathbf{X}}, \quad \forall \mathbf{F}, \det \mathbf{F} > 0. \quad (3.1.5)$$

En introduisant le second tenseur de Piola-Kirchhoff $\mathbf{S} = \mathbf{F}^{-1} \cdot \mathbf{P}$, on obtient

$$\mathbf{S} = 2 \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{C}}(\mathbf{C}, \mathbf{X}). \quad (3.1.6)$$

Sous une hypothèse d'isotropie, la loi de comportement prend une forme particulière. L'énergie libre caractérise effectivement un matériau isotrope si pour toute rotation $\mathbf{Q} \in SO^+(3)$, on a $\forall \mathbf{X} \in B_{\mathbf{X}}$

$$\psi(\mathbf{F} \cdot \mathbf{Q}, \mathbf{X}) = \psi(\mathbf{F}, \mathbf{X}), \quad \forall \mathbf{F}, \det \mathbf{F} > 0. \quad (3.1.7)$$

On renvoie à [31] pour montrer que ψ est une fonctionnelle d'énergie libre sous forme indépendante du référentiel et caractérisant un matériau isotrope si et seulement si elle s'écrit en fonction des invariants principaux de \mathbf{C}

$$\psi(\mathbf{F}, \mathbf{X}) = \psi(\text{tr } \mathbf{C}, \text{tr } \text{cof } \mathbf{C}, \det \mathbf{C}, \mathbf{X}). \quad (3.1.8)$$

3.1.3 Lois de comportement hyperélastiques pour le caoutchouc

De nombreuses lois ont été proposées pour décrire le comportement hyperélastique du caoutchouc. On peut grossièrement les classer en trois catégories :

- les lois basées sur un développement mathématique de ψ comme les séries de Rivlin [123] en fonction des invariants ou les exposants d'Ogden [111] en fonction des valeurs propres de \mathbf{C} ,
- les lois qui déterminent les fonctions $\frac{\partial \psi}{\partial \text{tr } \mathbf{C}}$ et $\frac{\partial \psi}{\partial \text{tr } \text{cof } \mathbf{C}}$ à partir d'observations expérimentales comme les modèles de Rivlin-Saunders [124] et Hart-Smith [61],

- les lois basées sur une vision constructive de la loi de comportement. Ils sont construits à partir de méthodes statistiques appliquées au réseau de chaînes polymères. On peut citer le modèle Néo-Hookéen [153], le modèle de tube étendu [69], le modèle de micro-sphère [99], le modèle variationnel [52].

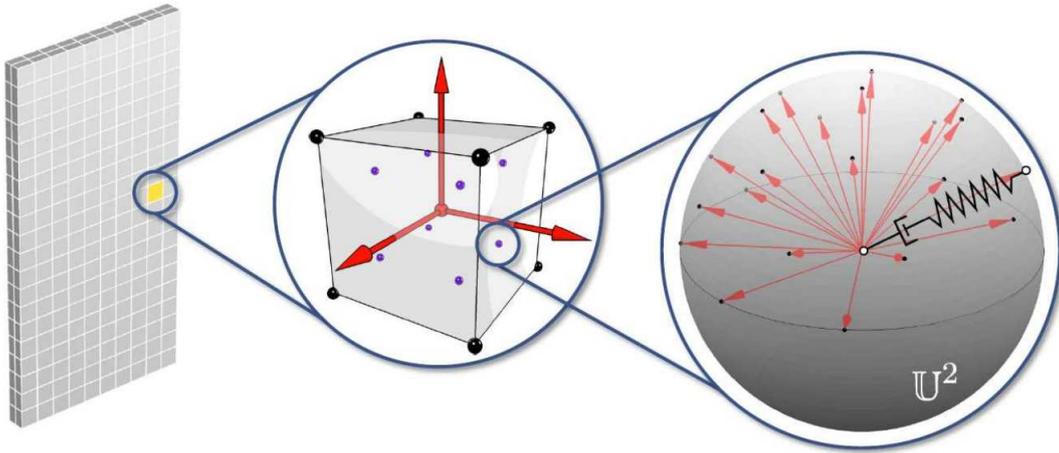


FIGURE 3.1.1: Concept de micro-sphère. De gauche à droite, représentation d'une éprouvette test, puis d'un élément, puis d'un point de Gauss. Les directions sont indiquées par des flèches en rouge.

3.2 Loi de comportement élastoplastique en grandes déformations

3.2.1 Plasticité basée sur la décomposition multiplicative du gradient de déformation

La formulation des modèles élastoplastiques en grandes déformations a pour source les travaux pionniers de Hill [65] et de Green-Naghdi [54]. Les premiers développements éléments-finis de ces modèles ont d'abord été concentrés sur l'hypoélasticité [6]. En hypoélasticité, l'élastoplasticité standard petites déformations est étendue au grandes déformations en utilisant, dans les équations d'évolution, une mesure objective du gradient temporel de la contrainte. Beaucoup de controverses ont alors été soulevées sur :

- l'utilisation d'une mesure objective arbitraire du gradient temporel de contrainte [106],
- le manque d'objectivité des expressions incrémentales [127],
- l'oscillation de la contrainte observée lors d'un chargement monotone [105],
- la dissipation présente dans le domaine élastique [136].

Dans ce contexte, deux formulations ont été développées :

1. celle basée sur une décomposition multiplicative du gradient de déformation en une partie élastique \mathbf{F}_e et une partie inélastique \mathbf{F}_p : $\mathbf{F} = \mathbf{F}_e \cdot \mathbf{F}_p$ [137, 138],
2. son extension construite sur la base d'une nouvelle mesure de la déformation plastique lagrangienne \mathbf{E}^p [98].

La première est motivée par la théorie micro-mécanique de la plasticité cristalline et s'applique aux modèles phénoménologiques. Cette formulation, nommée théorie de Green-Nagdhi, a été étendue par Miehe [98], en une formulation additive de la plasticité en grandes déformations, qui a proposé de travailler dans l'espace des déformations logarithmiques. Les résultats de ces deux formulations ont été comparés par Miehe avec les résultats obtenus avec les formulations multiplicatives pour des matériaux isotropes et anisotropes. Il a révélé qu'elles étaient très proches l'une de l'autre.

Pour pouvoir appliquer le problème adjoint du chapitre 5 à un modèle de plasticité simple, on s'intéresse plus en détails à la formulation basée sur une décomposition multiplicative locale et à son application la plus simple : La plasticité J_2 [140].

Relations cinématiques associées à la configuration intermédiaire :

Motivé par la plasticité cristalline, on postule l'existence d'une décomposition multiplicative du gradient sous la forme

$$\mathbf{F}(\mathbf{X}, t) = \mathbf{F}_e(\mathbf{X}, t) \cdot \mathbf{F}_p(\mathbf{X}, t) \quad \forall \mathbf{X} \in B_{\mathbf{X}}, \quad \forall t \in [0, T]. \quad (3.2.1)$$

D'un point de vue phénoménologique, on peut interpréter \mathbf{F}_e^{-1} comme la déformation locale de relâchement de la contrainte dans chaque voisinage $\mathcal{O}_{\mathbf{x}}$ de la configuration actuelle $B_{\mathbf{x}}$ (Figure 3.2.1).

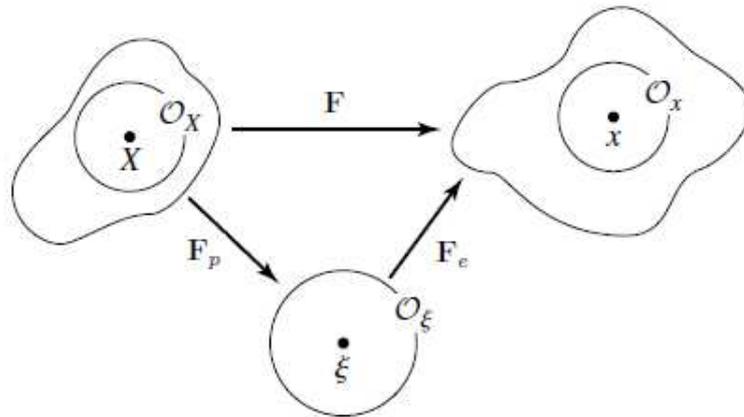


FIGURE 3.2.1: Décomposition multiplicative

Par conséquent, on suppose implicitement que la configuration locale intermédiaire, définie par \mathbf{F}_e^{-1} , est libre de contrainte. En suivant les notations précédentes, on peut définir les tenseurs de déformations (déformation totale et déformation plastique) dans la configuration de référence

$$\mathbf{E} = \frac{1}{2} (\mathbf{F}^\top \cdot \mathbf{F} - \mathbf{1}) = \frac{1}{2} (\mathbf{C} - \mathbf{1}), \quad (3.2.2)$$

et

$$\mathbf{E}_p = \frac{1}{2} (\mathbf{F}_p^\top \cdot \mathbf{F}_p - \mathbf{1}) = \frac{1}{2} (\mathbf{C}_p - \mathbf{1}). \quad (3.2.3)$$

On peut également introduire les tenseurs en configuration actuelle

$$\mathbf{b} = \mathbf{F} \cdot \mathbf{F}^\top \quad (3.2.4)$$

et

$$\mathbf{b}_e = \mathbf{F}_e \cdot \mathbf{F}_e^\top = \mathbf{F} \cdot \mathbf{C}_p^{-1} \cdot \mathbf{F}^\top, \quad (3.2.5)$$

qui nous permettent d'introduire, de manière analogue, les tenseurs de déformations totales et élastiques définis dans la configuration actuelle

$$\mathbf{e} = \frac{1}{2} (\mathbf{1} - \mathbf{F}^{-\top} \cdot \mathbf{F}^{-1}) = \frac{1}{2} (\mathbf{1} - \mathbf{b}^{-1}), \quad (3.2.6)$$

et

$$\mathbf{e}_e = \frac{1}{2} (\mathbf{1} - \mathbf{F}_e^{-\top} \cdot \mathbf{F}_e^{-1}) = \frac{1}{2} (\mathbf{1} - \mathbf{b}_e^{-1}). \quad (3.2.7)$$

Décomposition multiplicative volumétrique-déviatorique :

Dans le contexte de la théorie des petites déformations, le tenseur de déformation $\boldsymbol{\varepsilon}$ est décomposé en une partie volumétrique et une partie déviatorique de manière additive

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \text{dev } \boldsymbol{\varepsilon} + \frac{1}{3} \text{tr } \boldsymbol{\varepsilon} \mathbf{1}, \quad (3.2.8)$$

le comportement plastique étant surtout observé sur le déviateur. Cette décomposition perd son sens en grandes déformations. Dans le cadre multiplicatif, on peut utiliser la partie préservant le volume du gradient de déformation $\bar{\mathbf{F}}$, introduite par [48], qui s'écrit

$$\bar{\mathbf{F}} = (\det \mathbf{F})^{-1/3} \mathbf{F}, \quad (3.2.9)$$

pour remplacer la notion en petites déformations. On peut également écrire le tenseur de Cauchy-Green sous cette forme

$$\bar{\mathbf{C}} = (\det \mathbf{F})^{-2/3} \mathbf{C}. \quad (3.2.10)$$

On peut alors dériver la relation précédente par rapport au temps pour obtenir

$$\dot{\bar{\mathbf{C}}} = 2\bar{\mathbf{F}}^\top \cdot \text{dev } (\mathbf{d}) \cdot \bar{\mathbf{F}}. \quad (3.2.11)$$

3.2.2 Plasticité J_2 en grandes déformations

Dans cette section, on considère la formulation en grandes déformations de la plasticité J_2 avec écrouissage isotrope. Tout d'abord, on suppose que le comportement reste isotrope. En conséquence, l'énergie libre est indépendante de l'orientation de la configuration de référence. Ensuite, on suppose, en accord avec la plasticité dans les métaux, que l'écoulement plastique est isochore

$$\det \mathbf{F}_p = \det \mathbf{C}_p = 1 \quad \text{d'où} \quad \det \mathbf{F} = \det \mathbf{F}_e. \quad (3.2.12)$$

Partie hyperélastique

L'énergie libre s'écrit alors sous la forme développée

$$\psi = U(\det \mathbf{F}_e) + \bar{\psi}(\bar{\mathbf{b}}_e), \quad (3.2.13)$$

avec

- la partie volumétrique $U(\det \mathbf{F}_e) = \frac{\kappa}{2} \left[\frac{1}{2} [(\det \mathbf{F}_e)^2 - 1] - \ln \det \mathbf{F}_e \right]$,
- la partie déviatorique $\bar{\psi}(\bar{\mathbf{b}}_e) = \frac{\mu}{2} (\text{tr} \bar{\mathbf{b}}_e - 3) = \frac{\mu}{2} (\text{tr} \bar{\mathbf{C}}_e - 3)$ où $\bar{\mathbf{C}}_e = (\det \mathbf{F}_e)^{-2/3} \mathbf{F}_e^\top \cdot \mathbf{F}_e$.

En utilisant la relation

$$\text{tr} \bar{\mathbf{b}}_e = \text{tr} [\bar{\mathbf{C}} \cdot \bar{\mathbf{C}}_p^{-1}] = \bar{\mathbf{C}} : \bar{\mathbf{C}}_p^{-1}, \quad (3.2.14)$$

avec $\bar{\mathbf{C}}_p = (\det \mathbf{F}_p)^{-2/3} \mathbf{C}_p = \mathbf{C}_p$, on peut obtenir une expression de l'énergie libre plus adaptée à notre cadre de travail lagrangien

$$\psi(\mathbf{C}, \mathbf{C}_p) = U(\det \mathbf{F}) + \frac{\mu}{2} (\bar{\mathbf{C}} : \bar{\mathbf{C}}_p^{-1} - 3). \quad (3.2.15)$$

Seuil de Mises-Heyber

Le seuil de Mises-Heyber à ne pas dépasser par le tenseur des contraintes s'écrit en fonction de la contrainte de Kirchhoff eulérienne $\boldsymbol{\tau} = J\boldsymbol{\sigma}$ de la même manière qu'en petites déformations

$$\varrho(\boldsymbol{\tau}, \alpha) = \|\text{dev } \boldsymbol{\tau}\| - \sqrt{\frac{2}{3}} [\sigma_\varrho + K\alpha] \leq 0, \quad (3.2.16)$$

avec

- $\boldsymbol{\tau} = 2\mathbf{F}_e \cdot \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{C}_e} \cdot \mathbf{F}_e^\top$ la contrainte de Kirchhoff eulérienne et $\mathbf{s} = \text{dev } \boldsymbol{\tau}$,
- σ_ϱ la contrainte seuil,
- $K > 0$ le module d'écrouissage isotrope,
- α la variable d'écrouissage.

Loi d'écoulement associative

De manière analogue à la théorie infinitésimale, en considérant la fonction seuil ϱ et l'énergie libre ψ , la loi d'écoulement associative correspondante est déterminée de manière unique par le principe de dissipation plastique maximum. Dans notre cas, les relations (3.2.16) et (3.2.15) nous permettent d'obtenir la loi d'écoulement plastique [139]

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\mathbf{C}}_p^{-1}) = -\frac{2}{3}\gamma (\mathbf{C} : \mathbf{C}_p^{-1}) \mathbf{F}^{-1} \cdot \mathbf{n} \cdot \mathbf{F}^{-\top}, \quad \mathbf{n} = \mathbf{s}/\|\mathbf{s}\|, \quad (3.2.17)$$

à compléter par la loi élastique

$$\mathbf{s} = \mu \operatorname{dev} \bar{\mathbf{b}}_e = \mu \left[\mathbf{F} \cdot \mathbf{C}_p^{-1} \cdot \mathbf{F}^\top - \frac{1}{3} (\mathbf{C} : \mathbf{C}_p^{-1}) \right] \det(\mathbf{F}_e)^{-2/3}. \quad (3.2.18)$$

Loi d'écrouissage isotrope et conditions de charge/décharge

De la même manière que dans la théorie linéaire, on suppose que la variable d'écrouissage suit la loi d'évolution

$$\dot{\alpha} = \sqrt{\frac{2}{3}} \gamma \quad (3.2.19)$$

Dans les deux lois (3.2.17) et (3.2.19), γ est le multiplicateur plastique vérifiant les conditions de Kuhn-Tucker de charge/décharge

$$\gamma \geq 0 \quad \varrho(\boldsymbol{\tau}, \alpha) \leq 0 \quad \gamma \varrho(\boldsymbol{\tau}, \alpha) = 0. \quad (3.2.20)$$

La condition de consistance s'écrit enfin

$$\gamma \dot{\varrho}(\boldsymbol{\tau}, \alpha) = 0. \quad (3.2.21)$$

3.3 Exemple d'une loi de comportement viscoélastique en grandes déformations

3.3.1 Modèle viscoélastique de base [82]

L'hypothèse d'hyperélasticité ne permettant pas de prendre en compte l'historique de déformation des matériaux, nous complétons ici la présentation précédente en introduisant le cadre viscoélastique, tel que décrit dans [82]. Ce modèle est basé sur le modèle rhéologique de Kelvin-Voigt schématisé (Figure 3.3.1).

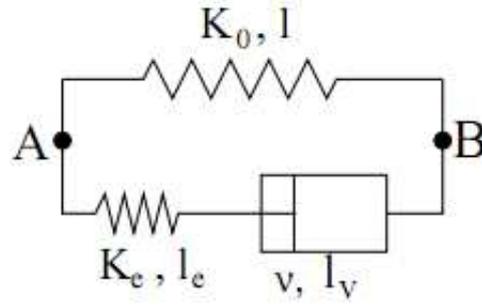


FIGURE 3.3.1: Modèle rhéologique de Kelvin-Voigt pour un matériau viscoélastique

Il est composé de deux branches parallèles :

- une purement élastique et composée d'un ressort de raideur K_0 , d'élongation l ,
- une, partiellement visqueuse, comprenant un ressort de raideur K_e d'élongation l_e , et un vérin de coefficient de viscosité ν d'élongation l_ν .

Si la force f est exercée entre les extrêmités A et B du système, son évolution est alors décrite par le système d'équations

$$\begin{cases} f = K_0 l + K_e l_e \\ \nu \dot{l}_\nu = K_e l_e \\ l = l_e + l_\nu \end{cases} . \quad (3.3.1)$$

En grandes déformations, on considère par analogie que le champ de déformation \mathbf{F} dans le matériau se décompose en une partie visqueuse \mathbf{F}_ν et une partie élastique \mathbf{F}_e , et on écrit

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_e \cdot \mathbf{F}_\nu. \quad (3.3.2)$$

De la même manière qu'en plasticité, on a :

- $\mathbf{C}_e = \mathbf{F}_e^\top \cdot \mathbf{F}_e$ qui désigne le tenseur de Cauchy-Green à droite de la partie élastique du champ de déplacements,
- $\mathbf{C}_\nu = \mathbf{F}_\nu^\top \cdot \mathbf{F}_\nu$ qui désigne le tenseur de Cauchy-Green à droite de la partie visqueuse du champ de déplacements.

Si on suppose de plus que le matériau est incompressible dans son comportement élastique et visqueux, ces quantités sont alors contraintes, par

$$\det \mathbf{C}_\nu = 1 \quad \text{et} \quad \det \mathbf{C} = 1. \quad (3.3.3)$$

3.3.2 Loi de comportement

A tout état déformé caractérisé par \mathbf{C} et \mathbf{C}_ν , on associe alors l'énergie de déformation suivante

$$\psi(\mathbf{C}, \mathbf{C}_\nu) = \psi_0(\mathbf{C}) + \psi_e(\mathbf{C}_e), \quad (3.3.4)$$

constituée de l'énergie de déformation de la branche élastique ψ_0 , et de l'énergie de déformation élastique de la branche visqueuse ψ_e . Dans ce cadre, on obtient l'expression du premier tenseur de Piola-Krichhoff

$$\mathbf{P} = 2\mathbf{F} \cdot \frac{\partial \psi(\mathbf{C}, \mathbf{C}_\nu)}{\partial \mathbf{C}} - p \operatorname{cof} \mathbf{F}, \quad (3.3.5)$$

où figure la pression hydrostatique $p \in \mathcal{P}$, associée à la contrainte d'incompressibilité

$$\int_{B_{\mathbf{x}}} (\det \mathbf{F} - 1) q = 0, \quad \forall q \in \mathcal{P}. \quad (3.3.6)$$

En introduisant la variable interne $\mathbf{A} = \mathbf{C}_\nu^{-1}$, par différentiation de l'énergie par rapport à la variable interne et introduction d'un potentiel de dissipation $\phi(\mathbf{A}) = \nu \dot{\mathbf{A}} : \dot{\mathbf{A}}$. L'équation d'évolution s'écrit conformément au second principe [82]

$$\nu \frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{A}^{-1}) = \frac{\partial \psi(\mathbf{C}, \mathbf{C}_\nu)}{\partial \mathbf{A}} + q \operatorname{cof} \mathbf{A}. \quad (3.3.7)$$

3.4 Cadre linéarisé

On compare les résultats de simulation à un calcul analytique dont les solutions analytiques ne sont connues que dans le cas linéaire. On a donc besoin de linéariser les lois de comportements. Les hypothèses de linéarisation sont les suivantes.

3.4.1 Hypothèses de linéarisation

En notant le gradient de déplacement

$$\nabla_{\mathbf{x}} \boldsymbol{\xi} = \mathbf{F} - \mathbf{1}, \quad (3.4.1)$$

l'hypothèse de transformation infinitésimale suppose que ce gradient est petit quand on se déplace de l'état d'équilibre initial à l'état d'équilibre actuel

$$\|\nabla_{\mathbf{x}} \boldsymbol{\xi}\| \ll 1. \quad (3.4.2)$$

On rappelle que cette hypothèse implique celle des déformations infinitésimales. Le tenseur de Green-Lagrange se réduit alors au premier ordre au tenseur linéarisé

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2} (\nabla_{\mathbf{x}} \boldsymbol{\xi} + \nabla_{\mathbf{x}}^\top \boldsymbol{\xi}). \quad (3.4.3)$$

De cette linéarisation découle une simplification des variables internes

$$\mathbf{b}_e = \mathbf{1} + 2(\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^p), \quad (3.4.4)$$

$$\mathbf{C}_p^{-1} = \mathbf{1} - 2\boldsymbol{\varepsilon}^p. \quad (3.4.5)$$

3.4.2 Linéarisation des lois de comportements

Elasticité linéaire

Par linéarisation, on obtient

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}, \quad (3.4.6)$$

avec \mathbf{C} le tenseur des modules d'élasticité qui possède les symétries

$$\mathcal{C}_{ijkl} = \mathcal{C}_{jikl} = \mathcal{C}_{klij}, \quad (3.4.7)$$

et qui est associé à une forme quadratique définie positive sur les tenseurs symétriques

$$\boldsymbol{\varepsilon} : \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon} > 0, \quad \forall \boldsymbol{\varepsilon}, \|\boldsymbol{\varepsilon}\| \neq 0, \boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}^\top. \quad (3.4.8)$$

Compte tenu des symétries, un comportement élastique anisotrope général est susceptible d'être défini par au maximum 21 coefficients.

Plasticité linéarisée

Par linéarisation, si un élément de matière subit une déformation $\boldsymbol{\varepsilon}$, on définit les parties élastiques $\boldsymbol{\varepsilon}^e$ et plastiques $\boldsymbol{\varepsilon}^p$ de la déformation par

$$\boldsymbol{\varepsilon}^e = \mathbf{C}^{-1} : \boldsymbol{\sigma}, \quad (3.4.9)$$

$$\boldsymbol{\varepsilon}^p = \boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^e. \quad (3.4.10)$$

Pour reprendre le cas précédent, on peut écrire le seuil de Mises sous la forme

$$\varrho(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\alpha}) = \|\text{dev } \boldsymbol{\sigma}\| - \sqrt{\frac{2}{3}} [\sigma_\varrho + K\boldsymbol{\alpha}] \leq 0, \quad (3.4.11)$$

Modèle viscoélastique de base

Le modèle de viscoélasticité de base s'écrit par construction dans le cas linéaire

$$\begin{cases} \boldsymbol{\sigma} = K_0 \boldsymbol{\varepsilon} + K_e \boldsymbol{\varepsilon}^e \\ \nu \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^v = K_e \boldsymbol{\varepsilon}^e \\ \boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}^e + \boldsymbol{\varepsilon}^v \end{cases}. \quad (3.4.12)$$

Calcul de taux de restitution d'énergie

Il est maintenant bien établi que lorsqu'on cherche une grandeur caractéristique associée à la propagation d'une fissure, on peut représenter cette propagation par une perturbation de la configuration de la structure. Ensuite, on peut construire la grandeur caractéristique grâce aux méthodes de dérivation par rapport au domaine [96]. Dans cette partie, nous proposons d'utiliser et d'étendre **formellement** ce type de méthode lorsque le solide a un comportement viscoplastique. Dans ce cadre de travail, la difficulté principale vient de la dépendance en temps du problème. Dans un premier temps, on se propose alors d'introduire le temps physique dans la définition même de la perturbation. Ensuite, on examine plusieurs hypothèses nous permettant de découpler la perturbation et l'évolution inélastique (chapitre 4). On examine également le cas où la perturbation et le processus d'évolution inélastique restent couplés (chapitre 5). Ce dernier cas donne lieu à un calcul de grandeur caractéristique par une méthode d'état adjoint. Des choix concrets de grandeurs caractéristiques ainsi que les détails pratiques de mise en oeuvre du calcul sont enfin étudiés dans :

- le chapitre 6 pour la mise en oeuvre analytique et numérique du calcul de grandeur par la méthode adjointe,
- le chapitre 7 pour la mise en oeuvre numérique de la variation de domaine,
- le chapitre 8 pour les cas de grandeurs explicites.

Chapitre 4

Construction d'une grandeur caractéristique de la rupture par perturbation de domaine

Dans ce chapitre, nous allons construire des grandeurs caractéristiques de la rupture par perturbation de domaine dans le cadre des matériaux dissipatifs. Pour cela, nous allons, tout d'abord, reprendre entièrement la construction classique des perturbations de domaine en y ajoutant une dépendance en temps. Ensuite, nous allons construire les outils permettant de dériver les grandeurs caractéristiques. Enfin, on propose, dans le cadre de perturbation classique sans dépendance au temps, de calculer la dérivée de l'énergie potentielle par rapport à la perturbation. On détermine alors les différentes hypothèses que l'on doit faire pour que ce calcul soit explicite.

4.1 Méthodologie de perturbation

Considérons la configuration de référence (ou configuration matérielle) $B_{\mathbf{x}}$. C'est dans cette configuration qu'on construit l'ensemble de nos grandeurs caractéristiques. Notre méthodologie consiste à créer des petites perturbations virtuelles de ce domaine dépendantes du temps et induisant une variation de l'état thermodynamique de ce domaine. Ces petites perturbations nous permettent de décrire la propagation d'une fissure et de donner un sens à la variation d'une quantité mécanique ou thermodynamique par rapport à la perturbation. Cette méthode, nommée *méthode θ* , a été introduite par Murat-Simon [103] dans le cas d'un ouvert régulier et par Destuynder-Djaoua [39, 40] dans le cas d'une fissure pour des problèmes indépendants du temps physique. Si le temps physique est explicitement présent dans le problème mécanique comme c'est le cas dans les travaux de Sandig [79] qui s'intéresse à la propagation d'une fissure en dynamique, la fonction indicatrice ϑ de la perturbation peut alors dépendre non-linéairement du temps physique t et exister sur un intervalle fini $[t_i, t_f]$.

Puisqu'on s'attache seulement à étendre formellement le cadre d'utilisation de ces perturbations, on ne précisera pas, dans notre cas, le cadre fonctionnel sous-jacent bien qu'il faille être très prudent sur la régularité des champs utilisés. En effet, dans le cas d'un domaine fissuré d'épaisseur nulle, la dérivée de la quantité recherchée peut être nulle sauf dans le cas où les champs sont suffisamment singuliers. En revanche, s'ils le sont trop la dérivée ne peut être définie.

On construit donc une famille de configurations matérielles perturbées, qu'on indexe par le temps $t \in [t_i, t_f]$, $B_{\mathbf{X}}^t$; ainsi qu'une transformation χ^ϑ qui associe la configuration $B_{\mathbf{X}}$ à la configuration $B_{\mathbf{X}}^t$ ensuite soumise à un chargement. Ensuite, on se sert de ce cadre pour obtenir les formules principales servant à exprimer et à dériver les quantités perturbées sur la configuration de départ. Enfin, on développe ces formules au premier ordre en supposant que les perturbations géométriques sont petites.

4.1.1 Les trois configurations

Pour $t \in [t_i, t_f]$, on peut définir trois configurations :

- une configuration de référence $B_{\mathbf{X}}$ qui sera utilisée comme configuration de calcul; c'est en général une configuration matérielle « saine » avant propagation d'une perturbation,
- une configuration matérielle perturbée $B_{\mathbf{X}}^t$ décrivant la géométrie du domaine matériel perturbé avant chargement,
- une configuration courante perturbée $B_{\mathbf{X}}^t$.

Cette représentation, utilisant trois configurations, est intimement liée aux travaux sur les forces configurationnelles de J. D. Eshelby [93], G.A. Maugin [96] et sur la dérivée topologique en grandes déformations [115].

Construction et Propriétés des transformations χ^ϑ

Pour $t \in [t_i, t_f]$, on associe la configuration perturbée $B_{\mathbf{X}}^t$ à la configuration de référence $B_{\mathbf{X}}$ par la transformation

$$\chi^\vartheta : \begin{cases} \mathbf{X} \in B_{\mathbf{X}} \rightarrow \mathbf{X}^t \in B_{\mathbf{X}}^t, \\ \mathbf{X}^t = \chi^\vartheta(\mathbf{X}, t), \end{cases} \quad (4.1.1)$$

et on associe la configuration $B_{\mathbf{X}}$ à la configuration $B_{\mathbf{X}}^t$ par la transformation inverse

$$\Xi^\vartheta : \begin{cases} \mathbf{X}^t \in B_{\mathbf{X}}^t \rightarrow \mathbf{X} \in B_{\mathbf{X}}, \\ \mathbf{X} = \Xi^\vartheta(\mathbf{X}^t, t). \end{cases} \quad (4.1.2)$$

On suppose que la transformation χ^ϑ vérifie les hypothèses suivantes :

1. $B_{\mathbf{X}}^t \subset B_{\mathbf{X}}$, la perturbation conduisant à une diminution du domaine matériel « sain »,
2. χ^ϑ est un difféomorphisme quand ϑ est proche de 0,

3. $\chi^0(\mathbf{X}, 0)$ est l'identité sur $B_{\mathbf{X}}$,

4. χ^ϑ est différentiable par rapport à ϑ en $\vartheta = 0$, de dérivée $\frac{\partial \chi^\vartheta}{\partial \vartheta} = \boldsymbol{\theta}(\mathbf{X})$.

On écrit alors localement en temps la transformation χ^ϑ sous la forme

$$\chi^\vartheta(\mathbf{X}, t) = \mathbf{X} + \vartheta(t) \boldsymbol{\theta}(\mathbf{X}) . \quad (4.1.3)$$

De plus, on pose

$$\forall t \in [t_i, t_f] \quad \vartheta(t) = \eta\tau = \eta(t - t_i) , \quad (4.1.4)$$

avec $\eta \ll 1$ un facteur d'échelle. On suppose en effet que la variation temporelle est linéaire en temps ce qui n'impose aucune restriction puisqu'on effectue un calcul de perturbation linéaire où le résultat dépend linéairement de la perturbation de domaine. Le calcul est alors simplifié puisqu'on a $\frac{d\vartheta}{dt} = \eta$.

Transformations entre les autres configurations

La transformation physique entre la configuration $B_{\mathbf{X}}^t$ et la configuration $B_{\mathbf{x}}^t$ s'écrit

$$\phi^\vartheta : \begin{cases} \mathbf{X}^t \in B_{\mathbf{X}}^t \rightarrow \mathbf{x}^t \in B_{\mathbf{x}}^t, \\ \mathbf{x}^t = \phi^\vartheta(\mathbf{X}^t, t). \end{cases} \quad (4.1.5)$$

La transformation complète entre la configuration $B_{\mathbf{X}}$ et la configuration $B_{\mathbf{x}}^t$ s'écrit $\varsigma^\vartheta = \phi^\vartheta \circ \chi^\vartheta$ avec

$$\varsigma^\vartheta : \begin{cases} \mathbf{X} \in B_{\mathbf{X}} \rightarrow \mathbf{x}^t \in B_{\mathbf{x}}^t, \\ \mathbf{x}^t = \varsigma^\vartheta(\mathbf{X}, t). \end{cases} \quad (4.1.6)$$

Sur la figure 4.1.1, on décrit les relations entre ces trois configurations.

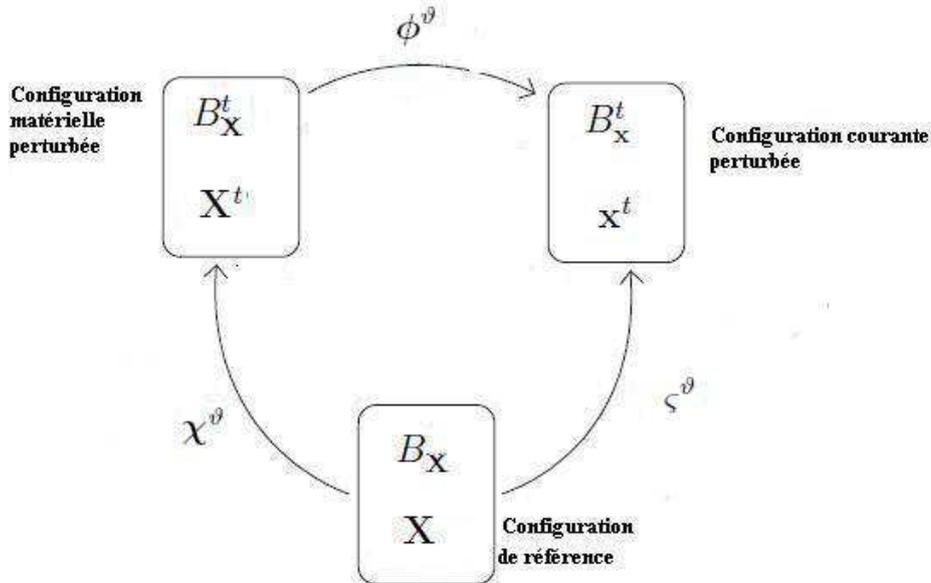


FIGURE 4.1.1: Les configurations du système.

Les relations entre les différentes configurations étant définies, on peut exprimer l'ensemble des quantités perturbées sur la configuration de calcul.

4.1.2 Formules liées au transport des quantités définies sur $B_{\mathbf{X}}^t$ dans la configuration de calcul

Toute quantité générique (mécanique, géométrique ou thermodynamique) \mathbf{Y}^t définie sur la configuration matérielle perturbée peut être transportée sur la configuration de référence

$$\mathbf{Y}^t(\mathbf{X}^t, t) = \mathbf{Y}^t(\boldsymbol{\chi}^\vartheta(\mathbf{X}, t), t). \quad (4.1.7)$$

En utilisant la quantité $\mathbf{Y}(\mathbf{X}, t)$ calculée dans le problème sans perturbation, on définit la perturbation $\delta\mathbf{Y}$ sous la forme

$$\delta\mathbf{Y}(\mathbf{X}, t) = \mathbf{Y}^t(\boldsymbol{\chi}^\vartheta(\mathbf{X}, t), t) - \mathbf{Y}(\mathbf{X}, t). \quad (4.1.8)$$

La perturbation de domaine débutant à $t = t_i$, l'évolution d'une quantité générique est schématisée comme suit (figure 4.1.2).

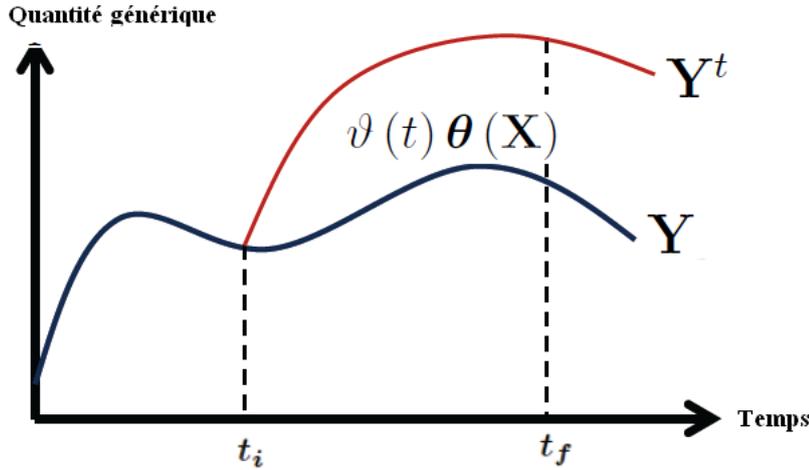


FIGURE 4.1.2: Schéma du problème de perturbation

Contrairement à la perturbation classique dans la *méthode* $\boldsymbol{\theta}$ de Destuynder-Djaoua [39, 40], la perturbation $\delta\mathbf{Y}$ n'est pas nécessairement linéaire en $\eta\tau$ du fait de l'éventuelle dépendance en temps de la solution et de sa perturbation.

Le transport utilisé nécessite la connaissance du gradient des transformations $\boldsymbol{\chi}^\vartheta$ et $(\boldsymbol{\chi}^\vartheta)^{-1}$ que l'on note respectivement

$$\mathbf{F}_{\boldsymbol{\chi}} = \frac{\partial \mathbf{X}^t}{\partial \mathbf{X}} = \nabla_{\mathbf{X}} \boldsymbol{\chi}^\vartheta, \quad (4.1.9)$$

$$\mathbf{F}_\chi^{-1} = \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \mathbf{X}^t} = \nabla_{\mathbf{X}^t}^{-1} \chi^\vartheta. \quad (4.1.10)$$

On peut également écrire la transformation d'un élément de volume $dV_{\mathbf{X}}$ en un élément de volume $dV_{\mathbf{X}}^t$

$$dV_{\mathbf{X}}^t = J_\chi dV_{\mathbf{X}}, \quad (4.1.11)$$

avec

$$J_\chi = \det(\mathbf{F}_\chi). \quad (4.1.12)$$

Pour la transformation d'un élément de surface $dS_{\mathbf{X}}$ de normale sortante \mathbf{N} en un élément de surface $dS_{\mathbf{X}}^t$ de normale sortante \mathbf{N}^t , on a ensuite

$$dS_{\mathbf{X}}^t = \|\mathbf{F}_\chi^{-\top} \cdot \mathbf{N}\| J_\chi dS_{\mathbf{X}}. \quad (4.1.13)$$

Enfin, le transport de $\nabla_{\mathbf{X}^t} \mathbf{Y}^t$ s'écrit

$$\nabla_{\mathbf{X}^t} \mathbf{Y}^t = \nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{Y}^t \cdot \mathbf{F}_\chi^{-1}. \quad (4.1.14)$$

La présence d'un problème d'évolution et la construction de grandeurs caractéristiques de la rupture nécessitent enfin de définir différentes dérivées par rapport au temps.

4.1.3 Dérivées par rapport au temps

En considérant une quantité générique \mathbf{Y}^t , on peut définir trois dérivées par rapport à t :

- la dérivée absolue $\frac{d}{dt} \mathbf{Y}^t = \frac{\partial \mathbf{Y}^t}{\partial t} |_{\mathbf{X}}$ à position de calcul fixe,
- la dérivée matérielle $\frac{d}{dt} \mathbf{Y}^t = \frac{\partial \mathbf{Y}^t}{\partial t} |_{\mathbf{X}^t}$ à position matérielle fixe,
- la dérivée spatiale $\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{Y}^t = \frac{\partial \mathbf{Y}^t}{\partial t} |_{\mathbf{X}^t}$ à position spatiale fixe.

Dans certains cas particuliers, indépendants du temps, on dérive simplement par rapport à ϑ en $\vartheta = 0$ pour retrouver les résultats classiques de la mécanique de la rupture. On note alors ces dérivées respectivement par :

- $D_\vartheta \mathbf{Y}^t = \frac{\partial \mathbf{Y}^t}{\partial \vartheta} |_{\mathbf{X}^\vartheta} (\mathbf{X}^{\vartheta=0}, \vartheta = 0) = \eta^{-1} \frac{\partial \mathbf{Y}^t}{\partial t} |_{\mathbf{X}^t} (\mathbf{X}^{t=t_i}, t = t_i)$,
- $\Delta_\vartheta \mathbf{Y}^t = \frac{\partial \mathbf{Y}^t}{\partial \vartheta} |_{\mathbf{X}} (\mathbf{X}^{\vartheta=0}, \vartheta = 0) = \eta^{-1} \frac{\partial \mathbf{Y}^t}{\partial t} |_{\mathbf{X}} (\mathbf{X}^{t=t_i}, t = t_i)$.

La dérivation par rapport au temps de la transformation χ^ϑ s'écrit alors

$$\frac{d}{dt} \chi^\vartheta = \eta \boldsymbol{\theta}(\mathbf{X}) \quad (4.1.15)$$

ce qui nous permet d'obtenir, par dérivation des fonctions composées

$$\frac{d}{dt} \mathbf{Y}^t = \frac{d}{dt} \mathbf{Y}^t + \eta \nabla_{\mathbf{X}^t} \mathbf{Y}^t \cdot \boldsymbol{\theta}. \quad (4.1.16)$$

En $\vartheta = 0$, on a immédiatement

$$\Delta_{\vartheta} \mathbf{Y}^t = D_{\vartheta} \mathbf{Y}^t + \nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{Y} \cdot \boldsymbol{\theta}. \quad (4.1.17)$$

On peut ensuite dériver le gradient de la transformation χ^{ϑ} avec (4.1.15)

$$\frac{\mathbf{d}}{\mathbf{d}t} \mathbf{F}_{\chi} = \eta \nabla_{\mathbf{X}} \boldsymbol{\theta}, \quad (4.1.18)$$

ce qui nous donne ci-dessous la dérivée de $\nabla_{\mathbf{X}^t} \mathbf{Y}^t$.

Calcul de $\frac{\mathbf{d}}{\mathbf{d}t} (\nabla_{\mathbf{X}^t} \mathbf{Y}^t)$

Par définition des transformations entre les trois configurations, on peut écrire

$$\nabla_{\mathbf{X}^t} \mathbf{Y}^t = \nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{Y}^t \cdot \mathbf{F}_{\chi}^{-1}. \quad (4.1.19)$$

En dérivant par rapport à t , on obtient

$$\frac{\mathbf{d}}{\mathbf{d}t} (\nabla_{\mathbf{X}^t} \mathbf{Y}^t) = \frac{\mathbf{d}}{\mathbf{d}t} (\nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{Y}^t) \cdot \mathbf{F}_{\chi}^{-1} + \nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{Y}^t \cdot \frac{\mathbf{d}\mathbf{F}_{\chi}^{-1}}{\mathbf{d}t}. \quad (4.1.20)$$

Puisque \mathbf{X} est indépendant de t , on peut permuter les dérivations, ce qui donne

$$\frac{\mathbf{d}}{\mathbf{d}t} (\nabla_{\mathbf{X}^t} \mathbf{Y}^t) = \nabla_{\mathbf{X}^t} \left(\frac{\mathbf{d}\mathbf{Y}^t}{\mathbf{d}t} \right) - \eta \nabla_{\mathbf{X}^t} \mathbf{Y}^t \cdot \nabla_{\mathbf{X}^t} \boldsymbol{\theta}. \quad (4.1.21)$$

En $\vartheta = 0$, on a immédiatement

$$\Delta_{\vartheta} (\nabla_{\mathbf{X}^t} \mathbf{Y}^t) = \nabla_{\mathbf{X}} (\Delta_{\vartheta} \mathbf{Y}^t) - \nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{Y} \cdot \nabla_{\mathbf{X}} \boldsymbol{\theta}. \quad (4.1.22)$$

Théorème de transport sur le domaine matériel

Si on considère le champ par unité de volume f^t décrivant une quantité physique dans le domaine $B_{\mathbf{X}}^t$, on peut déterminer la dérivée temporelle de la quantité

$$\mathbb{F}^t = \int_{B_{\mathbf{X}}^t} f^t \, dV_{\mathbf{X}}^t, \quad (4.1.23)$$

par le théorème de transport usuel

$$\frac{d\mathbb{F}^t}{dt} = \int_{B_{\mathbf{X}}^t} \frac{\mathbf{d}f^t}{\mathbf{d}t} + f^t \operatorname{div}_t (\eta \boldsymbol{\theta}) \, dV_{\mathbf{X}}^t, \quad (4.1.24)$$

ce qui s'écrit encore

$$\frac{dF^t}{dt} = \int_{B_{\mathbf{x}}^t} \frac{df^t}{dt} + \operatorname{div}_t (f^t \eta \boldsymbol{\theta}) \, dV_{\mathbf{x}}^t = \int_{B_{\mathbf{x}}^t} \frac{df^t}{dt} \, dV_{\mathbf{x}}^t + \int_{\partial B_{\mathbf{x}}^t} f^t \mathbf{N}^t \cdot (\eta \boldsymbol{\theta}) \, dS_{\mathbf{x}}^t, \quad (4.1.25)$$

avec

$$\mathbf{N}^t = \frac{\mathbf{F}_{\mathbf{x}}^{-\top} \cdot \mathbf{N}}{\|\mathbf{F}_{\mathbf{x}}^{-\top} \cdot \mathbf{N}\|}. \quad (4.1.26)$$

En $\vartheta = 0$, on a immédiatement d'après (4.1.24)

$$\frac{dF^t}{d\vartheta} \Big|_{\vartheta=0} = \int_{B_{\mathbf{x}}} \Delta_{\vartheta} f^t + f \operatorname{div} \boldsymbol{\theta} \, dV_{\mathbf{x}}. \quad (4.1.27)$$

Si on considère ensuite le champ par unité de surface g^t , on peut déterminer la dérivée temporelle de la quantité

$$\mathbf{G}^t = \int_{\partial B_{\mathbf{x}}^t} g^t \, dS_{\mathbf{x}}^t, \quad (4.1.28)$$

par le théorème de transport usuel

$$\frac{d\mathbf{G}^t}{dt} = \int_{\partial B_{\mathbf{x}}^t} \frac{d\mathbf{g}^t}{dt} + g^t \operatorname{div}_{\partial B_{\mathbf{x}}^t} \eta \boldsymbol{\theta} \, dS_{\mathbf{x}}^t, \quad (4.1.29)$$

où on a noté enfin

$$\operatorname{div}_{\partial B_{\mathbf{x}}^t} \eta \boldsymbol{\theta} = \operatorname{div}_t \eta \boldsymbol{\theta} - \frac{\partial \eta \boldsymbol{\theta}}{\partial \mathbf{N}^t} \cdot \mathbf{N}^t. \quad (4.1.30)$$

En $\vartheta = 0$, on a immédiatement

$$\frac{d\mathbf{G}^t}{d\vartheta} \Big|_{\vartheta=0} = \int_{B_{\mathbf{x}}} \Delta_{\vartheta} g^t + g \operatorname{div}_{\partial B_{\mathbf{x}}} \boldsymbol{\theta} \, dS_{\mathbf{x}}. \quad (4.1.31)$$

Si on considère enfin le champ par unité de courbe h^t défini sur la courbe $\Gamma_{\mathbf{x}}^t$ de tangente $\boldsymbol{\tau}^t$, on peut déterminer la dérivée temporelle de la quantité

$$\mathbf{H}^t = \int_{\Gamma_{\mathbf{x}}^t} h^t \, d\gamma_{\mathbf{x}}^t, \quad (4.1.32)$$

par le théorème de transport usuel

$$\frac{d\mathbf{H}^t}{dt} = \int_{\Gamma_{\mathbf{x}}^t} \frac{d\mathbf{h}^t}{dt} + h^t \left(\frac{\partial \eta \boldsymbol{\theta}}{\partial \boldsymbol{\tau}^t} \cdot \boldsymbol{\tau}^t \right) \, d\gamma_{\mathbf{x}}^t, \quad (4.1.33)$$

avec

$$\frac{\partial \eta \boldsymbol{\theta}}{\partial \boldsymbol{\tau}^t} = \nabla_{\mathbf{x}^t} (\eta \boldsymbol{\theta}) \cdot \boldsymbol{\tau}^t. \quad (4.1.34)$$

En $\vartheta = 0$, on a immédiatement

$$\frac{dH^t}{d\vartheta} \Big|_{\vartheta=0} = \int_{\tilde{B}_{\mathbf{x}}} \Delta_{\vartheta} h^t + h^t \left(\frac{\partial \boldsymbol{\theta}}{\partial \boldsymbol{\tau}} \cdot \boldsymbol{\tau} \right) d\gamma_{\mathbf{x}}. \quad (4.1.35)$$

L'ensemble des définitions précédentes sont suffisantes pour construire des grandeurs caractéristiques de la rupture. Néanmoins, dans notre cas, on suppose systématiquement que la perturbation géométrique est petite $\forall t \in [t_i, t_f]$, ce qui nous permet de faire un développement à l'ordre 1 en η de plusieurs quantités.

4.1.4 Développement limité à l'ordre 1 en η

Avec une hypothèse de petites perturbations ($\eta \ll 1$) et en se plaçant à l'instant t , à l'ordre 1 en η , on peut développer quatre quantités utilisées couramment dans les calculs

$$\mathbf{F}_{\mathbf{x}} = \mathbf{1} + \eta \tau \nabla_{\mathbf{x}} \boldsymbol{\theta}, \quad (4.1.36)$$

$$\mathbf{F}_{\mathbf{x}}^{-1} = \mathbf{1} - \eta \tau \nabla_{\mathbf{x}} \boldsymbol{\theta}, \quad (4.1.37)$$

$$J_{\mathbf{x}} = 1 + \eta \tau \operatorname{div}_{\mathbf{x}} \boldsymbol{\theta}, \quad (4.1.38)$$

$$\left\| \mathbf{F}_{\mathbf{x}}^{-\top} \cdot \mathbf{N} \right\| = \|\mathbf{N}\| - \eta \tau \left(\nabla_{\mathbf{x}}^{\top} \boldsymbol{\theta} \cdot \mathbf{N} \right) \cdot \mathbf{N}. \quad (4.1.39)$$

Ces égalités sont valables à tout instant.

4.1.5 Conclusion

L'ensemble de ces outils nous permet donc de travailler sur des quantités perturbées et leurs dérivées dans la configuration de calcul. On débute alors l'analyse des grandeurs caractéristiques par le cas classique de la dérivée en $\vartheta = 0$ avec des hypothèses suffisantes pour que le calcul de cette dérivée soit explicite.

4.2 Formulation de la grandeur caractéristique dans les cas indépendants du temps

La méthode $\boldsymbol{\theta}$, permet de dériver la fonction objective souhaitée par rapport au domaine [80]. Dans notre cas, on va s'intéresser à la variation de l'énergie potentielle dans un cadre isotherme quasi-statique. Ce choix se base sur une analyse thermodynamique du processus de fissuration [146] en élasticité et de son extension à une fissure fragile dans un milieu dissipatif [116, 131]. Ensuite la variation de l'énergie potentielle est calculée explicitement en utilisant plusieurs hypothèses simplificatrices sur le chargement et les variables internes.

4.2.1 Motivation thermodynamique

Sans pour autant aller dans le détail des motivations thermodynamiques, on revient rapidement ici sur deux idées fondamentales dans le choix des grandeurs caractéristiques de la rupture (voir par exemple [146]). En considérant, un domaine, dont le comportement est élastique, soumis à un chargement dans lequel une fissure plane de longueur l se propage, on peut montrer que la dissipation totale s'écrit

$$D = - \frac{\partial W_{ep}}{\partial l} \Big|_{\mathcal{E}} (\mathcal{E}, l) \frac{dl}{dt}. \quad (4.2.1)$$

avec \mathcal{E} une désignation générique du chargement. La force motrice de la propagation de fissure apparaît ainsi comme la dérivée de l'énergie potentielle par rapport à la position de la fissure à chargement fixé. Cette démonstration a été successivement étendue par Stolz [116] et par Steinmann [131] de manière sensiblement équivalente au cas d'une fissure fragile propageant dans un milieu dissipatif. L'hypothèse de fissure fragile suppose que les processus dissipatifs (représentés ici par l'évolution des variables internes k) ne sont pas couplés au processus de rupture. Dans ce cas, les auteurs obtiennent formellement

$$D = - \frac{\partial W_{ep}}{\partial l} \Big|_{\mathcal{E}, k} (\mathcal{E}, l, k) \frac{dl}{dt} - \frac{\partial \Psi_{libre}}{\partial k} \Big|_{\mathcal{E}, l} (\mathcal{E}, l, k) \frac{dk}{dt}. \quad (4.2.2)$$

Nous en verrons l'expression détaillée à un cas particulier au chapitre 8. De plus, on note que cette grandeur caractéristique a été utilisée avec succès par Luc Dormieux [109] pour un matériau viscoélastique. Dans ce cas la force motrice de la propagation apparaît comme la dérivée de l'énergie potentielle par rapport à la position de la fissure à chargement et variables internes fixés dans la configuration variable. Le second terme de la dissipation totale D représente la dissipation matériau.

4.2.2 Dérivation de l'énergie potentielle

L'énergie potentielle dans la configuration matérielle perturbée s'écrit

$$W_{ep}^t = \int_{B_{\mathbf{x}}^t} (\psi^t - \mathbf{b}^t \cdot \mathbf{x}^t) dV_{\mathbf{x}}^t - \int_{\partial B_{\mathbf{x}}^t} \mathbf{t}^t \cdot \mathbf{x}^t dS_{\mathbf{x}}^t + \int_{B_{\mathbf{x}}^t} (\mathbf{b}^t \cdot \mathbf{X}^t) dV_{\mathbf{x}}^t + \int_{\partial B_{\mathbf{x}}^t} \mathbf{t}^t \cdot \mathbf{X}^t dS_{\mathbf{x}}^t. \quad (4.2.3)$$

Elle est égale à l'énergie libre du système diminué de la variation du potentiel des efforts extérieurs entre configuration matérielle perturbée et configuration actuelle perturbée. La dérivée de l'énergie potentielle en $\boldsymbol{\mu} = \mathbf{0}$ est composée de trois termes correspondant respectivement aux variations d'énergie libre, de potentiel du chargement volumique et de potentiel des efforts extérieurs de surface

$$\frac{dW_{ep}^t}{d\vartheta} \Big|_{\vartheta=0} = \frac{d\Psi^t}{d\vartheta} \Big|_{\vartheta=0} - \frac{dF_V^t}{d\vartheta} \Big|_{\vartheta=0} - \frac{dF_T^t}{d\vartheta} \Big|_{\vartheta=0}, \quad (4.2.4)$$

avec

$$\frac{d\Psi^t}{d\vartheta} \Big|_{\vartheta=0} = \frac{d}{d\vartheta} \left\{ \int_{B_{\mathbf{x}}^t} \psi^t dV_{\mathbf{x}}^t \right\} \Big|_{\vartheta=0}, \quad (4.2.5)$$

$$\frac{dF_V^t}{d\vartheta} \Big|_{\vartheta=0} = \frac{d}{d\vartheta} \left\{ \int_{B_{\mathbf{x}}^t} \mathbf{b}^t \cdot (\mathbf{x}^t - \mathbf{X}^t) dV_{\mathbf{x}}^t \right\} \Big|_{\vartheta=0}, \quad (4.2.6)$$

$$\frac{dF_T^t}{d\vartheta} \Big|_{\vartheta=0} = \frac{d}{d\vartheta} \left\{ \int_{\partial B_{\mathbf{x}}^t} \mathbf{t}^t \cdot (\mathbf{x}^t - \mathbf{X}^t) dS_{\mathbf{x}}^t \right\} \Big|_{\vartheta=0}. \quad (4.2.7)$$

Terme en $\frac{d\Psi^t}{d\vartheta} \Big|_{\vartheta=0}$

D'après le théorème de transport (4.1.24), on obtient

$$\frac{d\Psi^t}{d\vartheta} \Big|_{\vartheta=0} = \int_{B_{\mathbf{x}}} \Delta_{\vartheta} \psi^t + \psi \operatorname{div}_{\mathbf{x}} \boldsymbol{\theta} dV_{\mathbf{x}}. \quad (4.2.8)$$

Or, par dérivation directe de $\psi = \psi(\mathbf{F}, \mathbf{k}, \mathbf{X})$

$$\Delta_{\vartheta} \psi^t = \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{F}} : \Delta_{\vartheta} \mathbf{F}^t + \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{k}} : \Delta_{\vartheta} \mathbf{k}^t + \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{X}} \Big|_{\mathbf{F}, \mathbf{k}, T} \cdot \boldsymbol{\theta}, \quad (4.2.9)$$

d'où, d'après les équations constitutives (2.4.2, 2.4.4)

$$\Delta_{\vartheta} \psi^t = \mathbf{P} : \Delta_{\vartheta} \mathbf{F}^t - \mathbf{K} : \Delta_{\vartheta} \mathbf{k}^t + \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{X}} \Big|_{\mathbf{F}, \mathbf{k}, T} \cdot \boldsymbol{\theta}. \quad (4.2.10)$$

Il vient donc

$$\frac{d\Psi^t}{d\vartheta} \Big|_{\vartheta=0} = \int_{B_{\mathbf{x}}} \mathbf{P} : \Delta_{\vartheta} \mathbf{F}^t - \mathbf{K} : \Delta_{\vartheta} \mathbf{k}^t + \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{X}} \Big|_{\mathbf{F}, \mathbf{k}, T} \cdot \boldsymbol{\theta} + \psi \operatorname{div}_{\mathbf{x}} \boldsymbol{\theta} dV_{\mathbf{x}}. \quad (4.2.11)$$

Calcul de $\Delta_{\vartheta} \mathbf{F}^t$

\mathbf{F}^t étant le gradient de la transformation physique, on a

$$\mathbf{F}^t = \nabla_{\mathbf{x}^t} (\mathbf{x}^t). \quad (4.2.12)$$

En dérivant en $\vartheta = 0$, on obtient par (4.1.22)

$$\Delta_{\vartheta} \mathbf{F}^t = \nabla_{\mathbf{x}} (\Delta_{\vartheta} \mathbf{x}^t) - \mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \boldsymbol{\theta}. \quad (4.2.13)$$

4.2 Formulation de la grandeur caractéristique dans les cas indépendants du temps

On a finalement après report dans (4.2.11), en notant $\boldsymbol{\xi} = \mathbf{x} - \mathbf{X}$ et en utilisant $\Delta_\vartheta \mathbf{X} = \boldsymbol{\theta}$

$$\frac{d\Psi^t}{d\vartheta} \Big|_{\vartheta=0} = \int_{B_{\mathbf{X}}} - \left[(\mathbf{F}^\top - \mathbf{1}) \cdot \mathbf{P} \right] : \nabla_{\mathbf{X}} \boldsymbol{\theta} + \mathbf{P} : \nabla_{\mathbf{X}} (\Delta_\vartheta \boldsymbol{\xi}^t) - \mathbf{K} : \Delta_\vartheta \mathbf{k}^t + \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{X}} \Big|_{\mathbf{F}, \mathbf{k}, T} \cdot \boldsymbol{\theta} + \psi \operatorname{div}_{\mathbf{X}} \boldsymbol{\theta} \, dV_{\mathbf{X}}. \quad (4.2.14)$$

Terme en $\frac{dF_V^t}{d\vartheta} \Big|_{\vartheta=0}$

D'après le théorème de transport (4.1.27), on obtient

$$\frac{dF_V^t}{d\vartheta} \Big|_{\vartheta=0} = \int_{B_{\mathbf{X}}} \Delta_\vartheta (\mathbf{b}^t \cdot \mathbf{x}^t) - \Delta_\vartheta (\mathbf{b}^t \cdot \mathbf{X}^t) + \mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\xi} \operatorname{div}_{\mathbf{X}} \boldsymbol{\theta} \, dV_{\mathbf{X}}, \quad (4.2.15)$$

puis par dérivation du produit scalaire

$$\frac{dF_V^t}{d\vartheta} \Big|_{\vartheta=0} = \int_{B_{\mathbf{X}}} \Delta_\vartheta \mathbf{b}^t \cdot \boldsymbol{\xi} + \mathbf{b} \cdot (\Delta_\vartheta \boldsymbol{\xi}^t) + \mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\xi} \operatorname{div}_{\mathbf{X}} \boldsymbol{\theta} \, dV_{\mathbf{X}}. \quad (4.2.16)$$

Terme en $\frac{dF_T^t}{d\vartheta} \Big|_{\vartheta=0}$

D'après le théorème de transport (4.1.31), on obtient,

$$\frac{dF_T^t}{d\vartheta} \Big|_{\vartheta=0} = \int_{\partial B_{\mathbf{X}}} \Delta_\vartheta (\mathbf{t}^t \cdot \mathbf{x}^t) - \Delta_\vartheta (\mathbf{t}^t \cdot \mathbf{X}^t) + (\mathbf{t} \cdot \boldsymbol{\xi}) \operatorname{div}_{\partial B_{\mathbf{X}}} \boldsymbol{\theta} \, dS_{\mathbf{X}}, \quad (4.2.17)$$

puis par dérivation du produit scalaire

$$\frac{dF_T^t}{d\vartheta} \Big|_{\vartheta=0} = \int_{\partial B_{\mathbf{X}}} \Delta_\vartheta \mathbf{t}^t \cdot \boldsymbol{\xi} + \mathbf{t} \cdot \Delta_\vartheta \boldsymbol{\xi}^t + (\mathbf{t} \cdot \boldsymbol{\xi}) \operatorname{div}_{\partial B_{\mathbf{X}}} \boldsymbol{\theta} \, dS_{\mathbf{X}}. \quad (4.2.18)$$

Formulation de la dérivée complète

Si on suppose que la variation de déplacement $\Delta_\vartheta \boldsymbol{\xi}^t$ est une vitesse admissible ayant la régularité permettant d'écrire le principe des puissances virtuelles en configuration matérielle à $\vartheta = 0$ alors, par l'équation d'équilibre, on a

$$\int_{B_{\mathbf{X}}} (\mathbf{P} : \nabla_{\mathbf{X}} (\Delta_\vartheta \boldsymbol{\xi}^t) - \mathbf{b} \cdot \Delta_\vartheta \boldsymbol{\xi}^t) \, dV - \int_{\partial B_{\mathbf{X}}} \mathbf{t} \cdot \Delta_\vartheta \boldsymbol{\xi}^t \, dS = 0. \quad (4.2.19)$$

La dérivée de l'énergie potentielle s'écrit alors après élimination de (4.2.19) dans (4.2.14), (4.2.16) et (4.2.18)

$$\begin{aligned} \frac{dW_{ep}^t}{d\vartheta} \Big|_{\vartheta=0} = & - \int_{B_{\mathbf{X}}} \left[[(\mathbf{F}^\top - \mathbf{1}) \cdot \mathbf{P}] : \nabla_{\mathbf{X}} \boldsymbol{\theta} + \mathbf{K} : \Delta_{\vartheta} \mathbf{k}^t - \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{X}} \Big|_{\mathbf{F}, \mathbf{k}, T} \cdot \boldsymbol{\theta} - \psi \operatorname{div}_{\mathbf{X}} \boldsymbol{\theta} \right] dV_{\mathbf{X}} \\ & - \int_{B_{\mathbf{X}}} [\Delta_{\vartheta} \mathbf{b}^t \cdot \boldsymbol{\xi} + (\mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\xi}) \operatorname{div}_{\mathbf{X}} \boldsymbol{\theta}] dV_{\mathbf{X}} - \int_{\partial B_{\mathbf{X}}} [\Delta_{\vartheta} \mathbf{t}^t \cdot \boldsymbol{\xi} + (\mathbf{t} \cdot \boldsymbol{\xi}) \operatorname{div}_{\partial B_{\mathbf{X}}} \boldsymbol{\theta}] dS_{\mathbf{X}} \end{aligned} \quad (4.2.20)$$

4.2.3 Etude des cas spécifiques

Dans cette section, on traite les cas où on a des hypothèses suffisantes pour que le calcul précédent soit explicite. Ces différents cas correspondent à des hypothèses classiques en mécanique de la rupture.

Hypothèses sur le chargement

Dans la suite, on suppose que $D_{\vartheta} \mathbf{b}^t = \Delta_{\vartheta} \mathbf{b}^t - (\nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\theta}) = 0$. Cela revient à supposer qu'à point matériel donné, le chargement volumique est indépendant de ϑ . De plus, on suppose que la fissure elle-même n'est pas chargée et que le champ $\boldsymbol{\theta}$ n'est non nul que dans un voisinage non chargé de la fissure. L'expression de la dérivée de l'énergie potentielle (4.2.20) se réduit donc à

$$\begin{aligned} \frac{dW_{ep}^t}{d\vartheta} \Big|_{\vartheta=0} = & - \int_{B_{\mathbf{X}}} \left[[(\mathbf{F}^\top - \mathbf{1}) \cdot \mathbf{P}] : \nabla_{\mathbf{X}} \boldsymbol{\theta} - \psi \operatorname{div}_{\mathbf{X}} \boldsymbol{\theta} \right] dV_{\mathbf{X}} \\ & - \int_{B_{\mathbf{X}}} \left[\mathbf{K} : \Delta_{\vartheta} \mathbf{k}^t - \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{X}} \Big|_{\mathbf{F}, \mathbf{k}, T} \cdot \boldsymbol{\theta} + (\nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\theta}) \cdot \boldsymbol{\xi} + (\mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\xi}) \operatorname{div}_{\mathbf{X}} \boldsymbol{\theta} \right] dV_{\mathbf{X}} \end{aligned} \quad (4.2.21)$$

On remarque que cette formulation est entièrement explicite à l'exception de la variation des variables internes $\Delta_{\vartheta} \mathbf{k}^t$ qu'on simplifie dans la suite du chapitre et dont on étudie la dépendance en temps dans le chapitre 5.

Hyperélasticité

Dans le cadre hyperélastique ($\mathbf{k} = 0$), isotherme, sans force de volume $\mathbf{b} = \mathbf{0}$, et où l'énergie libre ψ est homogène, on trouve à partir de (4.2.21)

$$\frac{dW_{ep}^t}{d\vartheta} \Big|_{\vartheta=0} = - \int_{B_{\mathbf{X}}} \left[[(\mathbf{F}^\top - \mathbf{1}) \cdot \mathbf{P}] : \nabla_{\mathbf{X}} \boldsymbol{\theta} - \psi \operatorname{div}_{\mathbf{X}} \boldsymbol{\theta} \right] dV_{\mathbf{X}}. \quad (4.2.22)$$

En utilisant le tenseur d'Eshelby $\Sigma = \psi \mathbf{1} - (\mathbf{F}^\top - \mathbf{1}) \cdot \mathbf{P}$, on obtient

$$\frac{d\mathcal{W}_{ep}^t}{d\vartheta} \Big|_{\vartheta=0} = \int_{B_{\mathbf{X}}} \Sigma : \nabla_{\mathbf{X}} \boldsymbol{\theta} dV_{\mathbf{X}}. \quad (4.2.23)$$

De plus, on a par calcul de la divergence du produit

$$\Sigma : \nabla_{\mathbf{X}} \boldsymbol{\theta} = \operatorname{div}_{\mathbf{X}} (\Sigma^\top \cdot \boldsymbol{\theta}) - \operatorname{div}_{\mathbf{X}} (\Sigma) \cdot \boldsymbol{\theta}. \quad (4.2.24)$$

En reprenant la notion d'équilibre configurationnel (2.4.9) dans ce cas, on obtient par le théorème de la divergence

$$\frac{d\mathcal{W}_{ep}^t}{d\vartheta} \Big|_{\vartheta=0} = \int_{\partial B_{\mathbf{X}}} (\Sigma \cdot \mathbf{N}) \cdot \boldsymbol{\theta} dS_{\mathbf{X}}. \quad (4.2.25)$$

On retrouve bien le taux de restitution d'énergie en hyperélasticité [115]

$$\mathbf{G} = - \frac{d\mathcal{W}_{ep}^t}{d\vartheta} \Big|_{\vartheta=0} = - \int_{B_{\mathbf{X}}} \Sigma : \nabla_{\mathbf{X}} \boldsymbol{\theta} dV_{\mathbf{X}}. \quad (4.2.26)$$

Cette grandeur n'est dépendante que de la valeur de $\boldsymbol{\theta}$ sur le bord du domaine. Comme on le verra dans la formulation de $\boldsymbol{\theta}$, cette méthode nous permet de calculer l'intégrale uniquement sur le domaine où $\nabla_{\mathbf{X}} \boldsymbol{\theta}$ n'est pas nul. Or, on peut choisir ce domaine arbitrairement ce qui nous permet de calculer loin de la singularité pour éviter les erreurs numériques. Dans tous les autres cas, on perd cet avantage (chapitre 8).

Evolution des variables internes dans un cas isotherme découplé sans force de volume

Puisqu'on cherche à prendre en compte des processus dissipatifs couplés avec le processus de rupture dans cette étude, il faut prendre en compte l'évolution des variables internes. Nous pouvons faire deux hypothèses simplificatrices :

- soit, les processus dissipatifs sont stationnaires dans $B_{\mathbf{X}}^t$. Les variables internes restent figées pendant la perturbation de domaine $D_{\vartheta} \mathbf{k}^t = 0$. Ces processus sont équivalents à des situations de précontraintes figées en configuration matérielle ou à un découplage entre processus dissipatifs.
- soit, les processus sont stationnaires dans $B_{\mathbf{X}}$. Les variables internes sont exactement et instantanément convectées avec la perturbation de domaine $\Delta_{\vartheta} \mathbf{k}^t = 0$.

Le premier cas qui est caractérisé par la relation

$$D_{\vartheta} \mathbf{k}^t = \Delta_{\vartheta} \mathbf{k}^t - (\nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\theta}) = 0. \quad (4.2.27)$$

Si on suppose que l'évolution des variables internes est beaucoup plus lente que le processus de fissuration traduit par la perturbation, on obtient la relation (4.2.27). Sous cette hypothèse et dans un cas sans force de volume, le problème d'un point de vue du processus de rupture est hyperélastique précontraint et la dérivée de l'énergie potentielle (4.2.21) s'écrit d'après (4.1.17)

$$\frac{dW_{ep}^t}{d\vartheta} \Big|_{\vartheta=0} = \int_{B_{\mathbf{X}}} \left[\boldsymbol{\Sigma} : \nabla_X \boldsymbol{\theta} - \mathbf{K} : (\nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\theta}) + \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{X}} \Big|_{\mathbf{F}, \mathbf{k}, T} \cdot \boldsymbol{\theta} \right] dV_{\mathbf{X}}. \quad (4.2.28)$$

En reprenant la notion d'équilibre configurationnel en présence de variables internes (2.4.9), on obtient par le théorème de la divergence

$$\frac{dW_{ep}^t}{d\vartheta} \Big|_{\vartheta=0} = \int_{\partial B_{\mathbf{X}}} (\boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{N}) \cdot \boldsymbol{\theta} dS_{\mathbf{X}}. \quad (4.2.29)$$

On remarque que dans ce cas, le calcul est explicite et que le taux de restitution d'énergie s'écrit

$$\begin{aligned} \mathfrak{G}_{B_{\mathbf{X}}}^{statio} &= - \frac{dW_{ep}^t}{d\vartheta} \Big|_{\vartheta=0} = \int_{B_{\mathbf{X}}} -\boldsymbol{\Sigma} : \nabla_X \boldsymbol{\theta} + \mathbf{K} : (\nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\theta}) - \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{X}} \Big|_{\mathbf{F}, \mathbf{k}, T} \cdot \boldsymbol{\theta} dV_{\mathbf{X}} \quad (4.2.30) \\ &= - \int_{\partial B_{\mathbf{X}}} (\boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{N}) \cdot \boldsymbol{\theta} dS_{\mathbf{X}}. \end{aligned}$$

Dans ce cas, la grandeur caractéristique est bien définie et il n'y a aucune ambiguïté sur la définition de taux de restitution d'énergie par rapport à l'analyse thermodynamique (section 4.2.1). On a toujours la propriété d'indépendance à la valeur de $\boldsymbol{\theta}$ à l'intérieur du domaine $B_{\mathbf{X}}$. Par contre, cette grandeur introduit des termes non nuls en $\nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{k}$ au voisinage de la pointe de fissure (voir section 8.2 pour une application numérique), ce qui complique le calcul numérique.

On considère ensuite le cas où les variables internes sont instantanément et exactement convectées avec la fissure. Ce cas est caractérisé par la relation

$$\Delta_{\vartheta} \mathbf{k}^t = 0. \quad (4.2.31)$$

Sous cette hypothèse, la dérivée de l'énergie potentielle s'écrit

$$\frac{dW_{ep}^t}{d\vartheta} \Big|_{\vartheta=0} = \int_{B_{\mathbf{X}}} \boldsymbol{\Sigma} : \nabla_X \boldsymbol{\theta} + \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{X}} \Big|_{\mathbf{F}, \mathbf{k}, T} \cdot \boldsymbol{\theta} dV_{\mathbf{X}}. \quad (4.2.32)$$

En reprenant la notion d'équilibre configurationnel en présence de variables internes (2.4.9), on obtient par le théorème de la divergence

$$\frac{dW_{ep}^t}{d\vartheta} \Big|_{\vartheta=0} = \int_{\partial B_{\mathbf{X}}} [\boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{N} \cdot \boldsymbol{\theta}] dS_{\mathbf{X}} + \int_{B_{\mathbf{X}}} \mathbf{K} : (\nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\theta}) dV_{\mathbf{X}}. \quad (4.2.33)$$

Pour illustrer, regardons par exemple un problème viscoplastique où on suppose que l'évolution des variables internes durant la perturbation se produit de manière instantanée et exactement convectée. Faisons une hypothèse supplémentaire en supposant que la zone de dissipation due à la plasticité est confinée en pointe de fissure. On peut alors imaginer deux cas extrêmes pour la grandeur caractéristique en fissuration. On peut soit supposer que la dissipation due à un processus viscoplastique confiné est comprise dans le processus de rupture, ce qui conduit à proposer

$$\mathbf{G}_{B_{\mathbf{X}}}^{statio} = - \frac{dW_{ep}^t}{d\vartheta} \Big|_{\vartheta=0}. \quad (4.2.34)$$

On peut également soustraire la dissipation confinée induite par la variation de position exactement convectée (toujours positive) à la quantité précédente. On trouve alors :

$$\mathbf{G}^r = \mathbf{G}_{B_{\mathbf{X}}}^{statio} - D^{\text{confinée}}, \quad (4.2.35)$$

avec

$$D^{\text{confinée}} = \int_{V_{\text{confinée}}} \mathbf{K} : D_{\vartheta} \mathbf{k}^t dV_{\mathbf{X}}, \quad (4.2.36)$$

et où par hypothèse

$$D_{\vartheta} \mathbf{k}^t = -\nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\theta}. \quad (4.2.37)$$

On a donc pour ce choix

$$\mathbf{G}^r = \int_{B_{\mathbf{X}}} -\boldsymbol{\Sigma} : \nabla_{\mathbf{X}} \boldsymbol{\theta} + \mathbf{K} : (\nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\theta}) - \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{X}} \Big|_{\mathbf{F}, \mathbf{k}, T} \cdot \boldsymbol{\theta} dV_{\mathbf{X}}. \quad (4.2.38)$$

Pour finir, on peut remarquer que ces deux choix sont reliés par

$$\mathbf{G}^r = \mathbf{G}_{B_{\mathbf{X}}}^{statio} - D^{\text{confinée}} = \mathbf{G}_{B_{\mathbf{X}}}^{statio} \quad (4.2.39)$$

4.2.4 Conclusion

La dérivée par rapport au domaine en $\vartheta = 0$ ainsi que le choix de la dérivée recherchée nous a permis de retrouver les différents cas classiques en mécanique de la rupture. On a également montré que pour que le calcul soit explicite, on devait faire des hypothèses de stationnarité sur l'évolution des variables internes. L'application de ces grandeurs explicites est faite dans le chapitre 8. Pour pouvoir prendre en compte un couplage entre processus dissipatifs et processus de rupture, on propose dans le chapitre 5 d'utiliser un problème d'évolution visco-plastique perturbé et de le linéariser pour de petites perturbations du domaine et des champs. Ce problème linéarisé va nous permettre de calculer les termes de la grandeur caractéristique qui restaient implicites dans notre première approche.

Chapitre 5

Extension de la construction d'une grandeur caractéristique de la rupture pour un problème couplé

Dans le chapitre précédent, on a défini des perturbations géométriques dépendantes du temps qui nous ont permis, dans le cadre de la méthode θ classique, de construire plusieurs grandeurs caractéristiques de la rupture. Ces grandeurs ont l'avantage de pouvoir être calculées explicitement mais il nous a fallu découpler l'évolution inélastique de l'évolution de la géométrie pour parvenir à ce résultat. Ce découplage allant à l'encontre du but premier de cette étude, on étend, dans ce chapitre, l'utilisation de la perturbation de domaine à un problème d'évolution couplant processus dissipatif et variation de domaine. Une fois ce couplage réalisé, on peut comparer le problème d'évolution avec et sans variation de domaine et le linéariser pour de petites variations de la géométrie et des champs. Dans ce cadre de perturbation linéaire d'un état non-linéaire, le calcul d'une grandeur caractéristique sous forme générique est ensuite mené en utilisant une méthode d'état adjoint. Enfin, on rappelle le lien, dans le cas de la variation d'énergie potentielle, entre les variations construites par la présente méthode et par la méthode de la section 4.2.

5.1 Description du problème posé

Pour pouvoir aborder le calcul d'une grandeur caractéristique pour un problème d'évolution couplé à une perturbation de domaine, on doit décrire les différents éléments qui sont utilisés pour ce calcul. Ces éléments sont :

- la perturbation de domaine,
- la forme générique de la grandeur caractéristique,
- le problème d'évolution sans perturbation de domaine.

5.1.1 Description de la perturbation

Dans un problème d'évolution défini $\forall t \in [0, T]$, on construit une perturbation quasi-statique sur un intervalle de temps donné $[t_i, t_f] \subset [0, T]$. On rappelle que cette perturbation s'écrit d'après (4.1.8)

$$\forall \mathbf{X} \in B_{\mathbf{X}}, \forall t \in [t_i, t_f] \quad \chi^\vartheta(\mathbf{X}, t) = \mathbf{X} + \eta(t - t_i) \boldsymbol{\theta}(\mathbf{X}), \quad (5.1.1)$$

avec $\eta \ll 1$ un facteur d'échelle adimensionné et $\boldsymbol{\theta}$ un champ de vitesse de perturbation de domaine. On note également $\tau = t - t_i$ le temps écoulé depuis l'initiation de la perturbation.

5.1.2 Grandeur caractéristique générique

L'intérêt premier d'introduire un problème perturbé est de pouvoir comparer deux histoires avec et sans perturbation. Si on ne prend pas en compte d'arguments spécifiques à un problème d'évolution précis, on peut donc choisir de construire une grandeur générique comme la variation d'une fonctionnelle J s'écrivant sous la forme intégrale

$$J_{NP} = \int_{t_i}^{t_f} \int_{B_{\mathbf{X}}} \mathbf{Z}(\mathbf{Y}, t, \mathbf{X}) \, dV_{\mathbf{X}} dt, \quad (5.1.2)$$

lorsqu'il n'y a aucune perturbation de domaine (domaine matériel fixe entre t_i et t_f) avec :

- \mathbf{Y} une quantité générique,
- $\mathbf{Z}(\mathbf{Y}, t, \mathbf{X})$ une fonction générique dépendant non-linéairement de $(\mathbf{Y}, t, \mathbf{X})$.

Cette quantité devient

$$J_P = \int_{t_i}^{t_f} \int_{B_{\mathbf{X}}^t} \mathbf{Z}^t(\mathbf{Y}^t, t, \mathbf{X}^t) \, dV_{\mathbf{X}}^t dt, \quad (5.1.3)$$

lorsque la perturbation est présente. En ramenant J_P sur la configuration de départ, on obtient grâce à (4.1.2)

$$J_P = \int_{t_i}^{t_f} \int_{B_{\mathbf{X}}} \mathbf{Z}^t(\mathbf{Y}^t(\chi^\vartheta(\mathbf{X}, t), t), t, \chi^\vartheta(\mathbf{X}, t)) J_{\chi} \, dV_{\mathbf{X}} dt, \quad (5.1.4)$$

avec $J_{\chi} = \det(\mathbf{F}_{\chi})$. On peut alors choisir de calculer la variation $\delta J = J_P - J_{NP}$ qui s'écrit enfin, en utilisant (4.1.4) et en développant à l'ordre 1 en η ,

$$\delta J = \eta \int_{t_i}^{t_f} \int_{B_{\mathbf{X}}} \tau \mathbf{Z} \operatorname{div}_{\mathbf{X}} \boldsymbol{\theta} \, dV_{\mathbf{X}} dt + \int_{t_i}^{t_f} \int_{B_{\mathbf{X}}} \frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial \mathbf{Y}} \cdot \delta \mathbf{Y} + \frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial \mathbf{X}} \cdot \delta \mathbf{X} \, dV_{\mathbf{X}} dt. \quad (5.1.5)$$

En utilisant (4.1.3), on peut séparer cette variation en un élément

$$\delta J_{\text{ex}} = \eta \int_{t_i}^{t_f} \int_{B_{\mathbf{X}}} \tau \left(\frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial \mathbf{X}} \cdot \boldsymbol{\theta} + \mathbf{Z} \operatorname{div}_{\mathbf{X}} \boldsymbol{\theta} \right) dV_{\mathbf{X}} dt, \quad (5.1.6)$$

qui ne nécessite pas un calcul de problème d'évolution perturbé et

$$\delta J_{\text{im}} = \int_{t_i}^{t_f} \int_{B_{\mathbf{X}}} \frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial \mathbf{Y}} \cdot \delta \mathbf{Y} dV_{\mathbf{X}} dt, \quad (5.1.7)$$

qui nécessite son évaluation. On remarque également que le premier terme est linéaire en η , ce qui nous permet d'obtenir une grandeur caractéristique \mathbf{G}_{ex} de la rupture indépendante de η et se calculant sur un horizon $(t_f - t_i)$ directement à partir du problème d'évolution non-perturbé sous la forme

$$\mathbf{G}_{ex} = \int_{t_i}^{t_f} \int_{B_{\mathbf{X}}} \tau \left(\frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial \mathbf{X}} \cdot \boldsymbol{\theta} + \mathbf{Z} \operatorname{div}_{\mathbf{X}} \boldsymbol{\theta} \right) dV_{\mathbf{X}} dt. \quad (5.1.8)$$

Rappelons que \mathbf{Z} peut être une fonction du temps, notamment parce que \mathbf{Y} est en général une fonction du temps.

5.1.3 Description du problème sans perturbation

On suppose que l'énergie libre est dépendante de $\mathbf{F} = \nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{x}$ via le tenseur des dilata-tions \mathbf{C} , d'un ensemble de variables internes variants dans le temps \mathbf{k} et explicitement de \mathbf{X} . On associe à cet ensemble de variables internes :

- $\mathbf{P} = \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{F}}$ le premier tenseur de Piola-Kirchhoff,
- $\mathbf{K} = -\frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{k}}$ la force thermodynamique.

L'équilibre s'écrit alors à chaque instant $t \in [t_i, t_f]$

$$\int_{B_{\mathbf{X}}} \mathbf{P} : \nabla_{\mathbf{X}} \hat{\mathbf{x}} - \mathbf{b} \cdot \hat{\mathbf{x}} dV_{\mathbf{X}} - \int_{\partial B_{\mathbf{X}}} \mathbf{t} \cdot \hat{\mathbf{x}} dS_{\mathbf{X}} = 0 \quad \forall \hat{\mathbf{x}} \in \mathcal{V}, \quad (5.1.9)$$

et la loi de comportement peut être écrite sous la forme faible suivante

$$\int_{B_{\mathbf{X}}} \hat{\mathbf{F}} : \left(\mathbf{P} - \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{F}}(\mathbf{F}, \mathbf{k}, \mathbf{X}) \right) dV_{\mathbf{X}} = 0 \quad \forall \hat{\mathbf{F}} \in \mathcal{I}_F, \quad (5.1.10)$$

$$\int_{B_{\mathbf{X}}} \hat{\mathbf{k}} : \left(\mathbf{K} + \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{k}}(\mathbf{F}, \mathbf{k}, \mathbf{X}) \right) dV_{\mathbf{X}} = 0 \quad \forall \hat{\mathbf{k}} \in \mathcal{I}_k. \quad (5.1.11)$$

Pour l'ensemble des variables internes \mathbf{k} , on suppose enfin qu'il existe une fonction $\mathbf{H}(\mathbf{K}, \mathbf{k}, \mathbf{X})$ régissant l'évolution de \mathbf{k} vérifiant $\mathbf{K} : \mathbf{H} \geq 0$ pour tout processus thermodynamique réalisable tel que

$$\int_{B_{\mathbf{X}}} \hat{\mathbf{K}} : \left(\frac{d\mathbf{k}}{dt} - \mathbf{H}(\mathbf{K}, \mathbf{k}, \mathbf{X}) \right) dV_{\mathbf{X}} = 0 \quad \forall \hat{\mathbf{K}} \in \mathcal{K}, \quad (5.1.12)$$

avec $\frac{d}{dt}\mathbf{Y}$ la dérivée par rapport au temps d'une quantité \mathbf{Y} à position matérielle fixe.

D'après (5.1.9,5.1.10,5.1.11,5.1.12), les champs et leurs dérivées satisfont le système au sens faible $\mathbf{b} \cdot \hat{\mathbf{x}}$

$$\int_{B_{\mathbf{X}}} \mathbf{P} : \nabla_{\mathbf{X}} \hat{\mathbf{x}} - \mathbf{b} \cdot \hat{\mathbf{x}} dV_{\mathbf{X}} - \int_{\partial B_{\mathbf{X}}} \mathbf{t} \cdot \hat{\mathbf{x}} dS_{\mathbf{X}} = 0 \quad \forall \hat{\mathbf{x}} \in \mathcal{V}, \quad \forall t \in [0, T], \quad (5.1.13)$$

$$\int_{B_{\mathbf{X}}} \hat{\mathbf{F}} : \left(\mathbf{P} - \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{F}}(\mathbf{F}, \mathbf{k}, \mathbf{X}) \right) dV_{\mathbf{X}} = 0 \quad \forall \hat{\mathbf{F}} \in \mathcal{I}_F, \quad \forall t \in [0, T], \quad (5.1.14)$$

$$\int_{B_{\mathbf{X}}} \hat{\mathbf{k}} : \left(\mathbf{K} + \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{k}}(\mathbf{F}, \mathbf{k}, \mathbf{X}) \right) dV_{\mathbf{X}} = 0 \quad \forall \hat{\mathbf{k}} \in \mathcal{I}_k, \quad \forall t \in [0, T], \quad (5.1.15)$$

$$\int_{B_{\mathbf{X}}} \hat{\mathbf{K}} : \left(\frac{d\mathbf{k}}{dt} - \mathbf{H}(\mathbf{K}, \mathbf{k}, \mathbf{X}) \right) dV_{\mathbf{X}} = 0 \quad \forall \hat{\mathbf{K}} \in \mathcal{K}, \quad \forall t \in [0, T]. \quad (5.1.16)$$

Ce problème à résoudre sur les inconnues $(\mathbf{x}, \mathbf{P}, \mathbf{k}, \mathbf{K})$ se complète par une donne de l'état initial $\mathbf{k}(0, \mathbf{X})$ des variables internes en tout point.

5.2 Problème d'évolution couplé à une variation de domaine

Dans cette section, on reprend le système (5.1.13,5.1.14,5.1.15,5.1.16). Ce système, une fois posé sur un domaine variable, est ramené sur la configuration de calcul puis linéarisé et développé à l'ordre 1 en η de manière à obtenir un problème d'évolution sur les perturbations.

5.2.1 Problème d'évolution sur un domaine variable

En supposant que le système précédent est vérifié sur le domaine variable $B_{\mathbf{X}}^t$, on obtient de manière identique au système (5.1.13,5.1.14,5.1.15,5.1.16)

$$\int_{B_{\mathbf{X}}^t} \mathbf{P}^t : \nabla_{\mathbf{X}^t} \hat{\mathbf{x}}^t - \mathbf{b}^t \cdot \hat{\mathbf{x}}^t dV_{\mathbf{X}}^t - \int_{\partial B_{\mathbf{X}}^t} \mathbf{t}^t \cdot \hat{\mathbf{x}}^t dS_{\mathbf{X}}^t = 0 \quad \forall \hat{\mathbf{x}}^t \in \mathcal{V}^t, \quad \forall t \in [t_i, t_f], \quad (5.2.1)$$

$$\int_{B_{\mathbf{X}}^t} \hat{\mathbf{F}}^t : \left(\mathbf{P}^t - \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{F}} (\mathbf{F}^t, \mathbf{k}^t, \mathbf{X}^t) \right) dV_{\mathbf{X}}^t = 0 \quad \forall \hat{\mathbf{F}}^t \in \mathcal{I}_F^t, \quad \forall t \in [t_i, t_f], \quad (5.2.2)$$

$$\int_{B_{\mathbf{X}}^t} \hat{\mathbf{k}}^t : \left(\mathbf{K}^t + \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{k}} (\mathbf{F}^t, \mathbf{k}^t, \mathbf{X}^t) \right) dV_{\mathbf{X}}^t = 0 \quad \forall \hat{\mathbf{k}}^t \in \mathcal{I}_k^t, \quad \forall t \in [t_i, t_f], \quad (5.2.3)$$

$$\int_{B_{\mathbf{X}}^t} \hat{\mathbf{K}}^t : \left(\frac{d\mathbf{k}^t}{dt} - \mathbf{H} (\mathbf{K}^t, \mathbf{k}^t, \mathbf{X}^t) \right) dV_{\mathbf{X}}^t = 0 \quad \forall \hat{\mathbf{K}}^t \in \mathcal{K}^t, \quad \forall t \in [t_i, t_f]. \quad (5.2.4)$$

Ce système, pour une transformation de domaine donnée, possède les mêmes propriétés que le système sans perturbation. Pour qu'il soit bien posé, il faut connaître l'état initial du système. Par définition, on a $\mathbf{k}^t(t_i, \mathbf{X}^t) = \mathbf{k}^t(t_i, \mathbf{X})$ en début de perturbation. On doit aussi connaître l'évolution des forces de volumes \mathbf{b} et des conditions aux limites imposées sur la frontière dans la variation de domaine. Puisqu'on ne souhaite pas, dans notre méthode, devoir connaître autre chose que le problème d'évolution non-perturbé et la transformation de domaine, on suppose que :

- la frontière extérieure $\partial B_{\mathbf{X}}^t$ où sont appliquées les conditions aux limites imposées non nulles en chargement ne varie pas durant la transformation de domaine ($\partial B_{\mathbf{X}}^t = \chi^\vartheta(\partial B_{\mathbf{X}}^t)$)

- Les forces de volumes sont convectées avec la transformation $\mathbf{b}^t(\mathbf{X}^t, t) = \mathbf{b}(\mathbf{X})$

Ce système doit maintenant être transporté sur la configuration de calcul.

5.2.2 Problème d'évolution sur la configuration de calcul

Tout d'abord, on choisit de prendre à t la fonction test $\hat{\mathbf{x}}^t$ telle que

$$\hat{\mathbf{x}}^t(\mathbf{X}^t, t) = \hat{\mathbf{x}}(\mathbf{X}) \quad \forall \mathbf{X} \in B_X, \quad (5.2.5)$$

de façon à avoir

$$\forall \hat{\mathbf{x}}^t \in \mathcal{V}^t \quad \frac{d}{dt} \hat{\mathbf{x}}^t = 0. \quad (5.2.6)$$

Cela revient à convecter les fonctions tests. Le transport de l'équilibre (5.2.1) sur la configuration de calcul s'écrit alors

$$\int_{B_{\mathbf{X}}^t} \mathbf{P}^t : \nabla_{\mathbf{X}^t} \hat{\mathbf{x}}^t - \mathbf{b}^t \cdot \hat{\mathbf{x}}^t dV_{\mathbf{X}}^t - \int_{\partial B_{\mathbf{X}}^t} \mathbf{t}^t \cdot \hat{\mathbf{x}}^t dS_{\mathbf{X}}^t = \int_{B_{\mathbf{X}}} \left[\mathbf{P}^t : \left(\nabla_{\mathbf{X}} \hat{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{F}_{\mathbf{X}}^{-1} \right) - \mathbf{b}^t \cdot \hat{\mathbf{x}} \right] J_{\mathbf{X}} dV_{\mathbf{X}} \quad (5.2.7)$$

$$- \int_{\partial B_{\mathbf{X}}} \mathbf{t}^t \cdot \hat{\mathbf{x}} \left\| \mathbf{F}_{\mathbf{X}}^{-\top} \cdot \mathbf{N} \right\| J_{\mathbf{X}} dS_{\mathbf{X}} \quad \forall \hat{\mathbf{x}} \in \mathcal{V}$$

avec $\mathbf{F}_\chi = \nabla_{\mathbf{X}} \boldsymbol{\chi}^\theta$ le gradient de transformation entre le domaine matériel de départ et le domaine matériel perturbé.

En choisissant de prendre à t la fonction test $\hat{\mathbf{F}}^t$ telle que

$$J_\chi \hat{\mathbf{F}}^t(\mathbf{X}^t, t) = \hat{\mathbf{F}}(\mathbf{X}) \quad \forall \mathbf{X} \in B_X, \quad (5.2.8)$$

le transport de (5.2.2) s'écrit en utilisant les formules de transport

$$\int_{B_{\mathbf{X}}^t} \hat{\mathbf{F}}^t : \left(\mathbf{P}^t - \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{F}}(\mathbf{F}^t, \mathbf{k}^t, \mathbf{X}^t) \right) dV_{\mathbf{X}}^t = \int_{B_{\mathbf{X}}} \hat{\mathbf{F}} : \left(\mathbf{P}^t - \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{F}}(\mathbf{F}^t, \mathbf{k}^t, \mathbf{X}^t) \right) dV_{\mathbf{X}} \quad \forall \hat{\mathbf{F}} \in \mathcal{I}_F, \quad \forall t \in [t_i, t_f]. \quad (5.2.9)$$

En choisissant de prendre à t la fonction test $\hat{\mathbf{k}}^t$ telle que

$$J_\chi \hat{\mathbf{k}}^t(\mathbf{X}^t, t) = \hat{\mathbf{k}}(\mathbf{X}) \quad \forall \mathbf{X} \in B_X, \quad (5.2.10)$$

le transport de (5.2.3) s'écrit en utilisant les formules de transport

$$\int_{B_{\mathbf{X}}^t} \hat{\mathbf{k}}^t : \left(\mathbf{K}^t + \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{k}}(\mathbf{F}^t, \mathbf{k}^t, \mathbf{X}^t) \right) dV_{\mathbf{X}}^t = \int_{B_{\mathbf{X}}} \hat{\mathbf{k}} : \left(\mathbf{K}^t + \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{k}}(\mathbf{F}^t, \mathbf{k}^t, \mathbf{X}^t) \right) dV_{\mathbf{X}} \quad \forall \hat{\mathbf{k}} \in \mathcal{I}_k, \quad \forall t \in [t_i, t_f]. \quad (5.2.11)$$

Dans le cas de l'équation d'évolution des variables internes (5.2.4), on doit en plus de l'opération précédente transformer la dérivée par rapport au temps à position matérielle fixe en dérivée par rapport au temps à position de calcul fixe notée $\frac{d}{dt} \mathbf{Y}^t$ avec la relation (4.1.16)

$$\frac{d}{dt} \mathbf{Y}^t = \frac{d}{dt} \mathbf{Y}^t - \eta \nabla_{\mathbf{X}^t} \mathbf{Y}^t \cdot \boldsymbol{\theta}. \quad (5.2.12)$$

On obtient donc en choisissant de prendre à t la fonction test \mathbf{K}^t telle que

$$J_\chi \mathbf{K}^t(\mathbf{X}^t, t) = \hat{\mathbf{K}}(\mathbf{X}) \quad \forall \mathbf{X} \in B_X, \quad (5.2.13)$$

le transport de (5.2.4)

$$\int_{B_{\mathbf{X}}^t} \hat{\mathbf{K}}^t : \left(\frac{d\mathbf{k}^t}{dt} - \mathbf{H}(\mathbf{K}, \mathbf{k}, \mathbf{X}) \right) dV_{\mathbf{X}}^t = \int_{B_{\mathbf{X}}} \hat{\mathbf{K}} : \left(\frac{d\mathbf{k}^t}{dt} - \mathbf{H}(\mathbf{K}^t, \mathbf{k}^t, \mathbf{X}^t) \right) dV_{\mathbf{X}} \quad (5.2.14)$$

$$- \eta \int_{B_{\mathbf{X}}} \hat{\mathbf{K}} : \left[(\nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{k}^t \cdot \mathbf{F}_\chi^{-1}) \cdot \boldsymbol{\theta} \right] dV_{\mathbf{X}} \quad \forall \hat{\mathbf{K}} \in \mathcal{K}, \quad \forall t \in [t_i, t_f].$$

Le système (5.2.7, 5.2.9, 5.2.11, 5.2.14) écrit sur la configuration de calcul est explicitement fonction de la transformation géométrique. On peut alors le linéariser et utiliser les hypothèses de petites variations géométriques (sous-section 4.1.4).

5.3 Linéarisation du problème d'évolution contraint

D'après la construction de la perturbation de domaine (4.1.8), on a $\eta \ll 1$. On suppose également que les perturbations $\delta \mathbf{Y} = \mathbf{Y}^t - \mathbf{Y}$ de chaque quantité sont petites de manière à pouvoir linéariser. A partir de là, on travaille à l'ordre 1 en η et $\delta \mathbf{Y}$, en négligeant les termes en η^2 , $\eta \delta \mathbf{Y}$ et leurs dérivées (spatiales et temporelles).

5.3.1 Linéarisation de l'équilibre

L'équilibre ramené sur la configuration initiale s'écrit d'après (5.2.7) :

$$\int_{B_{\mathbf{x}}} [\mathbf{P}^t : (\nabla_{\mathbf{x}} \hat{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{F}_{\mathbf{x}}^{-1}) - \mathbf{b}^t \cdot \hat{\mathbf{x}}] J_{\mathbf{x}} dV_{\mathbf{x}} - \int_{\partial B_{\mathbf{x}}} \mathbf{t}^t \cdot \hat{\mathbf{x}} \|\mathbf{F}_{\mathbf{x}}^{-\top} \cdot \mathbf{N}\| J_{\mathbf{x}} dS_{\mathbf{x}} = 0 \quad \forall \hat{\mathbf{x}} \in \mathcal{V}, \quad \forall t \in [t_i, t_f]. \quad (5.3.1)$$

Les termes de transformation de domaine se linéarisent au premier ordre en η (sous-section 4.1.4) :

$$\begin{aligned} - \mathbf{F}_{\mathbf{x}}^{-1} &= \mathbf{1} - \eta \tau \nabla_{\mathbf{x}} \boldsymbol{\theta} \\ - J_{\mathbf{x}} &= 1 + \eta \tau \operatorname{div}_{\mathbf{x}} \boldsymbol{\theta} \\ - \|\mathbf{F}_{\mathbf{x}}^{-\top} \cdot \mathbf{N}\| &= 1 - \eta \tau (\nabla_{\mathbf{x}}^{\top} \boldsymbol{\theta} \cdot \mathbf{N}) \cdot \mathbf{N} \end{aligned}$$

Pour le premier terme de l'équilibre, on obtient donc

$$\begin{aligned} \int_{B_{\mathbf{x}}} [\mathbf{P}^t : (\nabla_{\mathbf{x}} \hat{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{F}_{\mathbf{x}}^{-1}) - \mathbf{b}^t \cdot \hat{\mathbf{x}}] J_{\mathbf{x}} dV_{\mathbf{x}} &= \int_{B_{\mathbf{x}}} \mathbf{P}^t : \nabla_{\mathbf{x}} \hat{\mathbf{x}} - \mathbf{b}^t \cdot \hat{\mathbf{x}} dV_{\mathbf{x}} \\ &\quad - \eta \tau \int_{B_{\mathbf{x}}} \mathbf{P}^t : (\nabla_{\mathbf{x}} \hat{\mathbf{x}} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \boldsymbol{\theta}) dV_{\mathbf{x}} \\ &\quad + \eta \tau \int_{B_{\mathbf{x}}} [\mathbf{P}^t : \nabla_{\mathbf{x}} \hat{\mathbf{x}} - \mathbf{b}^t \cdot \hat{\mathbf{x}}] \operatorname{div}_{\mathbf{x}} \boldsymbol{\theta} dV_{\mathbf{x}} \end{aligned} \quad (5.3.2)$$

puis en utilisant la définition de la perturbation et l'hypothèse sur l'évolution des forces de volumes, on obtient à l'ordre 1

$$\begin{aligned}
 \int_{B_{\mathbf{X}}} [\mathbf{P}^t : (\nabla_{\mathbf{X}} \hat{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{F}_{\mathbf{X}}^{-1}) - \mathbf{b}^t \cdot \hat{\mathbf{x}}] J_{\mathbf{X}} dV_{\mathbf{X}} = & \int_{\hat{B}_{\mathbf{X}}} \mathbf{P} : \nabla_{\mathbf{X}} \hat{\mathbf{x}} - \mathbf{b} \cdot \hat{\mathbf{x}} dV_{\mathbf{X}} \\
 & + \int_{B_{\mathbf{X}}} \delta \mathbf{P} : \nabla_{\mathbf{X}} \hat{\mathbf{x}} dV_{\mathbf{X}} \\
 & - \eta \tau \int_{B_{\mathbf{X}}} \mathbf{P} : (\nabla_{\mathbf{X}} \hat{\mathbf{x}} \cdot \nabla_{\mathbf{X}} \boldsymbol{\theta}) dV_{\mathbf{X}} \\
 & + \eta \tau \int_{\hat{B}_{\mathbf{X}}} [\mathbf{P} : \nabla_{\mathbf{X}} \hat{\mathbf{x}} - \mathbf{b} \cdot \hat{\mathbf{x}}] \operatorname{div}_{\mathbf{X}} \boldsymbol{\theta} dV_{\mathbf{X}}.
 \end{aligned} \tag{5.3.3}$$

De la même manière le second terme s'écrit

$$\int_{\partial B_{\mathbf{X}}} \mathbf{t}^t \cdot \hat{\mathbf{x}} \|\mathbf{F}_{\mathbf{X}}^{-\top} \cdot \mathbf{N}\| J_{\mathbf{X}} dS_{\mathbf{X}} = \int_{\partial B_{\mathbf{X}}} \mathbf{t} \cdot \hat{\mathbf{x}} dS_{\mathbf{X}} + \int_{\partial B_{\mathbf{X}}} \delta \mathbf{t} \cdot \hat{\mathbf{x}} dS_{\mathbf{X}} + \eta \tau \int_{\partial B_{\mathbf{X}}} (\mathbf{t} \cdot \hat{\mathbf{x}}) \operatorname{div}_{\partial B_{\mathbf{X}}} \boldsymbol{\theta} dS_{\mathbf{X}}, \tag{5.3.4}$$

en notant $\operatorname{div}_{\partial B_{\mathbf{X}}} \boldsymbol{\theta} = \operatorname{div}_{\mathbf{X}} \boldsymbol{\theta} - (\nabla_{\mathbf{X}}^{\top} \boldsymbol{\theta} \cdot \mathbf{N}) \cdot \mathbf{N}$. Or, l'équilibre sans perturbation est vérifié

$$\int_{B_{\mathbf{X}}} \mathbf{P} : \nabla_{\mathbf{X}} \hat{\mathbf{x}} - \mathbf{b} \cdot \hat{\mathbf{x}} dV_{\mathbf{X}} - \int_{\partial B_{\mathbf{X}}} \mathbf{t} \cdot \hat{\mathbf{x}} dS_{\mathbf{X}} = 0 \quad \forall \hat{\mathbf{x}} \in \mathcal{V}, \quad \forall t \in [t_i, t_f]. \tag{5.3.5}$$

Par application de (5.3.5) dans (5.3.3,5.3.4), on obtient l'équilibre linéarisé

$$\begin{aligned}
 & \int_{B_{\mathbf{X}}} \delta \mathbf{P} : \nabla_{\mathbf{X}} \hat{\mathbf{x}} dV_{\mathbf{X}} - \int_{\partial B_{\mathbf{X}}} \delta \mathbf{t} \cdot \hat{\mathbf{x}} dS_{\mathbf{X}} \\
 & - \eta \tau \left\{ \int_{B_{\mathbf{X}}} \mathbf{P} : (\nabla_{\mathbf{X}} \hat{\mathbf{x}} \cdot \nabla_{\mathbf{X}} \boldsymbol{\theta}) dV_{\mathbf{X}} - \int_{B_{\mathbf{X}}} [\mathbf{P} : \nabla_{\mathbf{X}} \hat{\mathbf{x}} - \mathbf{b} \cdot \hat{\mathbf{x}}] \operatorname{div}_{\mathbf{X}} \boldsymbol{\theta} dV_{\mathbf{X}} \right\} \\
 & - \eta \tau \int_{\partial B_{\mathbf{X}}} (\mathbf{t} \cdot \hat{\mathbf{x}}) \operatorname{div}_{\partial B_{\mathbf{X}}} \boldsymbol{\theta} dS_{\mathbf{X}} = 0 \quad \forall \hat{\mathbf{x}} \in \mathcal{V}, \quad \forall t \in [t_i, t_f].
 \end{aligned} \tag{5.3.6}$$

5.3.2 Loi de comportement linéarisée

La première équation de comportement ramenée sur la configuration initiale s'écrit d'après (5.2.9) :

$$\int_{\hat{B}_{\mathbf{X}}} \hat{\mathbf{F}} : \left(\mathbf{P}^t - \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{F}} (\mathbf{F}^t, \mathbf{k}^t, \mathbf{X}^t) \right) dV_{\mathbf{X}} = 0 \quad \forall \hat{\mathbf{F}} \in \mathcal{I}_F, \quad \forall t \in [t_i, t_f]. \tag{5.3.7}$$

En supposant une différentiabilité suffisante de l'énergie libre, on a par l'hypothèse de petites perturbations des champs avec $\mathbf{P} = \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{F}}$

$$\frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{F}}(\mathbf{F}^t, \mathbf{k}^t, \mathbf{X}^t) = \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{F}}(\mathbf{F}, \mathbf{k}, \mathbf{X}) + \frac{\partial^2 \psi}{\partial \mathbf{F}^2}(\mathbf{F}, \mathbf{k}, \mathbf{X}) : \delta \mathbf{F} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial \mathbf{k} \partial \mathbf{F}}(\mathbf{F}, \mathbf{k}, \mathbf{X}) \cdot \delta \mathbf{k} + \eta \tau \nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\theta}. \quad (5.3.8)$$

La linéarisation au premier ordre s'écrit donc en utilisant la même méthode que pour l'équilibre

$$\begin{aligned} \int_{B_{\mathbf{X}}} \hat{\mathbf{F}} : \left(\mathbf{P}^t - \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{F}}(\mathbf{F}^t, \mathbf{k}^t, \mathbf{X}^t) \right) dV_{\mathbf{X}} &= \int_{B_{\mathbf{X}}} \hat{\mathbf{F}} : \delta \mathbf{P} dV_{\mathbf{X}} \\ &- \int_{B_{\mathbf{X}}} \hat{\mathbf{F}} : \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial \mathbf{F}^2}(\mathbf{F}, \mathbf{k}, \mathbf{X}) : \delta \mathbf{F} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial \mathbf{k} \partial \mathbf{F}}(\mathbf{F}, \mathbf{k}, \mathbf{X}) \cdot \delta \mathbf{k} \right) dV_{\mathbf{X}} \\ &- \eta \tau \int_{B_{\mathbf{X}}} \hat{\mathbf{F}} : (\nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\theta}) dV_{\mathbf{X}} \\ &+ \int_{B_{\mathbf{X}}} \hat{\mathbf{F}} : \left(\mathbf{P} - \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{F}}(\mathbf{F}, \mathbf{k}, \mathbf{X}) \right) dV_{\mathbf{X}}, \end{aligned} \quad (5.3.9)$$

La première équation de comportement pour le problème non-perturbé est vérifiée

$$\int_{B_{\mathbf{X}}} \hat{\mathbf{F}} : \left(\mathbf{P} - \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{F}}(\mathbf{F}, \mathbf{k}, \mathbf{X}) \right) dV_{\mathbf{X}} = 0 \quad \forall \hat{\mathbf{F}} \in \mathcal{I}_F, \quad (5.3.10)$$

ce qui nous permet d'obtenir finalement la première relation de comportement linéarisé de la même façon

$$\begin{aligned} \int_{B_{\mathbf{X}}} \hat{\mathbf{F}} : \delta \mathbf{P} dV_{\mathbf{X}} - \int_{B_{\mathbf{X}}} \hat{\mathbf{F}} : \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial \mathbf{F}^2}(\mathbf{F}, \mathbf{k}, \mathbf{X}) : \delta \mathbf{F} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial \mathbf{k} \partial \mathbf{F}}(\mathbf{F}, \mathbf{k}, \mathbf{X}) \cdot \delta \mathbf{k} \right) dV_{\mathbf{X}} \\ - \eta \tau \int_{B_{\mathbf{X}}} \hat{\mathbf{F}} : (\nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\theta}) dV_{\mathbf{X}} = 0 \quad \forall \hat{\mathbf{F}} \in \mathcal{I}_F, \quad \forall t \in [t_i, t_f]. \end{aligned} \quad (5.3.11)$$

En reprenant le même raisonnement pour la deuxième équation de comportement ramenée sur la configuration initiale (5.2.11), on obtient

$$\begin{aligned} \int_{B_{\mathbf{X}}} \hat{\mathbf{k}} : \delta \mathbf{K} dV_{\mathbf{X}} + \int_{B_{\mathbf{X}}} \hat{\mathbf{k}} : \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial \mathbf{k}^2}(\mathbf{F}, \mathbf{k}, \mathbf{X}) \cdot \delta \mathbf{k} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial \mathbf{F} \partial \mathbf{k}}(\mathbf{F}, \mathbf{k}, \mathbf{X}) \cdot \delta \mathbf{F} \right) dV_{\mathbf{X}} \\ + \eta \tau \int_{B_{\mathbf{X}}} \hat{\mathbf{k}} : (-\nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\theta}) dV_{\mathbf{X}} = 0 \quad \forall \hat{\mathbf{k}} \in \mathcal{I}_k, \quad \forall t \in [t_i, t_f]. \end{aligned} \quad (5.3.12)$$

5.3.3 Equation d'évolution linéarisée

L'équation d'évolution ramenée sur la configuration initiale s'écrit d'après (5.2.14)

$$\int_{B_{\mathbf{X}}} \hat{\mathbf{K}} : \left(\frac{d\mathbf{k}^t}{dt} - \mathbf{H}(\mathbf{K}^t, \mathbf{k}^t, \mathbf{X}^t) \right) dV_{\mathbf{X}} - \eta \int_{B_{\mathbf{X}}} \hat{\mathbf{K}} : \left[(\nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{k}^t \cdot \mathbf{F}_{\mathbf{X}}^{-1}) \cdot \boldsymbol{\theta} \right] dV_{\mathbf{X}} = 0 \quad \forall \hat{\mathbf{K}} \in \mathcal{K}, \quad \forall t \in [t_i, t_f]. \quad (5.3.13)$$

En supposant une différentiabilité suffisante de la fonction \mathbf{H} , on a par l'hypothèse de petites perturbations des champs

$$\mathbf{H}(\mathbf{K}^t, \mathbf{k}^t, \mathbf{X}^t) = \mathbf{H}(\mathbf{K}, \mathbf{k}, \mathbf{X}) + \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{K}}(\mathbf{K}, \mathbf{k}, \mathbf{X}) \cdot \delta \mathbf{K} + \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{k}}(\mathbf{K}, \mathbf{k}, \mathbf{X}) \cdot \delta \mathbf{k} + \eta \tau \nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{H}(\mathbf{K}, \mathbf{k}, \mathbf{X}) \cdot \boldsymbol{\theta}. \quad (5.3.14)$$

Le premier terme de (5.2.14) se linéarise alors en

$$\begin{aligned} \int_{B_{\mathbf{X}}} \hat{\mathbf{K}} : \left(\frac{d\mathbf{k}^t}{dt} - \mathbf{H}(\mathbf{K}^t, \mathbf{k}^t, \mathbf{X}^t) \right) dV_{\mathbf{X}} &= \int_{B_{\mathbf{X}}} \hat{\mathbf{K}} : \frac{d\delta \mathbf{k}}{dt} dV_{\mathbf{X}} \\ &\quad - \int_{B_{\mathbf{X}}} \hat{\mathbf{K}} : \left(\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{K}}(\mathbf{K}, \mathbf{k}, \mathbf{X}) \cdot \delta \mathbf{K} + \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{k}}(\mathbf{K}, \mathbf{k}, \mathbf{X}) \cdot \delta \mathbf{k} \right) dV_{\mathbf{X}} \\ &\quad - \eta \tau \int_{B_{\mathbf{X}}} \hat{\mathbf{K}} : (\nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{H}(\mathbf{K}, \mathbf{k}, \mathbf{X}) \cdot \boldsymbol{\theta}) dV_{\mathbf{X}} \\ &\quad + \int_{B_{\mathbf{X}}} \hat{\mathbf{K}} : \left(\frac{d\mathbf{k}}{dt} - \mathbf{H}(\mathbf{K}, \mathbf{k}, \mathbf{X}) \right) dV_{\mathbf{X}}. \end{aligned} \quad (5.3.15)$$

L'équation d'évolution pour le problème non-perturbé donne

$$\int_{B_{\mathbf{X}}} \hat{\mathbf{K}} : \left(\frac{d\mathbf{k}}{dt} - \mathbf{H}(\mathbf{K}, \mathbf{k}, \mathbf{X}) \right) dV_{\mathbf{X}} = 0 \quad \forall \hat{\mathbf{K}} \in \mathcal{K}, \quad \forall t \in [t_i, t_f]. \quad (5.3.16)$$

ce qui nous permet finalement d'obtenir en éliminant (5.3.16) dans (5.3.15)

$$\begin{aligned} \int_{B_{\mathbf{X}}} \hat{\mathbf{K}} : \left(\frac{d\mathbf{k}^t}{dt} - \mathbf{H}(\mathbf{K}^t, \mathbf{k}^t, \mathbf{X}^t) \right) J_{\mathbf{X}} dV_{\mathbf{X}} &= \int_{B_{\mathbf{X}}} \hat{\mathbf{K}} : \frac{d\delta \mathbf{k}}{dt} dV_{\mathbf{X}} \\ &\quad - \int_{B_{\mathbf{X}}} \hat{\mathbf{K}} : \left(\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{K}}(\mathbf{K}, \mathbf{k}, \mathbf{X}) \cdot \delta \mathbf{K} + \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{k}}(\mathbf{K}, \mathbf{k}, \mathbf{X}) \cdot \delta \mathbf{k} \right) dV_{\mathbf{X}} \\ &\quad - \eta \tau \int_{B_{\mathbf{X}}} \hat{\mathbf{K}} : (\nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{H}(\mathbf{K}, \mathbf{k}, \mathbf{X}) \cdot \boldsymbol{\theta}) dV_{\mathbf{X}} \end{aligned} \quad (5.3.17)$$

Le second terme de (5.2.14) se linéarise en

$$\eta \int_{B_{\mathbf{X}}} \hat{\mathbf{K}} : \left[(\nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{k}^t \cdot \mathbf{F}_{\mathbf{X}}^{-1}) \cdot \boldsymbol{\theta} \right] J_{\mathbf{X}} dV_{\mathbf{X}} = \eta \int_{B_{\mathbf{X}}} \hat{\mathbf{K}} : (\nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\theta}) dV_{\mathbf{X}}. \quad (5.3.18)$$

On obtient finalement par (5.3.17,5.3.18) l'équation d'évolution linéarisée

$$\begin{aligned} \int_{B_{\mathbf{X}}} \hat{\mathbf{K}} : \frac{d\delta \mathbf{k}}{dt} V_{\mathbf{X}} - \int_{B_{\mathbf{X}}} \hat{\mathbf{K}} : \left(\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{K}} \cdot \delta \mathbf{K} + \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{k}} \cdot \delta \mathbf{k} \right) dV_{\mathbf{X}} \\ - \eta \int_{B_{\mathbf{X}}} \hat{\mathbf{K}} : (\nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\theta} + \tau \nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{H} \cdot \boldsymbol{\theta}) dV_{\mathbf{X}} = 0 \quad \forall \hat{\mathbf{K}} \in \mathcal{K}, \forall t \in [t_i, t_f]. \end{aligned} \quad (5.3.19)$$

5.3.4 Système final

Le problème linéarisé s'écrit finalement en regroupant les quatres équations linéarisées

$$\begin{aligned} \int_{B_{\mathbf{X}}} \delta \mathbf{P} : \nabla_{\mathbf{X}} \hat{\mathbf{x}} dV_{\mathbf{X}} - \int_{\partial B_{\mathbf{X}}} \delta \mathbf{t} \cdot \hat{\mathbf{x}} dS_{\mathbf{X}} \\ - \eta \tau \left\{ \int_{B_{\mathbf{X}}} \mathbf{P} : (\nabla_{\mathbf{X}} \hat{\mathbf{x}} \cdot \nabla_{\mathbf{X}} \boldsymbol{\theta}) dV_{\mathbf{X}} - \int_{B_{\mathbf{X}}} [\mathbf{P} : \nabla_{\mathbf{X}} \hat{\mathbf{x}} - \mathbf{b} \cdot \hat{\mathbf{x}}] \operatorname{div}_{\mathbf{X}} \boldsymbol{\theta} dV_{\mathbf{X}} \right\} \\ - \eta \tau \int_{\partial B_{\mathbf{X}}} (\mathbf{t} \cdot \hat{\mathbf{x}}) \operatorname{div}_{\partial B_{\mathbf{X}}} \boldsymbol{\theta} dS_{\mathbf{X}} = 0 \quad \forall \hat{\mathbf{x}} \in \mathcal{V}, \forall t \in [t_i, t_f]. \end{aligned} \quad (5.3.20)$$

$$\begin{aligned} \int_{B_{\mathbf{X}}} \hat{\mathbf{F}} : \delta \mathbf{P} dV_{\mathbf{X}} - \int_{B_{\mathbf{X}}} \hat{\mathbf{F}} : \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial \mathbf{F}^2} : \delta \mathbf{F} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial \mathbf{k} \partial \mathbf{F}} \cdot \delta \mathbf{k} \right) dV_{\mathbf{X}} \\ - \eta \tau \int_{B_{\mathbf{X}}} \hat{\mathbf{F}} : (\nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\theta}) dV_{\mathbf{X}} = 0 \quad \forall \hat{\mathbf{F}} \in \mathcal{I}_F, \forall t \in [t_i, t_f]. \end{aligned} \quad (5.3.21)$$

$$\begin{aligned} \int_{B_{\mathbf{X}}} \hat{\mathbf{k}} : \delta \mathbf{K} dV_{\mathbf{X}} + \int_{B_{\mathbf{X}}} \hat{\mathbf{k}} : \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial \mathbf{k}^2} \cdot \delta \mathbf{k} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial \mathbf{F} \partial \mathbf{k}} \cdot \delta \mathbf{F} \right) dV_{\mathbf{X}} \\ + \eta \tau \int_{B_{\mathbf{X}}} \hat{\mathbf{k}} : (-\nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\theta}) dV_{\mathbf{X}} = 0 \quad \forall \hat{\mathbf{k}} \in \mathcal{I}_k, \forall t \in [t_i, t_f]. \end{aligned} \quad (5.3.22)$$

$$\begin{aligned} \int_{B_{\mathbf{X}}} \hat{\mathbf{K}} : \frac{d\delta \mathbf{k}}{dt} dV_{\mathbf{X}} - \int_{B_{\mathbf{X}}} \hat{\mathbf{K}} : \left(\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{K}} \cdot \delta \mathbf{K} + \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{k}} \cdot \delta \mathbf{k} \right) dV_{\mathbf{X}} \\ - \eta \int_{B_{\mathbf{X}}} \hat{\mathbf{K}} : (\nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\theta} + \tau \nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{H} \cdot \boldsymbol{\theta}) dV_{\mathbf{X}} = 0 \quad \forall \hat{\mathbf{K}} \in \mathcal{K}, \forall t \in [t_i, t_f]. \end{aligned} \quad (5.3.23)$$

5.4 Construction du problème adjoint

Dans cette section, on écrit le problème précédent $\forall t \in [t_i, t_f]$ sous une forme générique puis on l'adjoint afin d'avoir un calcul direct de la grandeur caractéristique

$$\delta J_{\text{im}} = \int_{t_i}^{t_f} \int_{B_{\mathbf{x}}} \frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial \hat{\mathbf{Y}}} \cdot \delta \mathbf{Y} \, dV_{\mathbf{x}} dt. \quad (5.4.1)$$

Le système linéarisé $\forall t \in [t_i, t_f]$ (5.3.20, 5.3.21, 5.3.22, 5.3.23) peut s'écrire sous une forme simplifiée

$$\begin{cases} \mathbf{a} \left(\frac{d\delta \mathbf{Y}}{dt}, \hat{\mathbf{Y}} \right) + \mathbf{b} (\delta \mathbf{Y}, \hat{\mathbf{Y}}, t) + \eta \mathbf{c} (\hat{\mathbf{Y}}, t) = \mathbf{0} \\ \delta \mathbf{Y}(t_i) = \mathbf{0} \end{cases} \quad \forall \hat{\mathbf{Y}} \in \mathcal{Y}, \quad (5.4.2)$$

où les variables duales $\hat{\mathbf{Y}}$ perturbées $\delta \mathbf{Y}$, et espaces associés \mathcal{Y} sont définis par :

$$\begin{aligned} - \hat{\mathbf{Y}} &= \begin{cases} \hat{\mathbf{x}} \\ \hat{\mathbf{F}} \\ \hat{\mathbf{k}} \\ \hat{\mathbf{K}} \end{cases} \quad \text{et } \mathcal{Y} = \left\{ \hat{\mathbf{Y}} : B_{\mathbf{x}} \times [t_i, t_f] \rightarrow \mathcal{V} \times \mathcal{I}_F \times \mathcal{I}_k \times \mathcal{K} \right\} \\ - \delta \mathbf{Y} &= \begin{cases} \delta \mathbf{P} \\ \delta \mathbf{F} = \delta \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{x} \\ \delta \mathbf{k} \\ \delta \mathbf{K} \end{cases} \end{aligned}$$

Ci dessus $\mathbf{a} \left(\frac{d\delta \mathbf{Y}}{dt}, \hat{\mathbf{Y}} \right)$ est bilinéaire en $\frac{d\delta \mathbf{Y}}{dt}$ et $\hat{\mathbf{Y}}$, $\mathbf{b}(\delta \mathbf{Y}, \hat{\mathbf{Y}}, t)$ fonction du temps et bilinéaire en $\hat{\mathbf{Y}}$ et $\delta \mathbf{Y}$ et le second membre $\eta \mathbf{c} (\hat{\mathbf{Y}}, t)$ est fonction uniquement de quantités connues et du temps et ces formes sont définies à partir des équations du système linéarisé, par

$$\mathbf{a} \left(\frac{d\delta \mathbf{Y}}{dt}, \hat{\mathbf{Y}} \right) = \int_{B_{\mathbf{x}}} \hat{\mathbf{K}} : \frac{d\delta \mathbf{k}}{dt} \, dV_{\mathbf{x}} \quad (5.4.3)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{b}(\delta \mathbf{Y}, \hat{\mathbf{Y}}, t) &= \int_{B_{\mathbf{x}}} \delta \mathbf{P} : \nabla_{\mathbf{x}} \hat{\mathbf{x}} \, dV_{\mathbf{x}} - \int_{\partial B_{\mathbf{x}}} \delta \mathbf{t} \cdot \hat{\mathbf{x}} \, dS_{\mathbf{x}} \\ &+ \int_{B_{\mathbf{x}}} \hat{\mathbf{F}} : \delta \mathbf{P} \, dV_{\mathbf{x}} - \int_{B_{\mathbf{x}}} \hat{\mathbf{F}} : \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial \mathbf{F}^2} : \delta \mathbf{F} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial \mathbf{k} \partial \mathbf{F}} \cdot \delta \mathbf{k} \right) \, dV_{\mathbf{x}} \\ &+ \int_{B_{\mathbf{x}}} \hat{\mathbf{k}} : \delta \mathbf{K} \, dV_{\mathbf{x}} + \int_{B_{\mathbf{x}}} \hat{\mathbf{k}} : \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial \mathbf{k}^2} \cdot \delta \mathbf{k} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial \mathbf{F} \partial \mathbf{k}} \cdot \delta \mathbf{F} \right) \, dV_{\mathbf{x}} \\ &- \int_{B_{\mathbf{x}}} \hat{\mathbf{K}} : \left(\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{K}} \cdot \delta \mathbf{K} + \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{k}} \cdot \delta \mathbf{k} \right) \, dV_{\mathbf{x}} \end{aligned} \quad (5.4.4)$$

$$\begin{aligned}
 \mathbf{c}(\hat{\mathbf{Y}}, t) = & -\tau \int_{B_{\mathbf{X}}} \mathbf{P} : (\nabla_{\mathbf{X}} \hat{\mathbf{x}} \cdot \nabla_{\mathbf{X}} \boldsymbol{\theta}) \, dV_{\mathbf{X}} \\
 & + \tau \int_{B_{\mathbf{X}}} [\mathbf{P} : \nabla_{\mathbf{X}} \hat{\mathbf{x}} - \mathbf{b} \cdot \hat{\mathbf{x}}] \operatorname{div}_{\mathbf{X}} \boldsymbol{\theta} \, dV_{\mathbf{X}} \\
 & - \tau \int_{\partial B_{\mathbf{X}}} (\mathbf{t} \cdot \hat{\mathbf{x}}) \operatorname{div}_{\partial B_{\mathbf{X}}} \boldsymbol{\theta} \, dS_{\mathbf{X}} - \tau \int_{B_{\mathbf{X}}} \hat{\mathbf{F}} : (-\nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\theta}) \, dV_{\mathbf{X}} \\
 & + \tau \int_{B_{\mathbf{X}}} \hat{\mathbf{k}} : (-\nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\theta}) \, dV_{\mathbf{X}} \\
 & - \int_{B_{\mathbf{X}}} \hat{\mathbf{K}} : (\nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\theta} + \tau \nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{H} \cdot \boldsymbol{\theta}) \, dV_{\mathbf{X}}
 \end{aligned} \tag{5.4.5}$$

En intégrant la première équation du problème générique en temps, on obtient

$$\int_{t_i}^{t_f} \mathbf{a} \left(\frac{d\delta\mathbf{Y}}{dt}, \hat{\mathbf{Y}} \right) dt + \int_{t_i}^{t_f} \mathbf{b}(\delta\mathbf{Y}, \hat{\mathbf{Y}}, t) dt + \eta \int_{t_i}^{t_f} \mathbf{c}(\hat{\mathbf{Y}}, t) dt = \mathbf{0} \quad \forall \hat{\mathbf{Y}} \in \mathcal{Y}. \tag{5.4.6}$$

On intègre alors par parties la première intégrale afin de reporter la dérivation en temps sur la fonction test en considérant la condition $\delta\mathbf{Y}(t_i) = \mathbf{0}$ (nullité de la perturbation en $t = t_i$)

$$\int_{t_i}^{t_f} \mathbf{a} \left(\frac{d\delta\mathbf{Y}}{dt}, \hat{\mathbf{Y}} \right) dt = \mathbf{a}(\delta\mathbf{Y}(t_f), \hat{\mathbf{Y}}(t_f)) - \int_{t_i}^{t_f} \mathbf{a} \left(\delta\mathbf{Y}, \frac{d\hat{\mathbf{Y}}}{dt} \right) dt \quad \forall \hat{\mathbf{Y}} \in \mathcal{Y}. \tag{5.4.7}$$

On introduit alors le problème adjoint suivant

$$\begin{aligned}
 -\mathbf{a}(\delta\hat{\mathbf{Y}}, \frac{d\widetilde{\mathbf{Y}}}{dt}) + \mathbf{b}(\delta\hat{\mathbf{Y}}, \widetilde{\mathbf{Y}}, t) &= \int_{B_{\mathbf{X}}} \frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial \mathbf{Y}} \cdot \delta\hat{\mathbf{Y}} \, dV_{\mathbf{X}}, \quad \forall \delta\hat{\mathbf{Y}} \in \mathcal{Y} \\
 \widetilde{\mathbf{Y}}_{t_f} &= \mathbf{0},
 \end{aligned} \tag{5.4.8}$$

en notant l'inconnue adjointe $\widetilde{\mathbf{Y}}$. Il faut noter que pour résoudre le problème adjoint, il est nécessaire d'intégrer le système précédent de manière rétrograde en temps.

Après résolution du problème adjoint, en intégrant le problème adjoint en temps, on obtient l'identité

$$- \int_{t_i}^{t_f} \mathbf{a} \left(\delta\hat{\mathbf{Y}}, \frac{d\widetilde{\mathbf{Y}}}{dt} \right) + \int_{t_i}^{t_f} \mathbf{b}(\delta\hat{\mathbf{Y}}, \widetilde{\mathbf{Y}}, t) dt = \int_{t_i}^{t_f} \int_{B_{\mathbf{X}}} \frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial \mathbf{Y}} \cdot \delta\hat{\mathbf{Y}} \, dV_{\mathbf{X}} dt \quad \forall \delta\hat{\mathbf{Y}} \in \mathcal{Y}. \tag{5.4.9}$$

En intégrant par parties le premier terme, en utilisant la condition en t_f sur $\widetilde{\mathbf{Y}}$, et en prenant une fonction test $\widehat{\delta\mathbf{Y}}$ nulle en zéro, on a

$$\int_{t_i}^{t_f} \mathbf{a} \left(\frac{d\widehat{\delta\mathbf{Y}}}{dt}, \widetilde{\mathbf{Y}} \right) dt + \int_{t_i}^{t_f} \mathbf{b}(\widehat{\delta\mathbf{Y}}, \widetilde{\mathbf{Y}}, t) dt = \int_{t_i}^{t_f} \int_{B_{\mathbf{x}}} \frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial \mathbf{Y}} \cdot \widehat{\delta\mathbf{Y}} dV_{\mathbf{x}} dt \quad \forall \widehat{\delta\mathbf{Y}} \in \mathcal{Y}, \text{ et } \widehat{\delta\mathbf{Y}}=0. \quad (5.4.10)$$

Finalement par (5.4.6) utilisé avec $\widehat{\mathbf{Y}} = \widetilde{\mathbf{Y}}$ et (5.4.10) utilisé avec $\widehat{\delta\mathbf{Y}} = \delta\mathbf{Y}$, on a le résultat final

$$\int_{t_i}^{t_f} \int_{B_{\mathbf{x}}} \frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial \mathbf{Y}} \cdot \delta\mathbf{Y} dV_{\mathbf{x}} dt = -\eta \int_{t_i}^{t_f} \mathbf{c}(\widetilde{\mathbf{Y}}, t) dt. \quad (5.4.11)$$

Autrement dit, la variation inconnue recherchée est une fonction explicite de l'état adjoint sans que l'on ait à calculer $\delta\mathbf{Y}$. Pour résumer la démarche, il faut résoudre dans un premier temps le problème d'évolution non-perturbé sur la quantité générique afin d'obtenir $\mathbf{Y}(t)$. Il faut ensuite résoudre le problème adjoint (5.4.8) pour obtenir $\widetilde{\mathbf{Y}}(t)$. La connaissance de ces deux quantités permet enfin de calculer simplement la variation recherchée, quelque soit la perturbation imposée.

Chapitre 6

Comparaison des grandeurs explicites et couplées pour le problème de flexion trois points

L'objet de ce chapitre est de proposer un cas fissuré simple et une loi d'évolution régulière de manière à progresser dans la validation du calcul de grandeurs caractéristiques définies dans le chapitre 5.

Tout d'abord, on présente donc le cas de calcul et l'approximation choisie (section 6.1). Cette approximation permet de se ramener à un problème d'évolution 1D. Puis, on pose (section 6.2) et on adjoint le problème 1D d'évolution linéarisé (section 6.3). Pour finir, on propose une discrétisation du problème posé et une première étude sur une grandeur couplée (section 6.4).

6.1 Fissure en flexion trois points : Géométrie, loi de comportement et approximation

Dans le cadre des fissures fragiles en milieu dissipatif, l'étude de Dormieux [109] a montré que l'essai de fissuration en flexion trois points pouvait être approché par l'essai de délamination de poutre mince en flexion simple. On choisit donc de suivre la même voie lors de notre analyse.

Dans cette section, on met en place la géométrie et les lois de comportement que l'on va utiliser pour le problème fissuré en flexion trois points. Ensuite, on utilise une approximation de poutre en flexion pour reproduire le cas de la fissure en flexion simple. Ceci nous permet de former le problème d'évolution 1D qui va conduire aux calculs des grandeurs caractéristiques.

6.1.1 Géométrie

Dans ce chapitre, on considère une structure fine entaillée en flexion plane simple sous l'application d'une force constante F imposée en $t = 0$ et maintenue par la suite (figure 6.1.1).

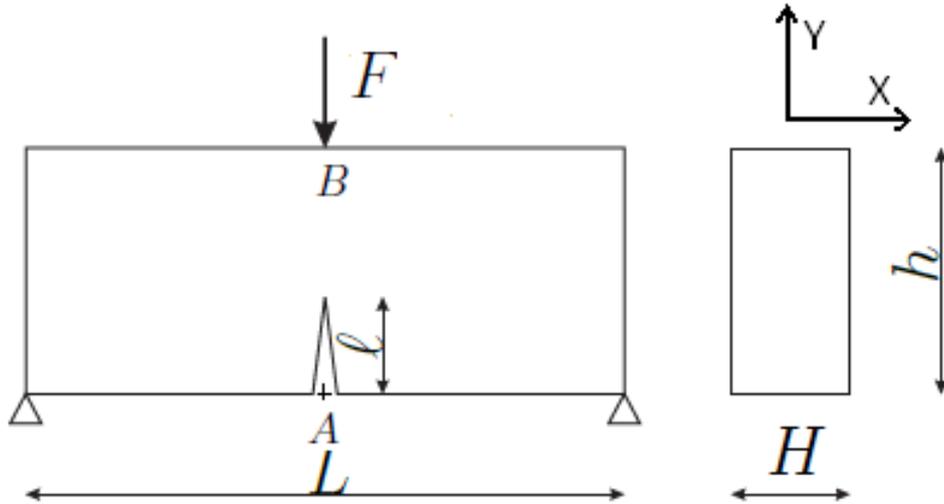


FIGURE 6.1.1: Structure 3D fine ($H \rightarrow 0$) entaillée en flexion trois points soumise à une force F selon l'axe Y imposée en $t = 0$ et maintenue par la suite. La structure est de longueur L , d'épaisseur H et de hauteur h . Le repère est centré en A .

Considérons alors les conditions aux limites appliquées à cette structure. Pour cela, on note :

- le déplacement $u(x, y, t)$ selon l'axe X ,
- le déplacement $v(x, y, t)$ selon l'axe Y .

Les conditions aux limites en déplacement sont alors $\forall t \in [0, T]$

$$u(-L/2, 0, t) = 0, v(-L/2, 0, t) = 0, v(L/2, 0, t) = 0. \quad (6.1.1)$$

et on impose une force selon l'axe Y au point B de coordonnée $(0, h, t)$.

6.1.2 Lois de comportement

On se limite à une loi de Maxwell linéaire pour éviter l'irrégularité du pseudo-potential de dissipation dans le cas élastoplastique et pour pouvoir comparer les résultats à l'étude de Luc Dormieux [109] et valide l'approche par état adjoint dans un cadre dissipatif.

6.1.3 Approximation : Délamination de poutre en flexion

La complexité mathématique du calcul de grandeur caractéristique pour des structures fissurées en viscoplasticité nous conduit à rechercher une forme simplifiée de ces grandeurs en simplifiant à la fois la géométrie et le comportement du cas de flexion 3 points. Dormieux [109] a utilisé l'approximation de la poutre d'Euler-Bernoulli pour résoudre ce problème. On choisit donc d'approcher le problème de flexion trois points par le délaminage de deux poutres visco-élastiques identiques se divisant en deux moitiés symétriques. Chaque moitié est modélisée comme une poutre droite de section rectangulaire soumise, à son extrémité, à un déplacement perpendiculaire à son axe. Ce problème est symétrique et on peut donc considérer **une seule poutre, la poutre supérieure**. Elle occupe alors le volume $[0, L] \times [-h, h]$ où h représente la demi-épaisseur de la poutre petite devant les autres dimensions et L sa longueur (figure 6.1.2).

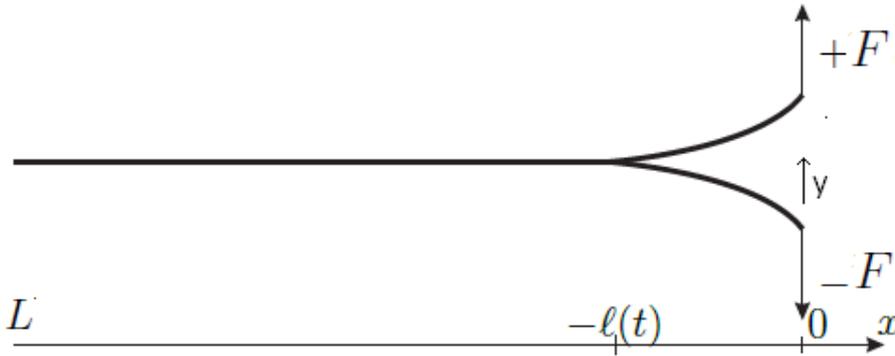


FIGURE 6.1.2: Délamination de deux poutres visco-élastiques soumises à une force F appliquée en $t = 0$ et maintenu par la suite. Les deux poutres sont délaminées sur une longueur $l(t)$ et ont une longueur L .

La poutre considérée est encore collée à partir du point d'abscisse $x = -l(t)$ dans le domaine $x \leq -l(t)$. L'abscisse $x = -l(t)$ est alors considérée comme un encastrement. En posant $v(x, t)$ le déplacement selon l'axe y , les conditions aux limites peuvent s'écrire

$$v(-l(t), t) = 0; \quad \frac{\partial v(-l(t), t)}{\partial x} = 0. \quad (6.1.2)$$

Le champ de contrainte à l'intérieur de la poutre est ensuite supposé uniaxial

$$\boldsymbol{\sigma} = \sigma_{xx}(x, y, t) \mathbf{e}_x \otimes \mathbf{e}_x. \quad (6.1.3)$$

Le champ des déformations $\boldsymbol{\varepsilon}$ (de type Navier-Bernoulli) et des déformations inélastiques $\boldsymbol{\varepsilon}^{in}$ ont des composantes axiales respectivement de la forme

$$\boldsymbol{\varepsilon} = -y\chi(x, t) \mathbf{e}_x \otimes \mathbf{e}_x \quad (6.1.4)$$

avec χ la courbure totale χ , $\chi(x, t) = \frac{\partial^2 v(x, t)}{\partial x^2}$ et

$$\boldsymbol{\varepsilon}_v = -y\chi_v(x, t) \mathbf{e}_x \otimes \mathbf{e}_x. \quad (6.1.5)$$

Ensuite, on définit classiquement l'effort normal N par

$$N(x, t) = \int_{-h}^h \sigma_{xx}(x, y, t) dy \quad (6.1.6)$$

et le moment fléchissant M par

$$M(x, t) = \int_{-h}^h -y\sigma_{xx}(x, y, t) dy \quad (6.1.7)$$

ce qui compte tenu de (6.1.4, 6.1.5) s'écrit sous la forme

$$N(x, t) = 0 \quad (6.1.8)$$

$$M(x, t) = EI(\chi - \chi_v) \quad (6.1.9)$$

avec E le module d'Young et $I = \frac{2}{3}h^3$.

6.1.4 Lois d'évolution pour la poutre

L'intérêt de l'écriture de la relation courbure - moment est de poser les lois d'évolution sur ces grandeurs simples. Dans le cadre proposé, on peut écrire la loi d'évolution sous la forme de Maxwell linéaire

$$\frac{d\boldsymbol{\varepsilon}_v}{dt} = \boldsymbol{\sigma}\tau \quad (6.1.10)$$

avec une seule constante de viscosité τ . L'intégration de la loi nous donne alors

$$\frac{d\chi_v}{dt} = \frac{M}{\kappa} \quad (6.1.11)$$

avec $\frac{\tau}{I} = \kappa^{-1}$.

6.1.5 Problème d'évolution pour la poutre

Pour le système de poutre viscoélastique en flexion, les champs et leurs dérivées satisfont le système suivant au sens faible :

1. L'équation d'équilibre quasi-statique se met sous la forme

$$\int_{-l}^0 M(x, t) \frac{\partial^2 \hat{v}}{\partial x^2} dx - F\hat{v}(0) = 0, \forall \hat{v} \in \mathcal{V}, \forall t \in [0, T]. \quad (6.1.12)$$

avec, M le moment fléchissant, v le déplacement selon l'axe y (figure 6.1.2), $\mathcal{V} = \{v \in H^2(-l, 0) : (-l, 0) \rightarrow \mathbb{R}, v(-l) = \frac{\partial v}{\partial x}(-l) = 0\}$ l'espace des déplacements verticaux cinématiquement admissible et $[0, T]$ l'intervalle du temps sur lequel le problème est défini.

2. La loi de comportement (6.1.9) au sens faible se met sous la forme

$$\int_{-l}^0 \hat{\chi} M dx = EI \int_{-l}^0 \hat{\chi} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} - \chi_v \right) dx, \forall \hat{\chi} \in \mathcal{I}_\chi \forall t \in [0, T]. \quad (6.1.13)$$

$$\int_{-l}^0 \hat{\chi}_v K dx = EI \int_{-l}^0 \hat{\chi}_v \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} - \chi_v \right) dx, \forall \hat{\chi}_v \in \mathcal{I}_\chi \forall t \in [0, T]. \quad (6.1.14)$$

avec χ la courbure totale, χ_v la courbure visqueuse, E le module d'Young, $I = \frac{2}{3}h^3$ et K la force thermodynamique associée à χ_v . L'espace des fonctions tests \mathcal{I}_χ est typiquement de la forme $L^2(-l, 0)$.

3. La loi d'écoulement (6.1.11) au sens faible écrite en flexion visqueuse linéaire s'écrit sous la forme

$$\int_{-l}^0 \hat{K} \frac{d\chi_v}{dt} dx = \kappa^{-1} \int_{-l}^0 \hat{K} K dx, \forall \hat{K} \in \mathcal{I}_\chi \forall t \in [0, T]. \quad (6.1.15)$$

6.2 Problème d'évolution linéarisé

6.2.1 Système perturbé linéarisé

En suivant la méthode du chapitre 5, on définit ensuite une perturbation sous la forme d'une transformation de domaine sur l'intervalle de temps $[t_i, t_f]$, par (4.1.8)

$$\forall \mathbf{X} \in B_{\mathbf{X}}, \forall t \in [t_i, t_f] \quad \chi^\theta(\mathbf{X}, t) = \mathbf{X} + \eta(t - t_i) \boldsymbol{\theta}(\mathbf{X}), \quad (6.2.1)$$

avec $\eta \ll 1$ un facteur d'échelle adimensionné et $\boldsymbol{\theta}$ un champ de vitesse de perturbation de domaine. On suppose que le système défini par les équations (6.1.12, 6.1.13, 6.1.14, 6.1.15) est vérifié sur le domaine perturbé. Ensuite, on ramène le système perturbé sur la configuration de calcul puis on le développe à l'ordre 1 en η de manière à obtenir un problème d'évolution sur les perturbations. La linéarisation de l'équilibre (6.1.12) en suivant la méthode que l'on vient de décrire est obtenue, en choisissant,

- de prendre à t la fonction test \hat{v}^t telle que $\hat{v}^t(x^t, t) = \hat{v}(x) \forall x \in [-l, 0]$,
- la transformation de domaine telle que la frontière extérieure où sont appliquées les conditions aux limites imposées en chargement ne varie pas.

On développe également le terme $\frac{\partial^2 v^t}{\partial x^{t,2}}$, par (4.1.9) sous la forme,

$$\frac{\partial^2 v^t}{\partial x^{t,2}} = \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial v^t}{\partial x} F_x^{-1} \right) \right\} F_x^{-1}. \quad (6.2.2)$$

Par application du développement limité à l'ordre 1 en η de F_x^{-1} , on obtient $F_x^{-1} = 1 - \eta(t - t_i)\theta'$, où on a noté $\theta' = \frac{d\theta}{dx}$. Au premier ordre, il reste alors

$$\frac{\partial^2 v^t}{\partial x^{t,2}} = \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\partial(v + \delta v)}{\partial x} (1 - \eta(t - t_i)\theta') \right] \right\} (1 - \eta(t - t_i)\theta'), \quad (6.2.3)$$

puis

$$\frac{\partial^2 v^t}{\partial x^{t,2}} = \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial \delta v}{\partial x} - \eta(t - t_i)\theta' \frac{\partial v}{\partial x} \right] \right\} (1 - \eta(t - t_i)\theta'), \quad (6.2.4)$$

puis

$$\frac{\partial^2 v^t}{\partial x^{t,2}} = \left\{ \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \delta v}{\partial x^2} - \eta(t - t_i) \left(\theta'' \frac{\partial v}{\partial x} + \theta' \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} \right) \right\} (1 - \eta(t - t_i)\theta'), \quad (6.2.5)$$

et enfin

$$\frac{\partial^2 v^t}{\partial x^{t,2}} = \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \delta v}{\partial x^2} - \eta(t - t_i) \left(\theta'' \frac{\partial v}{\partial x} + 2\theta' \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} \right). \quad (6.2.6)$$

L'équilibre linéarisé se met alors sous la forme

$$\int_{-l}^0 \delta M \frac{\partial^2 \hat{v}}{\partial x^2} dx = \eta(t - t_i) \int_{-l}^0 M \left(\theta'' \frac{\partial \hat{v}}{\partial x} + \theta' \frac{\partial^2 \hat{v}}{\partial x^2} \right) dx, \forall \hat{v} \in \mathcal{V} \forall t \in [t_i, t_f]. \quad (6.2.7)$$

Ensuite, on peut obtenir la linéarisation de la première équation de comportement (6.1.13) en choisissant de prendre à t la fonction test sur le domaine perturbé $\hat{\chi}^t$ telle que $J_x \hat{\chi}^t(x^t, t) = \hat{\chi}(x) \forall x \in [-l, 0]$, ce qui donne

$$\int_{-l}^0 \hat{\chi} \delta M dx - EI \int_{-l}^0 \hat{\chi} \left(\frac{\partial^2 \delta v}{\partial x^2} - \delta \chi_v \right) dx = -\eta(t - t_i) EI \int_{-l}^0 \hat{\chi} \left(\theta'' \frac{\partial v}{\partial x} + 2\theta' \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} \right) dx, \forall \hat{\chi} \in \mathcal{I}_x, \forall t \in [t_i, t_f]. \quad (6.2.8)$$

Ensuite, on linéarise la seconde loi de comportement (6.1.14) en choisissant de prendre à t la fonction test sur le domaine perturbé $\hat{\chi}_v^t$ telle que $J_{\chi}\hat{\chi}_v^t(x^t, t) = \hat{\chi}_v(x) \quad \forall x \in [-l, 0]$,

$$\int_{-l}^0 \hat{\chi}_v \delta K \, dx - EI \int_{-l}^0 \hat{\chi}_v \left(\frac{\partial^2 \delta v}{\partial x^2} - \delta \chi_v \right) dx = -\eta(t-t_i) EI \int_{-l}^0 \hat{\chi}_v \left(\theta'' \frac{\partial v}{\partial x} + 2\theta' \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} \right) dx, \quad \forall \hat{\chi}_v \in \mathcal{I}_{\chi}, \forall t \in [t_i, t_f] \quad (6.2.9)$$

Pour finir, on linéarise la loi d'évolution (6.1.15) en choisissant de prendre à t la fonction test sur le domaine perturbé \hat{K}^t telle que $J_{\chi}\hat{K}^t(\mathbf{x}^t, t) = \hat{K}(\mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{x} \in [-l, 0]$

$$\int_{-l}^0 \hat{K} \frac{d\delta \chi_v}{dt} dx - \kappa^{-1} \int_{-l}^0 \hat{K} \delta K \, dx = -\eta \int_{-l}^0 \hat{K} \left(\theta \frac{\partial \chi_v}{\partial x} \right) dx, \quad \forall \hat{K} \in \mathcal{I}_{\chi}, \forall t \in [t_i, t_f]. \quad (6.2.10)$$

6.2.2 Report du système sous la forme a, b, c

Le système linéarisé $\forall t \in [t_i, t_f]$ (6.2.7, 6.2.8, 6.2.9, 6.2.10) peut s'écrire sous une forme compacte

$$\begin{cases} \mathbf{a} \left(\frac{d\delta \mathbf{Y}}{dt}, \hat{\mathbf{Y}} \right) + \mathbf{b} \left(\delta \mathbf{Y}, \hat{\mathbf{Y}}, t \right) + \eta \mathbf{c} \left(\hat{\mathbf{Y}}, t \right) = 0 \\ \delta \mathbf{Y}(t_i) = 0 \end{cases} \quad \forall \hat{\mathbf{Y}} \in \mathcal{Y}, \quad (6.2.11)$$

où les variables duales \mathbf{Y} et perturbées $\delta \mathbf{Y}$, sont définies par (en suivant l'ordre des équations proposées dans le système) :

$$\begin{aligned} - \hat{\mathbf{Y}} &= \begin{cases} \hat{v} \\ \hat{\chi} \\ \hat{\chi}_v \\ \hat{K} \end{cases} \\ - \mathbf{Y} &= \begin{cases} M \\ v \\ \chi_v \\ K \end{cases} \\ - \delta \mathbf{Y} &= \begin{cases} \delta M \\ \delta v \\ \delta \chi_v \\ \delta K \end{cases} \end{aligned}$$

et où \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} s'écrivent sous la forme

$$\mathbf{a} \left(\frac{d\delta \mathbf{Y}}{dt}, \hat{\mathbf{Y}} \right) = \int_{-l}^0 \hat{K} \frac{d\delta \chi_v}{dt} dx \quad (6.2.12)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{b}(\delta\mathbf{Y}, \hat{\mathbf{Y}}, t) = & \int_{-l}^0 \delta M \frac{\partial^2 \hat{v}}{\partial x^2} dx + \int_{-l}^0 \hat{\chi} \delta M dx - EI \int_{-l}^0 \hat{\chi} \left(\frac{\partial^2 \delta v}{\partial x^2} - \delta \chi_v \right) dx \quad (6.2.13) \\ & + \int_{-l}^0 \hat{\chi}_v \delta K dx - EI \int_{-l}^0 \hat{\chi}_v \left(\frac{\partial^2 \delta v}{\partial x^2} - \delta \chi_v \right) dx - \kappa^{-1} \int_{-l}^0 \hat{K} \delta K dx \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{c}(\hat{\mathbf{Y}}, t) = & -(t - t_i) \int_{-l}^0 M \left(\theta'' \frac{\partial \hat{v}}{\partial x} + \theta' \frac{\partial^2 \hat{v}}{\partial x^2} \right) dx \quad (6.2.14) \\ & + (t - t_i) EI \int_{-l}^0 \hat{\chi} \left(\theta'' \frac{\partial v}{\partial x} + 2\theta' \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} \right) dx \\ & + (t - t_i) EI \int_{-l}^0 \hat{\chi}_v \left(\theta'' \frac{\partial v}{\partial x} + 2\theta' \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} \right) dx + \eta \int_{-l}^0 \hat{K} \left(\theta \frac{\partial \chi_v}{\partial x} \right) dx \end{aligned}$$

6.3 Grandeur caractéristique & problème adjoint

On écrit ensuite l'intégrale en temps de l'énergie potentielle

$$\mathbf{W}_{ep} = \frac{EI}{2} \int_{-l}^0 \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} - \chi_v \right)^2 dx - Fv(0, t) \quad (6.3.1)$$

sur l'intervalle $[t_i, t_f]$ sous la forme

$$\mathbf{W}_A = \frac{EI}{2} \int_{t_i}^{t_f} g(t) \int_{-l}^0 \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} - \chi_v \right)^2 dx dt - \int_{t_i}^{t_f} g(t) Fv(0, t) dt \quad (6.3.2)$$

avec g une fonction permettant de varier la zone d'intérêt de la grandeur caractéristique recherchée. Cette grandeur s'écrit comme la variation de \mathbf{W}_A , $\delta\mathbf{W}_A = \delta\mathbf{W}_{A,im} + \delta\mathbf{W}_{A,ex}$ sous la forme de la somme d'un terme implicite et d'un terme explicite. Par (6.3.2) en développant à l'ordre 1 en η , et en suivant la méthode détaillée au chapitre 5, on obtient le terme implicite sous la forme suivante en supposant que :

1. les variables internes varient dans le temps,
2. le chargement est fixé,
3. le chargement est non nul uniquement sur la partie de domaine où θ est nul.

On obtient alors

$$\delta W_{A,im} = \int_{t_i}^{t_f} g(t) \int_{B_{\mathbf{X}}} \frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial \mathbf{Y}} \cdot \delta \mathbf{Y} \, dV_{\mathbf{X}} dt \quad (6.3.3)$$

puis

$$\delta W_{A,im} = EI \int_{t_i}^{t_f} g(t) \left\{ \int_{-l}^0 \left[\left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} - \chi_v \right) \left(\frac{\partial^2 \delta v}{\partial x^2} - \delta \chi_v \right) \right] dx - F \delta v(0) \right\} dt \quad (6.3.4)$$

et le terme explicite sous la forme

$$\delta W_{A,ex} = \eta \int_{t_i}^{t_f} g(t) \int_{B_{\mathbf{X}}} \tau \left(\frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial \mathbf{X}} \cdot \boldsymbol{\theta} + \mathbf{Z} \operatorname{div}_{\mathbf{X}} \boldsymbol{\theta} \right) \, dV_{\mathbf{X}} dt \quad (6.3.5)$$

puis

$$\delta W_{A,ex} = \eta EI \int_{t_i}^{t_f} g(t) \int_{-l}^0 (t - t_i) \left[\left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} - \chi_v \right) \left(\frac{\partial^3 v}{\partial x^3} - \frac{\partial \chi_v}{\partial x} \right) \theta + \frac{\left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} - \chi_v \right)^2}{2} \theta' \right] dx dt. \quad (6.3.6)$$

Ici, on a posé $\mathbf{Z} = \frac{EI}{2} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} - \chi_v \right)^2 - Fv\delta_0$. On introduit alors comme au chapitre 5 le problème adjoint suivant

$$-\mathbf{a}(\widehat{\delta \mathbf{Y}}, \frac{d\widetilde{\mathbf{Y}}}{dt}) + \mathbf{b}(\widehat{\delta \mathbf{Y}}, \widetilde{\mathbf{Y}}, t) = g(t) \int_{B_{\mathbf{X}}} \frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial \mathbf{Y}} \cdot \widehat{\delta \mathbf{Y}} \, dV_{\mathbf{X}}, \forall \widehat{\delta \mathbf{Y}} \in \mathcal{Y} \quad (6.3.7)$$

$$\widetilde{\mathbf{Y}}_{t_f} = \mathbf{0},$$

en notant :

$$- \text{les inconnues adjointes } \widetilde{\mathbf{Y}} = \begin{cases} \tilde{v} \\ \tilde{\chi} \\ \tilde{\chi}_v \\ \tilde{K} \end{cases},$$

$$- \text{les fonctions tests } \widehat{\delta \mathbf{Y}} = \begin{cases} \widehat{\delta M} \\ \widehat{\delta v} \\ \widehat{\delta \chi}_v \\ \widehat{\delta K} \end{cases}.$$

Après développement, le problème adjoint s'écrit par (6.2.12), (6.2.13), (6.3.4)

$$\begin{aligned}
 & - \int_{-l}^0 \widehat{\delta\chi_v} \frac{d\tilde{K}}{dt} dx + \int_{-l}^0 \widehat{\delta M} \frac{\partial^2 \tilde{v}}{\partial x^2} dx + \int_{-l}^0 \tilde{\chi} \widehat{\delta M} dx \\
 & - EI \int_{-l}^0 \tilde{\chi} \left(\frac{\partial^2 \widehat{\delta v}}{\partial x^2} - \widehat{\delta\chi_v} \right) dx + \int_{-l}^0 \tilde{\chi}_v \widehat{\delta K} dx - EI \int_{-l}^0 \tilde{\chi}_v \left(\frac{\partial^2 \widehat{\delta v}}{\partial x^2} - \widehat{\delta\chi_v} \right) dx - \kappa^{-1} \int_{-l}^0 \tilde{K} \widehat{\delta K} dx \\
 & = EI g(t) \int_{-l}^0 \left[\left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} - \chi_v \right) \left(\frac{\partial^2 \widehat{\delta v}}{\partial x^2} - \widehat{\delta\chi_v} \right) \right] dx - g(t) F \widehat{\delta v}(0) \vee (\widehat{\delta M}, \widehat{\delta v}, \widehat{\delta\chi_v}, \widehat{\delta K}) \in (\mathcal{I}_\chi)^3 \times \mathcal{V}
 \end{aligned} \tag{6.3.8}$$

avec les conditions initiales $\tilde{\mathbf{Y}}_{t_f} = \begin{cases} \tilde{v}_{t_f} = 0 \\ \tilde{\chi}_{t_f} = 0 \\ \tilde{\chi}_{v,t_f} = 0 \\ \tilde{K}_{t_f} = 0 \end{cases}$. Ce problème adjoint peut se mettre

sous la forme de quatre équations en annulant succesivement toutes les fonctions tests sauf une pour obtenir chaque équation

$$\int_{-l}^0 \widehat{\delta M} \left(\frac{\partial^2 \tilde{v}}{\partial x^2} + \tilde{\chi} \right) dx = 0, \forall \widehat{\delta M} \in \mathcal{I}_\chi \forall t \in [t_i, t_f], \tag{6.3.9}$$

$$-EI \int_{-l}^0 \frac{\partial^2 \widehat{\delta v}}{\partial x^2} (\tilde{\chi} + \tilde{\chi}_v) dx = EI g(t) \int_{-l}^0 \frac{\partial^2 \widehat{\delta v}}{\partial x^2} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} - \chi_v \right) - g(t) F \widehat{\delta v}(0) dx, \forall \widehat{\delta v} \in \mathcal{V} \forall t \in [t_i, t_f], \tag{6.3.10}$$

$$- \int_{-l}^0 \widehat{\delta\chi_v} \frac{d\tilde{K}}{dt} dx + EI \int_{-l}^0 \widehat{\delta\chi_v} (\tilde{\chi} + \tilde{\chi}_v) dx = -EI g(t) \int_{-l}^0 \widehat{\delta\chi_v} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} - \chi_v \right) dx, \forall \widehat{\delta\chi_v} \in \mathcal{I}_\chi, \forall t \in [t_i, t_f], \tag{6.3.11}$$

$$\int_{-l}^0 \widehat{\delta K} (\tilde{\chi}_v - \kappa^{-1} \tilde{K}) dx = 0, \forall \widehat{\delta K} \in \mathcal{I}_\chi \forall t \in [t_i, t_f]. \tag{6.3.12}$$

Après résolution du problème adjoint, en posant $\hat{\mathbf{Y}} = \tilde{\mathbf{Y}}$, pour la variation $\delta \mathbf{Y}$ recherchée et en utilisant (5.4.10) avec $\widehat{\delta \mathbf{Y}} = \delta \mathbf{Y}$, on a le résultat final du chapitre 5

$$\int_{t_i}^{t_f} g(t) \int_{B_{\mathbf{x}}} \frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial \mathbf{Y}} \cdot \delta \mathbf{Y} dV_{\mathbf{x}} dt = -\eta \int_{t_i}^{t_f} \mathbf{c}(\tilde{\mathbf{Y}}, t) dt. \tag{6.3.13}$$

6.4 Discrétisation et premiers résultats de calcul d'une grandeur caractéristique

6.4.1 Discrétisation

On explicite la discrétisation du problème direct, le problème adjoint se discrétisant de la même façon. Pour commencer, on introduit (6.1.14) dans (6.1.15) pour l'équation d'évolution. On réalise ensuite une discrétisation implicite de cette équation en N pas de temps sur l'intervalle $[0, t_f]$ sous la forme

$$\frac{\chi_v^{t_{n+1}} - \chi_v^{t_n}}{\Delta t} = \frac{EI}{\kappa} \left(\frac{\partial^2 v^{t_{n+1}}}{\partial x^2} - \chi_v^{t_{n+1}} \right) \quad (6.4.1)$$

avec $\Delta t = t_{n+1} - t_n$ et $\chi_v^{t_1=0} = 0$. L'équation (6.4.1) se met également sous la forme

$$\chi_v^{t_{n+1}} = \frac{EI\Delta t}{EI\Delta t + \kappa} \frac{\partial^2 v^{t_{n+1}}}{\partial x^2} + \frac{\kappa}{EI\Delta t + \kappa} \chi_v^{t_n}. \quad (6.4.2)$$

On introduit ensuite (6.1.13) et (6.4.2) dans (6.1.12) ce qui nous permet d'obtenir

$$EI \left(1 - \frac{EI\Delta t}{EI\Delta t + \kappa} \right) \int_{-l}^0 \frac{\partial^2 v^{t_{n+1}}}{\partial x^2} \frac{\partial^2 \hat{v}}{\partial x^2} dx - \frac{EI\kappa}{EI\Delta t + \kappa} \int_{-l}^0 \chi_v^{t_n} \frac{\partial^2 \hat{v}}{\partial x^2} dx + T\hat{v}(0) = 0. \quad (6.4.3)$$

Cette équation est résolue en utilisant des éléments finis 1D d'Hermite de degré 3 de manière à avoir une continuité de $v(x)$ et de sa dérivée entre chaque élément. On note également que la simulation est systématiquement réalisée avec 3 éléments de taille identique et que θ est pris sous la forme

$$\theta(x) = \begin{cases} 0 & \text{dans l'élément où est appliqué le chargement en force } x \in \left[-\frac{l}{3}, 0\right], \\ 1 & \text{pour } x \in \left[-l, -\frac{2l}{3}\right], \\ -1458 \left(\frac{x}{l}\right)^5 - 3645 \left(\frac{x}{l}\right)^4 - 3510 \left(\frac{x}{l}\right)^3 - 1620 \left(\frac{x}{l}\right)^2 - 360 \left(\frac{x}{l}\right) - 31 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (6.4.4)$$

Cette fonction est continue ainsi que ses dérivées première et seconde.

6.4.2 Premiers résultats sur le calcul de grandeur caractéristique

Cas de calcul à force constante et évolution de la courbure visqueuse bloquée

Pour commencer, on sollicite la poutre en flexion avec une force F appliquée à $t = 0$ (figure 6.1.2). De plus, on bloque l'évolution de la courbure visqueuse. Le problème est donc élastique. On peut alors obtenir $v(x)$ sous la forme analytique [75]

$$v(x) = -\frac{1}{6} \frac{Fx^3}{EI} + \frac{1}{2} \frac{Fl^2x}{EI} + \frac{1}{3} \frac{Fl^3}{EI}. \quad (6.4.5)$$

De plus, on peut calculer analytiquement l'énergie potentielle sous la forme, par (6.3.1)

$$W_{ep} = \frac{EI}{2} \int_{-l}^0 \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} \right)^2 dx - Fv(0) \quad (6.4.6)$$

puis par application de (6.4.5)

$$W_{ep} = -\frac{1}{6} \frac{F^2 l^3}{EI}, \quad (6.4.7)$$

Pour finir, on peut obtenir le taux de restitution d'énergie à courbure visqueuse bloquée

$$G_{p,ana}^{figee} = -\frac{\partial W_{ep}}{\partial l} = \frac{1}{2} \frac{F^2 l^2}{EI} \quad (6.4.8)$$

On remarque alors que ce résultat est identique à celui obtenu par Dormieux [109]. On vérifie alors que notre code nous donne bien le même résultat pour $v(0)$ en testant plusieurs valeurs de l , F et EI . On vérifie également qu'on obtient le même résultat avec notre code en calculant

$$G_{p,num}^{figee} = -\frac{\delta W_{ep}}{\eta} \quad (6.4.9)$$

pour plusieurs valeurs de l , F et EI . On obtient alors pour $G_{p,num}^{figee}$ et $v(0)$ une erreur de l'ordre de la précision machine entre le calcul par éléments finis et le calcul analytique.

Tendances sur la variation d'énergie potentielle et comparaison au cas bloqué

Pour pouvoir réaliser une première évaluation de la méthode proposée, et puisque le problème posé ne présente pas de difficultés numériques, on se propose de calculer $G_{p,num}^{dirac}$ défini par

$$G_{p,num}^{dirac} = -\frac{\delta W_A}{\eta} \quad (6.4.10)$$

grâce à l'équation (6.3.2) et avec $g(t)$ pris sous la forme d'un dirac en t_f . En pratique g n'est non nul qu'au dernier pas de temps dans la discrétisation. De plus, on pose $t_i = 0$. On peut également proposer de calculer $G_{p,num}^{dirac}$ par une autre méthode. $G_{p,num}^{dirac}$ est alors noté $G_{p,for}^{dirac}$.

Pour cela, on garde la discrétisation en temps de l'équation d'évolution mais on résout formellement le problème d'équilibre à chaque pas de temps. Ensuite, on calcule $G_{p,for}^{dirac}$ par différences finies en développant le résultat en $\eta = 0$ au premier ordre. Cette seconde méthode nous permet d'obtenir un résultat intéressant sur $G_{p,for}^{dirac}$. En effet, en calculant $G_{p,for}^{dirac}$ en utilisant de 1 à 10 pas de temps, on obtient systématiquement le même résultat, à savoir,

$$G_{p,for}^{dirac} = G_{p,ana}^{figee} t_f \left(1 + \frac{2EI t_f}{\kappa} \right) \quad (6.4.11)$$

Ensuite, pour l'ensemble discret de valeurs tests $l \in [1; 2]$, $F \in [1; 10^1; 10^2]$, $\kappa \in [1; 10^1; 10^2; 10^3; 10^4]$, $EI \in [1; 2; 10]$ et $t_f \in [10^{-3}; 10^{-2}; 10^{-1}; 1; 10^1; 10^2]$, on vérifie que l'on trouve $\mathbf{G}_{p,for}^{dirac} \simeq \mathbf{G}_{p,num}^{dirac}$ à la précision machine près. On conclue alors sur le bon fonctionnement du problème adjoint dans le calcul de $\mathbf{G}_{p,num}^{dirac}$.

Pour finir, on remarque deux propriétés intéressantes de la grandeur trouvée :

1. Si on prend $\frac{\mathbf{G}_{p,for}^{dirac}}{t_f}$ et que l'on fait tendre t_f vers 0 (donc vers t_i), on trouve $\frac{\mathbf{G}_{p,for}^{dirac}}{t_f} \rightarrow \mathbf{G}_{p,ana}^{figee}$.
2. De la même manière si κ^{-1} tend vers 0, on trouve $\frac{\mathbf{G}_{p,for}^{dirac}}{t_f} \rightarrow \mathbf{G}_{p,ana}^{figee}$.

Ces deux propriétés semblent logiques. En effet, la première revient à ne pas laisser le temps à la viscosité d'avoir un effet sur la déformée de la poutre durant l'intervalle de calcul de la perturbation, c'est à dire on perturbe beaucoup plus vite que le temps caractéristique de déformation viscoélastique. Dans le second cas, on tend vers une loi d'écoulement qui s'écrit sous la forme $\frac{d\chi_v}{dt} \simeq 0 \rightarrow \chi_v(t) = \chi_v(0) \forall t \in [0, t_f]$. Or, dans notre cas $\chi_v(0) = 0$. Il semble donc normal d'obtenir le même résultat.

6.5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons mis en place le calcul de grandeur caractéristique par problème adjoint dans un cas suffisamment simple et régulier pour ne pas être gêné par les erreurs numériques. De plus, nous avons pu comparer notre calcul par éléments finis et problème adjoint à des résultats semi-analytiques obtenus par différences finies. Nous avons systématiquement observé une correspondance entre le résultat semi-analytique et numérique. Ceci valide l'utilisation de la méthode proposée dans un cas régulier. De plus, nous avons pu montrer que la grandeur obtenue se réduit bien au taux de restitution d'énergie standard quand on se replace dans un cadre où l'évolution des variables internes peut être supposé comme figée. La grandeur et la méthode proposée semblent donc être de bonnes candidates à l'extension du taux de restitution d'énergie.

Chapitre 7

Calcul numérique du taux de restitution d'énergie

Dans cette section, on détaille une méthode de calcul numérique du taux de restitution pour une fissure 3D représentée par une surface de discontinuité au sein d'un milieu continu. Cette méthode est la méthode standard utilisée dans le logiciel Z-cracks à l'ONERA [5] avec lequel les calculs de fissuration de ce manuscrit ont été faits. Elle a été écrite par Vincent Chiaruttini [27] et l'auteur a collaboré à sa validation [28]. Ce chapitre se limite donc à rapporter les principaux choix faits dans cette méthode.

Pour cela, on établit tout d'abord une formulation variationnelle permettant de définir le taux de restitution d'énergie pour un front représenté par une courbe dans le cadre de la méthode θ (section 7.1). Ensuite, on détaille une restriction de cette formulation continue (section 7.2) et on propose une représentation numérique des différents objets mathématiques dont on a besoin pour discrétiser cette formulation (section 7.3). Ces objets sont : le front de fissure, la base locale de travail et le champ de vecteurs θ . Enfin, on détaille l'algorithme utilisé pour le calcul du taux de restitution d'énergie (section 7.4).

7.1 Représentation variationnelle du taux de restitution d'énergie

On utilise la méthode θ pour une fissure représentée par une surface $S_{\mathbf{x}}$ dont le front est représenté par une courbe $\Gamma_{\mathbf{x}}$. Dans ce cadre, on suppose qu'on est dans le cas (4.2.30) ce qui nous permet d'exprimer la dérivée de l'énergie potentielle sous la forme

$$-\frac{dW_{ep}^t}{d\vartheta} \Big|_{\vartheta=0} = \int_{B_{\mathbf{x}}} -\Sigma : \nabla_x \theta + \mathbf{K} : (\nabla_x \mathbf{k} \cdot \theta) - \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{X}} \Big|_{\mathbf{F}, \mathbf{k}, T} \cdot \theta \, dV_{\mathbf{x}}. \quad (7.1.1)$$

En caractérisant le champ de vecteurs $\boldsymbol{\theta}$ par sa trace le long du front, on peut alors choisir de représenter le taux de restitution d'énergie sous une forme restreinte

$$-\frac{dW_{ep}^t}{d\vartheta}|_{\vartheta=0} = \int_{\Gamma_{\mathbf{x}}} \mathbf{G}(s) \cdot \boldsymbol{\theta}(s) ds. \quad (7.1.2)$$

avec $s \in [0, s_{max}]$ un paramétrage continu du front et $\mathbf{G}(s)$ un taux de restitution d'énergie vectoriel distribué. La formulation variationnelle à résoudre s'écrit donc par (4.2.30) et (7.1.2)

$$\forall \boldsymbol{\theta} \in \mathcal{U}_{\boldsymbol{\theta}} \int_{\Gamma_{\mathbf{x}}} \mathbf{G}(s) \cdot \boldsymbol{\theta}(s) ds = \int_{B_{\mathbf{x}}} -\boldsymbol{\Sigma} : \nabla_{\mathbf{x}} \boldsymbol{\theta} + \mathbf{K} : (\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\theta}) - \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{X}}|_{\mathbf{F}, \mathbf{k}, T} \cdot \boldsymbol{\theta} dV_{\mathbf{x}}. \quad (7.1.3)$$

avec $\mathcal{U}_{\boldsymbol{\theta}}$ l'espace de recherche de $\boldsymbol{\theta}$ qui n'a pas été encore défini, et $\mathbf{G}(s)$ la représentation inconnue à déterminer.

7.2 Mise en oeuvre de la formulation continue

Dans cette section, les espaces de recherche de la solution associée à la formulation variationnelle (7.1.3) sont simplifiés.

7.2.1 Géométrie de la structure fissurée

Considérons un volume $B_{\mathbf{x}}$ contenant la surface fissurée représentée par $S_{\mathbf{x}}$. On suppose alors que la surface fissurée est suffisamment régulière pour y définir une normale $\mathbf{N}_{S_{\Gamma}}(\mathbf{M})$ en chaque point $\mathbf{M} \in S_{\mathbf{x}}$. A cette surface fissurée, on peut associer le front de fissure $\Gamma_{\mathbf{x}}$. Pour un problème contenant une seule fissure, comme c'est le cas ici, le front $\Gamma_{\mathbf{x}}$ peut être défini comme une courbe régulière paramétrisée

$$\Gamma_{\mathbf{x}} = \left\{ \mathbf{M} = \boldsymbol{\Gamma}(s), s \in [0, s_{max}], \boldsymbol{\Gamma} : [0, s_{max}] \rightarrow \mathbb{R}^3 \right\} \quad (7.2.1)$$

avec s un paramétrage continu du front fissure. En tout point du front de fissure $\boldsymbol{\Gamma}(s)$, une base orthonormale locale est définie comme suit :

- $\mathbf{T}_{\Gamma}(s) = \left\| \frac{d\boldsymbol{\Gamma}(s)}{ds} \right\|^{-1} \frac{d\boldsymbol{\Gamma}(s)}{ds}$, est la tangente locale normalisée au front de fissure,
- $\mathbf{B}_{\Gamma}(s) = \mathbf{N}_{S_{\Gamma}}(\boldsymbol{\Gamma}(s))$, est une normale à la surface fissurée $S_{\mathbf{x}}$,
- $\mathbf{N}_{\Gamma}(s) = \mathbf{B}_{\Gamma}(s) \times \mathbf{T}_{\Gamma}(s)$, la normale au front dans le plan de fissure dont l'orientation est dirigée vers l'intérieur de la structure.

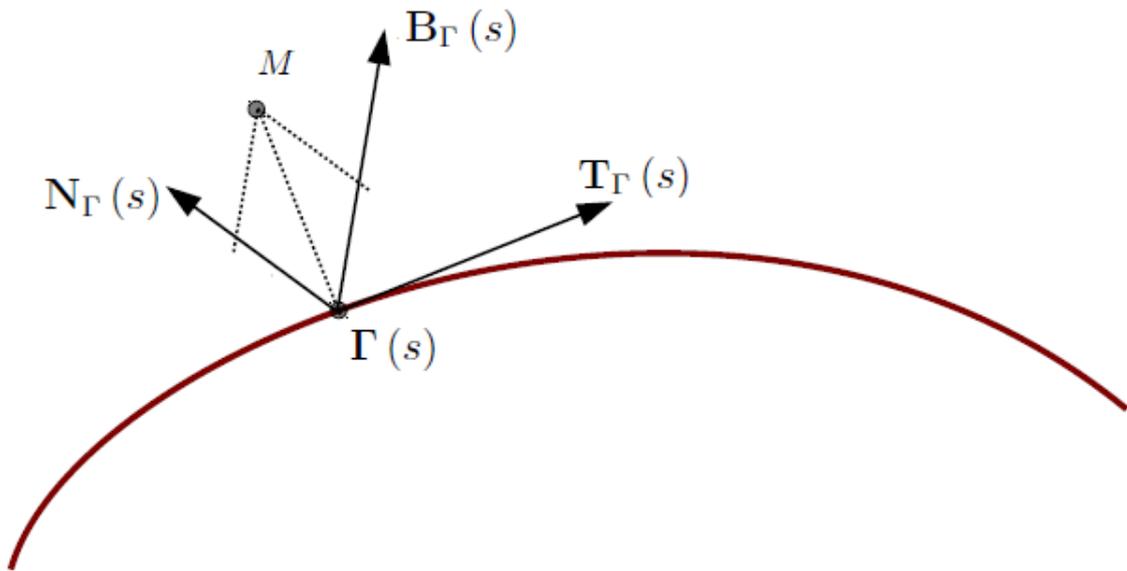


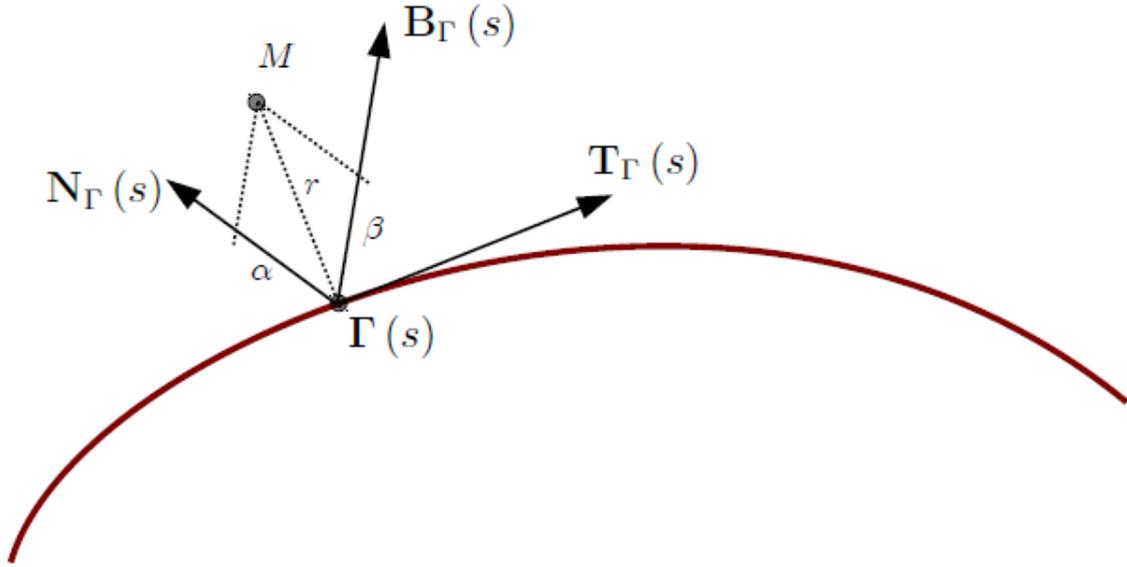
FIGURE 7.2.1: Base orthonormale locale

7.2.2 Champ d'extension du front de fissure en mode I

On se borne dans ce qui suit à étudier des perturbations en mode I (localement dans le plan de fissure). Dans un voisinage du front fissure, tout point \mathbf{M} peut localement être décomposé en

$$\mathbf{M} = \Gamma(s) + \alpha \mathbf{N}_\Gamma(s) + \beta \mathbf{B}_\Gamma(s) \quad (7.2.2)$$

avec $\Gamma(s)$ la projection \mathbf{M} sur le front de fissure, à savoir le plus proche voisin de \mathbf{M} sur $\Gamma_{\mathbf{x}}$.

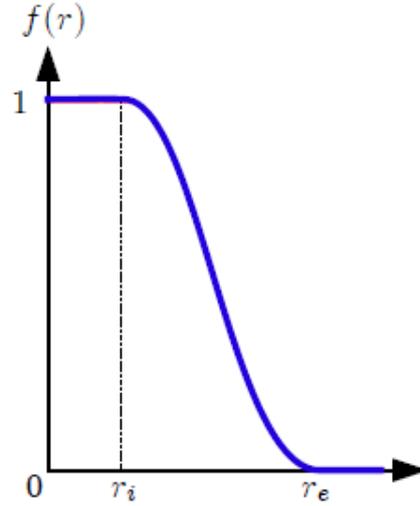

 FIGURE 7.2.2: Représentation d'un point \mathbf{M} dans la base locale.

On définit alors en chaque point du front une direction d'extension en mode I (localement dans le plan de fissure) $\boldsymbol{\nu}(s)$, qui se veut proche de $\mathbf{N}_\Gamma(s)$ dans le plan $(\mathbf{T}_\Gamma(s), \mathbf{N}_\Gamma(s))$. En pratique $\boldsymbol{\nu}(s)$ peut être choisie comme égale à $\mathbf{N}_\Gamma(s)$ sur l'ensemble du front excepté au niveau des bords libres. Dans une zone spécifiée par l'utilisateur, une correction est alors appliquée pour assurer l'orthogonalité de $\boldsymbol{\nu}(s)$ avec la normale à la surface libre. En pratique, sur la zone spécifiée, $\boldsymbol{\nu}(s)$ passe linéairement de la condition $\boldsymbol{\nu}(s) = \mathbf{N}_\Gamma(s)$ à la condition d'orthogonalité au niveau du bord libre. L'extension $\boldsymbol{\theta}$ est alors définie par

$$\boldsymbol{\theta}(\mathbf{M}) = f(r) \tilde{\boldsymbol{\theta}}(s) \boldsymbol{\nu}(s) \quad (7.2.3)$$

avec $r = \sqrt{\alpha^2 + \beta^2}$ la distance de \mathbf{M} au front de fissure et $0 \leq r_i \leq r_e \leq r_0$,

$$f(r) = \begin{cases} 0 & \text{si } r > r_e, \\ 1 & \text{si } r < r_i, \\ [2(r - r_e) + 3(r_e - r_i)] \frac{(r - r_e)^2}{(r_e - r_i)^3} & \text{sinon.} \end{cases} \quad (7.2.4)$$

FIGURE 7.2.3: Représentation de la fonction f

7.2.3 Formulation restreinte continue

Par application des restrictions précédemment définies à (7.1.3) et en notant $G(s)\boldsymbol{\nu}(s)$ la restriction de $\mathbf{G}(s)$ portée par $\boldsymbol{\nu}(s)$, on recherche donc le taux de restitution d'énergie paramétré scalaire $G(s) \in \mathcal{U}_{\tilde{\theta}}$ pour une extension en mode I qui vérifie

$$\forall \tilde{\theta} \in \mathcal{U}_{\tilde{\theta}} \int_{\Gamma_{\mathbf{x}}} G(s)\tilde{\theta}(s) ds = \int_{B_{\mathbf{x}}} -\boldsymbol{\Sigma} : \nabla_{\mathbf{x}}\boldsymbol{\theta} + \mathbf{K} : (\nabla_{\mathbf{x}}\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\theta}) - \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{X}}|_{\mathbf{F},\mathbf{k},T} \cdot \boldsymbol{\theta} dV_{\mathbf{x}}. \quad (7.2.5)$$

avec $\mathcal{U}_{\tilde{\theta}} = \{\tilde{\theta} : [0, s_{max}] \rightarrow \mathbb{R} \text{ régulières}\}$.

7.3 Outils numériques

Pour discrétiser la formulation variationnelle nous avons besoin de plusieurs outils numériques. Dans le cadre de la méthode rapportée, ces outils sont :

- une spline de Catmull-Rom [38] pour la discrétisation du front $\Gamma_{\mathbf{x}}$,
- une base locale régulière en chaque point du front,
- une interpolation des quantités le long du front permettant de définir une approximation de $\mathcal{U}_{\tilde{\theta}}$,
- une paramétrisation des points du volume par rapport au front.

7.3.1 Représentation du front de fissure

Considérons tout d'abord le front de fissure décrit par la courbe $\Gamma_{\mathbf{x}}$ régulière. Ce front est représenté initialement par un ensemble de segments puisque il résulte de l'intersec-

tion d'un maillage surfacique conforme (la surface fissurée) par un maillage volumique conforme (le domaine non-fissuré). Ces segments sont ordonnés et liés de manière à constituer une suite continue. De plus, les algorithmes présents dans Z-cracks imposent à ces segments d'avoir une longueur aussi proche que possible des autres segments du front. De manière à réduire le bruit numérique, on choisit alors de ne considérer que N points parmi les N^{total} points du front. On prend par exemple un point sur 8. Ces N points ordonnés notés \mathbf{P}_k , $k \in \{1, \dots, N\}$ sont considérés comme les points de contrôle d'une spline de Catmull-Rom [38] de classe C^2 et de degré 3 par morceaux

$$\hat{\Gamma}_{\mathbf{X}} = \{\mathbf{P}(s), s \in [0, N - 1 = s_{max}]\} \quad (7.3.1)$$

avec

$$\mathbf{P}(s) = \begin{bmatrix} 1 & u & u^2 & u^3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ -\tau & 0 & \tau & 0 \\ 2\tau & \tau - 3 & 3 - 2\tau & -\tau \\ -\tau & 2 - \tau & \tau - 2 & \tau \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{P}_k \\ \mathbf{P}_{k+1} \\ \mathbf{P}_{k+2} \\ \mathbf{P}_{k+3} \end{bmatrix} \quad (7.3.2)$$

et :

- $k = \min(IP(s), N - 2)$ la partie entière (IP) de s majorée par $N - 2$,
- $u = s - k \in [0, 1]$ la position locale dans la section k ,
- $\tau = \frac{1}{2}$ un paramètre de tension.

La formulation d'une spline tel qu'écrit dans (7.3.2) permet de paramétrer un point situé entre \mathbf{P}_{k+1} et \mathbf{P}_{k+2} à partir de quatre points. Il est donc nécessaire de rajouter deux points de contrôle supplémentaires pour pouvoir décrire complètement le front : les points \mathbf{P}_0 et \mathbf{P}_{N+1} . Dans le cas où le front est fermé $\mathbf{P}_1 = \mathbf{P}_{N^i}$ et on obtient $\mathbf{P}_0 = \mathbf{P}_{N^i-1}$, $\mathbf{P}_{N^i+1} = \mathbf{P}_2$. Dans le cas où il est ouvert, il est nécessaire de déterminer explicitement des nouveaux points de contrôle par extrapolation en utilisant les formules suivantes :

- si $N > 2$, on obtient $\mathbf{P}_0 = 3\mathbf{P}_1 - 3\mathbf{P}_2 + \mathbf{P}_3$ et $\mathbf{P}_{N^i+1} = 3\mathbf{P}_{N^i} - 3\mathbf{P}_{N^i-1} + \mathbf{P}_{N^i-2}$,
- si $N = 2$, on obtient $\mathbf{P}_0 = \frac{3}{2}\mathbf{P}_1 - \frac{1}{2}\mathbf{P}_2$ et $\mathbf{P}_{N^i+1} = \frac{3}{2}\mathbf{P}_{N^i} - \frac{1}{2}\mathbf{P}_{N^i-1}$.

Ce choix permet d'assurer une courbure symétrique autour des points \mathbf{P}_1 et \mathbf{P}_N . Dans la suite, la représentation discrète du front $\hat{\Gamma}_{\mathbf{X}}$ sera donc paramétrisée comme l'ensemble de points \mathbf{P} qui appartiennent à la spline construite sur les points de contrôle $\mathbf{P}(s)$, $s \in [0, s_{max}]$.

7.3.2 Base locale

Le long de la spline, une base de coordonnées locales est définie de manière à paramétrer le champ de vecteurs d'extension du front. On peut donc introduire de manière similaire à ce que l'on a fait pour la géométrie de la structure fissurée (section 7.2.1)

- $\mathbf{T}^f(s) = \frac{1}{\left\| \frac{d\mathbf{P}(s)}{ds} \right\|} \frac{d\mathbf{P}(s)}{ds}$,
- $\mathbf{N}^f(s) = \frac{1}{\left\| \frac{d\mathbf{T}^f(s)}{ds} \right\|} \frac{d\mathbf{T}^f(s)}{ds}$,
- $\mathbf{B}^f(s) = \mathbf{T}^f(s) \times \mathbf{N}^f(s)$.

Malheureusement, cette base est inadaptée car $\mathbf{N}^f(s)$ n'est pas nécessairement tangent à la surface de la fissure. En chaque point de contrôle \mathbf{P}^k , on calcule alors une normale discrète $\hat{\mathbf{B}}^k$ à la surface (figure 7.3.1) en sélectionnant l'élément de surface discret qui contient les deux points les plus proches dans la représentation discrète, \mathbf{P}_k^i , $k \in \{1, \dots, N_i\}$, et $\hat{\mathbf{B}}^k$ est définie comme la normale à la face de cet élément. Ensuite, on vérifie la direction $\hat{\mathbf{B}}^k$ de manière à ce que le vecteur $\hat{\mathbf{B}}^k \times \mathbf{T}^f(s)$ soit bien dirigé vers l'extérieur de la surface fissurée. Cette normale discrète est alors adaptée à notre problème. Pour obtenir une normale continue, une normale intermédiaire à la surface $\hat{\mathbf{B}}(s)$ est interpolée linéairement

$$\forall s \in [0, s_{max}] \quad \hat{\mathbf{B}}(s) = (1 - u) \hat{\mathbf{B}}^k + u \hat{\mathbf{B}}^{k+1}, \quad (7.3.3)$$

On définit alors la base orthonormée locale $(\mathbf{T}(s), \mathbf{N}(s), \mathbf{B}(s))$ sur le front de fissure par

$$\mathbf{T}(s) = \frac{1}{\left\| \frac{d\mathbf{P}(s)}{ds} \right\|} \frac{d\mathbf{P}(s)}{ds}, \quad (7.3.4)$$

$$\mathbf{N}(s) = \mathbf{B}(s) \times \mathbf{T}(s), \quad (7.3.5)$$

$$\mathbf{B}(s) = \frac{(\hat{\mathbf{B}}(s) - (\hat{\mathbf{B}}(s) \cdot \mathbf{T}(s)) \mathbf{T}(s))}{\left\| \hat{\mathbf{B}}(s) - (\hat{\mathbf{B}}(s) \cdot \mathbf{T}(s)) \mathbf{T}(s) \right\|}. \quad (7.3.6)$$

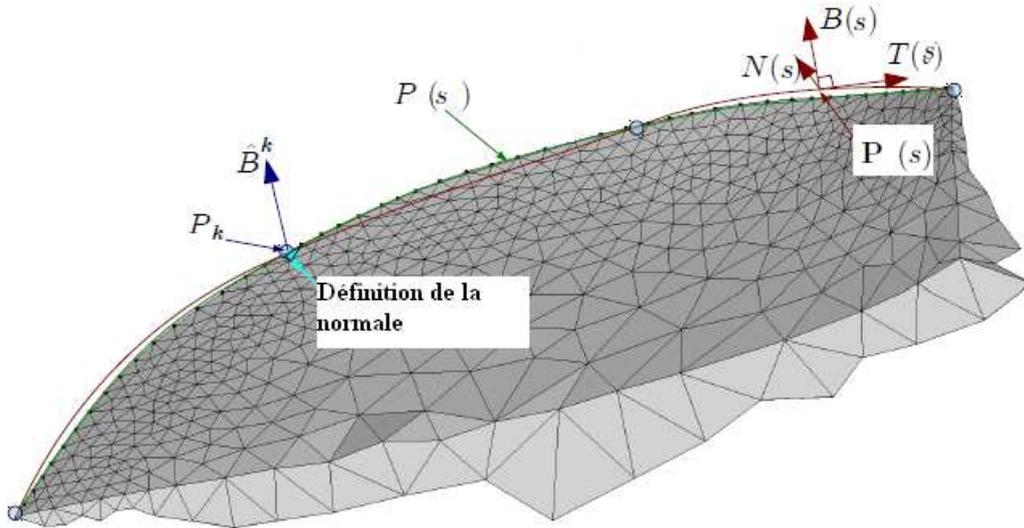


FIGURE 7.3.1: Approximation du front et base locale. (en vert) Le front résultant de N points de contrôle.(en rouge) La spline résultant de 4 points de contrôle.

7.3.3 Interpolation le long du front

Que ce soit pour la fonction d'extension ou pour le taux de restitution d'énergie, on a besoin d'une représentation le long du front qui repose sur les outils que l'on vient de construire. Autrement dit, on a besoin de construire un espace approché \mathcal{U}_h de l'espace continu $\mathcal{U}_{\hat{\theta}}$ utilisé a priori pour construire la perturbation θ et le G distribué. On choisit ici de prendre pour \mathcal{U}_h des éléments finis linéiques d'ordre 1, on propose d'introduire N valeurs nodales G^k du taux de restitution d'énergie aux points de contrôle comme cela est montré à la figure 7.3.2 avec une interpolation linéaire

$$\hat{G}(s) = (1 - \omega) G^k + \omega G^{k+1}, \quad (7.3.7)$$

et $k = \{1, \dots, \min(IP(s), N - 2)\}$, $\omega = s - k \in [0, 1]$.

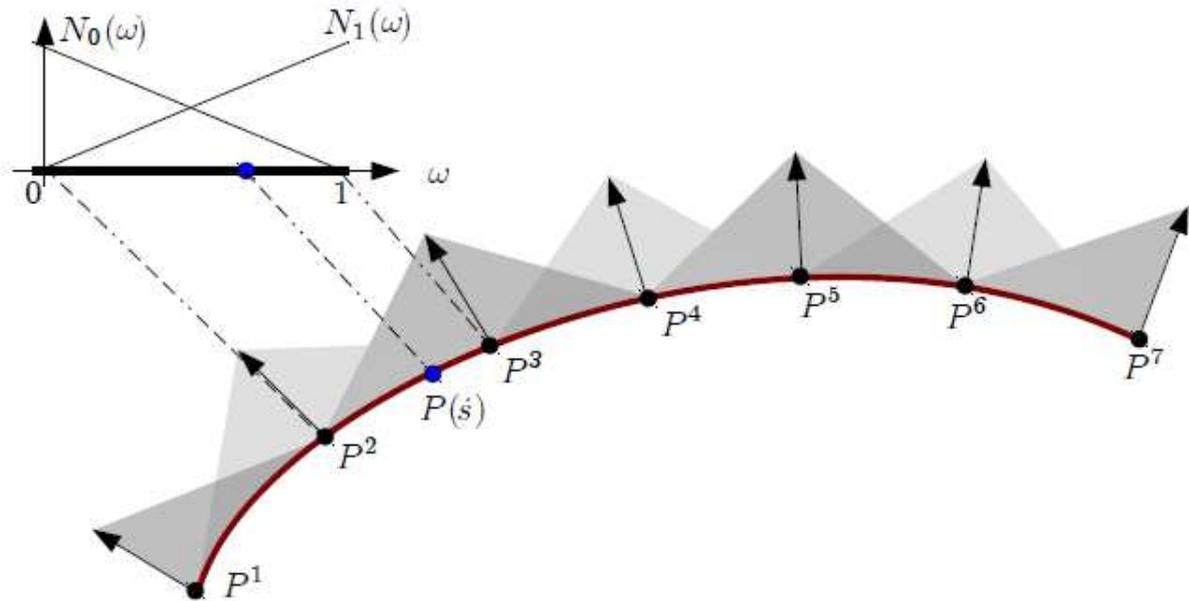


FIGURE 7.3.2: Représentation de $\hat{G}(s)$ le long d'un front (en rouge) à 7 points de contrôle. Exemple d'interpolation entre le noeud de contrôle 2 et 3. Triangles gris représentant l'interpolation utilisée.

De la même manière, on se propose de définir un champ d'extension discret par (7.2.3) avec

$$\hat{\theta}(s) = (1 - \omega) \theta^k + \omega \theta^{k+1}. \quad (7.3.8)$$

et on pose $\nu(s) = \mathbf{N}(s)$ pour respecter l'extension en mode I sur le problème discrétisé.

7.3.4 Position d'un point près du front de fissure en utilisant la base locale

Tout point \mathbf{M} suffisamment près du front discrétisé ($d(\mathbf{M}, \hat{\Gamma}_{\mathbf{x}}) \leq r_0$), peut s'écrire en coordonnées locales (section 7.2.2)

$$\mathbf{OM} = \mathbf{OM}_p + \mathbf{M}_p \mathbf{M} = \mathbf{OM}(\alpha, \beta, s) = \mathbf{P}(s) + \alpha \mathbf{N}(s) + \beta \mathbf{B}(s), \quad (7.3.9)$$

avec :

- s la coordonnée du point de contrôle le plus proche de \mathbf{M} sur le front $\mathbf{M}_p = \mathbf{P}(s)$,
- $\alpha = \mathbf{M}_p \mathbf{M} \cdot \mathbf{N}(s)$,
- $\beta = \mathbf{M}_p \mathbf{M} \cdot \mathbf{B}(s)$.

La matrice jacobienne de la position \mathbf{M} par rapport aux coordonnées locales s'écrit

$$J = \begin{bmatrix} \partial_\alpha \mathbf{OM} \cdot \mathbf{e}_x & \partial_\beta \mathbf{OM} \cdot \mathbf{e}_x & \partial_s \mathbf{OM} \cdot \mathbf{e}_x \\ \partial_\alpha \mathbf{OM} \cdot \mathbf{e}_y & \partial_\beta \mathbf{OM} \cdot \mathbf{e}_y & \partial_s \mathbf{OM} \cdot \mathbf{e}_y \\ \partial_\alpha \mathbf{OM} \cdot \mathbf{e}_z & \partial_\beta \mathbf{OM} \cdot \mathbf{e}_z & \partial_s \mathbf{OM} \cdot \mathbf{e}_z \end{bmatrix} \quad (7.3.10)$$

avec

$$\partial_\alpha \mathbf{OM} = \mathbf{N}(s), \quad (7.3.11)$$

$$\partial_\beta \mathbf{OM} = \mathbf{B}(s), \quad (7.3.12)$$

$$\partial_s \mathbf{OM} = \mathbf{P}'(s) + \alpha \mathbf{N}'(s) + \beta \mathbf{B}'(s). \quad (7.3.13)$$

7.3.5 Gradient de la fonction d'extension

En utilisant la transformation donnée par (7.3.9) et la matrice jacobienne (7.3.10), on peut finalement obtenir le gradient de la fonction d'extension sous la forme

$$\nabla_{\mathbf{x}} \theta(\mathbf{M}) = J^{-1}(\alpha, \beta, s) \begin{bmatrix} \frac{\alpha}{r} f'(r) g(s) \mathbf{N}(s) \cdot \mathbf{e}_x & \frac{\beta}{r} f'(r) g(s) \mathbf{N}(s) \cdot \mathbf{e}_x & \{f(r) g'(s) \mathbf{N}(s) + f(r) g(s) \mathbf{N}'(s)\} \cdot \mathbf{e}_x \\ \frac{\alpha}{r} f'(r) g(s) \mathbf{N}(s) \cdot \mathbf{e}_y & \frac{\beta}{r} f'(r) g(s) \mathbf{N}(s) \cdot \mathbf{e}_y & \{f(r) g'(s) \mathbf{N}(s) + f(r) g(s) \mathbf{N}'(s)\} \cdot \mathbf{e}_y \\ \frac{\alpha}{r} f'(r) g(s) \mathbf{N}(s) \cdot \mathbf{e}_z & \frac{\beta}{r} f'(r) g(s) \mathbf{N}(s) \cdot \mathbf{e}_z & \{f(r) g'(s) \mathbf{N}(s) + f(r) g(s) \mathbf{N}'(s)\} \cdot \mathbf{e}_z \end{bmatrix} \quad (7.3.14)$$

avec

$$f'(r) = \begin{cases} 0 & \text{si } r > r_e, \\ 0 & \text{si } r < r_i, \\ \frac{(r-r_e)(r-r_i)}{(r_e-r_i)^3} & \text{sinon.} \end{cases} \quad (7.3.15)$$

7.4 Description de la méthode de résolution

Dans cette section, on présente la méthode qui permet de résoudre le problème (7.2.5) discrétisé par éléments finis : trouver les $(G^j)_{j \in \{1, \dots, \min(IP(s), N^i - 2)\}}$ qui vérifient

$$\forall \theta^k, k \in \{1, \dots, \min(IP(s), N - 2)\}, \quad (7.4.1)$$

$$\int_{\Gamma_{\mathbf{x}}} \hat{G}(s) \hat{\theta}(s) ds = \int_{\hat{B}_{\mathbf{x}}} -\Sigma : \nabla_{\mathbf{x}} \boldsymbol{\theta} + \mathbf{K} : (\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\theta}) - \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{X}}_{|\mathbf{F}, \mathbf{k}, T} \cdot \boldsymbol{\theta} dV_{\mathbf{x}}.$$

Tout d'abord, un front discrétisé est construit en utilisant un spline de Catmull-Rom. On en déduit une base locale régulière en chaque point du front. Ensuite, un champ vectoriel d'extension de fissure est défini. Finalement, le volume d'intégration est discrétisé de manière à pouvoir intégrer numériquement l'intégrale volumique dans la formulation variationnelle.

Algorithme 7.1 Procédure complète telle que codé dans Z-cracks

***INPUTS

- $\{\mathbf{P}_k\}$ les points du front de fissure
- N le nombre de points de contrôle demandé par l'utilisateur
- $\{elements_p\}$ les éléments contenant les quantités aux points de Gauss et la règle d'intégration
- $\{lip - faces_i\}$ les faces de la fissure

***OUTPUT

- $\{G_k\}$ les valeurs du taux de restitution d'énergie aux points de contrôle

***ALGORITHM

1. `build - front` ($\{\mathbf{P}_k\}, \{lip - faces\}, N$) \rightarrow `crack - front`
 2. `build - volume` ($\{elements_p\}$) \rightarrow `crack - volume`
 3. `crack - front.integrate - curve` () \rightarrow $\mathbf{M}_{\mathbf{G}}$
 4. `crack - volume.integrate - volume - G` (`crack - front`, $\{elements_p\}$) \rightarrow $\mathbf{V}_{\mathbf{G}}$
 5. $\mathbf{M}_{\mathbf{G}}^{-1} \mathbf{V}_{\mathbf{G}} \rightarrow \{G_k\}$
-

Une organisation du code orienté objet est également décrite dans le diagramme UML (figure 7.4.1).

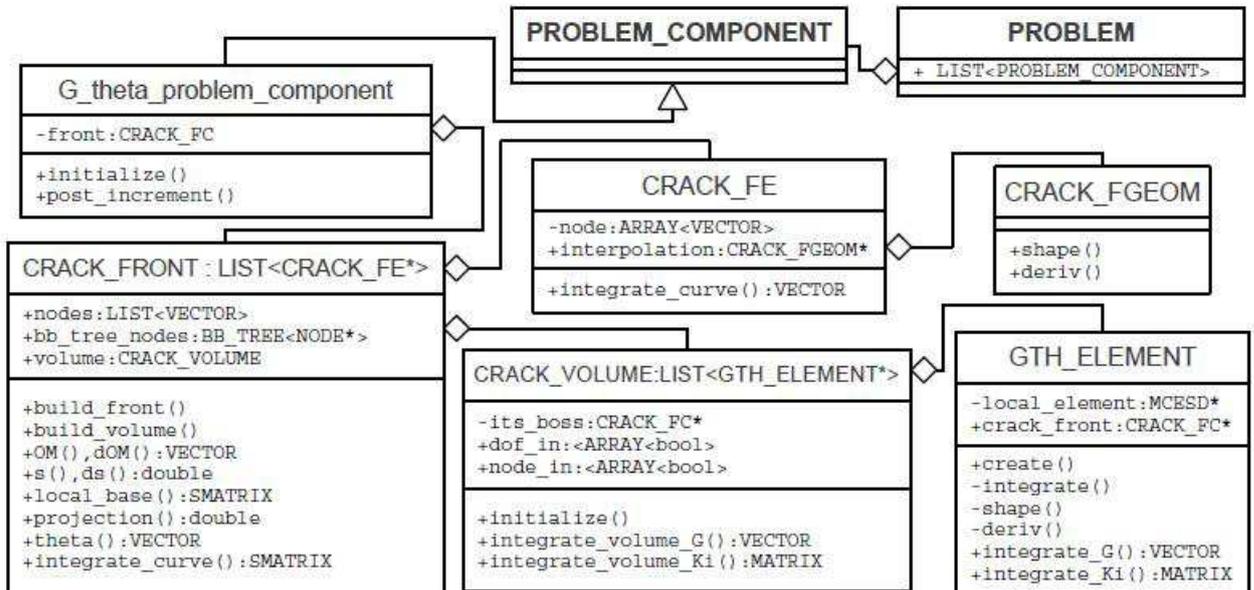


FIGURE 7.4.1: Diagramme UML tel qu'implémenté dans Z-cracks

7.4.1 Méthode d'intégration dans le volume

Le calcul éléments finis nous permet d'obtenir l'ensemble des quantités nécessaires aux points de Gauss des éléments dans le volume fissuré. Une méthode robuste d'intégration consiste alors à utiliser ces données et la règle d'intégration utilisée dans le calcul éléments-finis pour faire une intégration de Gauss sur chaque élément du volume d'intégration. On doit donc évaluer θ et $\nabla_X \theta$ aux points de Gauss en plus des autres quantités déjà présentes dans le post-processeur. Une fois cette étape finie, l'intégration complète suit les étapes suivantes reprises dans l'algorithme 7.2 :

1. Une liste des éléments contenus dans le support de θ est construite.
2. Cette liste est découpée en plusieurs sous-listes de même taille pour pouvoir réaliser un calcul en parallèle.
3. Pour chaque sous-liste, on réalise l'intégration de Gauss. Pour cela, on cherche tout d'abord le point du front le plus proche du point de Gauss courant. Ensuite, on calcule θ et $\nabla_X \theta$. Enfin, on détermine le terme volumique pour chaque point de Gauss.
4. On intègre le long du front.
5. On obtient un taux de restitution d'énergie curviligne en résolvant le système linéaire résultant de la formulation variationnelle discrétisée (7.4.1) .

Algorithme 7.2 Algorithme d'intégration en volume tel que codé dans Z-cracks

***INPUTS

- **crack** – front l'objet décrivant le front
- $\{elements_p\}$ les éléments contenant les quantités aux points de gauss et la règle d'intégration

***OUTPUT

- \mathbf{V}_G le second membre du taux de restitution d'énergie dans la formulation variationnelle

***ALGORITHM

- a) **function build – volume** ($\{elements_p\}$)
 - b) $\{\}$ \rightarrow **crack – volume**
 - c) **for** $i \in \{1, N_{elem}\}$ **do**
 - d) **create – box** ($elements_i, r_e + r_\Gamma$) \rightarrow **box**
 - e) **if** **bb – tree – nodes.find – in – box** (**box**) **then**
 - f) **crack – volume.add** ($elements_i$)
 - g) **end if**
 - h) **end for**
 - i) **function integrate – volume – G** ($\{elements_p\}$)
 - j) **for** $i \in \{1, \text{crack – volume.size}()\}$ **do**
 - k) **crack – volume** [i] \rightarrow **elem**
 - l) **for** $j \in \{1, \text{elem.GP}[j]\}$ $\rightarrow t_j$ **then**
 - m) **crack – front.projection** ($\text{elem.GP}[j]$) $\rightarrow t_j$
 - n) **compute – theta** (t_j) \rightarrow **theta**
 - o) **compute – gradtheta** (t_j) \rightarrow **gradtheta**
 - p) **integrate – G** ($t_j, \text{theta}_j, \text{gradtheta}_j, \text{elem}_i, \mathbf{V}_G$) \rightarrow **gradtheta**
 - q) **end for**
 - r) **end for**
-

Dans le détail l'algorithme 7.2 réalise les opérations suivantes :

- étapes (a) à (h) , **function build – volume** ($\{elements_p\}$). Cette fonction cherche dans le volume fissuré, les éléments qui ont une intersection avec le domaine d'extension limité par r_0 .
- étapes (i) à (r), **function integrate – volume – G** ($\{elements_p\}$). Cete fonction réalise l'intégration volumique en faisant une boucle sur les éléments obtenus précédemment puis sur les points de gauss de chaque élément.
- étape (k), sélection d'un élément, le i -ème dans le volume d'extension.

- étape (m), la projection du j-ième point de Gauss du i-ème élément permet d'obtenir une coordonnée s à partir de laquelle on calcule la valeur du champ d'extension (étape (n)) et de son gradient (étape (o)).
- étape (p), intégration de la contribution du point de gauss sélectionné dans la matrice du système linéaire \mathbf{V}_G .

Chapitre 8

Cas de calculs explicites de la grandeur caractéristique

Dans les chapitres 4 et 5, nous avons mis en place la construction de grandeurs caractéristiques de la rupture pour un problème dépendant du temps en distinguant deux cas de calcul. Dans le premier (chapitre 4), on réalise des hypothèses sur l'évolution des processus dissipatifs de manière à ce que les variations des variables internes soient explicites. Dans le second (chapitre 5), on prend complètement en compte cette évolution. Dans ce chapitre, on étudie deux cas particuliers dans l'utilisation des grandeurs caractéristiques explicites précédemment construites :

- le cas précontraint où les variables internes **ne sont pas singulières** (section 8.1). Cette hypothèse se traduit, dans notre cas, par un découplage de l'évolution de ces variables et du problème posé.
- le cas précontraint où les variables internes **sont singulières** (section 8.2). Cette hypothèse se traduit, dans notre cas, par un couplage de l'évolution de ces variables et du problème posé.

Pour ce faire, on choisit de calculer ces quantités sur des cas connus afin de comparer nos résultats à la littérature existante et de comprendre les problématiques numériques présentes dans les deux cas. Ceci nécessite l'abandon provisoire des lois en grandes déformations pour revenir vers des situations de pré-contrainte et de plasticité en petites déformations. On note finalement que tous les problèmes étudiés dans la suite sont en 2D.

8.1 Cas explicites non-singuliers

Dans cette section, on examine plusieurs utilisations possibles du taux de restitution d'énergie pour des problèmes où les variables internes ne sont pas singulières. Dans ce cas, le problème d'équilibre à résoudre est purement élastique et les variables internes sont prescrites durant l'analyse à la rupture. La grandeur utilisée pour caractériser la

rupture (4.2.30) est alors strictement équivalente au taux de restitution d'énergie en mécanique de la rupture élastique fragile. En présence de variables internes prescrites et non-singulières, le calcul du taux de restitution d'énergie a déjà fait l'objet de plusieurs applications telles que :

- La fissuration des matériaux présentant un champ de précontrainte [163],
- La fissuration des matériaux à gradient de comportement [8, 163, 42].

Dans ces deux cas, l'hypothèse d'invariance matérielle des variables internes $D_{\vartheta} \mathbf{k}^t = 0$ est trivialement vérifiée.

8.1.1 Cas de calcul validant la formulation (4.2.30)

Dans cette section, on utilise deux cas classiques, reconnus pour vérifier les hypothèses proposées, pour mettre en place une méthodologie de calcul :

- un cas de fissuration mode I élastique à gradient de comportement,
- un cas de fissuration mode I élastique avec présence d'un champ de dilatation thermique stationnaire.

Pour pouvoir valider notre méthode, on compare les résultats obtenus par la méthode $G - \theta$ à :

1. une référence bibliographique [45, 46] qui nous donne aussi les détails de la construction du cas test,
2. un résultat par différences finies obtenu à partir de deux calculs complets sur deux positions de fissure distinctes avec l'aide du logiciel Zébulon [5].

De plus, comme nous avons déjà identifié le calcul du terme

$$\int_{\tilde{B}_{\mathbf{x}}} \mathbf{K} : (\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\theta}) \, dV_{\mathbf{x}}, \quad (8.1.1)$$

comme une difficulté numérique, on se place dans le cas le plus simple, où \mathbf{k} est connu aux nœuds. La méthode numérique proposée pour le calcul de l'extension $\boldsymbol{\theta}$, limité ici à une extension scalaire en mode I, et du taux de restitution d'énergie \mathbf{G} est celle détaillée au chapitre 7. Le champ $\boldsymbol{\theta}$ s'écrit donc sous la forme

$$\boldsymbol{\theta}(r) = f(r) \boldsymbol{\nu}, \quad (8.1.2)$$

où :

- $\boldsymbol{\nu}$ est le vecteur unitaire tangent à la fissure au niveau de la pointe de fissure. Dans la suite, il désigne une perturbation de Mode I.
- r est la distance à la pointe de fissure,
- $f(r) = \begin{cases} 0 & \text{si } r > r_e, \\ 1 & \text{si } r < r_i, \\ [2(r - r_e) + 3(r - r_i)] \frac{(r - r_e)^2}{(r_e - r_i)^3} & \text{sinon,} \end{cases}$ une fonction régularisante de rayon intérieur r_i et de rayon extérieur r_e .

Géométrie

Le cas de calcul 2D choisi est tiré de [45, 46] et sa géométrie est décrite à la figure 8.1.1.

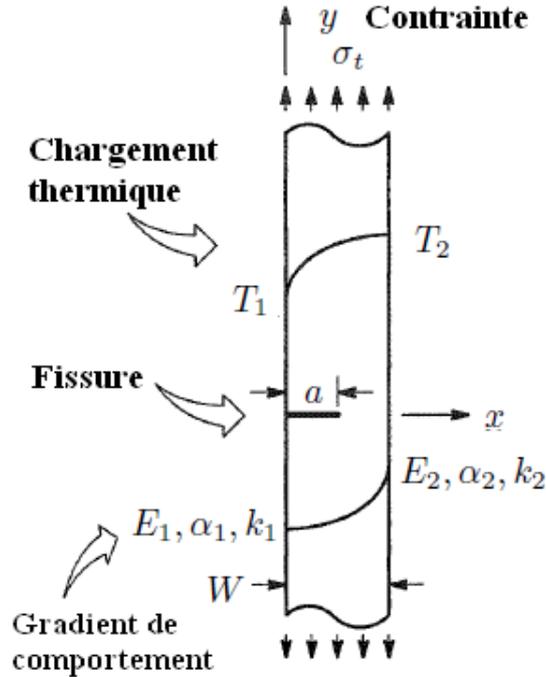


FIGURE 8.1.1: Éprouvette semi-infinie de largeur W , présentant une fissure de longueur a . Cette éprouvette est soumise à une contrainte uniforme σ_t parallèle à l'axe y , à un champ de température $T(x)$ et à une variation de ses propriétés matériau $(E(x), \alpha(x), k(x))$.

Cette éprouvette nous permet d'étudier la propagation d'une fissure de longueur a dans une éprouvette semi-infinie de largeur W en déformation plane et en mode I.

Loi de comportement

On se place dans le cadre d'un problème quasi-statique en petits déplacements sous chargement thermique (section 3.4). Le comportement de l'éprouvette testée est thermoélastique à propriétés non uniformes. Le modèle thermomécanique le plus simple, sur lequel on se concentre, est celui de la thermoélasticité découplée. Dans cette approche, le champ de température à tout instant résulte de causes externes (non mécaniques) et n'est pas affecté par l'état mécanique du matériau. La relation de comportement thermoélastique linéaire s'écrit alors

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C} : (\boldsymbol{\varepsilon} - \alpha T \mathbf{1}), \quad (8.1.3)$$

avec :

- $\boldsymbol{\sigma}$ la contrainte,
- $\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2} (\nabla_{\mathbf{x}} \boldsymbol{\xi} + \nabla_{\mathbf{x}}^{\top} \boldsymbol{\xi})$ la déformation linéarisée par (3.4.3),
- T la température du matériau,
- α le coefficient de dilatation thermique isotrope,
- \mathbf{C} le tenseur d'élasticité,
- $\mathbf{1}$ le tenseur identité d'ordre 2.

De plus, on prend un tenseur d'élasticité isotrope qui s'écrit dans le cadre des petits déplacements

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} \lambda + 2\mu & \lambda & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda + 2\mu & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda & \lambda + 2\mu & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2\mu & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2\mu & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2\mu \end{bmatrix}, \quad (8.1.4)$$

avec :

- $\lambda = \frac{\nu E}{(1+\nu)(1-2\nu)}$,
- $\mu = \frac{E}{2(1+\nu)}$.

Notre matériau est également à gradient de propriétés [45] :

- $\alpha(x) = \alpha_1 \exp(wx)$ avec $w = \frac{1}{W} \ln\left(\frac{\alpha_2}{\alpha_1}\right)$,
- le module d'Young $E(x) = E_1 \exp(\beta x)$ avec $\beta = \frac{1}{W} \ln\left(\frac{E_2}{E_1}\right)$,
- le coefficient de Poisson ν constant.

Dans ce cas [46], la distribution de température est définie par l'équation de diffusion stationnaire comportant une conductivité variable

$$\frac{d}{dx} \left(k(x) \frac{\partial T}{\partial x} \right) = 0 \quad (8.1.5)$$

avec un coefficient de conduction thermique $k(x) = k_1 \exp(\eta x)$ et $\eta = \frac{1}{W} \ln\left(\frac{k_2}{k_1}\right)$.

Cas de chargement

On distingue deux cas de chargement qui vont nous permettre de comprendre les difficultés associées au terme en gradient (8.1.1) :

- une contrainte de traction uniforme imposée à l'infini sur les deux extrémités de l'éprouvette sans variation de température (figure 8.1.1),
- une température imposée T_1 en $x = 0$ et T_2 en $x = W$ sur l'ensemble de l'éprouvette sans contrainte imposée (figure 8.1.1).

Expressions du taux de restitution d'énergie

Sous l'hypothèse de stationnarité dans $B_{\mathbf{x}}^t$, vérifiée par construction du problème, le taux de restitution d'énergie s'écrit par linéarisation de (4.2.30) sous l'hypothèse des

déformations infinitésimales

$$\mathbf{G} = \int_{B_{\mathbf{X}}} -\boldsymbol{\Sigma} : \nabla_{\mathbf{X}} \boldsymbol{\theta} + \mathbf{K} : (\nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\theta}) - \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{X}}|_{\mathbf{F}, \mathbf{k}, T} \cdot \boldsymbol{\theta} dV_{\mathbf{X}}, \quad (8.1.6)$$

et peut se séparer en deux termes

$$\mathbf{G} = \mathbf{G}_{eshelby} + \mathbf{G}_{gradient}, \quad (8.1.7)$$

avec

$$\mathbf{G}_{eshelby} = \int_{\Gamma_0^r} \left(\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla_{\mathbf{X}} \boldsymbol{\xi} - \frac{1}{2} [\boldsymbol{\sigma} : (\boldsymbol{\varepsilon} - \alpha T \mathbf{1})] \mathbf{1} \right) : \nabla_{\mathbf{X}} \boldsymbol{\theta} dV_{\mathbf{X}}, \quad (8.1.8)$$

et

$$\mathbf{G}_{gradient} = \int_{\Gamma_0^r} \left[\boldsymbol{\sigma} : (T \nabla_{\mathbf{X}} (\alpha \mathbf{1}) + \alpha \nabla_{\mathbf{X}} (T \mathbf{1})) - \frac{\partial \psi}{\partial E} \nabla_{\mathbf{X}} E - \frac{\partial \psi}{\partial \nu} \nabla_{\mathbf{X}} \nu \right] \cdot \boldsymbol{\theta} dV_{\mathbf{X}}. \quad (8.1.9)$$

Ici $B_{\mathbf{X}} \rightarrow \Gamma_0^r$ désigne le domaine de rayon r où $\boldsymbol{\theta}$ n'est pas nul. Par définition de ν , E et α , on obtient ensuite :

- $\nabla_{\mathbf{X}} \nu$ est le vecteur nul,
- $\nabla_{\mathbf{X}} E = E_1 \beta \exp(\beta x) \mathbf{e}_x$,
- $\nabla_{\mathbf{X}} \alpha = \alpha_1 w \exp(wx) \mathbf{e}_x$.

De plus, T ne dépend que de x et est connu analytiquement comme solution de (8.1.5) et $\boldsymbol{\theta}(r) = f(r) \boldsymbol{\nu}$ avec $\boldsymbol{\nu}$ représentant ici un vecteur unitaire selon les x positifs. Le terme $\mathbf{G}_{gradient}$ (8.1.9) se réduit donc à

$$\mathbf{G}_{gradient} = \int_{\Gamma_0^r} \left[\boldsymbol{\sigma} : \left(\alpha_1 w \exp(wx) T \mathbf{1} + \alpha \frac{dT}{dx} \mathbf{1} \right) - \frac{\partial \psi}{\partial E} E_1 \beta \exp(\beta x) \right] f(r) dV_{\mathbf{X}} \quad (8.1.10)$$

Le gradient de comportement et la présence de dilatation thermique n'induisent aucune singularité.

8.1.2 Résultats numériques

Pour réaliser ce calcul 2D, on choisit des quadrangles quadratiques à 8 nœuds car on sait [163] que les éléments linéaires sont trop pauvres pour bien représenter l'évolution du gradient de température.

Résultats sur le premier cas de charge

Pour pouvoir comparer notre calcul à [45, 46], on utilise une grandeur normalisée scalaire :

$$K_{In} = \frac{\sqrt{\mathbf{G} \frac{E(a)}{1-\nu^2}}}{\sigma_t \sqrt{\pi a}}, \quad (8.1.11)$$

avec :

- σ_t la contrainte de traction appliquée sur l'éprouvette,
- $E(a)$ le module d'Young en pointe de fissure.

Pour obtenir une valeur unique de G , on choisit de prendre la moyenne des valeurs de G sur 5 domaines de θ croissants (en prenant r_e croissant, r_i comprenant les 2 premières couches d'éléments) autour de la pointe de fissure allant du contour vert au contour rouge schématisé à la figure 8.1.2. On utilise en tout 354 éléments pour l'éprouvette et l'élément en pointe de fissure fait 3% de la largeur de l'éprouvette.

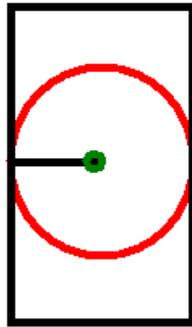


FIGURE 8.1.2: Domaines de θ .

En considérant les valeurs numériques proposées dans la littérature pour les différentes propriétés géométriques et matériaux :

- $\frac{E_2}{E_1} = 10$,
- $\nu = 0.3$,
- $\frac{a}{W} = 0.4$,

on obtient les résultats présentés à la table 8.1.

Méthode	K_{In}	Erreur relative en %
Différences finies	1.586	-0.13
Numérique	1.579	-0.57
Rèf _{biblio}	1.588	0

TABLE 8.1: Comparaison des résultats. Rèf_{biblio} : résultat de [45]. Numérique : Calcul de G moyenné sur plusieurs contours. Différences finies : Calcul par propagation de fissure pour une perturbation de 10^{-3} .

Lors de ce premier test (table 8.1), on a pu résoudre le problème par différences finies en réalisant deux calculs avant et après la perturbation de la pointe de la fissure de manière à obtenir un deuxième calcul de référence. On remarque que l'erreur résultante est très faible par rapport au résultat de référence. Il faut néanmoins bien comprendre que le cas est construit pour avoir une solution très régulière ce qui nous a permis de

limiter au maximum l'erreur de calcul sur les termes en gradient. On peut également vérifier l'indépendance au domaine d'intégration (figure 8.1.3).

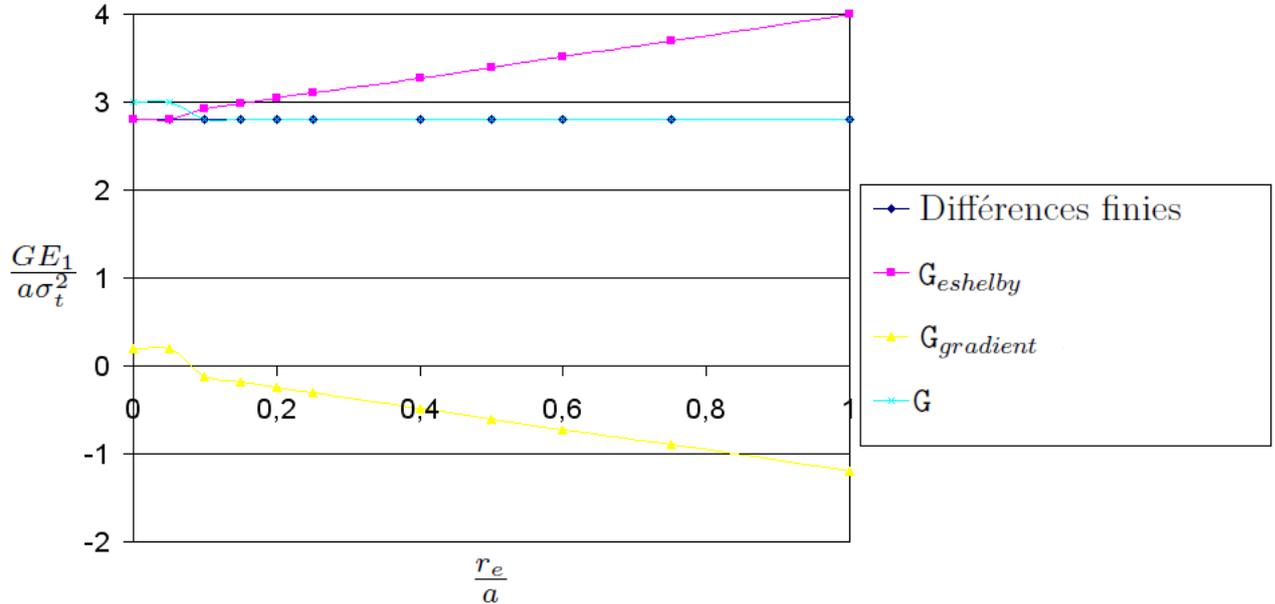


FIGURE 8.1.3: Indépendance au domaine de θ . Grandeur normalisée en fonction du domaine de θ rapporté à la longueur de fissure. (En bleu foncé) Résultat différences finies. (En rose) Partie d'Eshelby du taux de restitution d'énergie. (En jaune) Partie en gradient de variable interne du taux de restitution d'énergie. (En bleu clair) Somme des deux parties du taux de restitution d'énergie.

A la figure 8.1.3, l'indépendance au domaine de θ est excellente à part en pointe de fissure où le nombre d'éléments sur lequel on intègre est trop faible et l'erreur numérique due à la singularité importante. On remarque également l'importance de la prise en compte du terme en gradient dans le calcul de taux de restitution d'énergie. On peut alors s'interroger sur la capacité de notre méthode à modéliser un cas où les intégrales prises séparément sont 100 ou 1000 fois plus grandes que le taux de restitution d'énergie résultant. Ce problème est l'objet du second cas de charge.

Résultat sur le second cas de charge

Pour pouvoir comparer à [45, 46], on utilise également une grandeur normalisée

$$K_{In} = \frac{\sqrt{G \frac{E(a)}{1-\nu^2}}}{\frac{E_1}{1-\nu} \alpha_1 T_0 \sqrt{\pi a}}. \quad (8.1.12)$$

On applique toujours une moyenne sur les valeurs du taux de restitution d'énergie pour les cinq mêmes domaines de θ . Avec les constantes :

- $\frac{E_2}{E_1} = 10$,
- $\frac{\alpha_2}{\alpha_1} = 2$,
- $\frac{k_2}{k_1} = 10$,
- $\nu = 0.3$,
- $\frac{a}{W} = 0.5$,

on obtient alors (tables 8.2 et 8.3).

Méthode	K_{In}	Erreur en %
Différences finies	0.0412	0.5
Numérique	0.0430	4.7
Rèf _{biblio}	0.0410	—

TABLE 8.2: Comparaison des méthodes de calcul pour un chargement thermique vérifiant $T_1 = 0.05T_0$ $T_2 = 0.5T_0$. Rèf_{biblio} : résultat de [45]. Numérique : Calcul de G moyenné sur plusieurs domaines de θ . Différences finies : Calcul par propagation de fissure pour une perturbation de 10^{-3} .

Méthode	K_{In}	Erreur en %
Différences finies	0.0336	0.3
Numérique	0.0341	1.8
Rèf _{biblio}	0,0335	—

TABLE 8.3: Comparaison des méthodes de calcul pour un chargement thermique vérifiant $T_1 = 0.2T_0$ $T_2 = 0.5T_0$. Rèf_{biblio} : résultat de [45]. Numérique : Calcul de G moyenné sur plusieurs domaines de θ . Différences finies : Calcul par propagation de fissure pour une perturbation de 10^{-3} .

On remarque que sur les tables 8.2 et 8.3, l'erreur de calcul par rapport au résultat de référence reste assez faible mais peut varier beaucoup lorsqu'on change les conditions aux limites. On peut alors examiner l'indépendance au domaine de θ (figure 8.1.4) qui est visiblement responsable de l'erreur commise.

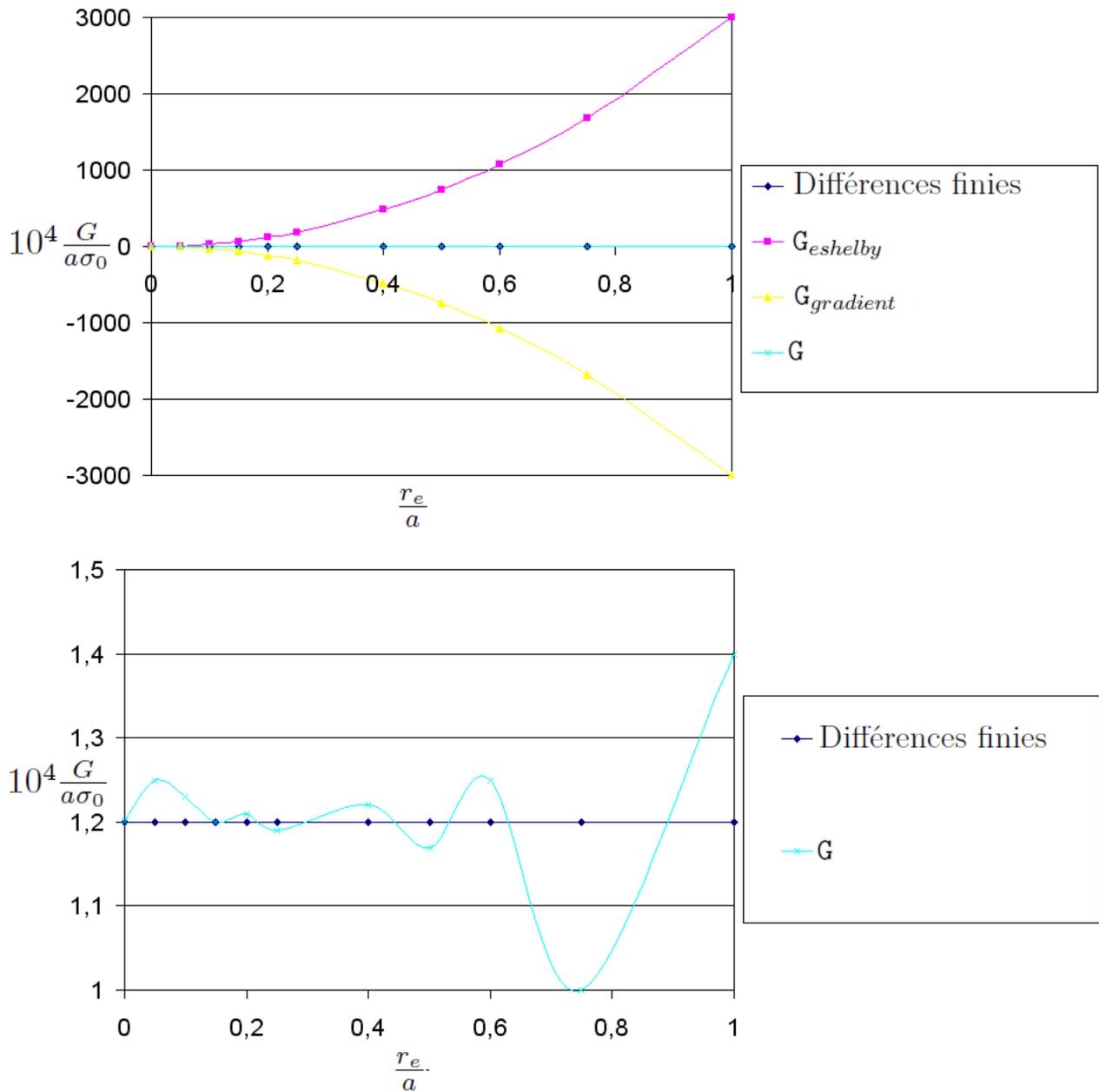


FIGURE 8.1.4: (En haut) Indépendance au domaine de θ pour le cas de chargement thermique avec $\sigma_0 = \frac{E_1 \alpha_1 T_0}{(1-\nu)}$ vérifiant $T_1 = 0.05T_0$ $T_2 = 0.5T_0$, Taux de restitution d'énergie normalisé en fonction du rayon d'intégration extérieur r_e rapporté à la longueur de fissure. (En bas) Zoom sur le taux de restitution d'énergie normalisé en fonction du rayon d'intégration extérieur r_e rapporté à la longueur de fissure. (En rose) Partie d'Eshelby du taux de restitution d'énergie. (En jaune) Partie en gradient de variable interne du taux de restitution d'énergie. (En bleu clair) Somme des deux parties du taux de restitution d'énergie.

On observe, en effet, deux pics d'erreur qui se situent pour le plus petit domaine de θ (4% d'erreur) et pour le plus grand (16% d'erreur). Par contre, si on considère le plus grand domaine de θ , l'erreur observée ne représente que 0.0067% de la valeur de $G_{eshelby}$ ce qui montre que l'erreur commise sur chacune des intégrales est très faible. Dans ce cas la méthode proposée n'est plus fiable et ne peut donc être utilisée.

8.1.3 Conclusion

Dans les deux cas précédents, on a pu mettre en avant l'intérêt de la prise en compte des termes en gradient de variable interne. De plus, on a remarqué qu'en se plaçant dans de bonnes conditions de calcul :

- discrétisation de la température aux nœuds,
- régularité de la solution,
- calcul analytique du gradient de propriétés,
- élément quadratique,
- intégration stable du taux de restitution d'énergie,

on retrouve des erreurs et des propriétés d'indépendance au domaine de θ extrêmement similaires au problème purement élastique [28]. Ce problème est donc bien connu et les méthodes numériques classiques sont bien adaptées à sa résolution. Comme nous allons le voir par la suite, ce n'est plus le cas lorsque les variables internes présentent une singularité.

8.2 Cas explicites singuliers

L'ensemble des travaux présentés ici ont été réalisés à l'Onera avec le logiciel Zcracks [5] en collaboration avec Vincent Riolo et Vincent Chiaruttini.

Comme dans la section précédente, on calcule la dérivée de l'énergie potentielle dans la propagation de fissure à chargement et variables internes fixées. Dans le cas le plus général, elle s'exprime, par (4.2.30)

$$G_{B_{\mathbf{x}}}^{statio} = - \frac{dW_{ep}^t}{d\vartheta} \Big|_{\vartheta=0} = \int_{B_{\mathbf{x}}} -\Sigma : \nabla_X \theta + \mathbf{K} : (\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{k} \cdot \theta) - \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{X}} \Big|_{\mathbf{F}, \mathbf{k}, T} \cdot \theta \, dV_{\mathbf{x}} \quad (8.2.1)$$

Comme nous l'avons vu à la section 4.2.1, on peut interpréter la grandeur caractéristique (8.2.1) comme la force motrice de la propagation d'une fissure fragile dans un milieu dissipatif. On rappelle finalement que l'on utilise la représentation numérique du taux de restitution d'énergie développée au chapitre 7. Puisqu'on se trouve dans un cas 2D, le front de fissure est ponctuel et on travaille donc avec une seule valeur scalaire du taux de restitution d'énergie.

8.2.1 Cas de calcul

La mise en œuvre du calcul de l'intégrale préalablement définie (8.2.1) a été réalisée au sein du code Zset/Zebulon pour application au module de fissuration conforme Z-cracks [5], co-développé à l'Onera. On considère un modèle test représentatif des effets de plasticité confinée agissant en pointe de fissure. Le domaine d'étude circulaire est maillé comme indiqué à la figure 8.2.1. Sur la frontière extérieure, on impose que le déplacement soit égal à la solution donnée par un champ de Westergaard en mode I en déformation plane

$$\begin{aligned}\xi_x &= \frac{1}{2\mu} \sqrt{\frac{r}{2\pi}} \cos(\alpha/2) (\kappa - \cos(\alpha)), \\ \xi_y &= \frac{1}{2\mu} \sqrt{\frac{r}{2\pi}} \sin(\alpha/2) (\kappa - \cos(\alpha)),\end{aligned}\tag{8.2.2}$$

où (r, α) sont les coordonnées polaires du point considéré et $\kappa = 3 - 4\nu$ avec ν le coefficient de Poisson du matériau et $\mu = \frac{E}{2(1+\nu)}$

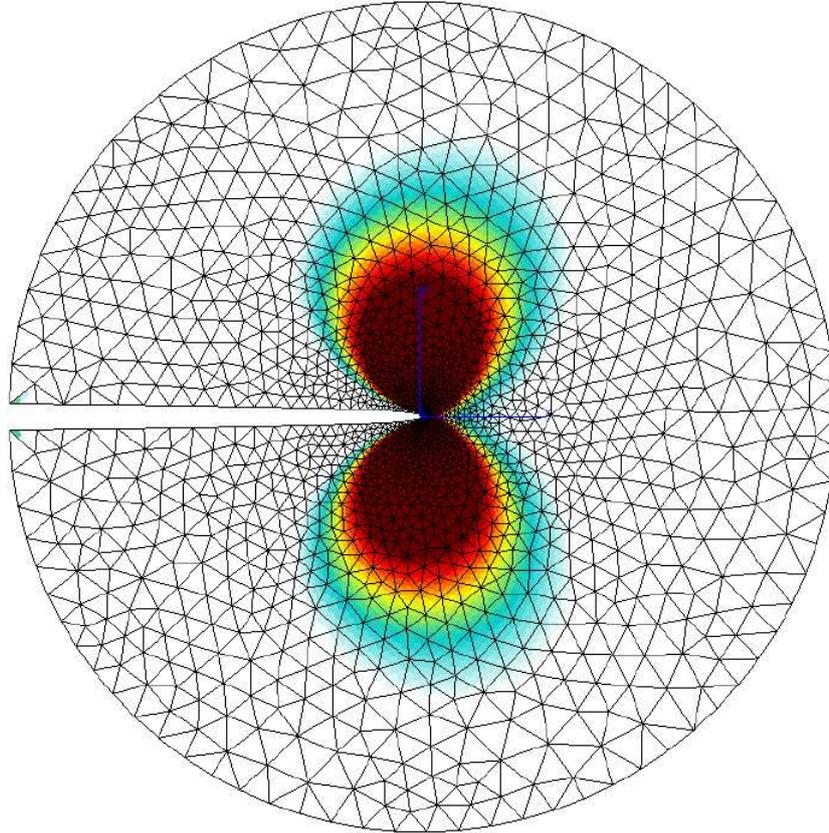


FIGURE 8.2.1: Maillage représentatif du problème de plasticité confinée en pointe de fissure (iso-valeurs de plasticité cumulée). Solution de Westergaard en mode I imposée sur la frontière. Éléments triangulaires quadratiques à 6 nœuds.

De cette façon, en vue d'une analyse de convergence en maillage, la longueur de la fissure disparaît de la modélisation et seule la taille de la zone plastique est déterminante. En pratique, on calibre les niveaux de chargement de sorte que la zone plastique reste confinée dans le domaine d'étude. Nous avons ainsi, avec un domaine de rayon unitaire, généré des éléments de taille caractéristique jusqu'à 10^{-6} pour un rayon plastique de l'ordre de 0.1. De plus, le domaine d'étude est noté Γ_0 .

Deux types de matériaux sont étudiés dans cette partie, tous les deux basés sur un comportement élastique isotrope linéaire (module d'Young E , coefficient de Poisson ν) avec un seuil de plasticité suivant un critère de Von-Mises de limite initiale σ_0 . On considère un comportement élastoplastique à écrouissage isotrope linéaire de module H ou à écrouissage cinématique linéaire de module C . Pour rappel, l'énergie libre dans le cas de l'écrouissage isotrope linéaire s'écrit

$$\psi_{libre} = \frac{1}{2} (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^p) : \mathbf{C} : (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^p) + \frac{H}{2} p^2, \quad (8.2.3)$$

et dans le cas de l'écrouissage cinématique linéaire

$$\psi_{libre} = \frac{1}{2} (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^p) : \mathbf{C} : (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^p) + \frac{C}{3} \boldsymbol{\varepsilon}^p : \boldsymbol{\varepsilon}^p. \quad (8.2.4)$$

On a introduit ici : $\boldsymbol{\varepsilon}$ la déformation totale, $\boldsymbol{\varepsilon}^p$ la déformation plastique, p la variable d'écrouissage isotrope, et \mathbf{C} le tenseur d'ordre 4 des modules d'élasticité. On note également la contrainte $\boldsymbol{\sigma} = \frac{\partial \psi}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}$.

Grâce à l'expression de l'énergie libre, on peut écrire la grandeur caractéristique (8.2.1) sous la forme

$$\begin{aligned} \mathbb{G} = & \int_{\Gamma_0^r} \left\{ \boldsymbol{\sigma} : (\nabla_{\mathbf{X}} \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla_{\mathbf{X}} \boldsymbol{\theta}) - \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} : (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_p) \operatorname{div} \boldsymbol{\theta} \right\} dV \\ & + \int_{\Gamma_0^r} \boldsymbol{\sigma} : (\nabla_{\mathbf{X}} \boldsymbol{\varepsilon}_p \cdot \boldsymbol{\theta}) dV - \int_{\Gamma_0^r} \left\{ \frac{1}{2} H p^2 \operatorname{div} \boldsymbol{\theta} \right\} dV - \int_{\Gamma_0^r} H p (\nabla_{\mathbf{X}} p \cdot \boldsymbol{\theta}) dV \end{aligned} \quad (8.2.5)$$

avec les termes en $\boldsymbol{\sigma} : (\nabla_{\mathbf{X}} \boldsymbol{\varepsilon}_p \cdot \boldsymbol{\theta})$ et en $H p (\nabla_{\mathbf{X}} p \cdot \boldsymbol{\theta})$ correspondant à $\mathbf{K} : (\nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\theta})$ dans (8.2.1) pour un écrouissage isotrope. On a de même

$$\begin{aligned} \mathbb{G} = & \int_{\Gamma_0^r} \left\{ \boldsymbol{\sigma} : (\nabla_{\mathbf{X}} \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla_{\mathbf{X}} \boldsymbol{\theta}) - \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} : (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_p) \operatorname{div} \boldsymbol{\theta} \right\} dV \\ & + \int_{\Gamma_0^r} \boldsymbol{\sigma} : (\nabla_{\mathbf{X}} \boldsymbol{\varepsilon}_p \cdot \boldsymbol{\theta}) dV - \int_{\Gamma_0^r} \left\{ \frac{1}{3} C \boldsymbol{\varepsilon}_p : \boldsymbol{\varepsilon}_p \operatorname{div} \boldsymbol{\theta} \right\} dV - \int_{\Gamma_0^r} \frac{2}{3} C \boldsymbol{\varepsilon}_p : (\nabla_{\mathbf{X}} \boldsymbol{\varepsilon}_p \cdot \boldsymbol{\theta}) dV \end{aligned} \quad (8.2.6)$$

avec les termes en $\boldsymbol{\sigma} : (\nabla_{\mathbf{X}} \boldsymbol{\varepsilon}_p \cdot \boldsymbol{\theta})$ et en $\frac{2}{3} C \boldsymbol{\varepsilon}_p : (\nabla_{\mathbf{X}} \boldsymbol{\varepsilon}_p \cdot \boldsymbol{\theta})$ correspondant à $\mathbf{K} : (\nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\theta})$ dans (8.2.1) pour un écrouissage cinématique. De plus $B_{\mathbf{X}} \rightarrow \Gamma_0^r$ désignant le domaine de rayon r où $\boldsymbol{\theta}$ n'est pas nul. De la même manière que dans la section précédente, on a pris $\boldsymbol{\theta}$ sous la forme

$$\boldsymbol{\theta}(r) = f(r) \boldsymbol{\nu}, \quad (8.2.7)$$

où :

- $\boldsymbol{\nu}$ est le vecteur unitaire tangent à la fissure au niveau de la pointe de fissure. Dans la suite, il désigne une perturbation de Mode I.
- r est la distance à la pointe de fissure,
- $f(r) = \begin{cases} 0 & \text{si } r > r_e, \\ 1 & \text{si } r < r_i, \\ [2(r - r_e) + 3(r - r_i)] \frac{(r - r_e)^2}{(r_e - r_i)^3} & \text{sinon,} \end{cases}$ une fonction régularisante de rayon intérieur r_i et de rayon extérieur r_e .

Le calcul du gradient des déformations inélastiques $\nabla_{\mathbf{x}} \boldsymbol{\varepsilon}_p$ est obtenu en utilisant un processus de lissage par moindre carré mobile [5] à partir de leurs valeurs aux points de Gauss (en pratique 8 à 16 points permettent d'obtenir de bons résultats).

Avec ce type de méthode et de lois de comportement, la contrainte garde une singularité en pointe de fissure et dans ces conditions, le calcul numérique de la quantité en gradient de variable interne n'est pas fiable sur les premières couches d'éléments. Aussi, dans le cas général, la limite

$$\lim_{r \rightarrow 0} \int_{\Gamma_0^r} \mathbf{K} : (\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\theta}) \, dV \quad (8.2.8)$$

reste indéterminée. Dans un premier temps, on choisit arbitrairement qu'en dessous d'un rayon r_c (représentant un rayon de coupure), cette quantité sera supposée nulle et évaluée par moindres carrés mobiles uniquement sur l'intervalle $[r_c, r_e]$. En pratique r est évalué en chaque point de Gauss de chaque élément et le point de Gauss considéré est pris en compte dans le calcul de \mathbf{G} si et seulement si $r \in [r_c, r_e]$.

8.2.2 Résultats

Pour pouvoir étudier la quantité proposée dans la section précédente, on commence par séparer chacun des ses termes pour identifier les difficultés numériques et vérifier l'indépendance au domaine. Ensuite, on examine l'indépendance au maillage. Enfin, on fait la synthèse des propriétés de notre grandeur en proposant une méthode de détermination de la longueur caractéristique r_c de coupure de l'intégrale de volume.

Identification des difficultés numériques pour chacun des termes

Pour identifier les difficultés numériques, on sépare la grandeur (8.2.5) en quatre termes :

- $\mathbf{G}_{esh-el} = \int_{\Gamma_0^r} \left\{ \boldsymbol{\sigma} : (\nabla_{\mathbf{x}} \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \boldsymbol{\theta}) - \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} : (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_p) \operatorname{div} \boldsymbol{\theta} \right\} \, dV,$
- $\mathbf{G}_{grad-pl} = \int_{\Gamma_0^r} \boldsymbol{\sigma} : (\nabla_{\mathbf{x}} \boldsymbol{\varepsilon}_p \cdot \boldsymbol{\theta}) \, dV,$
- $\mathbf{G}_{tr-ec} = - \int_{\Gamma_0^r} \left\{ \frac{1}{2} H p^2 \operatorname{div} \boldsymbol{\theta} \right\} \, dV$ pour l'écoulement isotrope et $\mathbf{G}_{tr-ec} = - \int_{\Gamma_0^r} \left\{ \frac{1}{3} C \boldsymbol{\varepsilon}_p : \boldsymbol{\varepsilon}_p \operatorname{div} \boldsymbol{\theta} \right\} \, dV$ pour l'écoulement cinématique,

- $\mathbf{G}_{grad-ec} = - \int_{\Gamma_0^r} Hp (\nabla_{\mathbf{x}} p \cdot \boldsymbol{\theta}) dV$ pour l'écouissage isotrope et $\mathbf{G}_{grad-ec} = - \int_{\Gamma_0^r} \frac{2}{3} C \boldsymbol{\varepsilon}_p : (\nabla_{\mathbf{x}} \boldsymbol{\varepsilon}_p \cdot \boldsymbol{\theta}) dV$ pour l'écouissage cinématique.

De plus, on ajoute des indicateurs de la dissipation plastique dans un but comparatif :

- $\mathbf{G}_{tr-plc} = - \int_{\Gamma_0^r} \left\{ \frac{1}{2} \sigma_0 p \operatorname{div} \boldsymbol{\theta} \right\} dV$, un terme de transport de la dissipation plastique,
- $\mathbf{G}_{grad-plc} = - \int_{\Gamma_0^r} \sigma_0 (\nabla_{\mathbf{x}} p \cdot \boldsymbol{\theta}) dV$, un terme de gradient de la dissipation plastique.

On rappelle que le terme \mathbf{G}_{esh-el} est le seul à ne pas contenir de longueur de coupure r_c . Dans tous les autres cas, cette longueur est pris égale à $3h_{min}$ avec h_{min} la taille caractéristique de la plus petite maille à la pointe de fissure.

On réalise alors un premier test avec écouissage isotrope (figure 8.2.1). Les propriétés choisies sont :

- $E = 200000 MPa$,
- $\nu = 0$,
- $\sigma_0 = 300 MPa$,
- $H = 50000 MPa$.

Le chargement et le maillage ont les propriétés suivantes :

- l'amplitude de déplacement imposée est de $2 \mu m$,
- la taille de maille à la pointe de fissure h_{min} est de 10^{-6} ,
- les éléments sont quadratiques,
- le maillage contient 223.300 ddls.

On applique alors au système un cycle relaxant triangulaire (figure 8.2.2) dont deux points nous intéressent :

1. un état de chargement maximal à $t = 1$,
2. un état de décharge complète à $t = 2$.

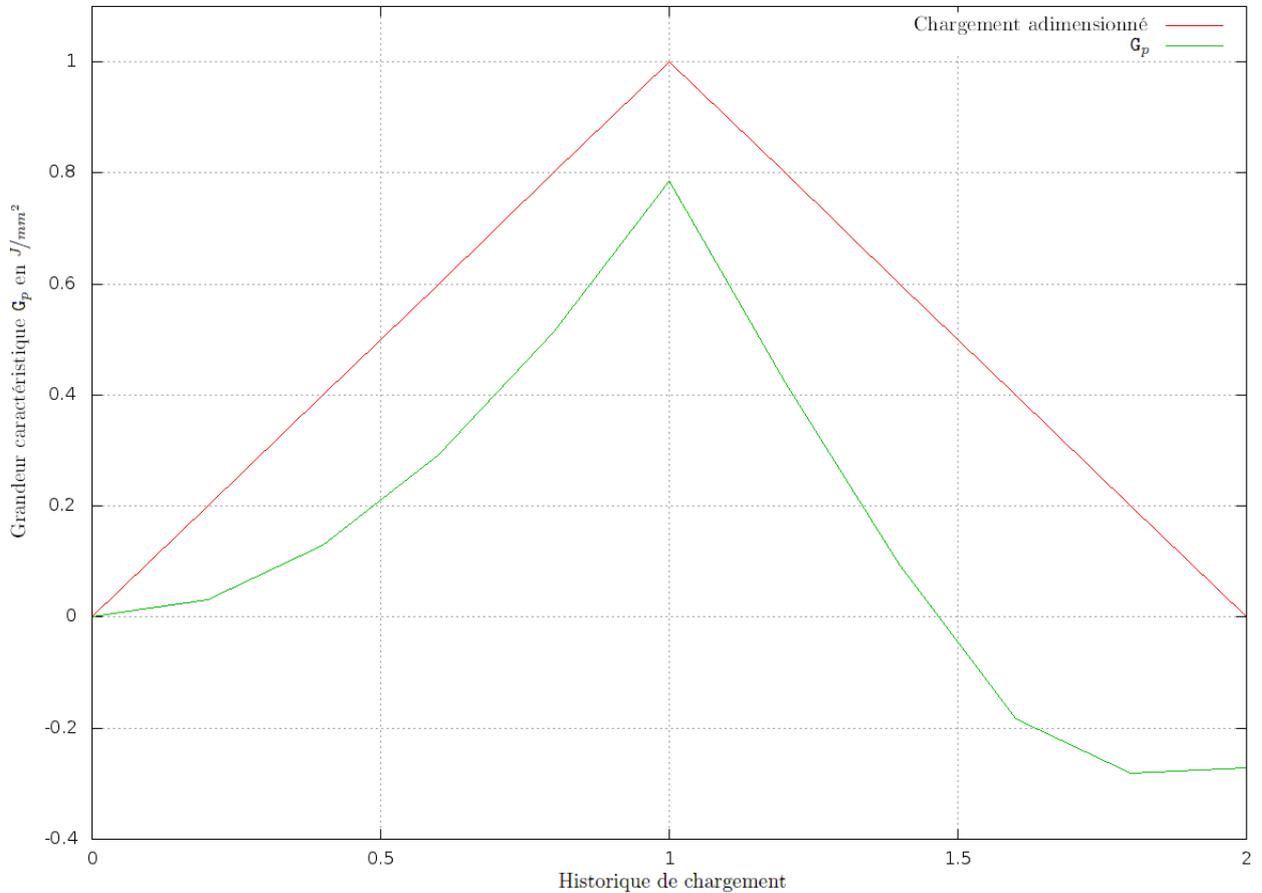


FIGURE 8.2.2: Calcul de $G_p = G_{esh-el} + G_{grad-pl}$ (en vert) en fonction de l'historique de chargement lors d'un cycle charge-décharge (chargement adimensionné identifié en rouge). Les termes d'écroissage ne sont pas représentés car d'un ordre inférieur.

A la figure 8.2.2, on peut observer la grandeur $G_p = G_{esh-el} + G_{grad-pl}$ en fonction de l'historique de chargement lors du cycle relaxant. On remarque alors qu'il y a bien croissance de la grandeur pendant la charge et décroissance durant la décharge. De plus, elle devient négative en fin de décharge. Cette variation pourrait être due aux effets de refermeture. Pour l'instant nous n'irons pas plus avant dans les détails du comportement de cette grandeur mais elle semble qualitativement proche de la notion de force thermodynamique pour la rupture (section 4.2.1). On examine ensuite l'influence des différents termes en fonction de l'historique de chargement (figure 8.2.3).

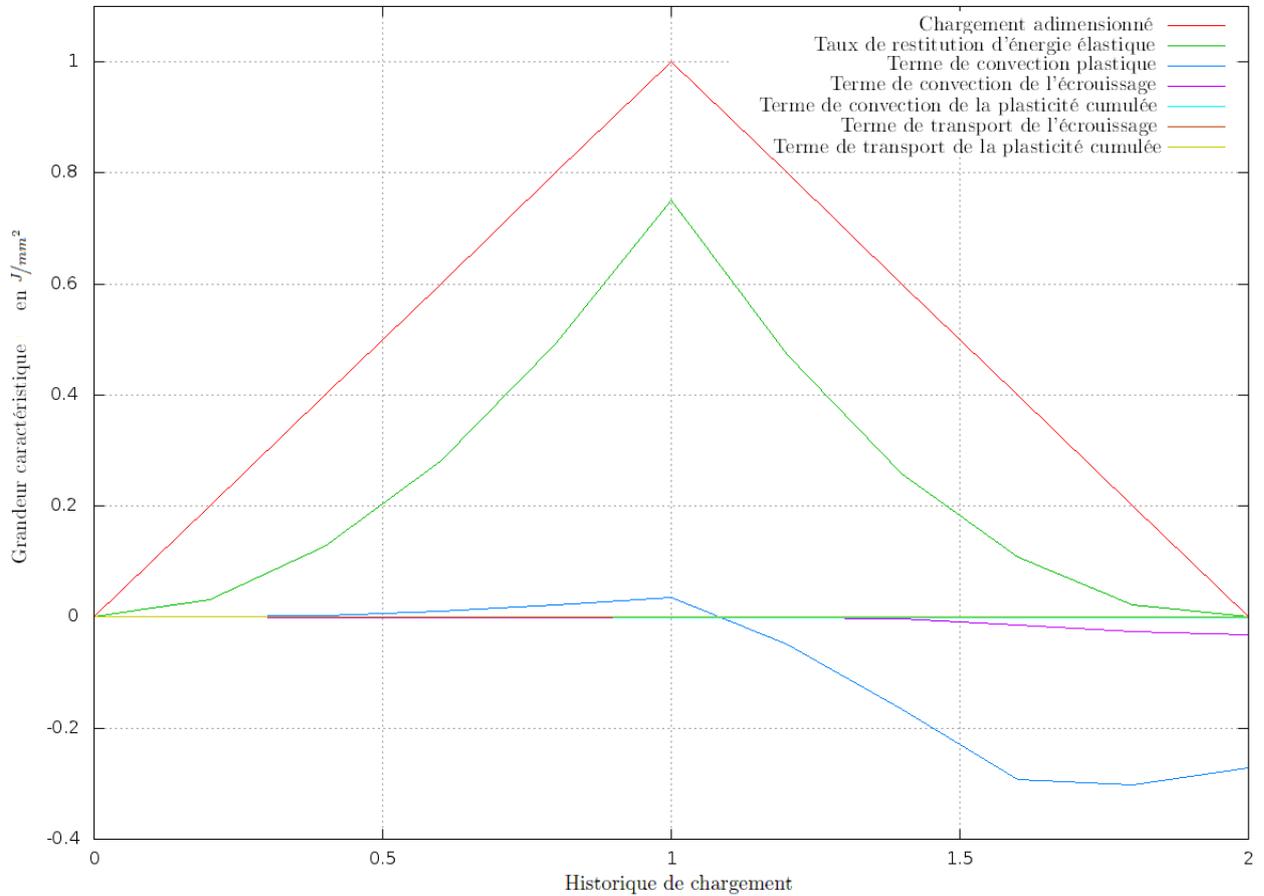


FIGURE 8.2.3: Séparation des différents termes en fonction de l'historique de chargement lors d'un cycle charge-décharge pour une loi isotrope. (En rouge) chargement adimensionné. (En vert) \mathbf{G}_{esh-el} terme d'Eshelby. (En bleu mer) $\mathbf{G}_{grad-pl}$ terme de gradient plastique. (En violet) $\mathbf{G}_{grad-ec}$ terme de gradient d'érouissage. (En bleu clair) $\mathbf{G}_{grad-plc}$ terme indicateur de gradient de plasticité cumulée. (En marron) \mathbf{G}_{tr-ec} terme de transport d'érouissage. (En vert-jaune) \mathbf{G}_{tr-plc} terme indicateur de transport de plasticité cumulée.

On observe alors que $\mathbf{G}_{grad-pl}$ permet d'obtenir une valeur négative dans la grandeur \mathbf{G}_p à la décharge. Les termes d'érouissage ($\mathbf{G}_{grad-ec}$, \mathbf{G}_{tr-ec}), quant à eux, ainsi que les termes indicateurs de plasticité cumulée $\mathbf{G}_{grad-plc}$, \mathbf{G}_{tr-plc} sont visiblement d'un ordre de grandeur inférieur à $\mathbf{G}_{grad-pl}$ et \mathbf{G}_{esh-el} .

On vérifie ensuite l'indépendance au domaine de ces termes et on regroupe entre eux les termes d'érouissage et les termes de plasticité cumulée. Pour cela, on calcule chaque terme en fonction du rayon r_e , délimitant le domaine où $\boldsymbol{\theta}$ est non-nul, en haut de la

charge (figure 8.2.4 et zoom figure 8.2.5) et en bas de la décharge (figure 8.2.6).

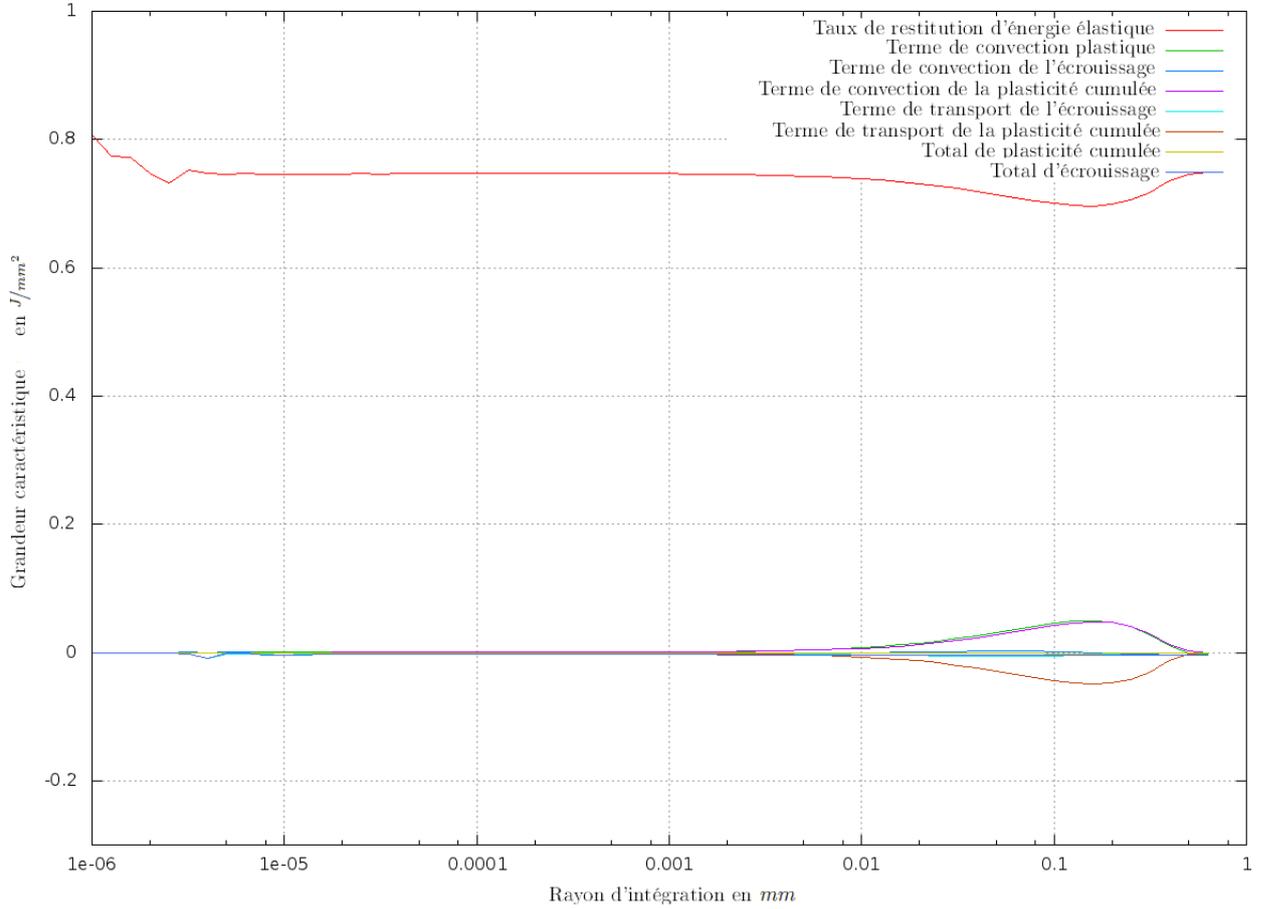


FIGURE 8.2.4: Séparation des différents termes en fonction du rayon r_e au maximum de la charge pour une loi isotrope. (En rouge) \mathbf{G}_{esh-el} terme d'Eshelby correspondant à la courbe haute, $\mathbf{G}_{esh-el} \approx 0.8$. (En vert) $\mathbf{G}_{grad-pl}$ terme de gradient plastique. (En bleu mer) $\mathbf{G}_{grad-ec}$ terme de gradient d'écroutissage. (En violet) $\mathbf{G}_{grad-plc}$ terme indicateur de gradient de plasticité cumulée. (En bleu clair) \mathbf{G}_{tr-ec} terme de transport d'écroutissage. (En marron) \mathbf{G}_{tr-plc} terme indicateur de transport de plasticité cumulée. (En vert-jaune) $\mathbf{G}_{tr-plc} + \mathbf{G}_{grad-plc}$. (En bleu foncé) $\mathbf{G}_{tr-ec} + \mathbf{G}_{grad-ec}$.

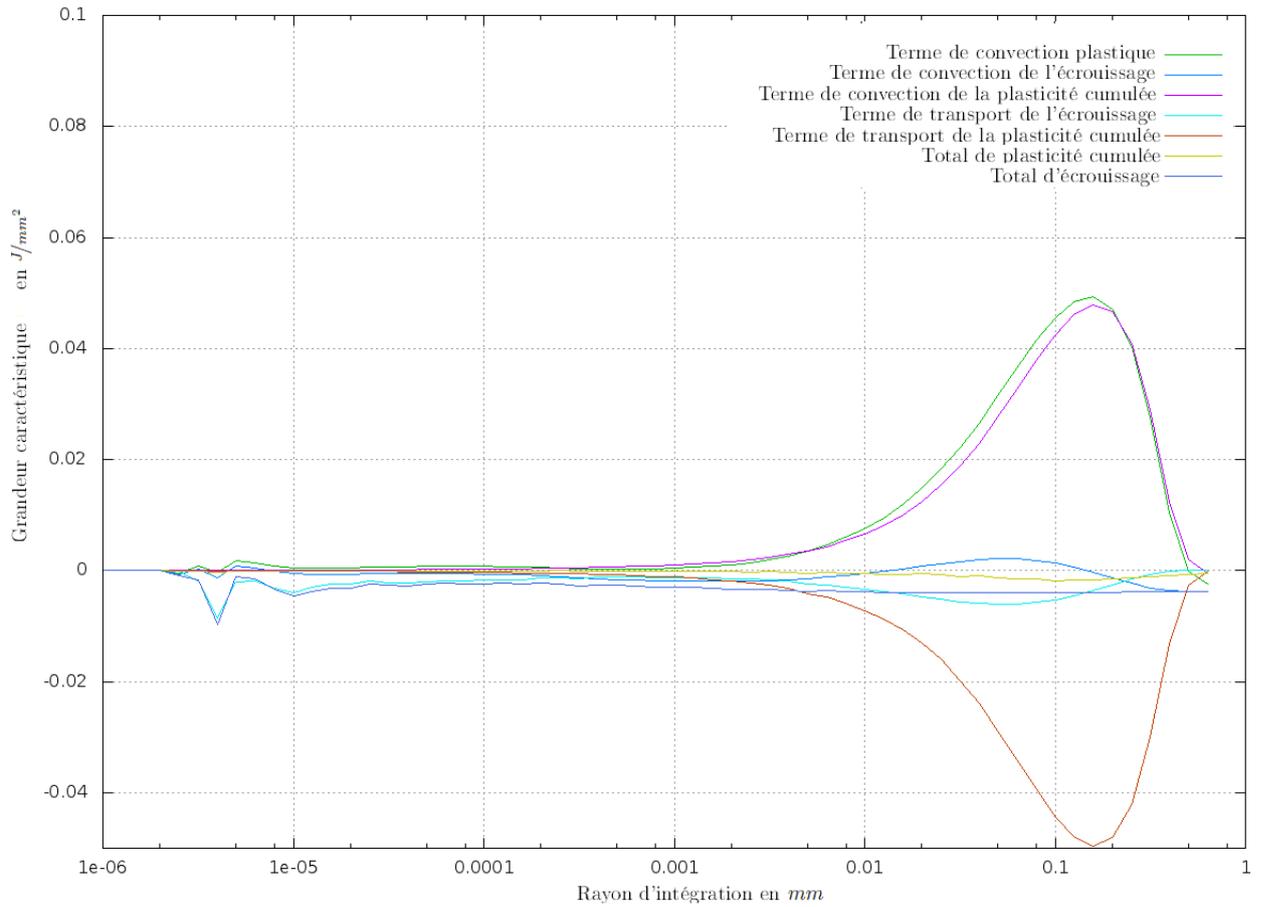


FIGURE 8.2.5: Zoom sur la séparation des différents termes en fonction du rayon r_e au maximum de la charge pour une loi isotrope. (En vert) $\mathbf{G}_{grad-pl}$ terme de gradient plastique. (En bleu mer) $\mathbf{G}_{grad-ec}$ terme de gradient d'écroutissage. (En violet) $\mathbf{G}_{grad-plc}$ terme indicateur de gradient de plasticité cumulée. (En bleu clair) \mathbf{G}_{tr-ec} terme de transport d'écroutissage. (En marron) \mathbf{G}_{tr-plc} terme indicateur de transport de plasticité cumulée. (En vert-jaune) $\mathbf{G}_{tr-plc} + \mathbf{G}_{grad-plc}$. (En bleu foncé) $\mathbf{G}_{tr-ec} + \mathbf{G}_{grad-ec}$.

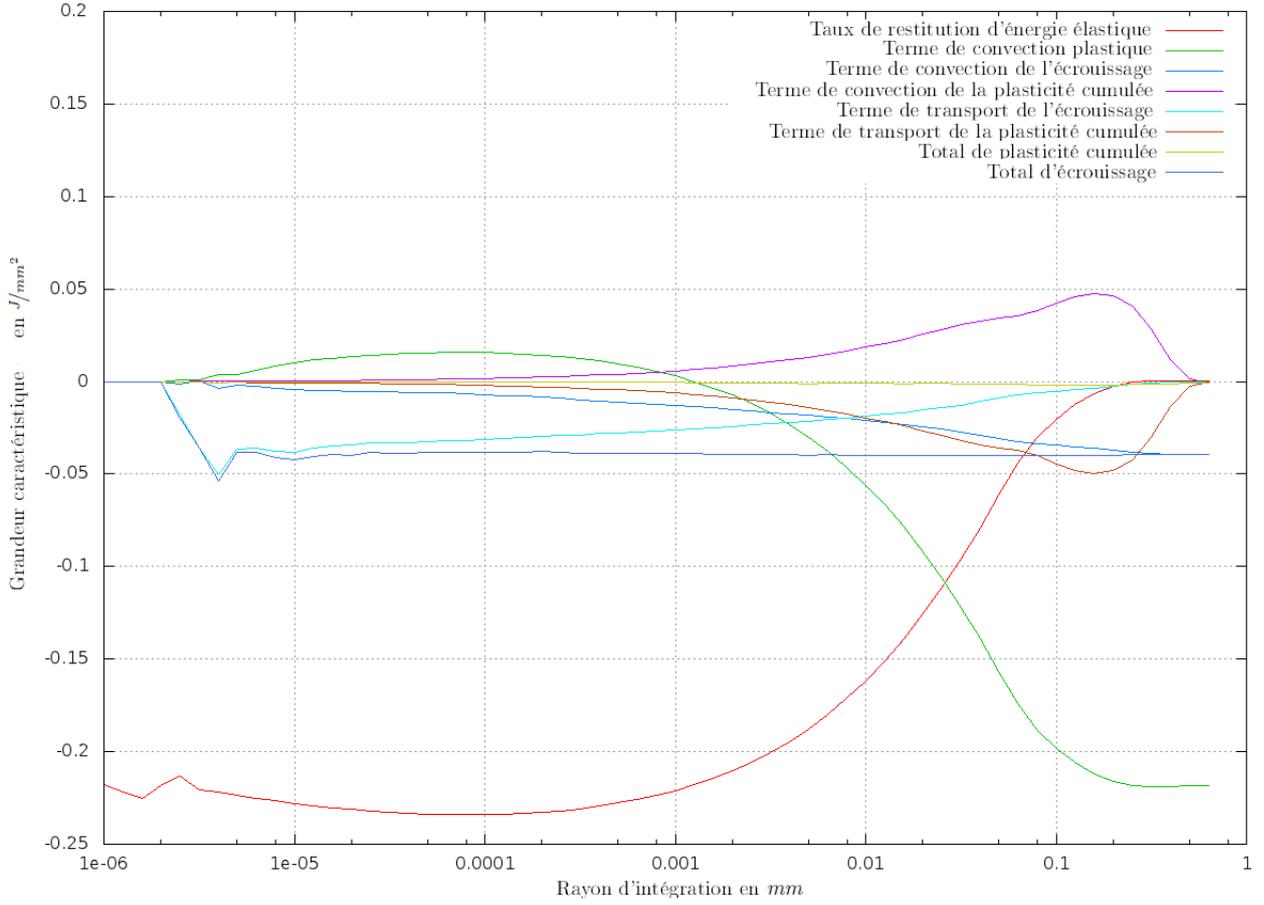


FIGURE 8.2.6: Séparation des différents termes en fonction du rayon r_e au minimum de la décharge pour une loi isotrope. (En rouge) \mathbf{G}_{esh-el} terme d'Eshelby. (En vert) $\mathbf{G}_{grad-pl}$ terme de gradient plastique. (En bleu mer) $\mathbf{G}_{grad-ec}$ terme de gradient d'écroutissage. (En violet) $\mathbf{G}_{grad-plc}$ terme indicateur de gradient de plasticité cumulée. (En bleu clair) \mathbf{G}_{tr-ec} terme de transport d'écroutissage. (En marron) \mathbf{G}_{tr-plc} terme indicateur de transport de plasticité cumulée. (En vert-jaune) $\mathbf{G}_{tr-plc} + \mathbf{G}_{grad-plc}$. (En bleu foncé) $\mathbf{G}_{tr-ec} + \mathbf{G}_{grad-ec}$.

Tout d'abord, on observe que si r_e est trop proche de r_c , le résultat n'est pas indépendant du domaine. Ceci est dû au fait que l'intégration de la quantité est réalisée sur trop peu d'éléments (1 à 3 éléments). Ensuite, on remarque que les regroupements proposés

- $\mathbf{G}_p = \mathbf{G}_{esh-el} + \mathbf{G}_{grad-pl}$,
- $\mathbf{G}_{ec} = \mathbf{G}_{tr-ec} + \mathbf{G}_{grad-ec}$,

semblent indépendants du domaine mais que ce n'est pas le cas de la somme des termes de plasticité cumulée $\mathbf{G}_{plc} = \mathbf{G}_{tr-plc} + \mathbf{G}_{grad-plc}$. On choisit donc de considérer uniquement \mathbf{G}_p

dans la suite car il est indépendant du domaine et aussi parce que le terme d'écrouissage G_{ec} est d'un ordre de grandeur plus petit.

Indépendance au maillage et à r_c

On étudie ensuite l'indépendance au maillage. Trois types de maillage possédant différents facteurs de raffinement sont alors construits (figure 8.2.7).

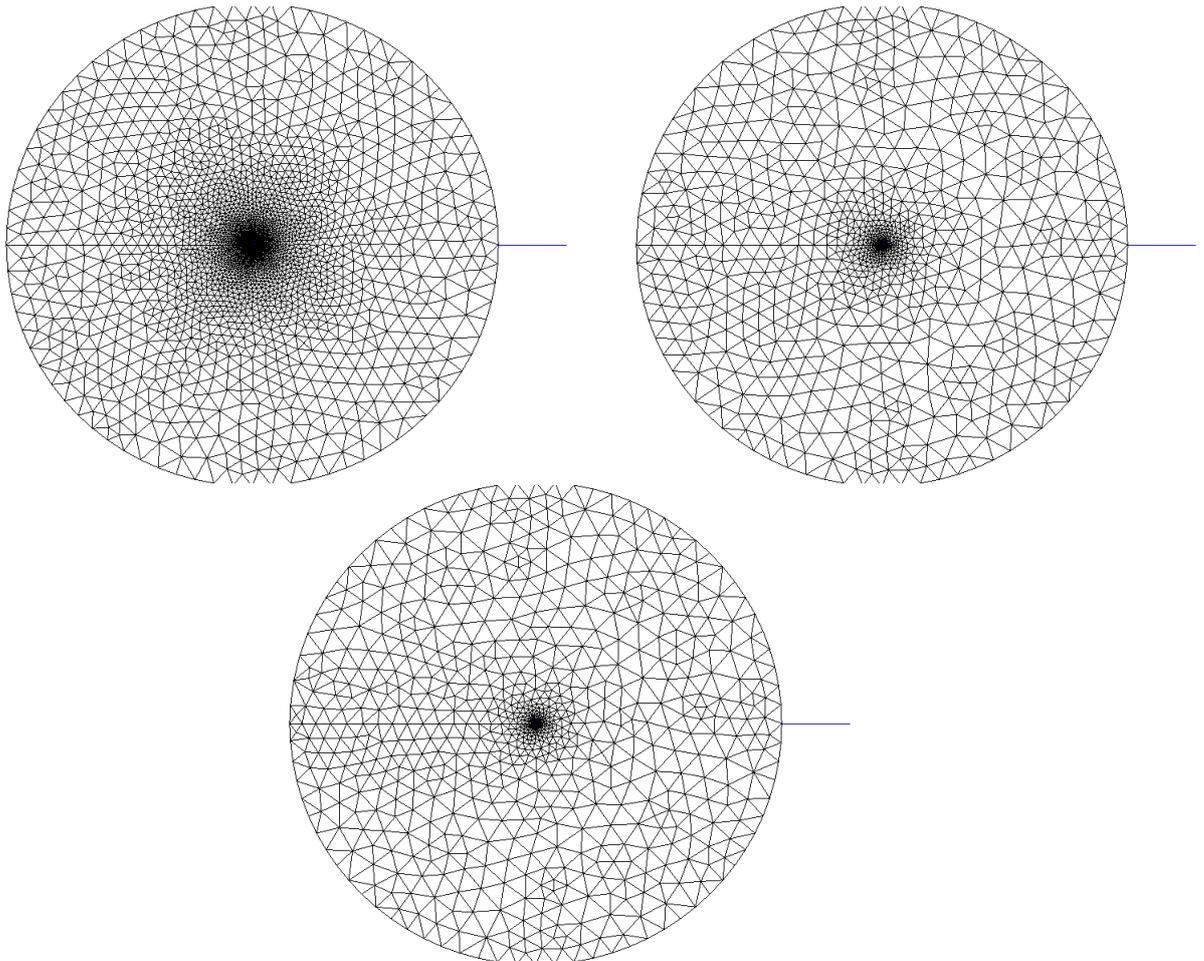


FIGURE 8.2.7: Maillages Z-cracks pour trois facteurs de raffinement (de gauche à droite et de haut en bas) $k = 0.1, 0.23, 0.35$. La taille de maille évolue en $kr \log(kr)$.

Pour chaque facteur de raffinement, on construit ensuite cinq maillages différents par leur valeur de h_{min} ($10^{-6}, 10^{-5}, 10^{-4}, 10^{-3}, 10^{-2}$). Finalement, la valeur du rayon du gradient initial r_c est prise égale à deux éléments de taille h_{min} pour chaque calcul. Ceci nous permet donc de vérifier également l'indépendance à r_c . La seule autre différence

avec le cas de calcul précédent se situe au niveau de la loi de comportement. En effet, en plus des tests en écouissage isotrope, on réalise des tests en écouissage cinématique (de coefficient de durcissement $C = 76000 \text{ MPa}$). Comme précédemment, on applique finalement au système fissuré un cycle relaxant dont deux points nous intéressent :

1. un état de chargement maximal à $t = 1$,
2. un état de décharge complète à $t = 2$.

On trace alors la valeur de G_p en fonction de h_{min} ($\sim r_c/2$) pour les trois facteurs de raffinement à la charge (figure 8.2.8) et à la décharge (figure 8.2.9) pour l'écouissage isotrope ainsi qu'à la charge (figure 8.2.10) et à la décharge (figure 8.2.11) pour l'écouissage cinématique.

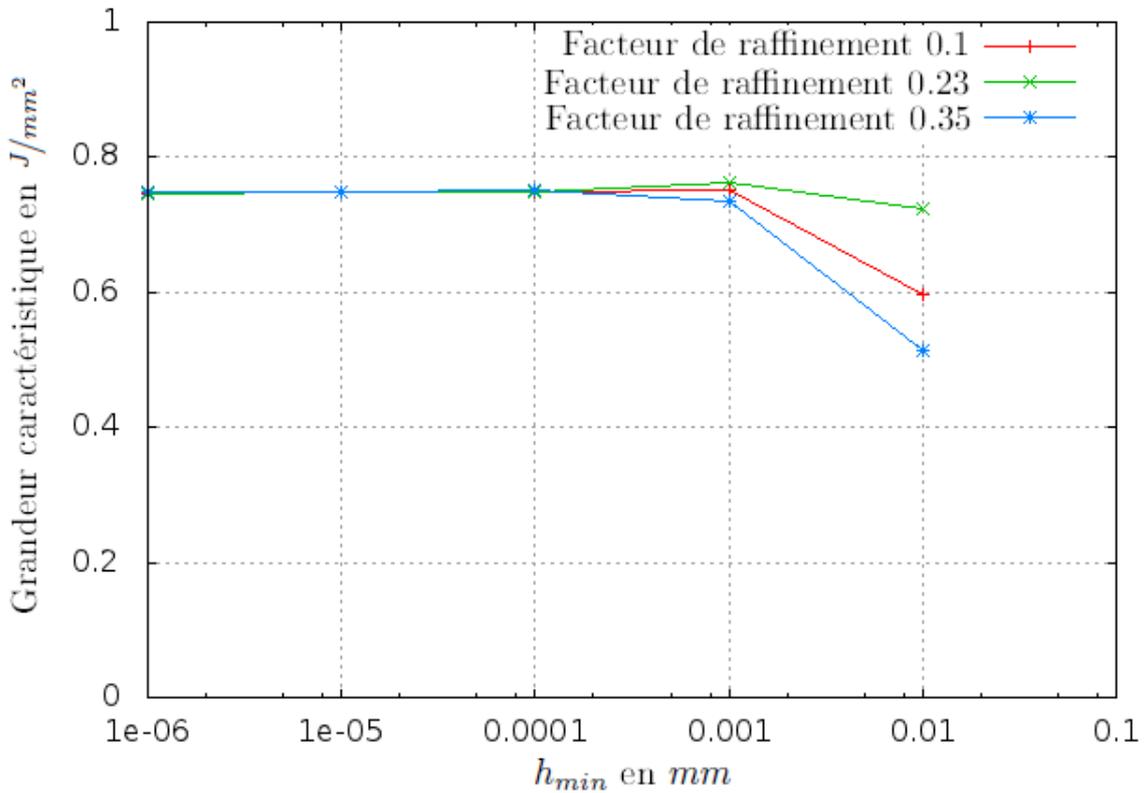


FIGURE 8.2.8: Convergence en h_{min} de G_p pour différents facteurs de raffinement (0.1 en rouge, 0.23 en vert et 0.35 en bleu). Valeurs de la grandeur obtenues au sommet de la charge pour une loi élastoplastique de Von-Mises à écouissage isotrope linéaire.

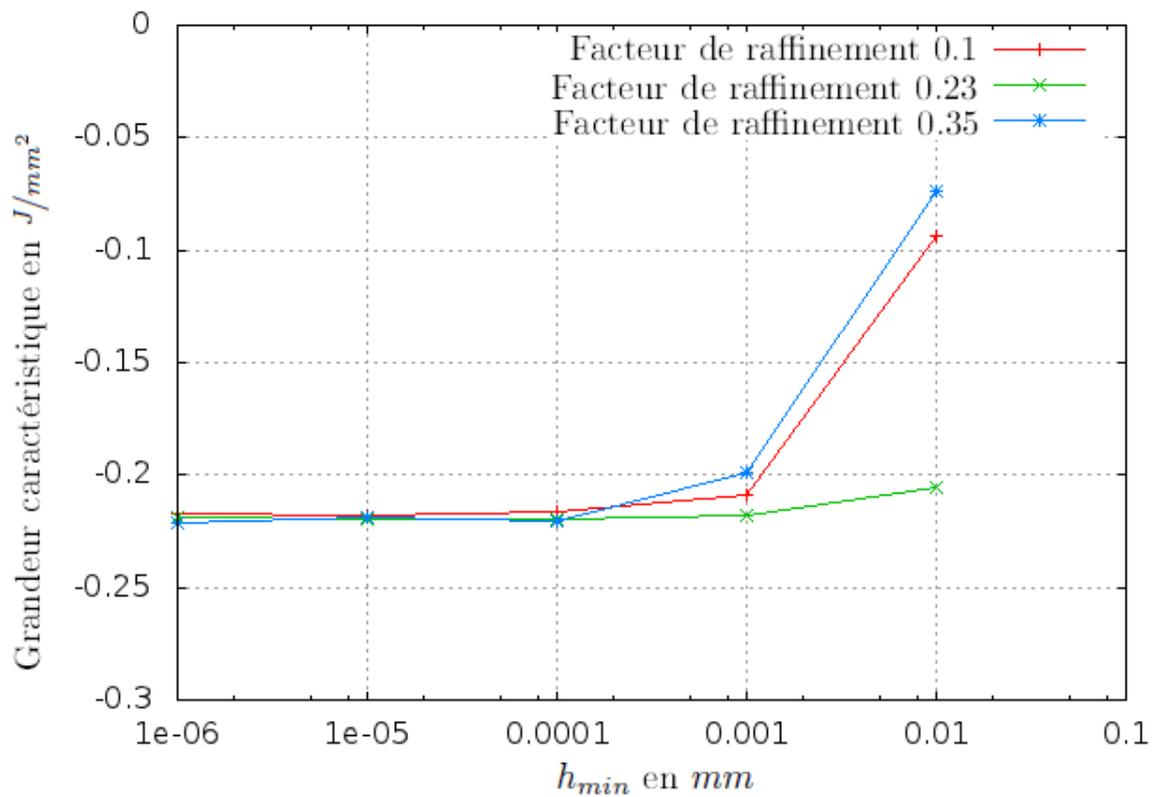


FIGURE 8.2.9: Convergence en h_{min} de G_p pour différents facteurs de raffinement (0.1 en rouge, 0.23 en vert et 0.35 en bleu). Valeurs de la grandeur obtenues en bas de la décharge pour une loi élastoplastique de Von-Mises à écrouissage isotrope linéaire.

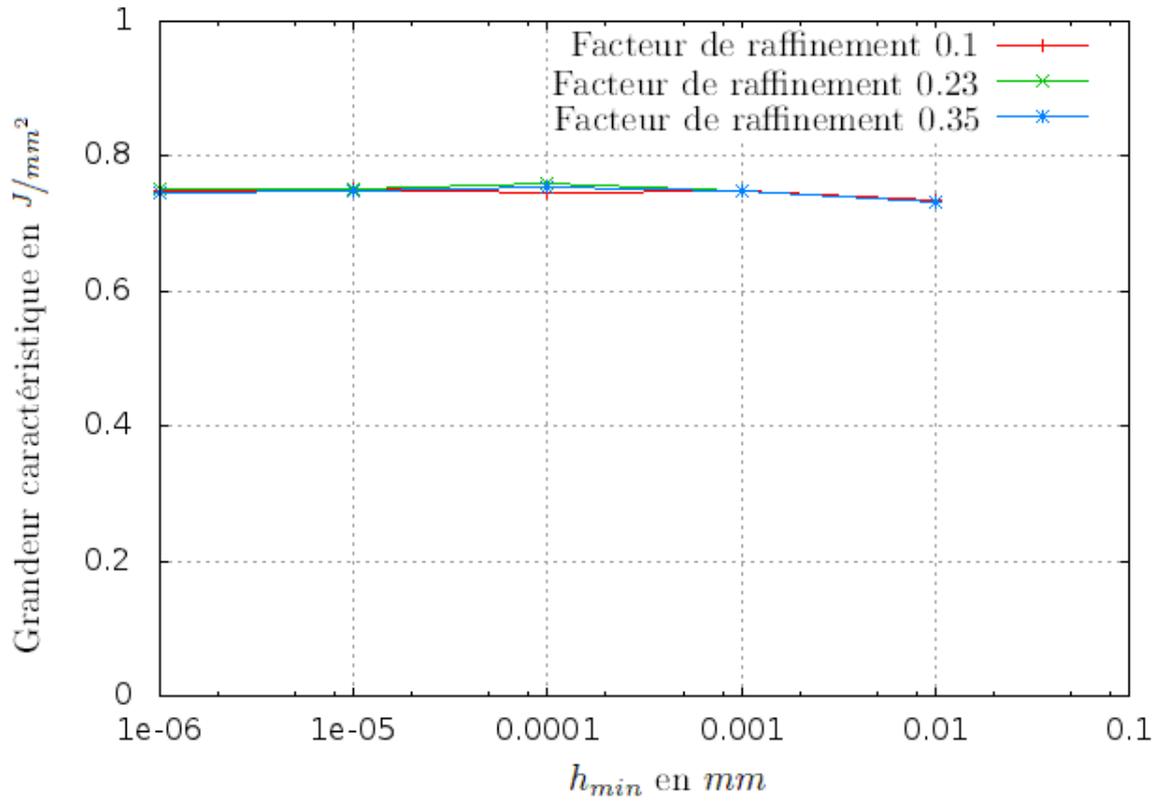


FIGURE 8.2.10: Convergence en h_{min} de G_p pour différents facteurs de raffinement (0.1 en rouge, 0.23 en vert et 0.35 en bleu). Valeurs de la grandeur obtenues au sommet de la charge pour une loi élastoplastique de Von-Mises à écrouissage cinématique linéaire.

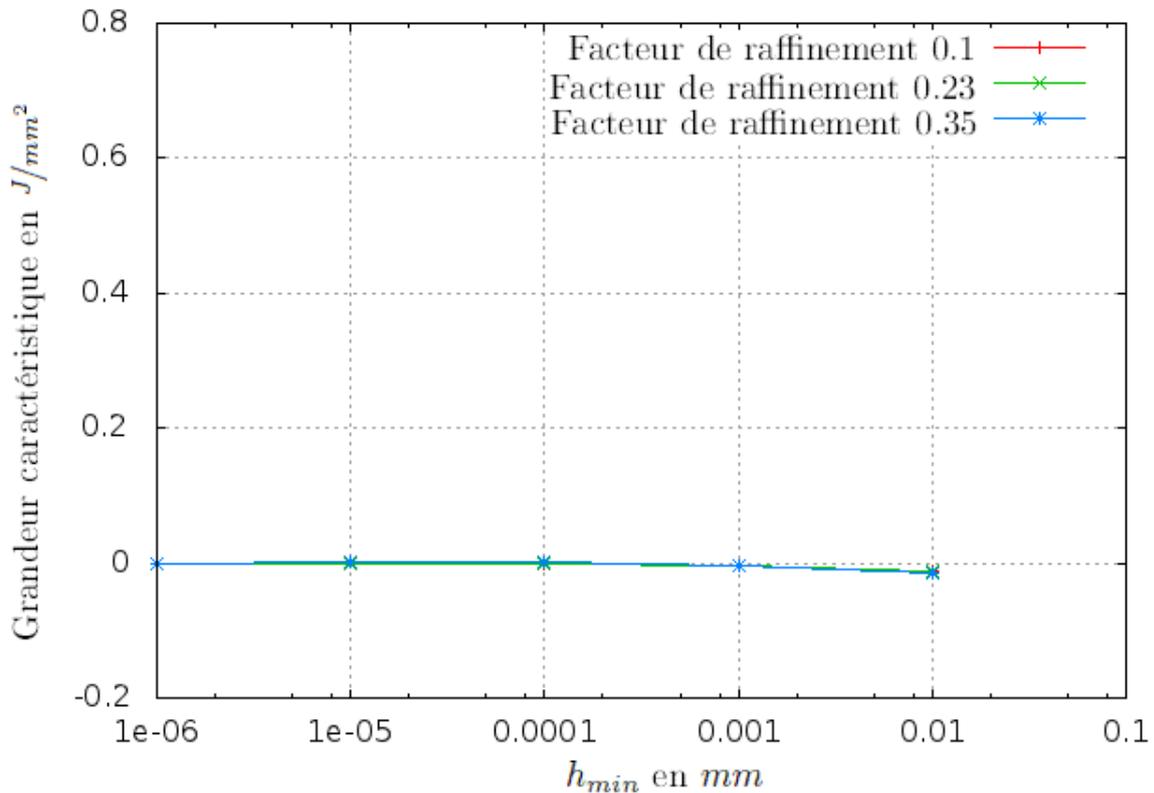


FIGURE 8.2.11: Convergence en h_{min} de G_p pour différents facteurs de raffinement (0.1 en rouge, 0.23 en vert et 0.35 en bleu). Valeurs de la grandeur obtenues en bas de la décharge pour une loi élastoplastique de Von-Mises à écrouissage cinématique linéaire.

Considérons pour commencer le cas d'écrouissage cinématique. Pour cette loi de comportement, il y a indépendance totale au facteur de raffinement ainsi qu'à r_c pour $h_{min} < 10^{-3}$. Ceci semble être également le cas à la charge pour un écrouissage isotrope même si on observe une plus grande dépendance au facteur de raffinement. Pour le cas de la décharge en écrouissage isotrope, même si l'erreur reste faible, il semble que l'on observe différentes valeurs pour $h_{min} = 10^{-6}$.

Pour conclure, nous avons identifié une grandeur caractéristique G_p indépendante du maillage, du raffinement et du domaine avec un comportement similaire à celui d'une force thermodynamique. De plus, cette grandeur contient les termes dominants de la dérivée d'énergie potentielle. La section suivante va nous permettre de synthétiser les caractéristiques de G_p et de voir que lorsqu'on cherche une expression très qualitative de G_p , il est possible de déraffiner et de choisir un r_c grand.

Synthèse sur la grandeur choisie et longueurs caractéristiques pour les calculs de fatigue

On considère ici le même cycle de chargement simple : une montée en charge en traction ($t \in [0, 1]$), puis un retour à une frontière extérieure à déplacement imposé nul ($t \in [1, 2]$). De plus, on étudie toujours les deux mêmes type de matériaux basés sur un comportement élastique isotrope linéaire (module d'Young $E = 200000 \text{ MPa}$, $\nu = 0.3$) avec un seuil de plasticité suivant un critère de Von Mises de limite initiale $\sigma_0 = 300 \text{ MPa}$. Le module de l'écroissage isotrope linéaire est $H = 50000 \text{ MPa}$ et celui de l'écroissage cinématique linéaire $C = 50000 \text{ MPa}$. En se basant sur les deux sections précédentes, on se limite aux calculs des termes :

$$- \mathbf{G}_{esh-el} = \int_{\Gamma_0^r} \left\{ -\frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} : (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_p) \operatorname{div} \boldsymbol{\theta} + \boldsymbol{\sigma} : (\nabla_{\mathbf{x}} \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \boldsymbol{\theta}) \right\} dV,$$

$$- \mathbf{G}_{grad-pl} = \int_{\Gamma_0^r} \boldsymbol{\sigma} : (\nabla_{\mathbf{x}} \boldsymbol{\varepsilon}_p \cdot \boldsymbol{\theta}) dV,$$

et on rappelle que $\mathbf{G}_p = \mathbf{G}_{esh-el} + \mathbf{G}_{grad-pl}$.

Les figures 8.2.12 et 8.2.13 illustrent la valeur des quantités \mathbf{G}_{esh-el} et $\mathbf{G}_{grad-pl}$ pour les deux lois de comportement en utilisant deux types de maillage : l'un très raffiné avec une taille de maille h_{min} atteignant 10^{-6} et l'autre plus grossier 10^{-2} . Le calcul est mené cette fois en quatre étapes :

1. un état de charge intermédiaire $t = 0.5$,
2. un état de chargement maximal $t = 1$,
3. un état de décharge intermédiaire $t = 1.5$,
4. un état de décharge complète $t = 2$.

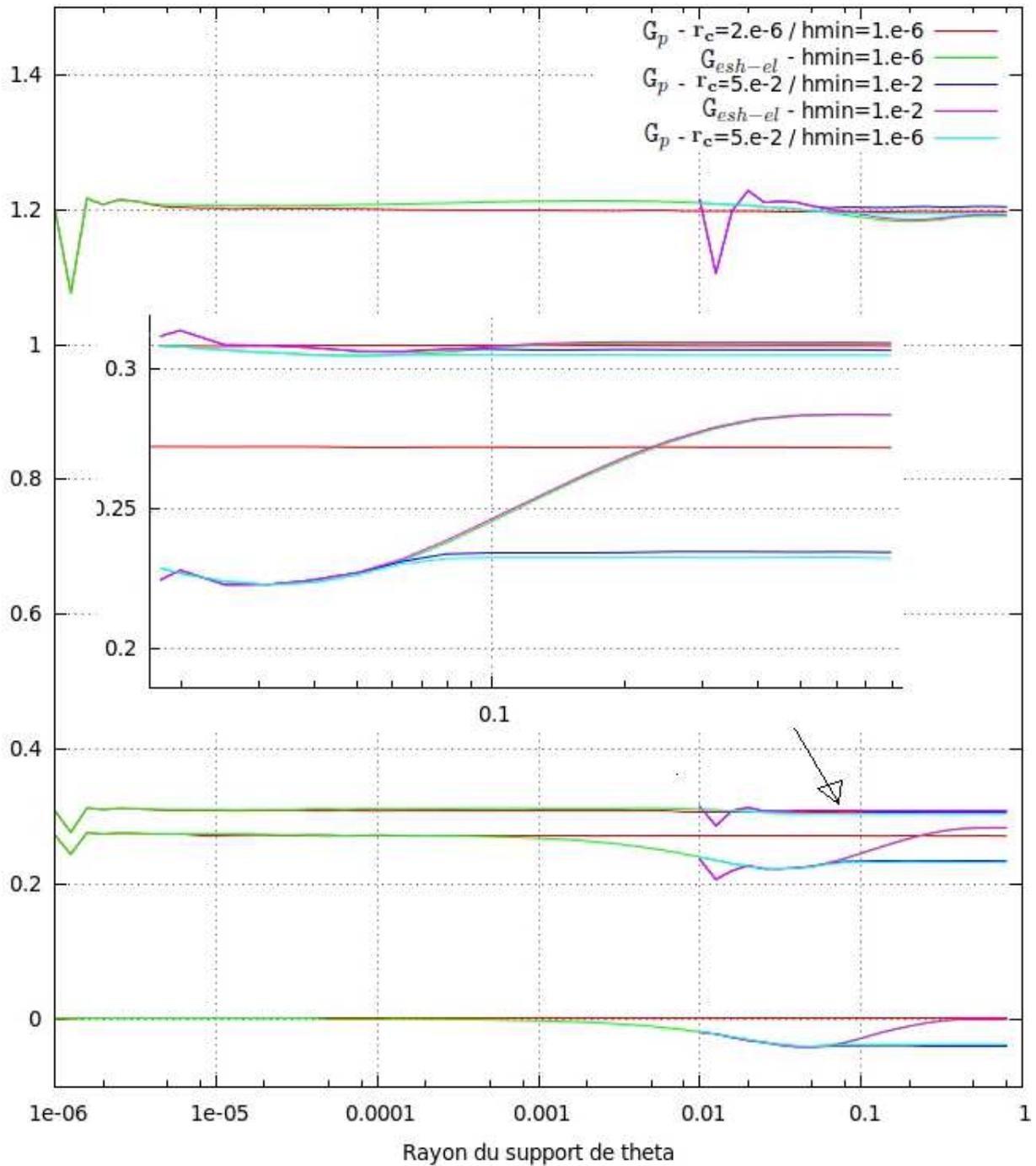


FIGURE 8.2.12: Quatre quantités en fonction du rayon du support de θ r_e et zoom sur une partie de la figure pour la loi d'écoulement cinématique. De haut en bas, courbes à $t = 1$, $t = 0.5$, $t = 1.5$ et $t = 2$ et Zoom. (En rouge) G_p en fonction de r_e pour $r_0 = 2.10^{-6}$ et $h_{min} = 10^{-6}$. (En vert) G_{esh-el} en fonction de r_e pour $h_{min} = 10^{-6}$. (En bleu foncé) G_p en fonction de r_e pour $r_c = 5.10^{-2}$ et $h_{min} = 10^{-2}$. (En violet) G_{esh-el} en fonction de r_e pour $h_{min} = 10^{-2}$. (En bleu clair) G_p en fonction de r_e pour $r_c = 5.10^{-2}$ et $h_{min} = 10^{-6}$.

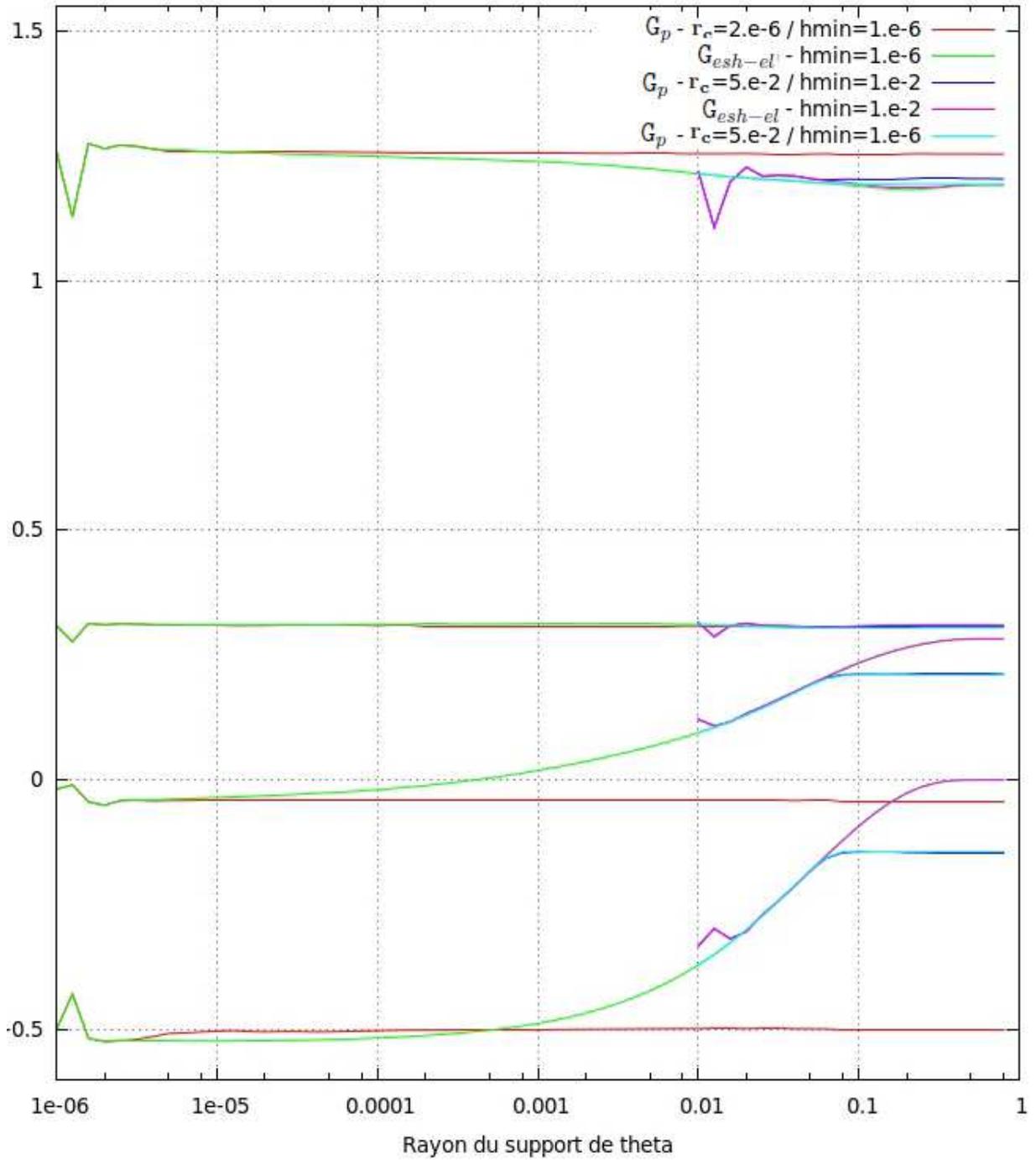


FIGURE 8.2.13: Quatre quantités en fonction du rayon du support de θ r_e pour la loi d'écroissage isotrope. De haut en bas, courbes à $t = 1$, $t = 0.5$, $t = 1.5$ et $t = 2$. (En rouge) G_p en fonction de r_e pour $r_c = 2.10^{-6}$ et $h_{min} = 10^{-6}$. (En vert) $G_{esh-el'}$ en fonction de r_e pour $h_{min} = 10^{-6}$. (En bleu foncé) G_p en fonction de r_e pour $r_c = 5.10^{-2}$ et $h_{min} = 10^{-2}$. (En violet) $G_{esh-el'}$ en fonction de r_e pour $h_{min} = 10^{-2}$. (En bleu clair) G_p en fonction de r_e pour $r_c = 5.10^{-2}$ et $h_{min} = 10^{-6}$.

Ainsi plusieurs courbes quasi horizontales sont tracées. En résumé, elles représentent soit des valeurs de G_{esh-el} (courbe verte maillage fin, et violette maillage grossier), soit des valeurs de G_p (courbe rouge maillage fin avec $r_c = 2 \cdot 10^{-6}$, bleu foncé et bleu clair pour maillage fin et grossier avec $r_c = 5 \cdot 10^{-2}$). D'un point de vue numérique, on a remarqué qu'à cause de la méthode de calcul du gradient de variable interne, on ne pouvait pas prendre le paramètre du modèle r_c inférieur à $\frac{h_{min}}{2}$. Néanmoins, il est important qu'il soit bien plus petit que la taille de la zone plastique. On choisit alors ici et dans la suite de le prendre égal à un dixième du rayon plastique et supérieur à $\frac{h_{min}}{2}$. Dans le cas test présenté, le rayon de la zone plastique vaut 0.5. On a donc pris $r_c = 5 \cdot 10^{-2}$. On remarque alors que les courbes en bleu foncé et bleu clair sont très proches et invariantes. Quelque soit le modèle, pour les deux états de montée en charge, on obtient des résultats identiques, avec une quasi-invariance de l'intégrale G_p pour de très faibles rayons d'intégration (1/1000 du rayon plastique).

Pour contourner la difficulté de détermination de la valeur du gradient initial, on peut observer que pour les deux types de comportement, d'une part, une fois la valeur r_c choisie, la valeur de G_p reste toujours invariante, et d'autre part, le calcul de G_{esh-el} mené sur un maillage beaucoup plus grossier, coïncide exactement dans sa zone de validité avec le résultat sur maillage fin. Ainsi, même si la valeur initiale (pour $r < r_c$) de la grandeur en gradient reste une indétermination, il est possible de définir une valeur stable de l'intégrale G_p associée à une valeur de r_c que l'on peut assimiler à une longueur caractéristique représentative, par exemple, de l'échelle à laquelle a lieu le phénomène de refermeture de fissure en décharge.

On propose ainsi, ici, de fixer cette longueur à $R_c = 0.05$ ce qui correspond dans cet exemple à environ 1/5 ème du rayon plastique. Il est possible avec cette valeur d'obtenir un résultat très proche de la solution de référence (du maillage fin), avec le maillage grossier beaucoup moins coûteux, tout en restant parfaitement invariant pour $r_e > R_c$. Sur ce premier exemple, il semble observable que la quantité ainsi définie $G_P^{R_c}$ est sensible à l'histoire du chargement, puisque les valeurs ne sont pas identiques dans des états de sollicitation d'amplitude identique dans les phases de charge et de décharge (avec une valeur qui devient même négative en décharge complète - qui coïncide avec un éventuel état de compression résultant de la plasticité engendrée en traction).

8.2.3 Comportement de la quantité $G_P^{R_c}$ sous chargement dans le cas d'une fissure fixe

Pour valider l'intérêt d'une telle grandeur pour des problématiques de fatigue, on considère, dans un premier temps, une sollicitation plus complexe agissant sur notre problème test : il s'agit d'une mission de chargement avec surcharge (décrite en trait continu à la figure 8.2.14). Deux charges/décharges sont appliquées avec un premier niveau de sollicitation, une surcharge de 50% est ensuite imposée, avant deux nouveaux cycles d'amplitude initiale. On calcule alors la quantité $G_P^{R_c=0.05}$ pour deux maillages

correspondant aux calculs de la section précédente : un maillage grossier avec 6892 degrés de liberté, un maillage fin avec 64088 degrés de liberté.

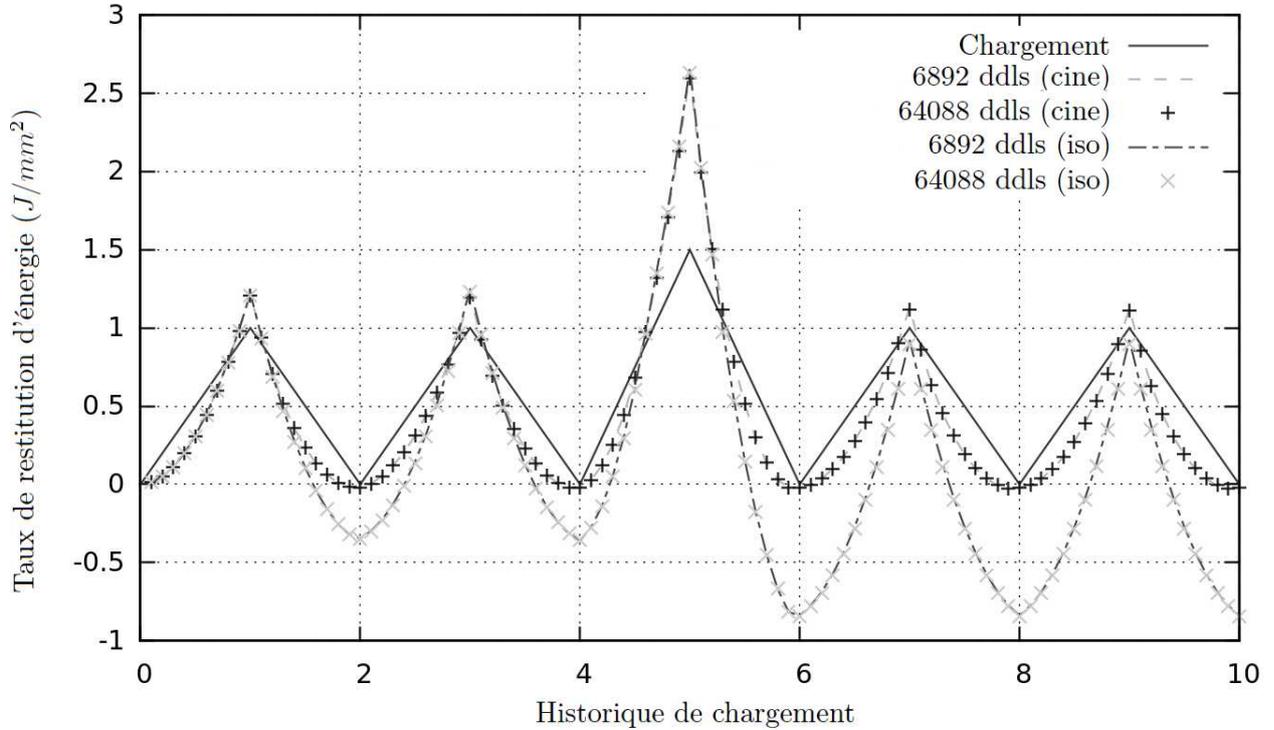


FIGURE 8.2.14: $G_P^{R_c=0.05}$ calculé lors d'un chargement avec surcharge, comparaison entre modèles de comportement pour maillages fin ou grossier. (En traits continus noir) chargement normalisé. (En tirets) $G_P^{R_c=0.05}$ pour une loi cinématique et un maillage grossier (6892 ddls). (En plus) $G_P^{R_c=0.05}$ pour une loi cinématique et un maillage fin (64088 ddls). (En tirets et points) $G_P^{R_0=0.05}$ pour une loi isotrope et un maillage grossier (6892 ddls). (En croix) $G_P^{R_c=0.05}$ pour une loi isotrope et un maillage fin (64088 ddls).

Dans ces conditions, on observe un fort effet de la surcharge en utilisant un comportement élastoplastique à écrouissage isotrope : une réduction de plus de 25% de la valeur maximale dans le cycle de chargement initial est observée. De plus, il n'y a pas de différence significative entre les valeurs obtenues avec les maillages fin et grossier.

8.2.4 Comportement de la quantité $G_P^{R_c}$ sous chargement lors de la propagation

Dans cette dernière section de validation de la quantité $G_P^{R_c}$, on propose de montrer qualitativement son intérêt pour un cas de propagation en plasticité confinée avec sur-

charge. On considère un problème 2D sur une éprouvette carrée de dimensions 10 mm \times 10 mm possédant un trou de rayon 1 mm en son centre (figure 8.2.15). La structure possède un comportement élastoplastique à écrouissage isotrope linéaire décrit dans la section précédente. Un chargement cyclique de traction verticale avec un effort d'amplitude 100 MPa est appliqué sur les parties supérieure et inférieure.

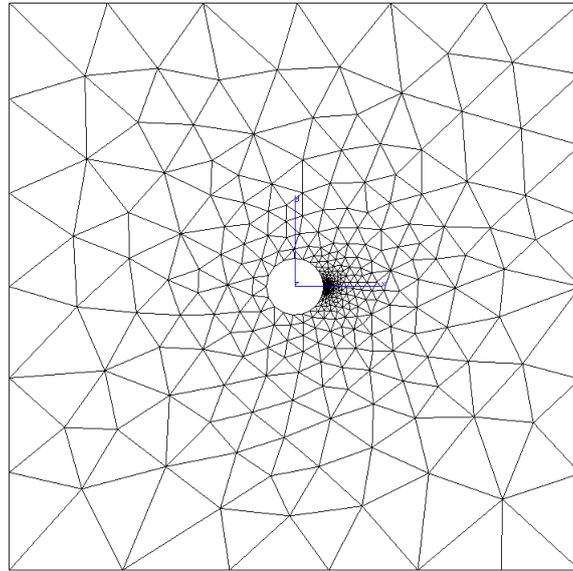


FIGURE 8.2.15: Eprouvette percée et fissurée (au voisinage du trou à droite) soumise à un chargement de traction verticale appliqué en déplacements imposés.

Une fissure de longueur initiale 0.1 mm est présente sur le côté droit de l'éprouvette. On choisit d'utiliser une loi de Paris caractérisée par un coefficient $C = 10^{-11}$ et un exposant $m = 3$. Cette loi de propagation est alimentée par une valeur en variation de $G_P^{R_c}$ pour $R_c = 0.01$ mm transformée en facteur d'intensité de contrainte K sous la forme

$$K = \sqrt{\frac{EG_P^{R_c}}{1 - \nu^2}}, \quad \frac{\Delta a}{\Delta N} = C (\Delta K)^m, \quad (8.2.9)$$

où a est la longueur d'avancée de fissure, N le numéro du cycle, et $\Delta K = K_{max} - K_{min}$ exprimé en $MPa\sqrt{mm}$.

Pour réaliser cette simulation, nous avons utilisé, en plus du module Z-cracks, un remailage adaptatif de la fissure. la taille d'éléments minimum est de 0.005 mm dans toute l'étude. En pratique, lors de la propagation, un incrément d'avancée de fissure Δa est défini, un chargement est effectué, et à partir du ΔK calculé, un incrément de mission ΔN correspondant est déterminé. Le maillage est alors transformé de façon à avancer le front de fissure.

La première validation a conduit sur un cas de chargement triangulaire sans surcharge de 0 à 100 MPa, à étudier la convergence de la simulation en fonction de l'incrément d'avancée de fissure Δa . La figure 8.2.16 montre une très nette surévaluation de la valeur de ΔK pour un pas d'avancée de fissure de 0.05 mm, qui produit une évolution beaucoup plus rapide de la fissure (cf. figure 8.2.17). Il semble, que si l'avancée est trop importante, le calcul n'est pas sensible à la traînée plastique qui fait chuter la valeur du facteur d'environ 15%, comme on peut l'observer sur les courbes avec des incréments d'avancée de fissure de 0.01 mm ou 0.005 mm, qui produisent des valeurs voisines (bien qu'oscillantes) et des vitesses de propagation très proches.

Le cycle de chargement est ensuite modifié : à chaque fois que la fissure progresse de 0.1 mm, une surcharge de contrainte de 50% est appliquée. En utilisant le paramètre proposé au sein de la même loi de Paris et un pas d'avancée de fissure suffisamment fin, il est visiblement possible de rendre compte qualitativement d'un ralentissement de la fissure (observable par la diminution de la valeur de ΔK juste après la surcharge), en accord avec les observations expérimentales habituelles (voir [135] par exemple).

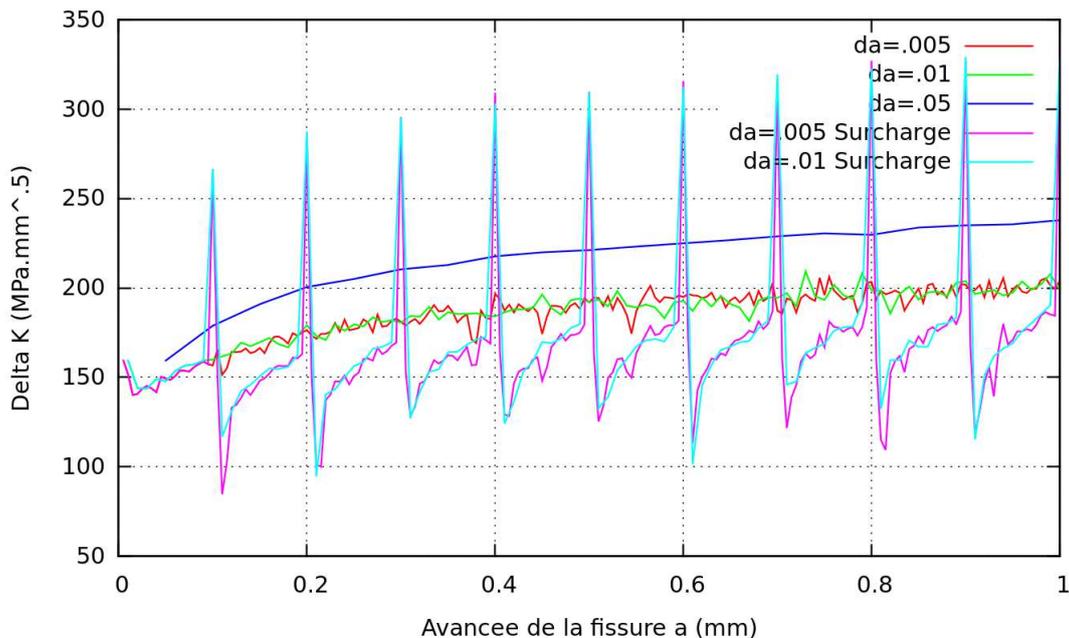


FIGURE 8.2.16: Comparaison des valeurs de ΔK ($MPa\sqrt{mm}$) en fonction de l'avancée de fissure a (mm). (En rouge) $\Delta a = 0.005$ mm sans surcharge. (En vert) $\Delta a = 0.01$ mm sans surcharge. (En bleu foncé) $\Delta a = 0.05$ mm sans surcharge. (En violet) $\Delta a = 0.005$ mm avec surcharge de 50% tous les 0.1 mm de propagation. (En bleu clair) $\Delta a = 0.01$ mm avec surcharge de 50% tous les 0.1 mm de propagation.

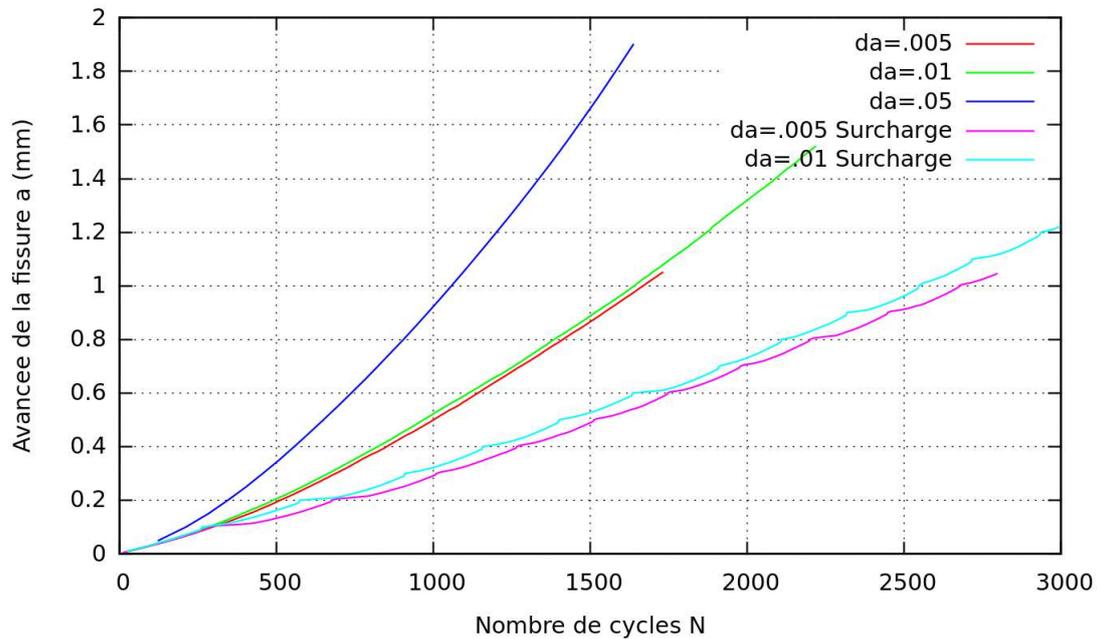


FIGURE 8.2.17: Comparaison des avancées de fissure a (mm) en fonction du nombre de cycles N . (En rouge) $\Delta a = 0.005$ mm sans surcharge. (En vert) $\Delta a = 0.01$ mm sans surcharge. (En bleu foncé) $\Delta a = 0.05$ mm sans surcharge. (En violet) $\Delta a = 0.005$ mm avec surcharge de 50% tous les 0.1 mm de propagation. (En bleu clair) $\Delta a = 0.01$ mm avec surcharge de 50% tous les 0.1 mm de propagation.

8.3 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons montré que lors de la mise en œuvre des grandeurs caractéristiques explicites, deux cas étaient à distinguer : le cas où les variables internes ne sont pas singulières, et le cas où elles le sont. En ce qui concerne le premier cas, la grandeur caractéristique utilisée peut être comprise comme le taux de restitution d'énergie du système et sa robustesse dépend de la précision du calcul du gradient de variables internes. A contrario, le second cas s'est avéré bien plus difficile à exploiter puisque nous avons identifié une difficulté numérique dans le calcul du gradient initial. Néanmoins, en commun avec Vincent Riolo et Vincent Chiaruttini, nous avons proposé la grandeur $G_P^{R_0}$ avec R_0 une longueur caractéristique. Les premiers résultats obtenus semblent indiquer que cette grandeur est qualitativement représentative des effets de la plasticité sur la fissuration en fatigue.

**Modélisation constitutive de la
cristallisation sous contrainte dans le
caoutchouc**

Le comportement sous chargement cyclique du caoutchouc naturel reste difficile à cerner du fait de sa faculté à cristalliser sous contrainte. Cette évolution de la microstructure s'accompagne d'une importante amélioration de la durée de vie des pièces en fatigue. Même si le phénomène de cristallisation sous contrainte de ce matériau est encore mal connu, certains travaux ont apporté un éclairage sur ce phénomène ([68], [132], [12]). Ces travaux ont concerné aussi bien les sollicitations monotones (cristallisation sous chargement et sa disparition lors de la décharge, rôle de la relaxation moléculaire, influence sur les chaînes amorphes), que cycliques (cumul des cristaux au cours des cycles, influence du rapport de charge, dissipation). On note les propriétés suivantes :

- L'alignement des chaînes polymères lors de la déformation influe sur la température de fusion du caoutchouc et crée le phénomène de cristallisation sous contrainte [48].
- Il y a cumul des cristaux sous chargements cycliques et plus particulièrement pour un rapport de charge positif et élevé ([132], [12]).
- La cristallisation modifie fortement la propagation d'une fissure en fatigue [132].

Dans cette partie, nous voulons obtenir une loi de comportement constitutive de la cristallisation sous contrainte dans le cadre du modèle de micro-sphère [53]. Ce modèle doit nous permettre de caractériser :

- la relation contrainte-déformation (effet relaxant et durcissant, hystérèse),
- l'anisotropie des réponses locales en prenant en compte l'histoire locale des directions principales de déformation,
- les effets localement induits par la cristallisation en fond de fissure.

Dans ce cadre de travail, la difficulté principale vient de l'absence de loi de comportement constitutive thermodynamiquement cohérente et pouvant s'appliquer à des simulations 3D comportant un grand nombre de degrés de liberté. On peut néanmoins citer deux tentatives de construction d'un modèle constitutif contemporaines de ce manuscrit ([74] qui se basent sur une cinétique de nucléation appliquée à une chaîne représentative dans chaque direction de l'espace et [119] qui cherchent une représentation mésomécanique d'une cristallite dans un réseau chargé). De plus, les différents mécanismes constitutifs proposés dans la littérature diffèrent sur de nombreux points [68]. Dans un premier temps, on se propose alors de faire un état de l'art des observations expérimentales en insistant sur les aspects constitutifs du comportement cyclique. Ensuite, on construit une loi de comportement 1D thermodynamiquement cohérente basée sur les mécanismes constitutifs que l'on a extrait des observations. Cette loi est alors intégrée au concept de micro-sphère pour lui donner son aspect anisotrope. Enfin, on compare la loi à plusieurs mesures expérimentales sur un panel exhaustif de chargements.

Chapitre 9

Observations expérimentales et mécanismes en cristallisation sous contrainte

La cristallisation sous contrainte est un phénomène de transformation de phase induit par la déformation. Celui-ci a été découvert par Katz [70] en 1925 sur du caoutchouc en déformation uni-axiale. On sait également que le caoutchouc non déformé peut cristalliser ; ce phénomène est nommé cristallisation induite par la température [10] et n'a pas lieu à température ambiante. On ne l'étudie donc pas dans la suite.

Dans la première section, on s'intéresse aux expériences fondamentales permettant de comprendre ce phénomène (section 9.1). Ensuite, on détaille le comportement constitutif du caoutchouc cristallisant sous contrainte (section 9.2). Enfin, on propose plusieurs mécanismes permettant d'expliquer le comportement observé (section 9.3).

Nous notons également que le travail expérimental présenté dans ce chapitre est basé sur les synthèses et études expérimentales de Huneau [68], Beurrot [12] et Marchal [91].

9.1 Expériences fondamentales

Depuis 1940, de nombreuses techniques expérimentales ont été utilisées pour étudier et comprendre la cristallisation sous contrainte :

- les mesures de variation de volume [10],
- la diffraction par rayons X aux grands angles et aux petits angles [68],
- les mesures de relaxation de la contrainte [51],
- la microscopie par transmission d'électrons [88],
- la biréfringence [161],
- la résonance magnétique nucléaire [91],
- la spectroscopie de Raman [62].

Dans cette section, on se concentre sur quatre types d'expériences fondamentales :

- la diffraction par rayons X aux grands angles et la microscopie par transmission d'électrons pour caractériser la structure de la phase cristalline et sa morphologie (section 9.1.1),
- l'essai de relaxation pour caractériser la cinétique de la cristallisation sous contrainte (section 9.1.2),
- la résonance magnétique nucléaire pour caractériser la phase amorphe (section 9.1.3),
- l'analyse d'un cycle de chargement (contrainte et cristallinité en fonction de la déformation) pour caractériser le réseau semi-cristallin (section 9.1.4).

9.1.1 Caractérisation de la phase cristalline

Analyse des tâches de diffraction par rayons-X aux grands angles

La diffraction rayons-X aux grands angles est une technique utilisée pour déterminer la structure cristallographique des polymères. Elle permet d'obtenir des clichés de diffraction (figure 9.1.1). Ces clichés sont obtenus à partir de données expérimentales consistant en une carte d'intensité que nous noterons par la suite $I(2\theta, \beta)$ où les angles 2θ et β sont représentées à la figure 9.1.2.

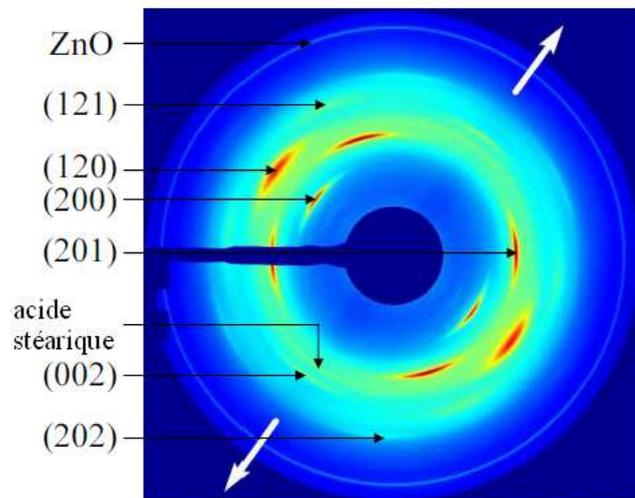


FIGURE 9.1.1: Exemple d'un cliché de diffraction pour un échantillon tendu en traction simple sur du caoutchouc naturel. Les flèches blanches montrent la direction de traction. Les indices de Miller des plans correspondant aux arcs de diffraction sont également indiqués (figure tirée de [12]).

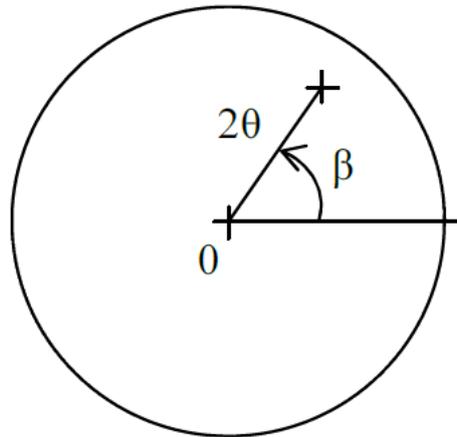


FIGURE 9.1.2: Définition de l'angle de Bragg 2θ et de l'angle azimuthal β (figure tirée de [12]).

Dans la figure 9.1.1, le caoutchouc est en élongation uni-axiale et le faisceau est normal à l'échantillon. Le caoutchouc sous tension peut alors être assimilé à un système dans lequel les cristallites ont une orientation aléatoire. Pour chaque direction de diffraction potentielle, si on trouve des cristallites présentant la bonne orientation, on obtient des cercles de diffraction. Si l'échantillon est soumis à une traction, les cristallites adoptent préférentiellement certaines directions et les anneaux de diffraction se structurent. On obtient alors un cliché dont l'analyse permet de remonter à plusieurs propriétés de la phase cristalline (figure 9.1.3).

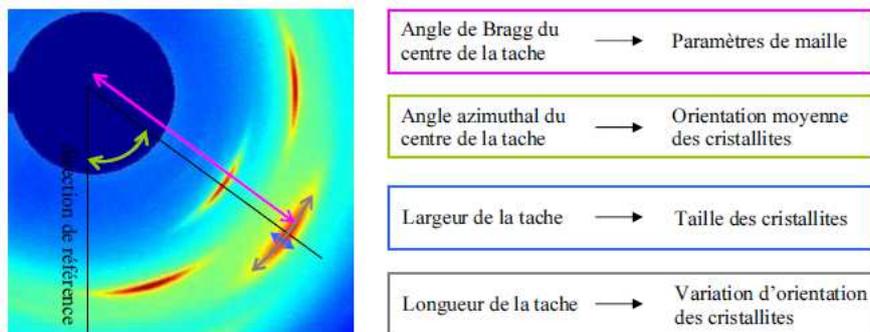


FIGURE 9.1.3: Représentation schématique des différents paramètres cristallographiques mesurés à partir d'un cliché de diffraction (figure tirée de [12]).

On observe également un anneau diffus qui correspond aux corrélations inter-chaînes. Les spectres X de la partie amorphe du polymère peuvent donc également apporter des informations utiles sur l'organisation des chaînes dans la matrice.

Dans ce type de cliché, on peut séparer l'intensité de la phase isotrope $I_{iso}(2\theta, \beta)$ de l'intensité de la phase anisotrope $I_{ani}(2\theta, \beta)$ (figure 9.1.4).

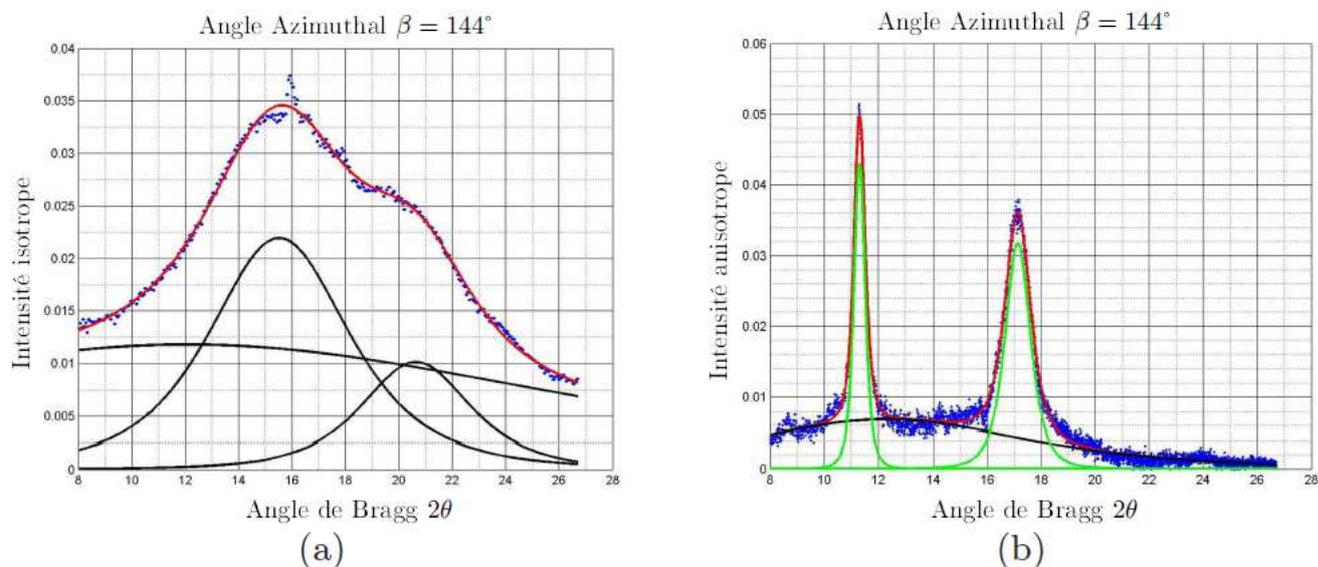


FIGURE 9.1.4: Exemple de déconvolution d'un spectre $(2\theta, I_{iso})$ (a) et d'un spectre $(2\theta, I_{ani})$ (b) interpolé par une série de fonctions de Pearson. (points bleus) Données expérimentales, (courbes noires) fonctions attribuées à la phase amorphe, (courbes vertes) fonctions attribuées à la phase cristallisée, (courbes rouges) somme des fonctions. (figure tirée de [12]).

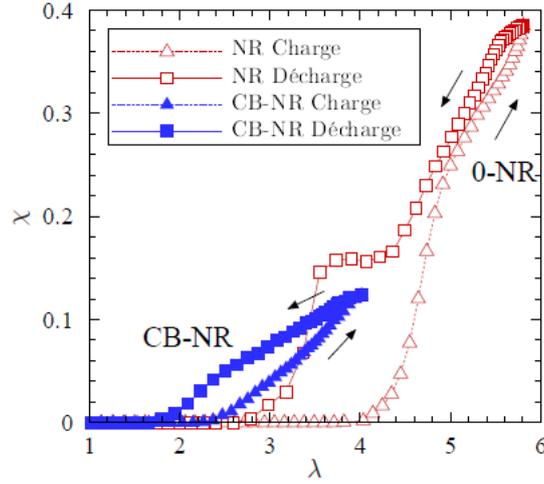


FIGURE 9.1.5: Evolution de l'index de cristallinité χ en fonction de l'élongation λ durant un cycle de chargement à faible vitesse pour un caoutchouc naturel non-chargé (NR) et un caoutchouc naturel chargé aux noirs de carbone (CB-NR) (figure tirée de [12]).

Un index de cristallinité χ (figure 9.1.5) est calculé par

$$\chi = \frac{\mathcal{I}_{cris}}{\mathcal{I}_{cris} + \mathcal{I}_{am}} \quad (9.1.1)$$

où \mathcal{I}_{cris} est l'intensité intégrée des pics (120) et (200), \mathcal{I}_{am} l'intensité intégrée du halo amorphe et λ est l'élongation globale de l'éprouvette, c'est à dire en extension uniaxiale, le rapport entre la hauteur déformée et non-déformée de l'éprouvette sollicitée dans cette direction. Sur le cliché, on peut identifier 18 arcs de diffraction qui résultent en 6 plans différents. Comme on ne calcule que trois paramètres de maille (a , b , c) (en supposant que la maille à la forme d'un parallépipède voir paragraphe suivant), chacun d'eux est pris comme la moyenne de deux valeurs prises sur deux plans différents. Pour déterminer les paramètres de maille, qui sont les trois dimensions du parallépipède, on détermine la distance interréticulaire d_{hkl} de chaque plan

$$d_{hkl} = \frac{\lambda}{2 \sin \theta} \quad (9.1.2)$$

avec λ la longueur d'onde et θ l'angle de diffraction (angle de Bragg). Ensuite, les paramètres a, b et c sont calculés grâce à la relation

$$d_{hkl} = \sqrt{\left(\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}\right)^{-1}} \quad (9.1.3)$$

Le volume d'une maille est enfin calculé par $V = abc$. La taille des cristallites (chaque cristallite est formé de nombreuses mailles) est ensuite déduite de la formule de Scherrer

$$l_{hkl} = \frac{K\varpi}{FWHM_{2\theta}\cos\theta}, \quad (9.1.4)$$

avec :

- l_{hkl} la taille de la cristallite dans la direction normale au plan de diffraction hkl ,
- K un scalaire qui dépend de la forme de la cristallite (ici $K = 0.78$),
- ϖ la longueur d'onde des rayons-X,
- θ l'angle de diffraction (angle de Bragg),
- $FWHM_{2\theta}$ la largeur à mi-hauteur du pic de hkl en 2θ .

On calcule alors un index du volume d'une cristallite par $\bar{V}_{cryst} = l_{200}l_{120}l_{201}$. Puisque la géométrie d'une cristallite dans le caoutchouc reste inconnue, il n'est pas possible de calculer le volume réel d'une cristallite. Mais, dans l'hypothèse où cette forme ne change pas avec la déformation et la présence de charge, \bar{V}_{cryst} est proportionnel au volume moyen réel d'une cristallite. En supposant que le matériau soit incompressible et que le volume cristallisé soit équivalent à la masse cristallisée, on peut calculer également un index du nombre de cristallites par unité de volume N par

$$N = \frac{\chi V_{irr}}{\bar{V}_{cryst}} = \frac{\chi}{\bar{V}_{cryst}} \frac{\pi R^2 t_0}{\sqrt{\lambda}}, \quad (9.1.5)$$

où : V_{irr} est le volume irradié par le faisceau de rayons-X, R est le rayon du faisceau, t_0 est l'épaisseur de l'échantillon dans l'état non-déformé, et λ est l'élongation de l'échantillon. Dans ce cas, N est proportionnel au nombre réel de cristallites par unité de volume.

Finalement, la désorientation ψ_{hkl} comparée à l'orientation moyenne du plan hkl de diffraction est simplement donnée par la moitié de la largeur à mi-hauteur des pics de diffraction.

Morphologie de la maille élémentaire

Une cristallite est constituée de mailles élémentaires cristallines dont les sommets sont les monomères constitutifs. En 1928, Mark et Von Susich [92] ont proposé, grâce à la diffraction rayons-X aux grands angles, une structure orthorhombique pour la maille élémentaire d'une cristallite (figure 9.1.6) avec les paramètres de maille $a = 12.3 \text{ \AA}$, $b = 8.3 \text{ \AA}$ et $c = 8.1 \text{ \AA}$.

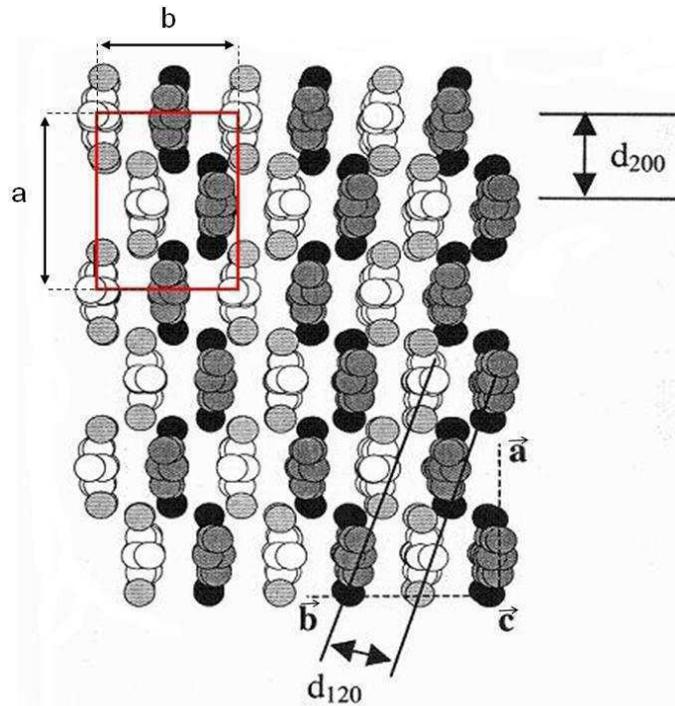


FIGURE 9.1.6: Représentation des chaînes dans le plan (a,b), avec c l'axe de traction et à l'axe des chaînes. En haut à gauche, représentation d'une maille élémentaire avec les paramètres de maille a et b. Position des plans perpendiculaires (200) et (120) (figure tirée de [91]).

Plusieurs études ont suivi mais la structure proposée est globalement restée la même avec une maille élémentaire comprenant quatre chaînes. Lorsque le caoutchouc subit une élongation uni-axiale, l'axe c de la cristallite correspond alors bien à la direction d'élongation selon laquelle les chaînes s'alignent. Pour ce qui a trait à la déformation de cette cristallite durant un test de traction, Pompradub et al [117], ont montré que les paramètres a et b décroissent avec le chargement et que le paramètre c croit. Beurrot a amélioré récemment ces résultats (figure 9.1.7).

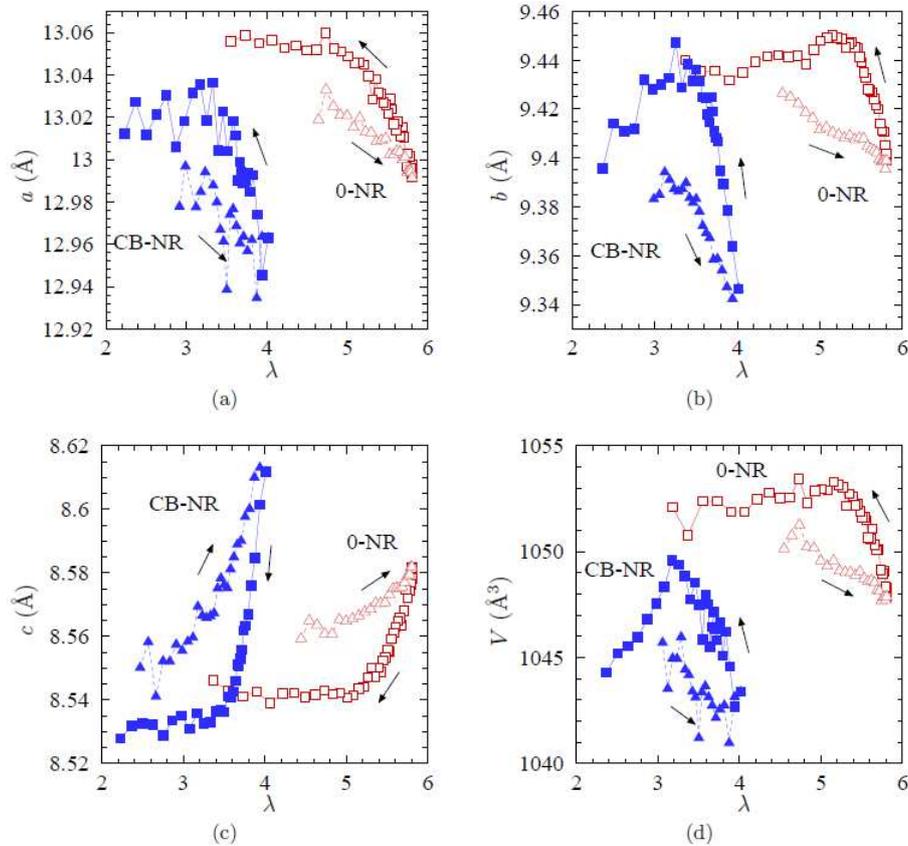


FIGURE 9.1.7: Evolution des paramètres d'une maille élémentaire contenue dans une cristallite et du volume de cette maille en fonction de l'élongation λ durant un cycle de chargement à faible vitesse pour un caoutchouc naturel non chargé (0-NR) et un caoutchouc naturel chargé aux noirs de carbone (CB-NR). (a) : paramètre de maille a , (b) : paramètre de maille b , (c) : paramètre de maille c , (d) : volume de maille. Triangles : charge, Carrés : décharge (figure tirée de [12]).

Ces évolutions sont similaires pour les deux matériaux. Cela signifie que lorsque le matériau est allongé, les mailles unitaires sont allongées selon la direction de traction et contractées selon les deux autres directions. De plus, le volume entier diminue. Pour une élongation donnée, on remarque également que la maille est moins allongée (paramètre c) et moins comprimée (paramètre a et b) durant la phase de décharge que durant la phase de charge. On remarque également que quantitativement ces paramètres n'évoluent que de 0.5% dans du caoutchouc non-chargé et de 1% dans du caoutchouc chargé.

Taille et volume des cristallites

A température ambiante, Luch et Yeh [88] ont observé au microscope par transmission d'électrons une structure fibrillaire avec des cristallites dont la taille moyenne est de 100 \AA influencée par la déformation et la densité de réticulation. Ils ont également étudié la morphologie des cristallites dans du caoutchouc naturel vulcanisé lors d'une déformation de 700% par diffraction rayons-X aux petits angles. L'absence de pic discret lors de la diffraction a alors été interprétée comme une absence de structure lamellaire [89]. On s'accorde donc sur une structure fibrillaire pour la cristallisation sous contrainte. Néanmoins pour de plus faibles elongations ($\lambda \in [4, 5]$) dans le caoutchouc naturel non-chargé), certains auteurs [159] supposent encore l'existence d'une combinaison entre structure fibrillaire et lamellaire. Cette hypothèse peut permettre de mieux expliquer le comportement constitutif du caoutchouc lors d'un cycle de chargement [119]. Les figures 9.1.8 et 9.1.9 montrent l'évolution de la taille des cristallites dans six directions différentes. L'évolution du volume moyen des cristallites est illustrée à la figure 9.1.10.

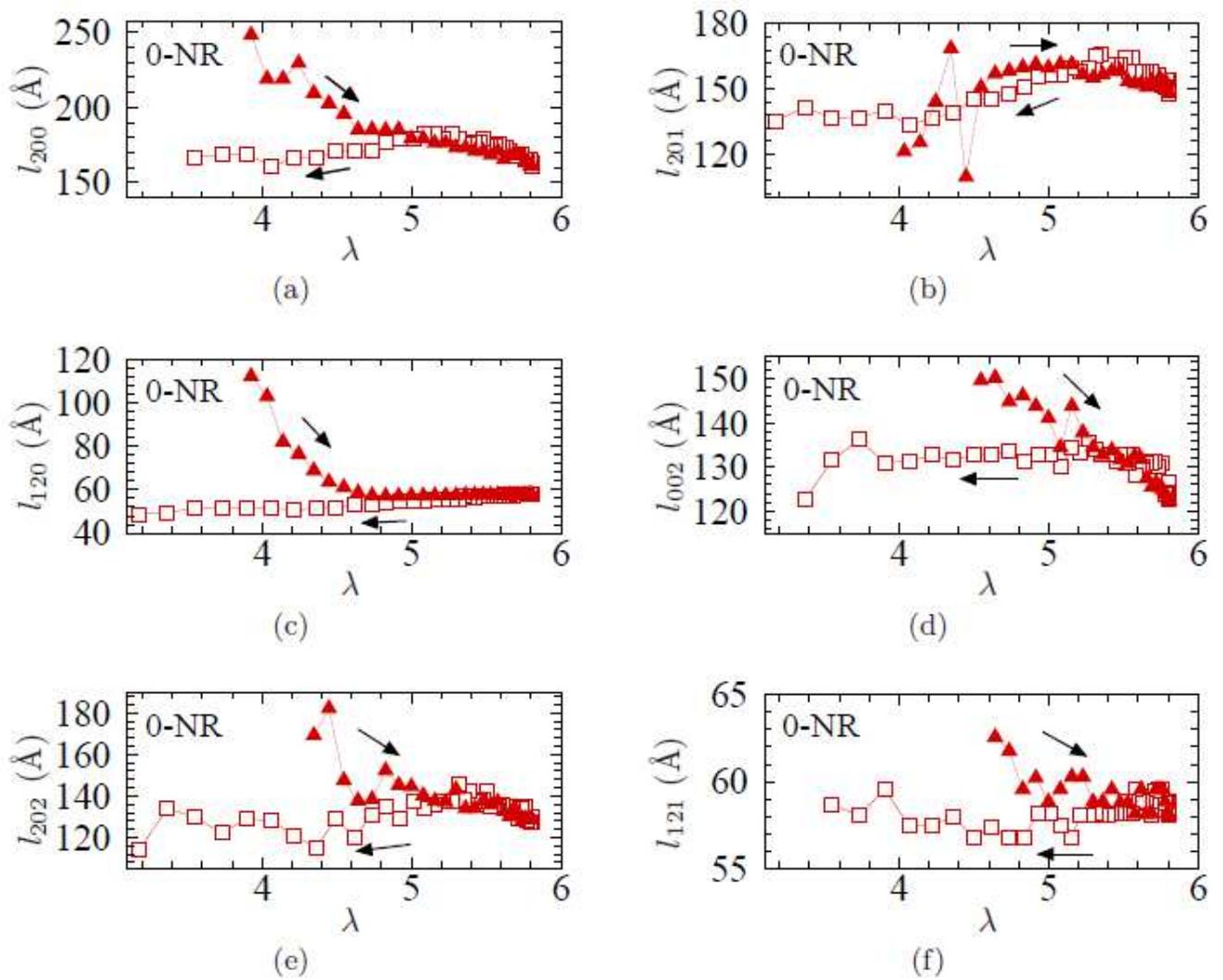


FIGURE 9.1.8: Evolution de la taille d'une cristallite en fonction de l'élongation λ durant un cycle de chargement à faible vitesse pour un caoutchouc naturel non-chargé (0-NR (a) à (f)). l_{hkl} est mesuré dans la direction normale au plan de diffraction (hkl). Triangles : charge, Carrés : décharge (figure tirée de [12]).

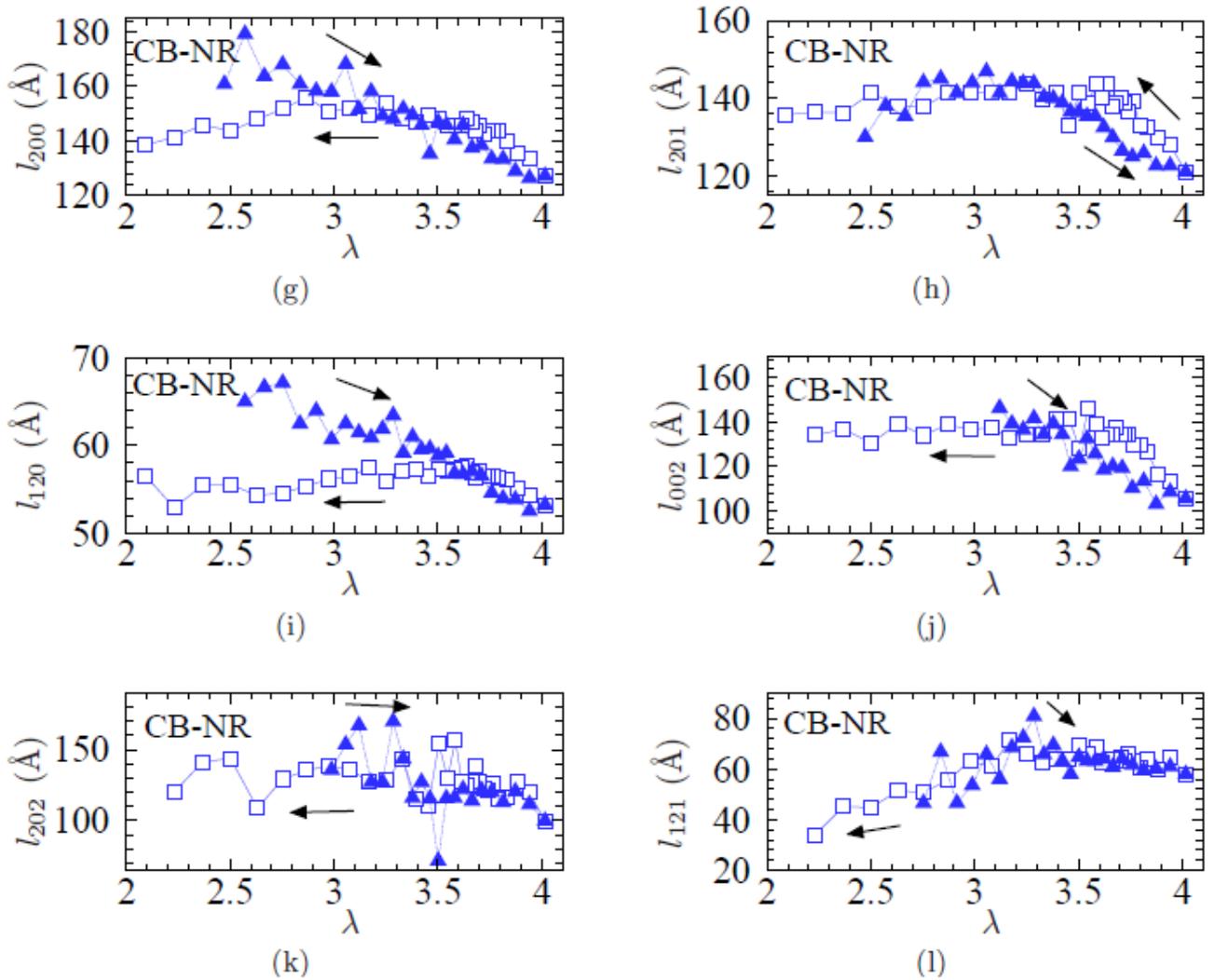


FIGURE 9.1.9: Evolution de la taille d'une cristallite en fonction de l'élongation λ durant un cycle de chargement à faible vitesse pour un caoutchouc naturel chargé aux noirs de carbone (CB-NR (g) à (l)). l_{hkl} est mesuré dans la direction normale au plan de diffraction (hkl). Triangles : charge, Carrés : décharge (figure tirée de [12]).

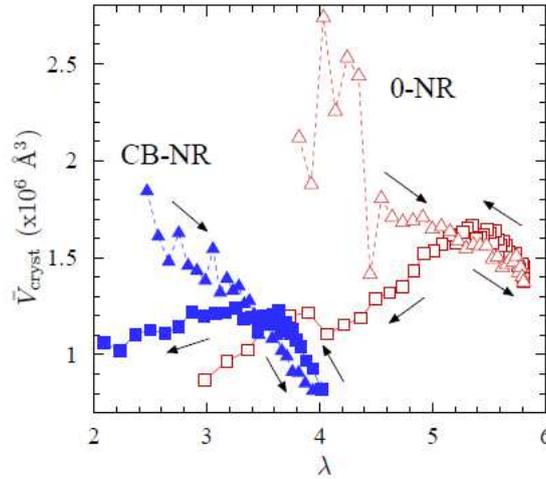


FIGURE 9.1.10: Evolution du volume d'une cristallite en fonction de l'élongation λ durant un cycle de chargement à faible vitesse pour un caoutchouc naturel non-chargeé (0-NR en rouge) et un caoutchouc naturel chargé aux noirs de carbone (CB-NR en bleu). Triangles : charge, Carrés : décharge (figure tirée de [12]).

Ces observations nous amènent aux résultats suivants :

- la taille des cristallites évolue de 10% à 50% et dépend du matériau et de la direction considérée,
- les cristallites sont plus petites dans le caoutchouc chargé que dans le non-chargeé [118, 152],
- les tailles vont de 50 \AA à 250 \AA dans le caoutchouc non-chargeé et de 40 \AA à 170 \AA dans le caoutchouc chargé. Cette taille varie avec la densité de réticulation [159, 25].

Finalement, on remarque que l'évolution de la taille et du volume des cristallites est la même pour les deux matériaux dans la plupart des directions : durant la phase de traction, la taille diminue avec λ ; durant la phase de rétraction, elle augmente d'abord pour les grandes élongations et décroît pour les petites élongations. De plus, pour une élongation donnée, les cristallites sont plus grosses durant la phase de charge que durant la phase de décharge pour les petites élongations alors que c'est l'opposé pour les grandes élongations.

Nombres de cristallites

L'évolution du nombre de cristallites par unité de volume de matériau non-déformé N est montrée à la figure 9.1.11.

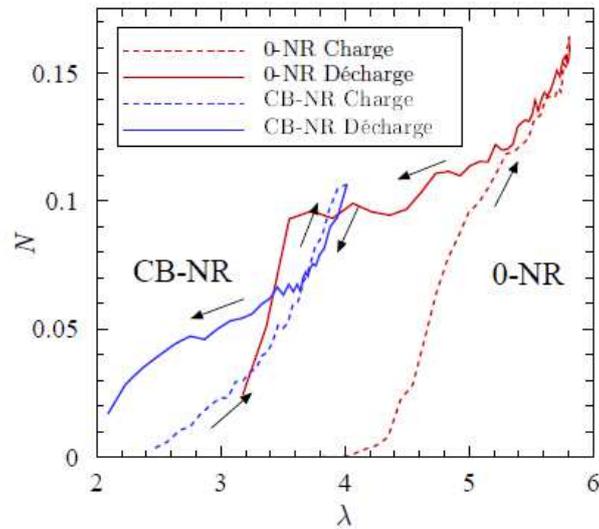


FIGURE 9.1.11: Evolution du nombre de cristallites par unité de volume de matériau non-déformé en fonction de l'élongation λ durant un cycle de chargement à faible vitesse pour un caoutchouc naturel non-chargé (0-NR en rouge) et un caoutchouc naturel chargé aux noirs de carbone (CB-NR en bleu) (figure tirée de [12]).

Cette évolution est très similaire à l'index de cristallinité. On remarque également qu'il y a plus de cristallites dans le caoutchouc chargé que dans le caoutchouc non-chargé pour une élongation donnée mais le nombre maximum de cristallites est plus petit. Les figures 9.1.5, 9.1.10 et 9.1.11 montrent alors que l'évolution du degré de cristallinité le long d'un cycle est principalement dûe à la nucléation et la fusion des cristallites, plutôt qu'à une évolution dans leur taille. Finalement, on note que pour le caoutchouc naturel chargé aux noirs de carbone et pour de très grandes élongations, le nombre de cristallites dans la phase de décharge est plus faible que durant la charge. L'auteur de cette expérience [12] invoque une mauvaise mesure du nombre de cristallites ou un artefact expérimental aux très grandes élongations pour expliquer ce résultat.

Orientation des cristallites

Les figures 9.1.12 et 9.1.13 donnent la désorientation comparée à l'orientation moyenne de six plans de diffraction différents dans le caoutchouc non-chargé et cinq plans dans le caoutchouc chargé. Le sixième plan dans le caoutchouc chargé n'est pas présent dans la littérature.

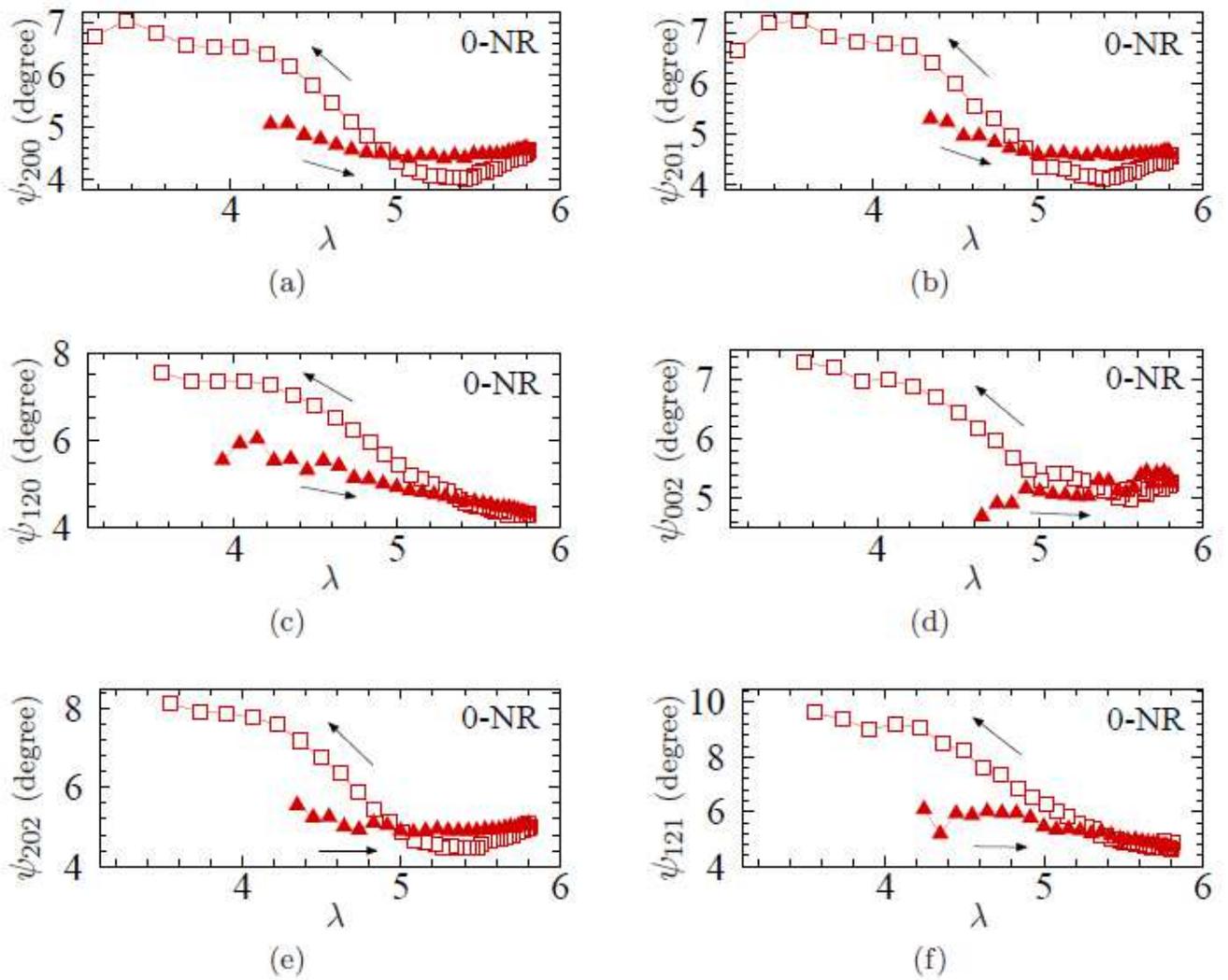


FIGURE 9.1.12: Evolution de la désorientation des plans de diffraction des cristallites en comparaison de leur orientation moyenne en fonction de l'élongation λ durant un cycle de chargement à faible vitesse pour un caoutchouc naturel non-chargé (0-NR de (a) à (f)). Les indices de Miller sont mis dans l'ordre hkl. Triangles : charge, Carrés : décharge (figure tirée de [12]).

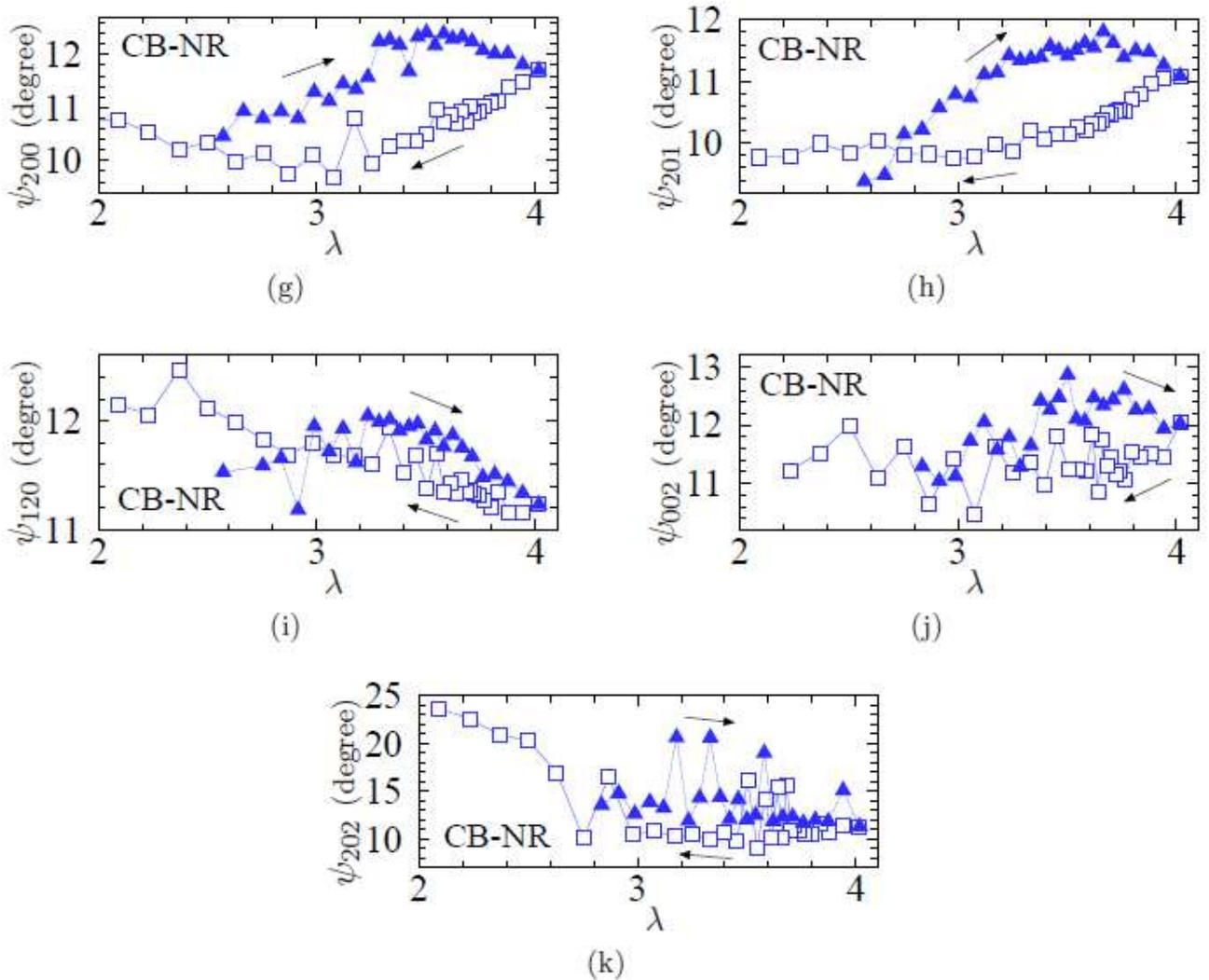


FIGURE 9.1.13: Evolution de la désorientation des plans de diffraction des cristallites en comparaison de leur orientation moyenne en fonction de l'élongation λ durant un cycle de chargement à faible vitesse pour un caoutchouc naturel chargé aux noirs de carbone (CB-NR de (g) à (k)). Les indices de Miller sont mis dans l'ordre hkl. Triangles : charge, Carrés : décharge (figure tirée de [12]).

Cette évolution nous amène aux résultats suivants :

- Dans le caoutchouc non-chargé, cette désorientation décroît faiblement avec λ durant la phase de charge. Durant la phase de décharge, elle commence à décroître faiblement puis augmente rapidement pour finir par une phase constante à la fin du cycle. Elle est plus élevée durant la phase de décharge que durant la phase de charge et est similaire pour les six plans de diffraction. Le même type d'évolution a

été rapporté par d'autres auteurs dont [118, 152, 159].

- Dans le caoutchouc chargé, cette désorientation augmente au début de la charge puis décroît faiblement. Durant la phase de décharge, elle commence par décroître puis elle croît faiblement. Elle est supérieure durant la phase de charge que durant la phase de décharge. Le même type d'évolution a été rapporté par d'autres auteurs dont [118, 152].

L'ensemble des observations faites nous permet d'avoir une idée simple de la structure cristalline du caoutchouc. C'est maintenant la cinétique de cristallisation que l'on étudie.

9.1.2 Cinétique de cristallisation

Lorsqu'on observe, à température ambiante, un caoutchouc naturel déformé suffisamment pour cristalliser, la contrainte relaxe au cours du temps et la cristallinité augmente [91]. On observe alors deux temps caractéristiques lors de cette relaxation. Ce résultat est confirmé par les travaux de Tosaka [158] et de Choi [30]. Cette expérience de relaxation, même si elle est la seule que l'on a pu faire jusqu'à très récemment, reste très critiquable car le temps pour atteindre l'élongation maximum est toujours trop long par rapport à la cinétique de cristallisation et les techniques de diffraction ont des temps d'acquisition de données importants (typiquement plusieurs minutes). Malgré ces difficultés, différentes études ont conclu [1, 86, 97, 43] que l'orientation des molécules n'était pas instantanée, et que les deux cinétiques s'accélérent lorsque l'élongation augmente. De plus, ces auteurs se sont accordés sur un temps caractéristique de 50 *msec* pour la cinétique la plus rapide. Cependant, durant les deux dernières années, de très important progrès ont été réalisés dans la mesure du temps caractéristique de cristallisation [19, 2]. Ces études ont mis en place des techniques expérimentales dédiées à la mesure de ce temps caractéristique. Elles ont alors mis en évidence un temps caractéristique évoluant avec l'élongation (figure 9.1.14).

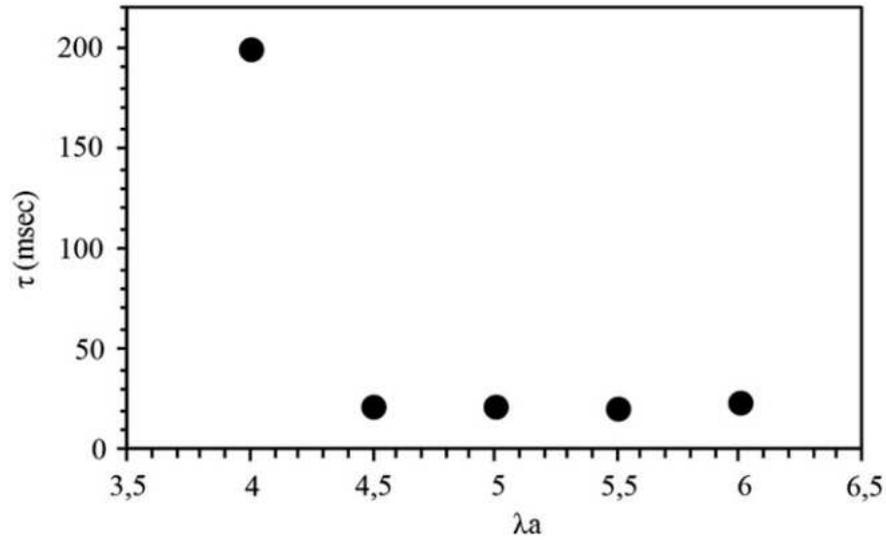


FIGURE 9.1.14: Temps caractéristique de cristallisation τ en milli-seconde fonction de l'élongation moyenne durant le test λa . $\lambda a = 4$ est l'élongation à partir de laquelle le matériau cristallise dans un essai quasi-statique (figure tirée de [19])

Ce temps caractéristique est de l'ordre de 20 msec lorsque $\lambda a > 4$. Lorsque on se rapproche de l'élongation $\lambda a = 4$ qui correspond à l'élongation à laquelle le matériau commence à cristalliser lors d'un essai quasi-statique, ce temps caractéristique augmente très rapidement. Il est plus grand d'un facteur 10 lorsqu'on est très proche de cette élongation. En fusion, il est naturel que l'on suppose un temps caractéristique très faible devant le temps caractéristique de cristallisation et récemment une étude a confirmé cette hypothèse (figure 9.1.15).

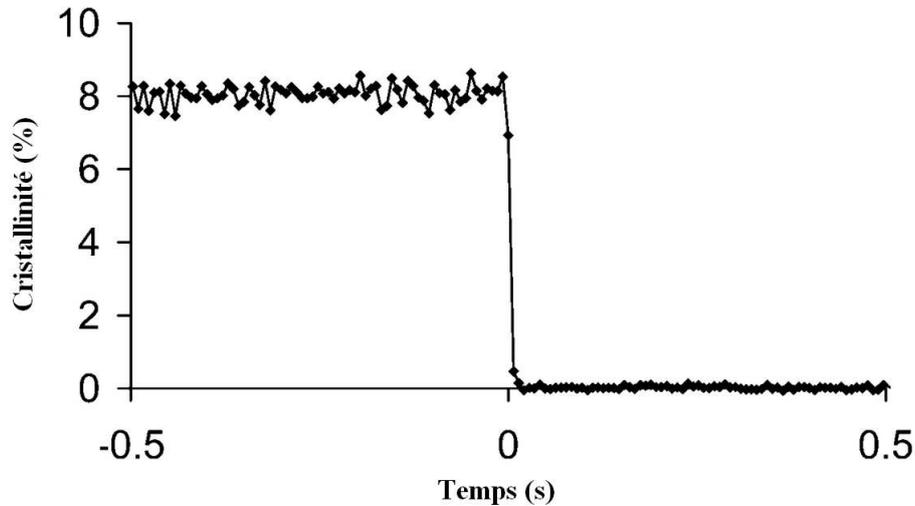


FIGURE 9.1.15: Cristallinité en fonction du temps pendant une décharge durant moins de 10 *msec* à $t = 0$ (figure tirée de [16]).

Dans cette figure, on remarque que le temps caractéristique de la fusion est nécessairement inférieur au temps entre deux points de mesures consécutifs. Or, ce temps est de 7 *msec*. La fusion peut donc être raisonnablement considérée comme instantanée. Et par extension, l'évolution de l'index de cristallinité en fusion peut être considérée comme la plus représentative d'un quasi-équilibre thermodynamique.

Dans la suite, on étudie plus spécifiquement l'influence de la cristallisation sur la phase amorphe.

9.1.3 Caractérisation mécanique de la phase amorphe

On sait que la principale conséquence de la cristallisation sous contrainte du caoutchouc est la relaxation de la phase amorphe. Ceci a notamment été mis en équation par Flory [48] en utilisant la mécanique statistique. Pour examiner plus en détails ce phénomène, il serait intéressant de pouvoir séparer la contribution de la phase amorphe et la contribution de la phase cristalline dans le réseau. Ceci peut être réalisé par la résonance magnétique nucléaire par exemple. En effet, cette technique nous permet d'obtenir une indication sur l'alignement des chaînes par rapport à l'axe de traction dans le caoutchouc sous tension qui est proportionnel à l'écart quadripolaire $\Delta\nu_1$ quantité obtenue par résonance magnétique nucléaire. Cette technique, mise au point par Deloche [144], consiste à introduire d'abord du deutérium dans le caoutchouc. Le nuage électronique de la liaison carbone-deutérium introduit alors un gradient de champ auquel le spectre de résonance magnétique nucléaire est sensible. On peut en effet mesurer alors $\Delta\nu_1$ et montrer que cette quantité est un paramètre d'ordre dont Deloche a montré qu'il s'exprime de manière simple en fonction notamment de l'angle theta de l'axe de la molécule

avec la direction de traction. Ainsi, un plateau dans la mesure de $\Delta\nu_1$ en fonction de la contrainte montre que la phase d'alignement des molécules est terminée comme c'est le cas à la figure 9.1.16). On peut ainsi utiliser cette quantité pour traduire l'évolution de l'élongation moyenne de la phase amorphe dans l'échantillon (pour plus de détails, on se réfère à [122]). On observe alors l'effet de la cristallisation sur l'écart quadripolaire (figure 9.1.16). Lorsque le matériau est totalement amorphe $\Delta\nu_1$ est proportionnel à $(\lambda^2 - \lambda^{-1})$. Puis, lorsque le matériau cristallise, on observe un plateau en $\Delta\nu_1$ que l'on peut interpréter comme un plateau dans l'évolution de l'élongation moyenne de la phase amorphe dans l'échantillon. En fusion, on observe une décroissance de cette quantité.

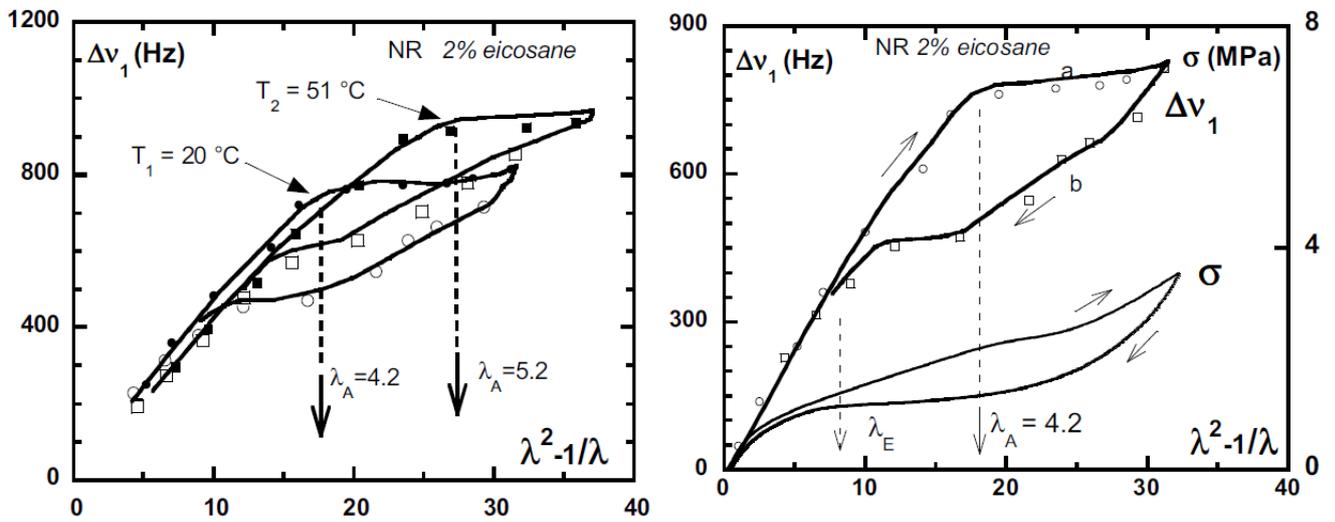


FIGURE 9.1.16: (à gauche) Écart quadripolaire pour le caoutchouc non-chargé à 20°C et 51°C sur un cycle. (à droite) Comparaison entre la contrainte et l'écart quadripolaire sur un cycle (la vitesse de chargement pour les deux mesures est du même ordre) (figures tirées de [122]) .

On peut remarquer que le même type de résultat a été obtenu par [3] en analysant la partie due à la phase amorphe dans le cliché de diffraction.

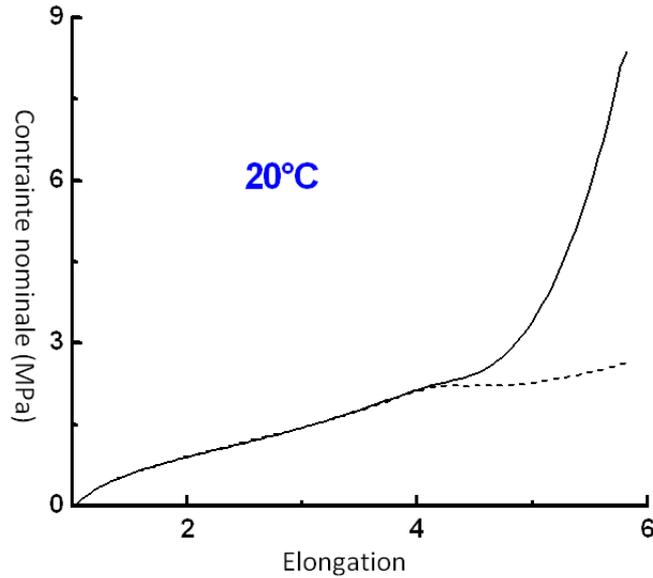


FIGURE 9.1.17: Caractérisation de l'effet de durcissement induit par les cristallites. (Lignes pleines) Contrainte nominale en fonction de l'élongation pour une charge cristallisante. (Pointillés) Contrainte calculée en utilisant la raideur amorphe combinée avec l'élongation de la partie amorphe du réseau pendant la cristallisation sous contrainte (figure tirée de [3]).

Ces résultats nous permettent de remarquer que les cristallites agissent très probablement comme des nano-charges dont le seuil de percolation serait faible. En effet, l'amplification de la contrainte due à l'effet durcissant de la cristallite sur la chaîne elle-même ne peut expliquer le durcissement observé puisque la contrainte du réseau amorphe (figure 9.1.17) ne présente pas de durcissement significatif lors de la charge. Pour finir, nous allons caractériser le réseau complet en étudiant le comportement mécanique du caoutchouc cristallisant sur un cycle de chargement. On se concentrera dans cette sous-section sur le caoutchouc naturel non-chargé. L'analyse du caoutchouc naturel chargé n'apporte pas d'informations supplémentaires.

9.1.4 Caractérisation mécanique du réseau semi-cristallin

Dans cette section, on étudie tout d'abord un cycle de chargement à vitesse et température constantes. Ensuite, on examine l'influence de plusieurs paramètres sur ce cycle :

- λ_{max} et λ_{min} , respectivement l'élongation maximale et l'élongation minimum atteinte pendant le cycle
- la vitesse de chargement,
- la température,
- la densité de réticulation.

Vitesse et température constante : cycle complet

Les trois processus expérimentaux sur du caoutchouc naturel non-chargé étudiés dans cette sous-section sont :

- l'essai de cristallisation sous contrainte à l'équilibre. Il s'agit d'étirer le caoutchouc à une extension donnée, de le chauffer à 80°C afin d'éliminer toute trace de cristallinité, puis de le refroidir à température déterminée, de manière à obtenir le taux de cristallisation du matériau à l'équilibre thermodynamique. On s'affranchit ainsi de tous les effets de cinétique et de relaxation qui peuvent se manifester sur des durées très longues.
- le cycle de traction à vitesse et température constantes. La cristallinité de l'échantillon est mesurée en continu, en temps réel, tout au long du cycle de traction. C'est une mesure sur un système hors équilibre, même dans les cas où la vitesse de traction est très lente. Le caoutchouc subit systématiquement un chargement cyclique précédemment à la mesure pour éliminer une grande partie de l'effet Mullins.
- l'essai sur phase amorphe. Il s'agit de chauffer le caoutchouc non-déformé à 80°C pour l'empêcher de cristalliser. Ensuite, il est soumis à un chargement de traction à vitesse constante.

Le cycle à vitesse et température constantes se décompose en deux phases : la traction et la rétraction. Ces deux phases sont indiquées par des flèches (figure 9.1.18). Le cycle peut être subdivisé en plusieurs segments, qui correspondent aux divers comportements microscopiques du caoutchouc. Ces points singuliers sont notés O, A, B, C, D, E.

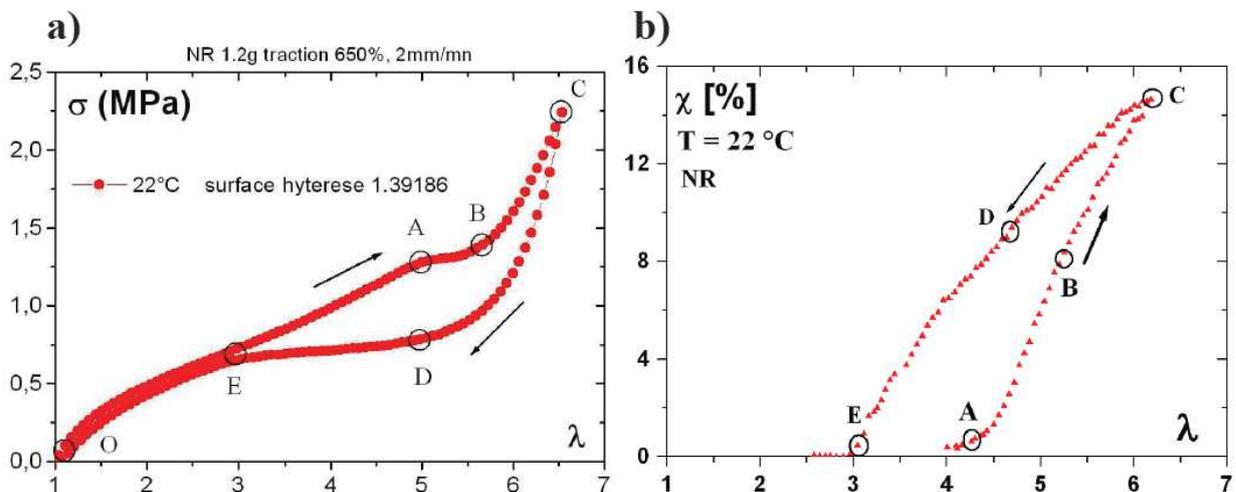


FIGURE 9.1.18: Évolution simultanée a) de la contrainte σ et b) de la cristallinité au cours d'un cycle de traction de vitesse 2 mm/min à température ambiante (figure tirée de [91]).

Pour pouvoir comprendre ce type de comportement, il est également intéressant de superposer à cette courbe le comportement amorphe et le comportement à l'équilibre (figure 9.1.19).

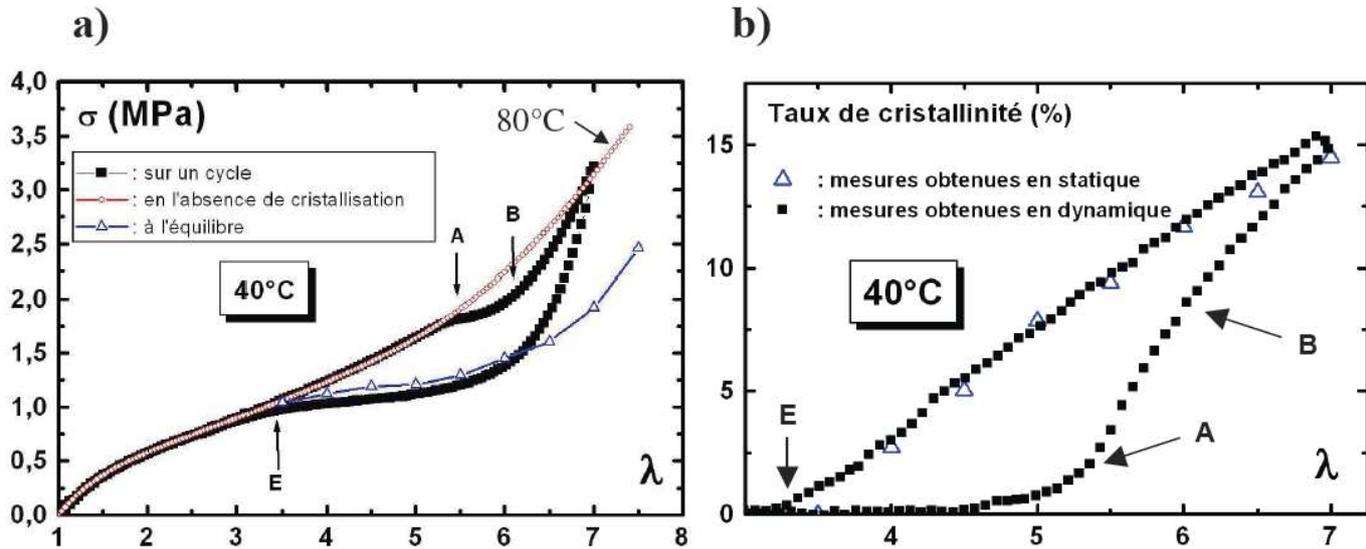


FIGURE 9.1.19: Évolution simultanée a) de la contrainte σ (en noir) à 40°C, (en rouge) à 82°C (renormalisée à 40°C par la loi de Mooney Rivlin), (en bleu) à l'équilibre et b) de la cristallinité au cours d'un cycle de traction de vitesse 2 mm/min (figure tirée de [91]).

On observe une cristallisation hors équilibre dans la phase de charge qui se produit à une élongation élevée λ_A et qui se traduit par une relaxation de contrainte au début suivi d'un durcissement. La phase de décharge se fait essentiellement le long de la courbe d'équilibre dès que le durcissement a été effacé. En décharge, la cristallisation s'observe à des élongations plus faibles qu'en charge.

Influence de λ_{max} sur la dissipation

En réalisant plusieurs expériences, on s'aperçoit que les cycles s'inscrivent les uns dans les autres (figure 9.1.20) et sont d'aire croissante avec λ_{max} .

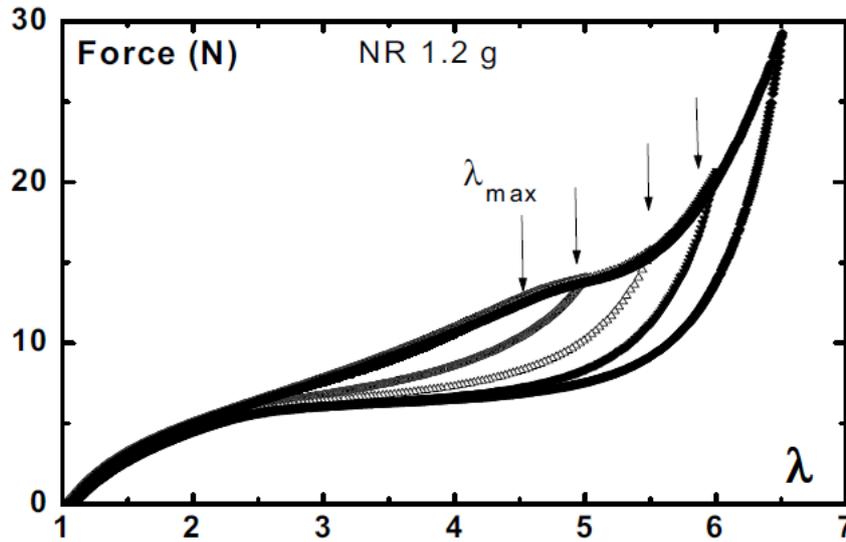


FIGURE 9.1.20: Cycles de chargement à λ_{max} croissant - force. La courbe de charge est la courbe la plus en haut (figure tirée de [91]).

La cristallinité augmente également avec λ_{max} (figure 9.1.21). De plus, on remarque que plus λ_{max} est réduit, plus on trouve une longue période de cristallinité constante en décharge.

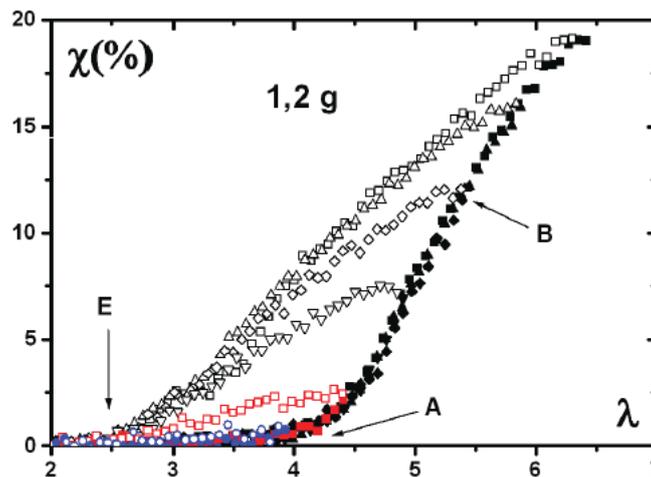


FIGURE 9.1.21: Cycles de chargement à λ_{max} croissant - cristallinité. La courbe de charge est la courbe du bas (figure tirée de [91]).

On peut alors remarquer (figure 9.1.20) que l'aire de l'hystérèse mécanique totale H est proportionnelle à la cristallinité maximale sur un cycle χ_{max} et donc à la densité de cristallites $d_{cris} = \frac{\chi_{max}}{V_{cris}}$ (chaque cristallite étant supposée de volume constant V_{cris}).

La connaissance de H , de χ et de la taille d'une cristallite nous permet de proposer un calcul de la contribution (figure 9.1.22) d'une cristallite à l'énergie dissipée D par unité de volume au cours du cycle

$$H = d_{cris}\varepsilon_{cris}, \quad (9.1.6)$$

avec ε_{cris} l'énergie dissipée ramenée à une cristallite.

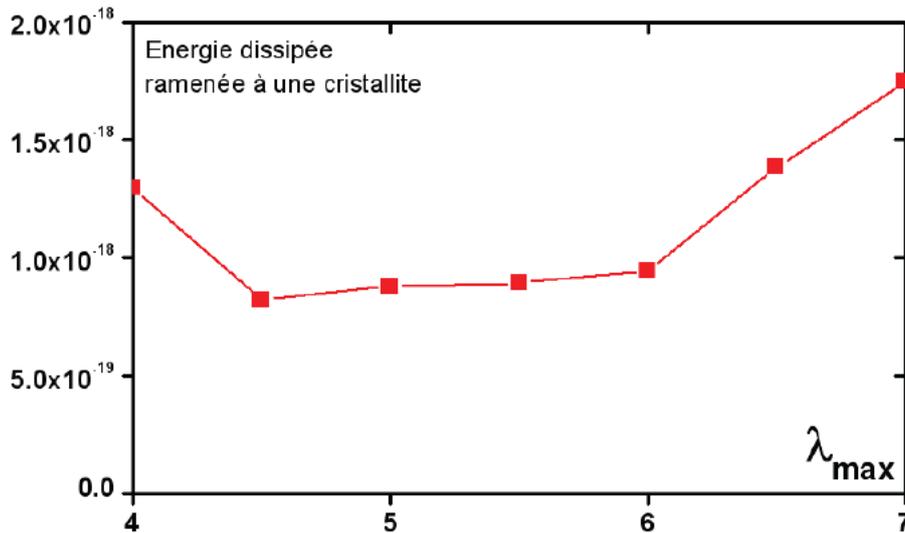


FIGURE 9.1.22: Énergie dissipée ramenée à une cristallite dans un cycle de traction à élongation comprise entre 200% et 700% à la vitesse de 2 mm/min à 20°C (figure tirée de [91]).

Influence de λ_{min} sur la dissipation

L'influence de λ_{min} sur la cristallisation durant un cycle de chargement a été abordée par l'auteur de ce manuscrit au Centre technique de Ladoux Michelin [56]. Néanmoins, l'étude de Nicolas Candau [21] a été mise en place sur une machine permettant une exploitation plus rigoureuse des résultats. On se réfère donc systématiquement à son étude dans la suite. L'effet du λ_{min} est similaire à celui du λ_{max} mais dans une amplitude bien moins importante. Ce qui peut s'expliquer par le fait qu'on se trouve plus proche de l'équilibre dans le second cas.

Influence de la vitesse de chargement sur le cycle

On a vu dans la section précédente que la première échelle de temps de la cristallisation sous contrainte est très rapide (20 msec). On peut donc supposer que la cristallisation a toujours le temps d'avoir lieu lorsque la vitesse de déformation est inférieure à 1 s^{-1} . Néanmoins, tous les tests sont hors-équilibre même avec une vitesse de 10^{-5} s^{-1} puisqu'on a observé, dans les essais de relaxation, une évolution de la cristallinité après 24h.

Les principaux résultats sur l'influence de la vitesse de déformation nous viennent de Miyamoto [102] avec des tests allant de $7 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ à 7 s^{-1} . Il a alors mis en évidence une variation de σ_A (contrainte nominale à l'initiation de la cristallisation) proportionnelle à $\ln\left(\frac{d\lambda}{dt}\right)$ lorsque la vitesse est multipliée par 10^4 . Nous avons reproduit cette dépendance (figure 9.1.23).

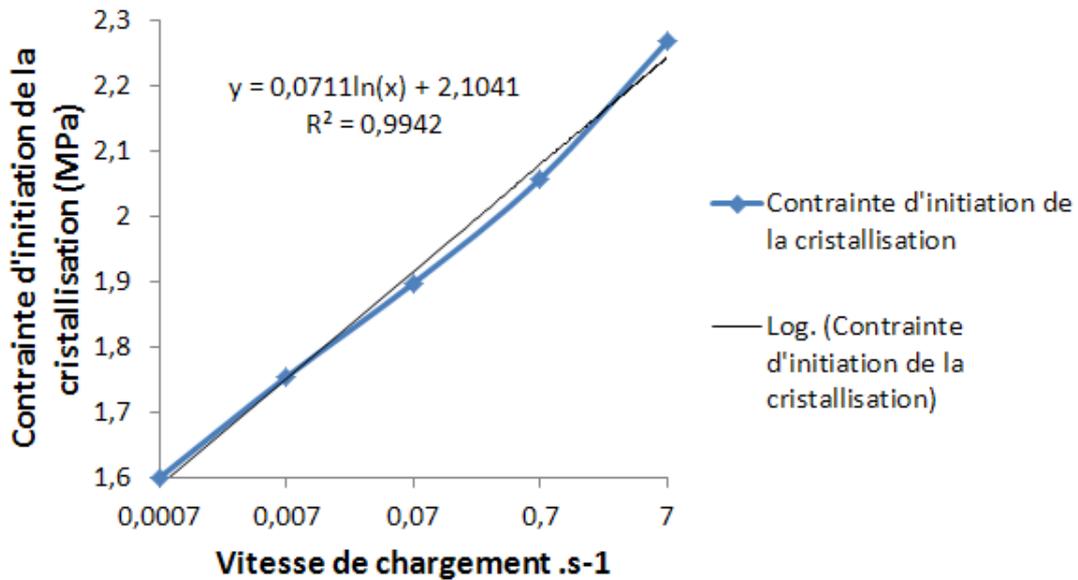


FIGURE 9.1.23: Variation de σ_A (contrainte nominale à l'initiation de la cristallisation) en fonction de $\frac{d\lambda}{dt}$. Résultats expérimentaux (bleu) et courbe de tendance (noir). (figure construite à partir des données de [102]).

Cette étude a été complétée par Trabelsi [149] et Marchal [91] (figure 9.1.24).

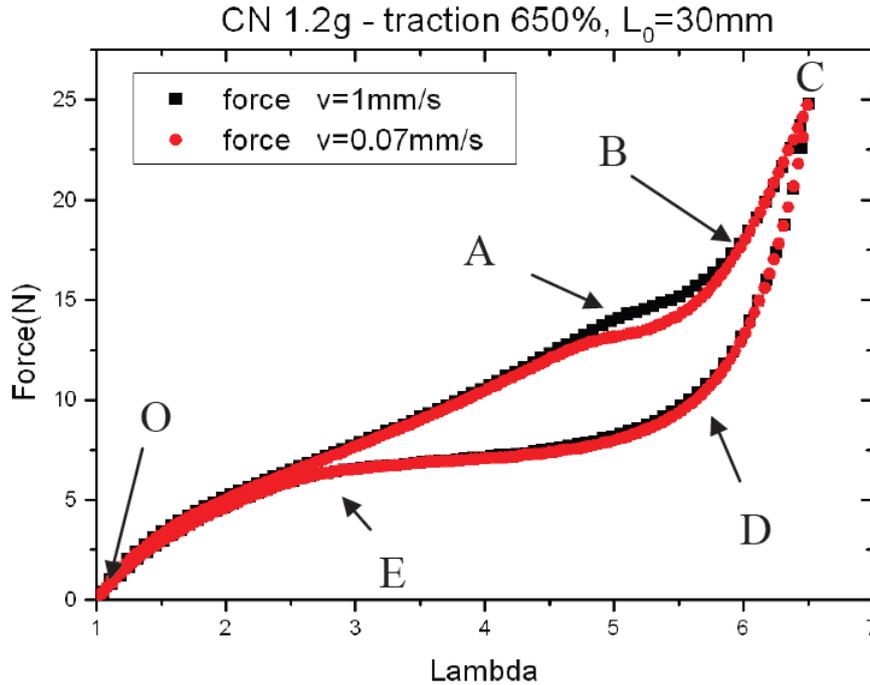


FIGURE 9.1.24: Cycles de traction mécanique à deux vitesses différentes sur du caoutchouc naturel (figure tirée de [91]).

Finalement, en considérant une vitesse de charge de $10^{-3} s^{-1}$ comme base, on peut faire les observations synthétiques suivantes :

- une réduction de la vitesse de déformation induit une légère accentuation de l'effet de relaxation juste après λ_A .
- une augmentation de la vitesse de déformation dans les très hauts régimes de déformations (supérieure à $1 s^{-1}$) [43] induit une diminution de l'effet du durcissement car à ce moment la cristallisation n'a plus le temps de se faire. Ce phénomène est caractérisé par une augmentation de λ_A .
- la taille et l'orientation des cristallites ne varient pas sensiblement pour des vitesses qui restent hors des temps caractéristiques courts de la cinétique de cristallisation.
- Entre λ_D et λ_E , le problème est indépendant de la vitesse. De plus, la pente du durcissement en décharge est indépendante de la vitesse. Il y a simplement une modification faible de λ_D . Cela renforce la notion de pseudo-équilibre en décharge.

Influence de la température sur le cycle

Nous ne considérons pas, dans cette étude, l'effet de la température lorsqu'elle est inférieure à la température ambiante car le caoutchouc cristallise alors de manière différente et cette cristallisation se couple à la cristallisation sous contrainte. L'ensemble

des études a montré que la cristallisation sous contrainte décroît lorsque la température augmente (figure 9.1.25).

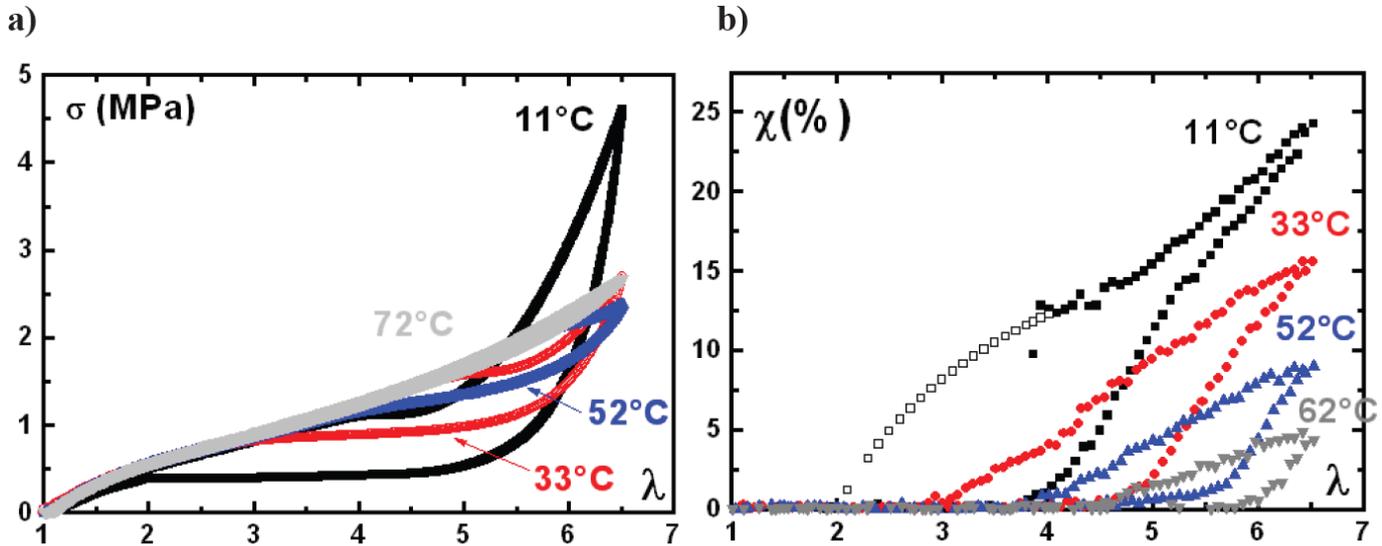


FIGURE 9.1.25: a) Cycles de traction mécanique effectués à 11°C, 33°C, 52°C et 72°C à la vitesse $V = 2\text{mm}/\text{min}$ (entre chaque cycle l'échantillon est chauffé) b) Cristallinité correspondant aux cycles de traction mécanique (figure tirée de [91]).

Albouy et Marchal [91] ont aussi montré que cette diminution est assez régulière. Par exemple λ_A (allongement minimum pour observer la cristallisation en charge) et λ_E (allongement minimum pour observer la cristallisation en décharge) croissent linéairement avec la température (figure 9.1.26).

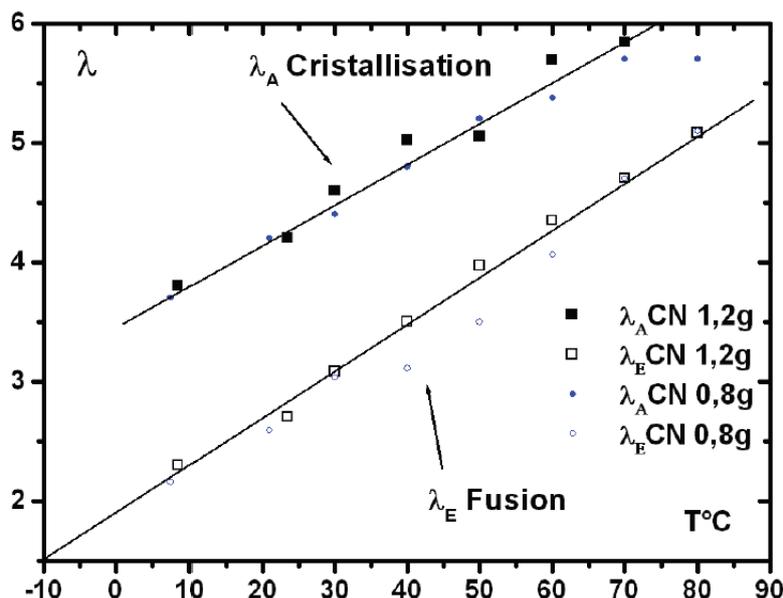


FIGURE 9.1.26: Représentation des élongations auxquelles débutent la cristallisation et des élongations auxquelles a lieu la fusion des dernières cristallites à différentes températures, pour chaque taux de réticulant (les cercles 0.8g de soufre et les carrés 1,2g de soufre) (figure tirée de [91]).

Ces auteurs ont enfin montré que la cristallisation disparaît presque complètement à 80°C . Par contre, quantifier en détail l'influence de la température est difficile puisque le comportement de l'amorphe est également fortement modifié par la température.

Influence de la densité de réticulation sur le cycle

L'influence de la densité de réticulation ν sur la cristallisation sous contrainte est un important sujet d'étude pour l'ensemble des équipes de recherche [155, 151, 160, 25, 24]. Malgré cela, elle n'a pas encore été bien comprise. Le premier résultat qu'on peut trouver est l'indépendance de λ_A par rapport à ν , ce qui est difficile à admettre en considérant la théorie de l'élasticité caoutchoutique et les applications de la mécanique statistique à la cristallisation sous contrainte [160]. Il semble que ce résultat soit dû à une hétérogénéité du réseau mais aucun mécanisme proposé ne semble arriver à reproduire l'ensemble des propriétés observées. On trouve même des désaccords entre certaines observations. Sans rentrer dans les détails et en considérant l'ensemble des études réalisées jusqu'ici, on peut faire un résumé des propriétés observées pour $\nu \geq 10^4 \text{ mol/cm}^3$:

- la nucléation des cristallites est supposée être gouvernée par l'élongation relative des chaînes, et augmente donc quand la densité de réticulation diminue.
- la taille maximum d'une cristallite est gouvernée par le nombre de segments entre deux points de réticulation, et par conséquent, elle diminue lorsque la densité de

réticulation augmente. De plus, elle semble disparaître si la densité de réticulation est trop élevée (le volume des cristallites devrait tendre vers zéro).

- une densité de réticulation optimale ($1.5 \times 10^4 \text{ mol/cm}^3$) existe pour la cristallisation; elle correspond à un nombre de cristallites relativement élevé et, en même temps, à des volumes élémentaires élevés.

Pour des densités de réticulation plus faibles, les résultats ne sont pas clairs et se contredisent [149, 24]. Il faut noter que dans ce cas le rôle des enchevêtrements comme points de réticulation temporaires devient prépondérant et leur prise en compte dans les mécanismes affecte fortement l'interprétation des résultats.

9.2 Comportement du caoutchouc cristallisant sous contrainte (réseau semi-cristallin)

L'ensemble de ces expériences nous a permis d'observer les principaux aspects et effets de la cristallisation sous contrainte. Puisqu'on cherche à construire une loi de comportement pour le caoutchouc cristallisant, nous allons ensuite détailler les principales propriétés qui devront être prises en compte dans cette loi.

9.2.1 Cristallisation et fusion

Tout d'abord, on observe que la cristallinité croît avec la déformation (figure 9.1.18) de λ_A à λ_C puis décroît à la décharge entre λ_C et λ_E . On observe également que la cristallinité est, à λ identique, plus grande en fusion qu'en cristallisation. Ensuite, on observe que l'évolution de la cristallinité est à peu près linéaire en λ lors de la cristallisation comme lors de la fusion. Enfin, la cristallinité en décharge correspond à celle à l'équilibre à l'exception d'une petite zone aux grandes élongations où plusieurs phénomènes différents peuvent être en compétition (sur-cristallisation, temps de pause sur le cycle, cinétique, etc).

9.2.2 Hystérèse

Lors d'un cycle de chargement pour un caoutchouc cristallisant sous contrainte, la déformation n'est pas entièrement réversible (figure 9.1.18). En effet, la courbe contrainte-élongation présente une hystérèse au cours d'un cycle de traction à vitesse et température constantes. La présence d'une hystérèse peut être interprétée comme la conséquence de plusieurs phénomènes :

- les effets viscoélastiques (le désenchevêtrement des chaînes au cours de la traction),
- l'endommagement (effet Mullins),
- la différence de cristallinité entre les phases aller et retour d'un cycle de déformation.

A priori, l'effet Mullins a été éliminé par cyclage du matériau avant l'expérience. Marchal [91] a jugé que la viscoélasticité représentait 10% de l'aire de l'hystérèse même si à de

plus grandes vitesses de chargement cette valeur devient plus grande. Cet effet serait un peu plus important pour des mélanges caoutchoutiques où l'effet des enchevêtrements est important [74]. On suppose donc que le phénomène de cristallisation est le principal responsable de l'hystérèse. Lorsque λ_{max} sur un cycle augmente, que λ_{min} diminue ou que T diminue, on observe également que l'hystérèse est d'aire croissante. On a remarqué enfin qu'à partir du moment où χ décroît, on se retrouve sur la courbe d'équilibre $\chi = \chi_{eq}$ avec χ_{eq} l'index de cristallinité à l'équilibre thermodynamique (figure 9.1.19). Par contre, il y a un écart léger entre la contrainte nominale en fusion et la contrainte nominale à l'équilibre thermodynamique. Pour ces raisons, l'état de fusion est nommé « état de pseudo-équilibre ». Pour conclure, on peut noter que certaines mesures thermiques récentes [134] observent une dissipation sous forme de chaleur négligeable sur un cycle. Les auteurs supposent alors que l'hystérèse pourrait être uniquement le résultat d'une différence de cinétique. En plus des études précédemment citées qui contredisent cette hypothèse, Nicolas Candau [20] a réalisé plusieurs chargements à vitesse faible suivis d'un maintien de l'élongation à valeur fixe. Il observe alors que même si la cristallinité continue à augmenter, cette augmentation est inférieure à 0.5% sur le temps caractéristique de l'expérience. Cela nous incite à garder notre hypothèse selon laquelle la surfusion est en majorité responsable de l'hystérèse.

9.2.3 Relaxation de la phase amorphe

En considérant la figure 9.1.19, on observe que la cristallisation crée une relaxation de la contrainte. Ceci est également visible dans les essais de relaxation. De plus, si on considère la caractérisation de la phase amorphe (figure 9.1.16), l'évolution de l'élongation moyenne semble quasi nulle lors de la cristallisation pour $\lambda \in [4, 5.7]$. La cristallisation crée donc une relaxation de la phase amorphe.

9.2.4 Durcissement du réseau

Si la cristallisation crée une relaxation de la phase amorphe, on remarque également qu'au début de la fusion et à la fin de la cristallisation, la contrainte est très élevée et rejoint la contrainte de la phase amorphe. Elle peut même la dépasser dans certains cas [91]. De plus, on remarque qu'à la fin de la cristallisation la pente de la courbe de contrainte cristallisante est plus forte que la pente de la courbe amorphe. Par conséquent, le réseau durcit lorsqu'il y a cristallisation. Ce durcissement semble venir principalement d'une augmentation du nombre de points de renfort dans le réseau (les cristallites) puisque la « contrainte amorphe » (figure 9.1.17) ne présente qu'un durcissement faible.

9.2.5 Diagramme de phase du caoutchouc

Ce diagramme (figure 9.2.1) montre que la contrainte nominale de début de la cristallisation est toujours supérieure à la contrainte de fin de fusion et qu'elles sont toutes

deux linéaires en la température. C'est ce phénomène que l'on nomme phénomène de surfusion.

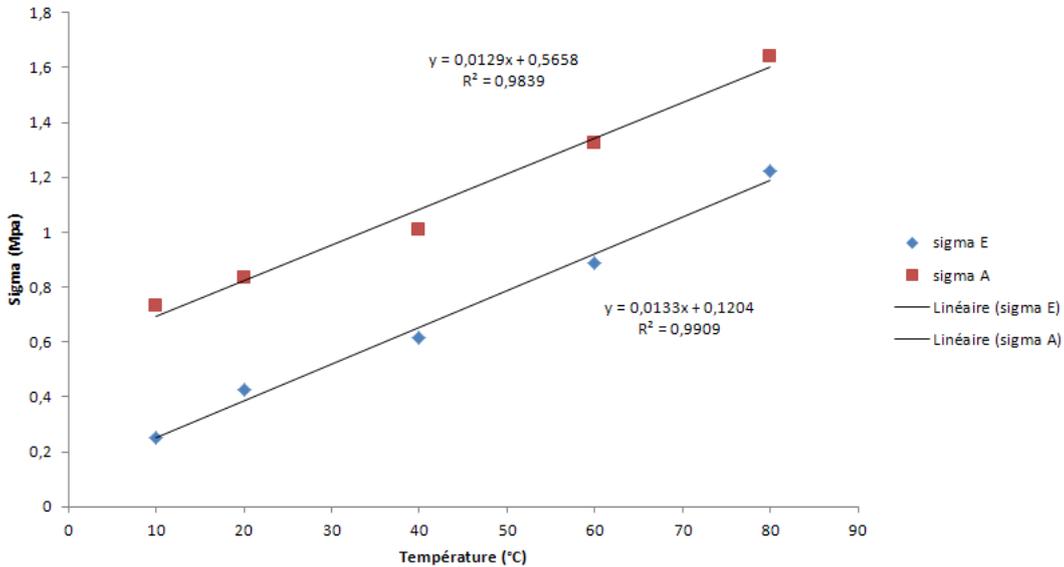


FIGURE 9.2.1: Diagramme de phase construit à partir des données de [91]. Contrainte nominale d'initiation de la cristallisation σ_A (rouge) et de fin de la fusion σ_E (bleu) et tendances linéaires respectives fonction de la température de l'échantillon.

9.3 Analyse des mécanismes proposés - phénoménologie

Dans cette section, on propose d'interpréter grâce à des relations phénoménologiques le comportement du caoutchouc cristallisant et de l'associer à des mécanismes phénoménologiques. Pour cela, on analyse tout d'abord les propriétés identifiées (relaxation de la phase amorphe, durcissement du réseau) sous forme de mécanismes phénoménologiques. Ensuite, on s'intéresse au lien entre la cristallinité et les variables internes proposées.

9.3.1 Relaxation de la phase amorphe

Analysons tout d'abord un réseau amorphe à 80°C. En élongation uniaxiale, la combinaison entre une loi de Mooney-Rivlin pour les petites élongations et une loi de Langevin pour les très grandes élongations peut être utilisée pour représenter précisément le comportement de l'amorphe [91]. La contrainte nominale en élongation uni-axiale s'écrit

alors

$$\sigma_{mooney-langevin} = 2TC_1 \frac{\lambda_m}{3} \left[L^{-1} \left(\frac{\lambda}{\lambda_m} \right) - \lambda^{-3/2} L^{-1} \left(\frac{\lambda^{-1/2}}{\lambda_m} \right) \right] + 2C_2 [1 - \lambda^{-3}] \quad (9.3.1)$$

avec trois constantes (C_1, C_2, λ_m) à déterminer et avec $L^{-1} : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}^+$ la fonction inverse de Langevin donnée par $L(\beta) = \coth \beta - \frac{1}{\beta}$. D'après Flory [48], l'extension des chaînes provoque une diminution d'entropie, ce qui conduit à la cristallisation d'une partie des segments des chaînes et d'autre part un gain d'entropie de la partie restée amorphe du polymère. Cette partie relaxe et la force exercée sur les points de réticulation diminue.

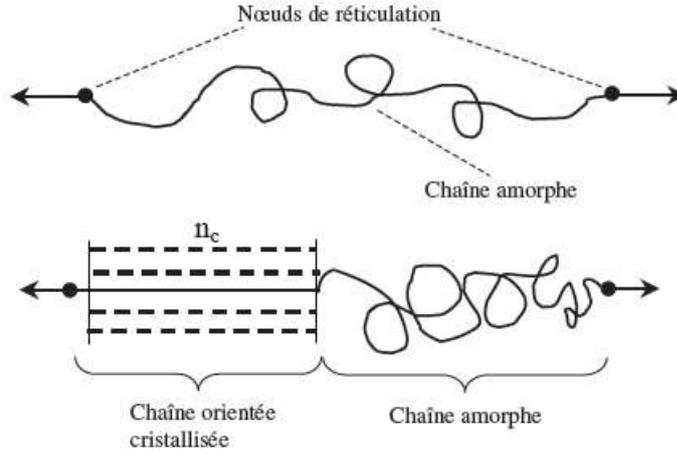


FIGURE 9.3.1: Chaîne semi-cristalline, modèle de Flory (figure tirée de [74]).

Le mécanisme de la figure 9.3.1 explique simplement ce phénomène sur une chaîne. Si λ représente l'extension à laquelle est soumise une chaîne de polymère comportant N_{seg} monomères, avant extension, la longueur de la chaîne à l'équilibre vaut $r_0 = \varpi \sqrt{N_{seg}}$ (où ϖ est un coefficient dépendant de la nature de la chaîne expérimentalement). Après traction, elle vaut $r = \lambda r_0$. Quand une cristallite de longueur $n_c l_{seg}$ se forme, l_{seg} étant la longueur d'un monomère, il reste $N_{seg} - n_c$ monomères dans la partie amorphe de la chaîne pour occuper la longueur $\lambda r_0 - n_c l_{seg}$. L'extension de la chaîne amorphe restante s'écrit alors

$$\lambda_{local} = \frac{\lambda \varpi \sqrt{N_{seg}} - n_c l_{seg}}{\varpi \sqrt{N_{seg} - n_c}}. \quad (9.3.2)$$

Lorsque $n_c \ll N_{seg}$, on écrit la relation précédente sous la forme

$$\lambda_{local} = \lambda - \lambda_\chi \quad (9.3.3)$$

avec λ_χ défini par $\lambda_\chi = \frac{n_c l_{seg}}{\varpi \sqrt{N_{seg}}}$. La relation (9.3.2) peut nous permettre d'estimer l'effet de relaxation sous la forme d'une diminution de l'élongation de la partie amorphe. Cette diminution ne représente pas une décomposition de la déformation en une déformation plastique puis élastique comme dans le cas de la décomposition multiplicative en plasticité grandes déformations. C'est lié à un gel d'une partie de chaîne et à une diminution de la partie active par (9.3.2) suivi d'une simplification supposant que seule une faible partie de la chaîne cristallise $n_c \ll N_{seg}$ dans la même philosophie qu'en Gaussien.

La relaxation de la phase amorphe est également très bien observée expérimentalement à la figure 9.1.17 où on sépare la contrainte nominale dans la phase amorphe et dans la phase cristalline. En conclusion, nous avons un premier mécanisme de relaxation qui se traduit autant de manière théorique qu'expérimentale par une cristallinité efficace λ_χ qui diminue la contribution amorphe au réseau semi-cristallin complet.

9.3.2 Durcissement du réseau

L'élongation de l'amorphe nous permet alors de travailler sur la raideur du réseau. En effet, on voit bien que la forte augmentation de la contrainte ne peut être seulement due à une augmentation de λ_{local} puisqu'on observe aux très hautes élongations une pente supérieure en contrainte dans le cas semi-cristallin que dans le cas amorphe (figure 9.1.19) et que la « contrainte amorphe » reconstruite à partir d'une mesure de l'élongation locale présente une quasi-absence de phase de durcissement (figure 9.1.17). Introduisons alors dans (9.3.1) une estimation expérimentale de λ_{local} [91] et une raideur de réseau sous la forme

$$R_T = 2k_B T \left(R_1 \langle \chi - \chi_B \rangle_+^2 + d_s \right) \quad (9.3.4)$$

avec :

- R_1 une constante phénoménologique,
- d_s la densité de points de réticulation initiale du réseau.

Un peu avant le point B et jusqu'au point C, la cristallinité augmente linéairement avec λ . Le réseau semi-cristallin, qui se met alors en place dans cette phase, crée deux mécanismes dont les effets s'opposent (figure 9.3.2) d'après Marchal :

- les chaînes relaxent entre les cristallites (section 9.3.1),
- il y a durcissement superlinéaire du matériau par (9.3.4) du fait de l'accroissement du nombre de cristallites pouvant créer si elles sont multi-chaînes des points de réticulation. Ces cristallites peuvent alors former des cages qui empêchent le matériau de se relaxer.

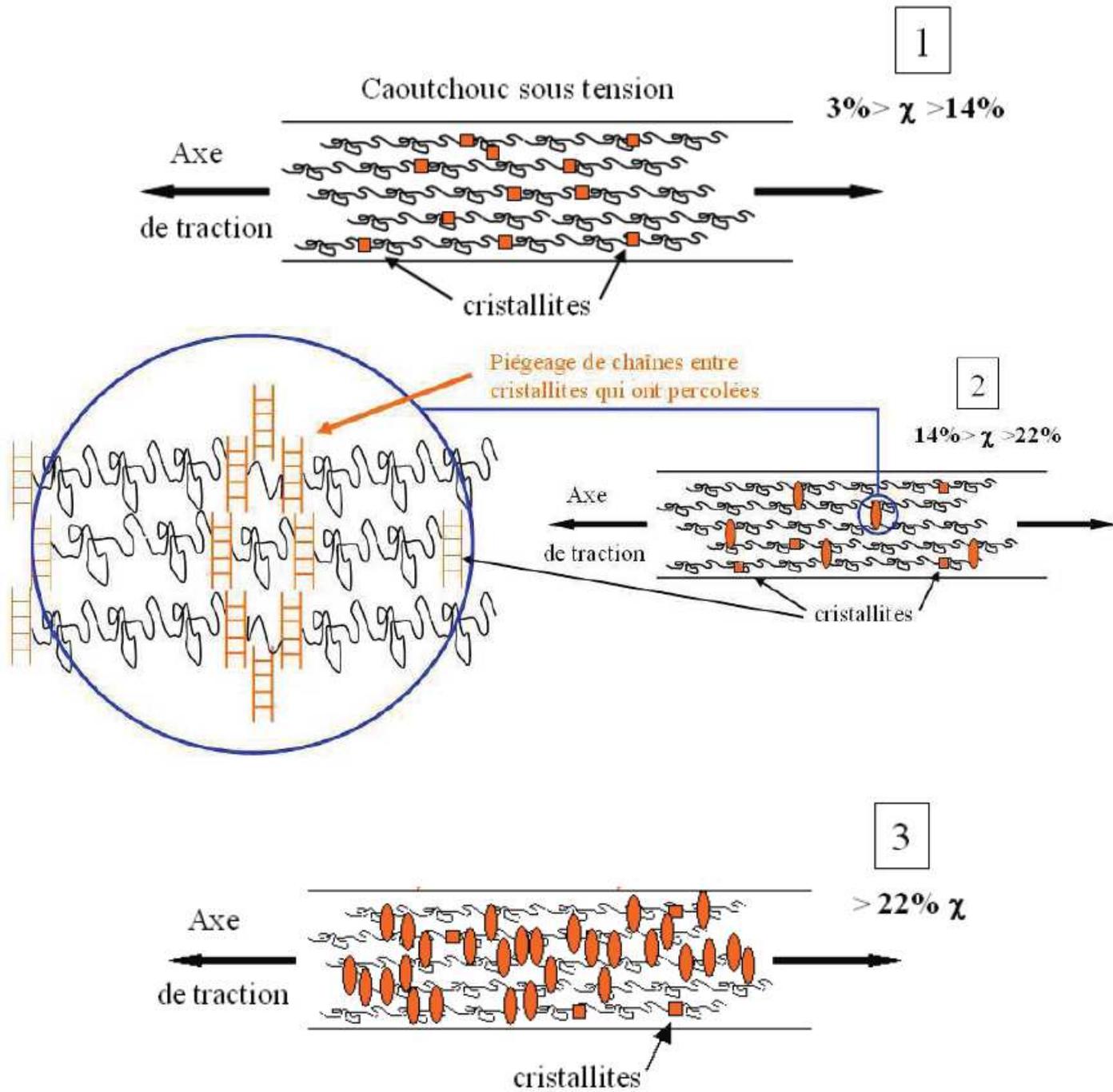


FIGURE 9.3.2: Mécanisme de cristallisation (figure tirée de [91]).

Dans cette phase (figure 9.1.19), on observe une dépendance quadratique en χ de la raideur R_T (9.3.4) (figure 9.3.3).

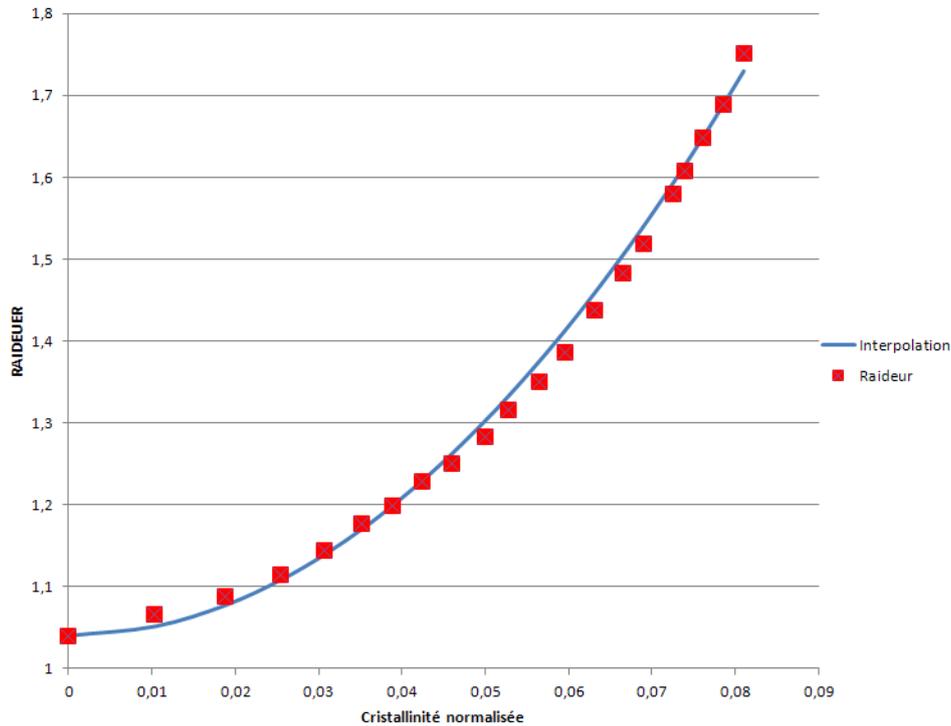


FIGURE 9.3.3: Raideur R_T du réseau en fonction de $\langle \chi - \chi_B \rangle$ la cristallinité normalisée et interpolation quadratique des résultats obtenus à partir des mesures d'élongation locale [91].

9.3.3 Expression de la cristallinité en fonction de λ_χ

Comme on l'a déjà souligné précédemment, il est possible que les cristallites aient des morphologies différentes quand elles nucléent à différents états de contrainte. Cette hypothèse se base sur l'évolution de l'orientation des chaînes amorphes avec la contrainte. Construire et suivre l'évolution de toutes les configurations cristallines possibles est bien au delà du cadre de cette étude et des possibilités de caractérisation thermomécanique. Cela nécessiterait la connaissance d'un nombre important de variables internes observables à des longueurs caractéristiques bien plus petites que celles auxquelles nous avons accès.

On préfère alors une approche plus phénoménologique qui consiste à se ramener à un cristal moyen dans une chaîne représentative qui possède une cristallinité efficace ou déformation de transformation λ_χ . Cette grandeur peut être comprise comme l'effet direct de la cristallite sur le champ de déformation. Si les cristallites qui nucléent à différents états de contrainte ne diffèrent pas par leur morphologie, ceci se traduit qualitativement par une proportionnalité entre λ_χ et χ comme c'est le cas dans la relation (9.3.2). Dans

ce cas, proposé par Flory [48] pour $n_c \ll N_{seg}$, on a

$$\lambda_\chi = \frac{n_c l_{seg}}{\alpha \sqrt{N_{seg}}}. \quad (9.3.5)$$

La croissance du cristal équivalent est ici donnée par l'augmentation du nombre de segments de Kuhn en phase cristalline n_c . Dans ce modèle, la cristallinité χ est représentée par la proportion de segments en phase cristalline et la cristallite est étendue et mono-chaîne.

Sous des hypothèses plus complexes, comme le suppose Marchal [91], les cristallites qui nucléent à de plus hauts niveaux de contraintes sont capables de générer une élongation de transformation plus importante à volume équivalent. Cela pourrait s'expliquer par un passage de cristallites lamellaires (faibles niveaux de contrainte) à des cristallites fibrillaires (hauts niveaux de contrainte) dû à un plus grand alignement des chaînes. Cette dépendance à la contrainte crée naturellement une variation dans la relation entre χ et λ_χ .

Puisque la littérature ne nous permet pas de trancher entre les deux approches, on propose d'utiliser la relation entre χ et λ_χ proposée par Lagoudas [77] dans la cristallisation sous contrainte des alliages à mémoire de forme. Elle s'écrit en cristallisation sous la forme

$$\frac{d\lambda_\chi}{dt} = \Lambda_{cris}(\sigma) \frac{d\chi}{dt}, \quad (9.3.6)$$

avec $\Lambda_{cris}(\sigma)$ l'élongation de transformation maximale atteignable par une cristallite qui nucléée à un niveau de contrainte σ . Lors de la fusion, on écrit de même

$$\frac{d\lambda_\chi}{dt} = \Lambda_{fus}(\sigma) \frac{d\chi}{dt}, \quad (9.3.7)$$

avec $\Lambda_{fus}(\sigma)$ l'élongation de transformation récupérée à chaque fusion à un niveau de contrainte σ donnée. Dans notre cas, cette relation ne sera utilisée que dans un but de post-processing des résultats pour relier la variable microcinématique λ_χ sortie du modèle au taux de cristallinité mesuré.

Chapitre 10

Modèle constitutif du caoutchouc cristallisant sous contrainte

Pour construire un modèle constitutif du caoutchouc cristallisant sous contrainte, on propose d'utiliser l'analyse faite au chapitre précédent en supposant que le phénomène dissipatif prépondérant en terme de dissipation est la cristallisation. Dans un premier temps, on construit à partir de cette analyse une loi de comportement uni-dimensionnelle thermodynamiquement cohérente pour un cycle de chargement (section 10.1). Ensuite, on présente une version simplifiée de cette loi (section 10.2) puis on ajoute les effets de viscosité du réseau (section 10.3). Enfin, pour pouvoir obtenir une loi de comportement multidirectionnelle capable de créer une réponse anisotrope, on intègre la loi 1D au concept de micro-sphère (section 10.4).

10.1 Loi 1D pour la cristallisation sous contrainte

10.1.1 Energie libre et variables internes

La construction d'une loi de comportement pour un système semi-cristallin passe tout d'abord par la construction d'une loi de comportement pour le caoutchouc amorphe. Pour cela, on peut s'appuyer sur la construction phénoménologique en élongation uni-axiale (9.3.1) telle que développée par Christian Miehe [53]. Pour la construire, on considère que l'énergie libre d'une chaîne polymère peut être modélisée par un ressort de Langevin. Ensuite, pour prendre en compte les effets de confinement (souvent représentés par un terme en I_2 dans l'énergie macroscopique) (sous-section 10.4.2), on suppose que la chaîne est confinée dans un tube de base variable (figure 10.1.1). Le comportement amorphe à l'échelle de la chaîne est donc caractérisé par :

- l'élongation de la chaîne,
- la contraction du tube,
- la température.

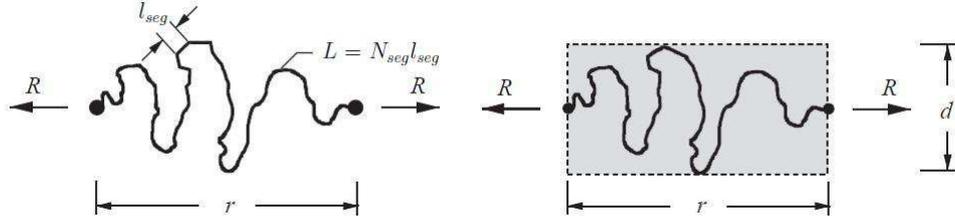


FIGURE 10.1.1: Chaîne amorphe contrainte (figure tirée de [53]).

Considérons alors une chaîne polymère représentative composée de N_{seg} segments de longueur l_{seg} . On note $L = N_{seg}l_{seg}$ sa longueur de référence. La chaîne non-contrainte par un tube est décrite par la variable r qui représente la distance entre ses extrémités. Pour une chaîne non-étirée à l'équilibre, on a en moyenne $r_0 = \sqrt{N_{seg}l_{seg}}$. L'élongation de la chaîne par rapport à cette longueur de référence s'écrit alors

$$\lambda = \frac{r}{r_0}. \quad (10.1.1)$$

Lorsque le réseau est amorphe, on a remarqué (figure 9.1.19) qu'il était nécessaire de prendre en compte l'effet d'extensibilité finie de la chaîne aux grandes élongations. C'est pour modéliser cet effet que l'on utilise le ressort de Langevin. Dans une direction donnée, on considère alors que l'on a n_{ch} chaînes allongées d'énergie libre

$$\psi_f = k_B T N_{seg} \left[\frac{\lambda}{\sqrt{N_{seg}}} L^{-1} \left(\frac{\lambda}{\sqrt{N_{seg}}} \right) + \ln \frac{L^{-1} \left(\frac{\lambda}{\sqrt{N_{seg}}} \right)}{\sinh \left(L^{-1} \left(\frac{\lambda}{\sqrt{N_{seg}}} \right) \right)} \right], \quad (10.1.2)$$

avec $L^{-1} : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}^+$ la fonction inverse de Langevin donnée par $L(\beta) = \coth \beta - \frac{1}{\beta}$. Le ressort de Langevin est équivalent au ressort gaussien pour de petites élongations et possède une extensibilité finie en $\lambda = \sqrt{N_{seg}}$.

Ensuite, on prend en compte les contraintes d'exclusion entre les différentes molécules qui forment le réseau. Pour cela, on peut utiliser un modèle de tube qui caractérise ces contraintes [41]. On suppose alors que chaque chaîne est confinée dans un tube de diamètre d dont les deux extrémités sont fixées aux extrémités de la chaîne et dont on limite la contraction de section. On caractérise alors cette contrainte par l'aire du tube d . Pour un tube droit, cette contrainte se traduit par la présence d'une énergie libre

$$\psi_c = k_B T N_{seg} \left[\alpha \left(\frac{l_{seg}}{d_0} \right)^2 \nu \right], \quad (10.1.3)$$

avec :

- α une constante qui dépend de la forme de la base du tube,

- $\nu = \left(\frac{d_0}{d}\right)^2$ la contraction relative de la base du tube,
- d_0 le diamètre du tube dans le réseau non déformé.

Dans la construction du modèle 1D, on remplace provisoirement cette mesure de contraction par un terme d'énergie en λ^{-1} . Cette approximation permet d'obtenir le terme de force en $-\lambda^{-2}$ utilisé par [53] pour le modèle 1D en présence des ces contraintes lorsque $\lambda \rightarrow 0$. Dans la gamme d'élongations utilisées pour le recalage du modèle 1D, cette approximation donne des résultats similaires à ν en élongation uniaxiale. L'énergie libre pour n_{ch} chaînes amorphes présentes dans une direction du réseau s'écrit alors en supposant que l'énergie libre de la chaîne (10.1.2) et du tube (10.1.3) sont additives et que toutes les chaînes dans la direction sont dans le même état moyen

$$\psi_{amorphe}(\lambda, T) = n_{ch} k_B T N_{seg} \left[\frac{\lambda}{\sqrt{N_{seg}}} L^{-1} \left(\frac{\lambda}{\sqrt{N_{seg}}} \right) + \ln \frac{L^{-1} \left(\frac{\lambda}{\sqrt{N_{seg}}} \right)}{\sinh \left(L^{-1} \left(\frac{\lambda}{\sqrt{N_{seg}}} \right) \right)} + \alpha \left(\frac{l_{seg}}{d_0} \right)^2 \lambda^{-1} \right]. \quad (10.1.4)$$

Pour rendre l'expression (10.1.4) plus compacte, on note

$$\psi_{amorphe}(\lambda, T) = n_{ch} k_B T N_{seg} \left[F_\beta \left(\frac{\lambda}{\sqrt{N_{seg}}} \right) + U \lambda^{-1} \right], \quad (10.1.5)$$

avec :

- $F_\beta \left(\frac{\lambda}{\sqrt{N_{seg}}} \right) = \frac{\lambda}{\sqrt{N_{seg}}} L^{-1} \left(\frac{\lambda}{\sqrt{N_{seg}}} \right) + \ln \frac{L^{-1} \left(\frac{\lambda}{\sqrt{N_{seg}}} \right)}{\sinh \left(L^{-1} \left(\frac{\lambda}{\sqrt{N_{seg}}} \right) \right)}$ l'énergie libre de Langevin,
- $U = \alpha \left(\frac{l_{seg}}{d_0} \right)^2$ le module du tube.

Nous aurons besoin dans la suite d'une approximation numérique de la fonction de Langevin. On peut choisir classiquement l'approximation de Padé proposée par [33] qui donne de bons résultats

$$L^{-1} \left(\frac{\lambda}{\sqrt{N_{seg}}} \right) \approx \frac{\lambda}{\sqrt{N_{seg}}} \frac{3N_{seg} - \lambda^2}{N_{seg} - \lambda^2}. \quad (10.1.6)$$

On peut maintenant construire l'énergie libre pour le cas semi-cristallin.

Système semi-cristallin

L'étude faite au chapitre 9 nous a permis de montrer que sous contrainte, des cristallites nucléent dans le caoutchouc. Leur présence induit toujours trois mécanismes observables à l'échelle constitutive :

1. la relaxation des chaînes amorphes,
2. un durcissement du réseau par changement de la morphologie,

3. un effet de raideur additionnelle par la présence de nano-renforts (les cristallites) pouvant percoler.

La relaxation a été modélisé au chapitre 9 par la formule (9.3.2) en $\lambda \rightarrow \lambda - \lambda_\chi$. Ensuite, le mécanisme de durcissement associé à la conformation de la cristallite est simplement pris en compte de manière phénoménologique grâce à une énergie stockée lors du changement de phase sous la forme $g(\lambda_\chi)$ (figure 10.1.2)

$$g(\lambda_\chi) = \begin{cases} g(0) = [0, \infty] \text{ pour } \lambda_\chi < 0, \\ \overset{\circ}{g}(\lambda_\chi) \text{ régulière croissante pour } \lambda_\chi \in]0, \lambda_{\chi, \text{sat}}[, \\ g(\lambda_{\chi, \text{sat}}) = [\overset{\circ}{g}(\lambda_{\chi, \text{sat}}), \infty]. \end{cases} \quad (10.1.7)$$

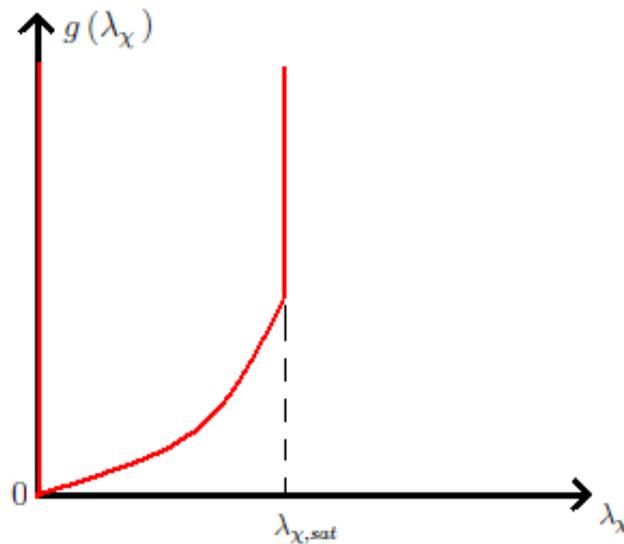


FIGURE 10.1.2: Energie stockée

Cette construction permet d'interdire des cristallinités négatives ou des cristallinités supérieures à $\lambda_{\chi, \text{sat}}$. On obtient ici une forme bien connue en plasticité parfaite. Le mécanisme d'élasticité activé par la présence de cristallites dans le caoutchouc est, quant à lui, uniquement présent aux grandes élongations $\lambda \geq \lambda^*$ et non dissipatif ($\lambda^* > \lambda_A$) avec λ^* l'élongation d'activation du mécanisme. Il est donc pris sous la forme d'une énergie libre supplémentaire

$$\psi_{el}(\lambda_\chi, \lambda) = F(\langle \lambda - \lambda^* \rangle_+) \text{ si } \lambda_\chi > 0. \quad (10.1.8)$$

Enfin, puisque de la chaleur latente est produite/absorbée durant la cristallisation/fusion sous contrainte, une dépendance à la température est présente par le biais d'une enthalpie

de formation h_f et d'une entropie s_f de phase cristalline. On propose donc finalement d'écrire l'énergie libre du système semi-cristallin sous la forme

$$\begin{aligned} \psi_{semi-cris}(\lambda, \lambda_\chi, T) = & n_{ch} R_A T \left[F_\beta \left(\frac{\lambda - \lambda_\chi}{\sqrt{N_{seg}}} \right) + U \lambda^{-1} \right] + n_{ch} g(\lambda_\chi) \quad (10.1.9) \\ & + n_{ch} \lambda_\chi (s_f T - h_f) + n_{ch} R_B T F \left(\langle \lambda - \lambda^* \rangle_+ \right). \end{aligned}$$

Cette énergie introduit :

- la relaxation à travers le choix de l'élongation locale $\lambda_{local} = \lambda - \lambda_\chi$ utilisée dans l'énergie libre de chaîne amorphe,
- $R_A = k_B N_{seg}$ et R_B les deux raideurs, respectivement du milieu amorphe et cristallisé,
- $g(\lambda_\chi)$ l'énergie stockée dans les cristallites en fonction de leur morphologie,
- $\lambda_{\chi, sat}$ l'élongation inélastique maximum atteignable dans un réseau semi-cristallin,
- s_f l'entropie de formation de la cristallite,
- h_f l'enthalpie de formation de la cristallite.

10.1.2 Relations constitutives

Pour obtenir les équations constitutives, on introduit l'inégalité de dissipation locale (2.4.13) qui s'écrit en une dimension d'espace

$$D = P \frac{d\lambda}{dt} - \frac{d\psi_{semi-cris}}{dt} - s \frac{dT}{dt} \geq 0, \quad (10.1.10)$$

avec :

- P la contrainte 1D en configuration de référence,
- s l'entropie.

En développant $\frac{d\psi_{semi-cris}(\lambda, \lambda_\chi, T)}{dt}$ par rapport aux variables internes, on obtient

$$\frac{d\psi_{semi-cris}(\lambda, \lambda_\chi, T)}{dt} = \frac{\partial \psi_{semi-cris}}{\partial \lambda} \frac{d\lambda}{dt} + \frac{\partial \psi_{semi-cris}}{\partial \lambda_\chi} \frac{d\lambda_\chi}{dt} + \frac{\partial \psi_{semi-cris}}{\partial T} \frac{dT}{dt}. \quad (10.1.11)$$

En utilisant la forme explicite de l'énergie libre du système semi-cristallin (10.1.9), on obtient donc les équations constitutives pour la contrainte en écrivant que la dissipation doit être nulle dans toute évolution à cristallisation figée (hypothèse d'élasticité). On obtient alors une contrainte axiale donnée par

$$P = \frac{\partial \psi_{semi-cris}}{\partial \lambda} = P_{am} + P_{tube} + P_{el}, \quad (10.1.12)$$

avec trois composantes : une composante de chaîne amorphe P_{am} , une composante de tube P_{tube} et une composante liée à l'activation de l'élasticité P_{el} :

$$\begin{aligned}
 - P_{am} &= n_{ch} \frac{R_A}{\sqrt{N_{seg}}} T L^{-1} \left(\frac{\lambda - \lambda_\chi}{\sqrt{N_{seg}}} \right), \\
 - P_{tube} &= -n_{ch} R_A T U \lambda^{-2}, \\
 - P_{el} &= \begin{cases} 0 & \text{si } \lambda < \lambda^*, \\ n_{ch} R_B T F'(\lambda - \lambda^*) & \text{si } \lambda \geq \lambda^*. \end{cases}
 \end{aligned}$$

La nullité de la dissipation dans un régime quasi-statique nous donne la valeur de l'entropie

$$\begin{aligned}
 s = -\frac{\partial \psi_{semi-cris}}{\partial T} &= -n_{ch} R_A F_\beta \left(\frac{\lambda - \lambda_\chi}{\sqrt{N_{seg}}} \right) - n_{ch} R_A U \lambda^{-1} - n_{ch} R_B F \left(\langle \lambda - \lambda^* \rangle_+ \right) \\
 &\quad - n_{ch} \lambda_\chi s_f.
 \end{aligned} \tag{10.1.13}$$

L'énergie libre n'étant pas différentiable en λ_χ du fait de la construction du terme g , il faut distinguer la force thermodynamique de cristallisation π_χ^d définie par la dérivée à droite de $\psi_{semi-cris}$ en λ_χ pour $\lambda_\chi \in [0, \lambda_{\chi, sat}[$ et λ_χ croissant de la force thermodynamique de fusion π_χ^g définie par la dérivée à gauche de $\psi_{semi-cris}$ en λ_χ pour $\lambda_\chi \in]0, \lambda_{\chi, sat}]$ et pour λ_χ décroissant. On a donc :

1. si $\frac{d\lambda_\chi}{dt} > 0$,

$$\pi_\chi = \pi_\chi^d = - \left(\frac{\partial \psi_{semi-cris}}{\partial \lambda_\chi} \right)^d = P_{am} - n_{ch} \frac{\partial \overset{\circ}{g}}{\partial \lambda_\chi} - n_{ch} (s_f T - h_f), \forall \lambda_\chi \in [0, \lambda_{\chi, sat}[, \tag{10.1.14}$$

2. si $\frac{d\lambda_\chi}{dt} < 0$,

$$\pi_\chi = \pi_\chi^g = - \left(\frac{\partial \psi_{semi-cris}}{\partial \lambda_\chi} \right)^g = P_{am} - n_{ch} \frac{\partial \overset{\circ}{g}}{\partial \lambda_\chi} - n_{ch} (s_f T - h_f), \forall \lambda_\chi \in]0, \lambda_{\chi, sat}]. \tag{10.1.15}$$

10.1.3 Lois d'évolution

Par application des équations constitutives (10.1.12, 10.1.13) dans (10.1.11), on trouve que l'inégalité de dissipation (10.1.10) se réduit à

$$D = \pi_\chi^d \frac{d\lambda_\chi}{dt} \geq 0 \text{ si } \frac{d\lambda_\chi}{dt} > 0, \quad D = \pi_\chi^g \frac{d\lambda_\chi}{dt} \geq 0 \text{ si } \frac{d\lambda_\chi}{dt} < 0. \tag{10.1.16}$$

L'inégalité est automatiquement vérifiée à cristallisation figée $\frac{d\lambda_\chi}{dt} = 0$. On suppose que durant l'évolution de la variable interne, on obtient une inégalité stricte sur la dissipation lors de la cristallisation. Cette hypothèse est naturelle puisque le comportement du caoutchouc cristallisant est dissipatif en charge d'après les expériences. Lorsqu'il y a fusion, on est par contre dans un état de pseudo équilibre. On suppose donc que cet état

est non dissipatif. En appliquant ces conditions, on trouve que π_χ doit être strictement positif lorsqu'il y a cristallisation et nul lorsqu'il y a fusion.

On définit alors les lois d'évolution par rapport à la cristallinité à l'équilibre qui vérifie

$$\pi_\chi(\lambda_{\chi,eq}, \lambda, T) = 0, \quad (10.1.17)$$

et qui relie de manière unique λ_χ à un couple (λ, T) donné. En fusion, $\frac{d\lambda_\chi}{dt} < 0$ on prend donc

$$\pi_\chi^g = 0. \quad (10.1.18)$$

Pour la cristallisation ($\frac{d\lambda_\chi}{dt} > 0$), qui est en retard sur l'équilibre, on ne l'autorise que si la force thermodynamique est égale à un seuil donné

$$\pi_\chi^d = n_{ch} Y(\lambda_{\chi,sat} - \lambda_\chi) \quad (10.1.19)$$

avec une fonction Y caractéristique du matériau positive décroissante nulle à l'origine ($Y(0) = 0$). En effet, le mécanisme simplifié que l'on a pu extraire des observations sur le comportement cyclique est le rapprochement entre la courbe d'équilibre en $\lambda_{\chi,eq}(\lambda, T)$ et la même courbe en charge lorsque $\lambda_{\chi,max_{cycle}} \rightarrow \lambda_{\chi,sat}$. Lorsque $\lambda_{\chi,max_{cycle}} = \lambda_{\chi,sat}$, il est alors naturel d'après nos hypothèses que la décharge élastique soit nulle puisque le problème est à l'équilibre. Pour finir, on impose que le seuil vérifie l'inégalité

$$3k_B \sqrt{N_{seg}} T_g + \frac{\partial^2 g^\circ}{\partial \lambda_\chi^2} > -\frac{\partial Y}{\partial \lambda_\chi} \geq 0. \quad (10.1.20)$$

La température T_g ici est la température de transition vitreuse en deçà de laquelle le milieu est entièrement cristallisé et notre modèle ne s'applique plus. Ceci qui nous permet de garantir

$$-\frac{\partial \pi_\chi^d}{\partial \lambda_\chi} + n_{ch} \frac{\partial Y}{\partial \lambda_\chi} > 0, \quad \forall \lambda_\chi \in [0, \lambda_{\chi,sat}[. \quad (10.1.21)$$

En effet, on a par (10.1.14, 10.1.2, 10.1.6) ,

$$-\frac{\partial \pi_\chi^d}{\partial \lambda_\chi} + n_{ch} \frac{\partial Y}{\partial \lambda_\chi} = n_{ch} k_B \sqrt{N_{seg}} T \frac{3N^2 + (\lambda - \lambda_\chi)^4}{(N - (\lambda - \lambda_\chi)^2)^2} + n_{ch} \frac{\partial^2 g^\circ}{\partial \lambda_\chi^2} + n_{ch} \frac{\partial Y}{\partial \lambda_\chi}, \quad (10.1.22)$$

Comme $(\lambda - \lambda_\chi)^2 \in [0, N_{seg}[$, on en déduit

$$-\frac{\partial \pi_\chi^d}{\partial \lambda_\chi} + n_{ch} \frac{\partial Y}{\partial \lambda_\chi} \geq n_{ch} \left(3k_B \sqrt{N_{seg}} T_g + \frac{\partial^2 g^\circ}{\partial \lambda_\chi^2} + \frac{\partial Y}{\partial \lambda_\chi} \right) > 0 \quad (10.1.23)$$

qui sera donc positif si (10.1.20). On propose donc d'écrire l'évolution sous la forme de trois cas :

1. Si $\pi_\chi^d = n_{ch}Y(\lambda_{\chi,sat} - \lambda_\chi)$ et $\frac{d\pi_\chi^d}{dt} > 0$ à $\lambda_\chi \in [0, \lambda_{\chi,sat}[$ figé et on pose

$$\frac{d}{dt} \left(\pi_\chi^d - n_{ch}Y(\lambda_{\chi,sat} - \lambda_\chi) \right) = 0 \Rightarrow \frac{d\lambda_\chi}{dt} = \frac{\frac{\partial \pi_\chi^d}{\partial \lambda} \frac{d\lambda}{dt} + \frac{\partial \pi_\chi^d}{\partial T} \frac{dT}{dt}}{-\frac{\partial \pi_\chi^d}{\partial \lambda_\chi} + n_{ch} \frac{\partial Y}{\partial \lambda_\chi}} \quad (10.1.24)$$

qui est positif par (10.1.21). On est donc en cristallisation que l'on pilote en faisant π_χ^d à rester sur la courbe de cristallisation $\pi_\chi^d - n_{ch}Y(\lambda_{\chi,sat} - \lambda_\chi) = 0$.

2. Si $\pi_\chi^g = 0$ et $\frac{d\pi_\chi^g}{dt} < 0$ à $\lambda_\chi \in]0, \lambda_{\chi,sat}]$ figé et on pose

$$\frac{d\pi_\chi^g}{dt} = 0 \Rightarrow \frac{d\lambda_\chi}{dt} = \frac{\frac{\partial \pi_\chi^g}{\partial \lambda} \frac{d\lambda}{dt} + \frac{\partial \pi_\chi^g}{\partial T} \frac{dT}{dt}}{-\frac{\partial \pi_\chi^g}{\partial \lambda_\chi}} \quad (10.1.25)$$

qui est strictement négative car $\overset{\circ}{g}$ est convexe. On est en fusion.

3. Dans tous les autres cas, on prend $\frac{d\lambda_\chi}{dt} = 0$.

Ce modèle vérifie alors les inégalités suivantes

Théorème 0 : On a nécessairement $\frac{d\lambda_\chi}{dt} \leq 0$ en $\lambda_\chi = \lambda_{\chi,sat}$ et $\frac{d\lambda_\chi}{dt} \geq 0$ en $\lambda_\chi = 0$ donc on reste toujours dans l'intervalle d'admissibilité.

Théorème 1 : On garantit l'inégalité de dissipation

- Cas 1 : la dissipation est positive ou nulle car $\frac{d\lambda_\chi}{dt} > 0$ et $\pi_\chi^d = n_{ch}Y(\lambda_{\chi,sat} - \lambda_\chi) \geq 0$.
- Cas 2 : la dissipation est positive ou nulle car $\pi_\chi^g = 0$.
- Cas 3 : la dissipation est positive ou nulle car $\frac{d\lambda_\chi}{dt} = 0$.

Théorème 2 : Par construction, le modèle borne la force thermodynamique :

- Le cas 1 empêche d'avoir $\pi_\chi^d > n_{ch}Y(\lambda_{\chi,sat} - \lambda_\chi)$, $\forall \lambda_\chi \in [0, \lambda_{\chi,sat}[$
- Le cas 2 empêche d'avoir $\pi_\chi^g < 0$, $\forall \lambda_\chi \in]0, \lambda_{\chi,sat}]$.

Pour pouvoir utiliser ce modèle dans un cadre industriel, on en propose une version simplifiée dans la section suivante.

10.2 Modèle simplifié

10.2.1 Formulation

Dans cette sous-section, on détaille une version simplifiée du modèle. Pour obtenir une version plus simple de l'énergie libre, on raisonne d'abord sur une seule chaîne ($n_{ch} = 1$) et on pose $U = 1$. Ensuite, on réduit le ressort de Langevin et $F(\lambda)$ à des ressorts linéaires ce qui nous donne d'après (10.1.9)

$$R_A T F_\beta \left(\frac{\lambda - \lambda_\chi}{\sqrt{N_{seg}}} \right) \simeq R_{A-G} T \frac{(\lambda - \lambda_\chi)^2}{2}, \quad (10.2.1)$$

$$F(\lambda) = \frac{\langle \lambda - \lambda_* \rangle_{\pm}^2}{2}. \quad (10.2.2)$$

Enfin, on suppose que l'énergie stockée s'écrit sous la forme quadratique

$$\mathring{g}(\lambda_{\chi}) = g_1 \frac{\lambda_{\chi}^2}{2} \text{ pour } \lambda_{\chi} \in]0, \lambda_{\chi, sat}[\quad (10.2.3)$$

et que le seuil varie linéairement

$$Y = (\lambda_{\chi, sat} - \lambda_{\chi}) Y_1, \quad (10.2.4)$$

avec $g_1 > 0$ et $Y_1 > 0$. Cela donne finalement d'après (10.1.9, 10.2.2 et 10.2.1)

$$\begin{aligned} \psi_{semi-cris-gauss}(\lambda, \lambda_{\chi}, T) = & R_{A-G}T \left(\frac{(\lambda - \lambda_{\chi})^2}{2} + \lambda^{-1} \right) + g(\lambda_{\chi}) \\ & + R_B T \frac{\langle \lambda - \lambda_* \rangle_{\pm}^2}{2} + \lambda_{\chi} (s_f T - h_f). \end{aligned} \quad (10.2.5)$$

La contrainte s'écrit alors

$$P = \begin{cases} R_{A-G}T (\lambda - \lambda_{\chi} - \lambda^{-2}) & \text{si } \lambda < \lambda_*, \\ R_{A-G}T (\lambda - \lambda_{\chi} - \lambda^{-2}) + R_B T (\lambda - \lambda_*) & \text{si } \lambda \geq \lambda_*. \end{cases} \quad (10.2.6)$$

On note par ailleurs :

- $P_1 = R_{A-G}T (\lambda - \lambda_{\chi})$,
- $P_2 = R_B T (\lambda - \lambda_*)$.

La force thermodynamique π_{χ} s'écrit finalement par (10.1.14)

$$\pi_{\chi}^g = \pi_{\chi}^d = P_1 - s_f T + h_f - g_1 \lambda_{\chi}. \quad (10.2.7)$$

On remarque que pour le modèle simplifié, la condition (10.1.20) s'écrit

$$R_{A-G}T g + g_1 > Y_1. \quad (10.2.8)$$

De manière à vérifier que ce modèle est bien capable de reproduire le comportement recherché, on réalise une analyse analytique avant d'ajouter la viscosité du réseau.

10.2.2 Test du modèle 1D sur un cas analytique

Dans cette sous-section, on commence par proposer une procédure afin de déterminer les constantes du modèle. Ensuite, on calcule de manière analytique la réponse du modèle à un cycle de chargement piloté en λ . Le cycle choisi est supposé saturant en début et en fin de cycle. Cela signifie qu'en bas du cycle, on aura $\lambda_{\chi} = 0$ et qu'en haut du cycle, on aura $\lambda_{\chi} = \lambda_{\chi, sat}$. Enfin, on commente les différentes propriétés obtenues.

Zone de comportement amorphe pour $\lambda_x = 0$

Au début de ce cycle ($P < P(\lambda_A, 0, T)$), la contrainte est en $R_{A-G}T(\lambda - \lambda^{-2})$ par (10.2.6). On retrouve alors bien $P(\lambda = 1) = 0$. Cette zone est donc pilotée entièrement par la raideur R_{A-G} et permet de la fixer. Dans la suite, on ne considère pas le terme de tube en λ^{-2} puisqu'il n'influe pas sur la zone d'élongation étudiée en cristallisation et en fusion. De plus, ce terme n'est pas présent dans la force thermodynamique.

Problème en fusion et en cristallisation

Les trois états caractérisant ce cycle sont :

- en $\lambda_x = 0$, le début de la cristallisation à $P(\lambda_A, 0, T)$,
- en $\lambda_x = 0$, la fin de de la fusion à $P(\lambda_E, 0, T)$,
- en $\lambda_x = \lambda_{x,sat}$ avec une contrainte $P(\lambda_C, \lambda_{x,sat}, T)$ identique en cristallisation et en fusion puisque, lors d'un cycle saturant, on n'observe pas de décharge élastique.

La première condition s'écrit donc, par (10.2.7), sous la forme

$$P(\lambda_A, 0, T) - s_f T + h_f = Y_1 \lambda_{x,sat}. \quad (10.2.9)$$

De la même manière, on obtient la seconde condition

$$P(\lambda_E, 0, T) - s_f T + h_f = 0, \quad (10.2.10)$$

et la troisième identique en fusion et en cristallisation

$$P_1(\lambda_C, \lambda_{x,sat}, T) - s_f T + h_f - g_1 \lambda_{x,sat} = 0. \quad (10.2.11)$$

A priori, la dépendance à la température de P_E et P_A est correcte car expérimentalement ces contraintes sont effectivement linéaires à peu près de même pente en T (figure 9.2.1). On a donc $P(\lambda_E, 0, T_E)$ sous la forme

$$P(\lambda_E, 0, T) = C_{fus} T + P(\lambda_E, 0, T_E), \quad (10.2.12)$$

avec :

- $P(\lambda_E, 0, T_E) = -h_f$,
- $C_{fus} = s_f$.

Par soustraction des conditions (10.2.9,10.2.10) sur la transformation, on obtient en utilisant la forme (10.2.6) de P_1

$$Y_1 = R_{A-G} T \frac{\lambda_A - \lambda_E}{\lambda_{x,sat}} > 0 \quad (10.2.13)$$

par définition de λ_A et λ_E . La condition (10.2.11) nous permet ensuite d'obtenir

$$g_1 = R_{A-G} T \frac{\lambda_C - \lambda_{x,sat} - \lambda_E}{\lambda_{x,sat}}. \quad (10.2.14)$$

On rappelle alors que l'on doit vérifier deux conditions :

- la condition de positivité de l'énergie stockée qui impose $\lambda_C - \lambda_E \geq \lambda_{\chi,sat}$,
- la condition sur les lois d'évolution (10.2.8) qui impose $\lambda_C > \lambda_A$.

Avec les constantes obtenues, on obtient donc en fusion d'après (10.1.18)

$$\lambda - \lambda_E - (\lambda_C - \lambda_E) \frac{\lambda_{\chi}}{\lambda_{\chi,sat}} = 0, \quad (10.2.15)$$

et lors de la cristallisation d'après (10.1.19)

$$\lambda - \lambda_A - (\lambda_C - \lambda_A) \frac{\lambda_{\chi}}{\lambda_{\chi,sat}} = 0. \quad (10.2.16)$$

On obtient donc en fusion par (10.2.15) (bas de la figure 10.2.1)

$$\lambda_{\chi} = \lambda_{\chi,sat} \frac{\lambda - \lambda_E}{\lambda_C - \lambda_E}, \quad (10.2.17)$$

et en cristallisation par (10.2.16) (bas de la figure 10.2.1)

$$\lambda_{\chi} = \lambda_{\chi,sat} \frac{\lambda - \lambda_A}{\lambda_C - \lambda_A}. \quad (10.2.18)$$

On retrouve bien une pente plus grande dans la phase de cristallisation que dans la phase de fusion car

$$\lambda_A > \lambda_E \quad (10.2.19)$$

par le diagramme de phase. En fusion, la contrainte s'écrit ensuite en négligeant le terme de tube (haut de la figure 10.2.1)

$$P = \begin{cases} R_{A-G}T \left(\lambda \left(1 - \frac{\lambda_{\chi,sat}}{\lambda_C - \lambda_E} \right) + \frac{\lambda_{\chi,sat}\lambda_E}{\lambda_C - \lambda_E} \right) & \text{si } \lambda < \lambda_*, \\ R_{A-G}T \left(\lambda \left(1 - \frac{\lambda_{\chi,sat}}{\lambda_C - \lambda_E} \right) + \frac{\lambda_{\chi,sat}\lambda_E}{\lambda_C - \lambda_E} \right) + R_{B}T (\lambda - \lambda_*) & \text{si } \lambda \geq \lambda_*. \end{cases} \quad (10.2.20)$$

En cristallisation, la contrainte s'écrit enfin (haut de la figure 10.2.1)

$$P = \begin{cases} R_{A-G}T \left(\lambda \left(1 - \frac{\lambda_{\chi,sat}}{\lambda_C - \lambda_A} \right) + \frac{\lambda_{\chi,sat}\lambda_A}{\lambda_C - \lambda_A} \right) & \text{si } \lambda < \lambda_*, \\ R_{A-G}T \left(\lambda \left(1 - \frac{\lambda_{\chi,sat}}{\lambda_C - \lambda_A} \right) + \frac{\lambda_{\chi,sat}\lambda_A}{\lambda_C - \lambda_A} \right) + R_{B}T (\lambda - \lambda_*) & \text{si } \lambda \geq \lambda_*. \end{cases} \quad (10.2.21)$$

On vérifie donc bien qu'il y a relaxation de la contrainte par le changement de phase puisque le facteur qui précède λ est plus petit que 1. De plus, on observe que, puisque $\lambda_A > \lambda_E$, la relaxation de la partie amorphe du réseau est nécessairement plus grande en cristallisation qu'elle ne l'est en fusion. On peut également remarquer qu'il n'y a aucune restriction dans la relation entre λ_* et λ_c , on peut donc avoir $\lambda_* \leq \lambda_c$ ou $\lambda_* \geq \lambda_c$. Seulement, dans l'interprétation physique du modèle, le mécanisme en λ_* représente la création d'un « macro-réseau » par les nouvelles nucléations. Ce n'est donc pas dans l'esprit du modèle de prendre $\lambda_* \geq \lambda_c$.

Zone de comportement amorphe après saturation en $\lambda_\chi = \lambda_{\chi,sat}$

Après avoir atteint $\lambda_\chi = \lambda_{\chi,sat}$, la contrainte s'écrit

$$P = \begin{cases} R_{A-G}T (\lambda - \lambda_{\chi,sat}) & \text{si } \lambda < \lambda_*, \\ R_{A-G}T (\lambda - \lambda_{\chi,sat}) + R_B T (\lambda - \lambda_*) & \text{si } \lambda \geq \lambda_*. \end{cases} \quad (10.2.22)$$

Dans ce cas, le comportement redevient élastique.

Résultats

On retrouve donc bien les « grandes tendances » de comportement du caoutchouc cristallisant sous contrainte (figure 10.2.1) :

- la présence d'une hystérèse,
- la relaxation en cristallisation et en fusion,
- l'effet de raideur additionnelle,
- les courbes de fusion et de cristallisation qui se rejoignent en λ_C .

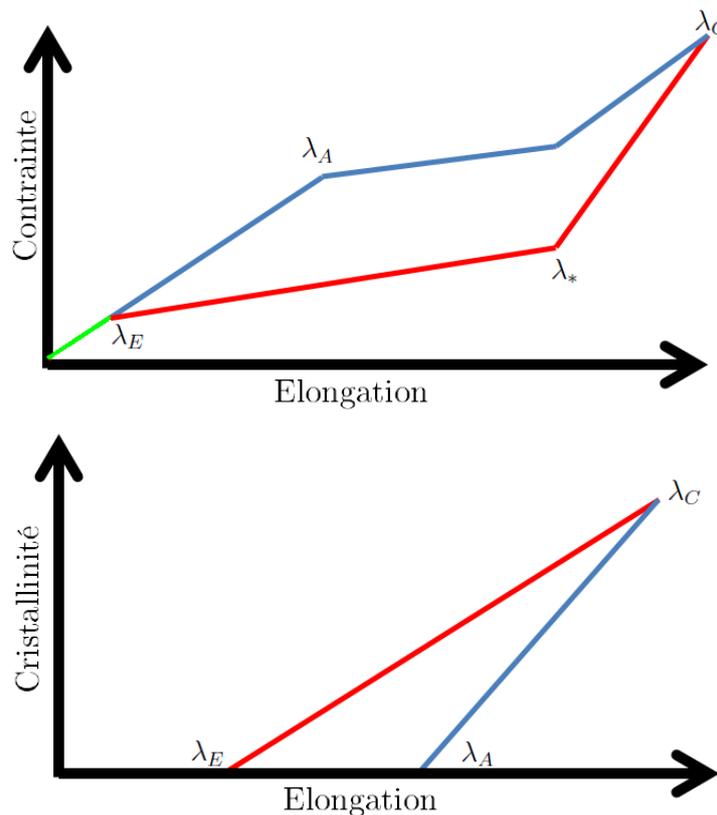


FIGURE 10.2.1: Résultat analytique de la contrainte (en haut) et de la cristallinité (en bas) en fonction de λ (Bleu en cristallisation) (Rouge en fusion) (Vert en amorphe)

10.3 Effets visqueux

On a mis en place dans la section précédente l'énergie libre et les lois d'évolution associées au modèle de cristallisation sous contrainte. Basé sur la représentation phénoménologique des mécanismes observés, ce système doit nous permettre de retrouver les observations faites au chapitre 9. Dans ce chapitre, on a cependant observé qu'une partie de l'hystérèse (entre 10 et 20%) était probablement due à la viscoélasticité. Nous allons donc proposer dans la suite une modélisation de cet aspect en supposant que la viscoélasticité observée dans le réseau amorphe est due à la présence d'enchevêtrements dans le caoutchouc que l'on modélise en utilisant la méthode des réseaux superposés de Doi et Edwards [41]. Au mécanisme de cristallisation, on superpose donc un mécanisme de relaxation viscoélastique pour modéliser les désenchevêtrements : certaines chaînes sous chargement vont s'allonger de manière irréversible, et leur élongation dans l'énergie libre devra être mesurée par rapport à cet allongement irréversible.



FIGURE 10.3.1: Hiérarchie de chaînes (figure tirée de [53]).

On suppose dans ce cas qu'il existe un spectre $a = 1 \dots s$ de chaînes prototypes surimposées au réseau (figure 10.3.1). Ce spectre discret est nommé hiérarchie d'élongation hors-équilibre. Il est décrit par un ensemble de variables internes

$$\{\varepsilon^a\}_{a=1..s}. \quad (10.3.1)$$

Ces variables nous permettent de décrire les fluctuations dépendantes du temps du mécanisme hiérarchique par une contribution supplémentaire à l'énergie libre

$$\psi_v = \psi_v(\lambda, \{\varepsilon^a\}_{a=1..s}). \quad (10.3.2)$$

Dans le modèle le plus simple, on suppose que cette contribution prend la forme d'une énergie de déformation quadratique par rapport à l'écart entre la déformation logarithmique et la déformation relâchée ε^a

$$\psi_v = \frac{1}{2} \sum_{a=1}^s \left\{ \mu^a (\ln(\lambda) - \varepsilon^a)^2 \right\}, \quad (10.3.3)$$

avec $\{\mu^a\}_{a=1..s}$ un ensemble de paramètres matériau définissant les raideurs locales. La force thermodynamique associée s'écrit

$$\beta^a = -\frac{\partial \psi_v}{\partial \varepsilon^a} = \mu^a (\ln(\lambda) - \varepsilon^a). \quad (10.3.4)$$

On observe alors qu'on revient à l'équilibre sur ce réseau si les fluctuations sont nulles

$$\ln(\lambda) = \varepsilon^a. \quad (10.3.5)$$

On introduit alors un potentiel de dissipation quadratique positif

$$\phi^v = \sum_{a=1}^s \left\{ \frac{\eta^a}{2} \left| \frac{d\varepsilon^a}{dt} \right|^2 \right\}, \quad (10.3.6)$$

où η^a est une constante et mesure la viscosité locale. Ce choix nous permet d'écrire la loi d'évolution générique

$$\frac{\partial \psi^v}{\partial \varepsilon^a} + \frac{\partial \phi^v}{\partial_t \varepsilon^a} = 0, \quad (10.3.7)$$

avec $\varepsilon^a(0) = 0$ ce qui s'écrit de manière explicite

$$\frac{d\varepsilon^a}{dt} = \frac{\mu^a}{\eta^a} (\ln(\lambda) - \varepsilon^a). \quad (10.3.8)$$

La variable ε^a se relâche donc avec un temps de relaxation $\tau^a = \frac{\eta^a}{\mu^a}$. On peut également obtenir le problème sous la forme

$$\frac{d\beta^a}{dt} + \frac{\beta^a}{\tau^a} = \mu^a \frac{d \ln(\lambda)}{dt}, \quad (10.3.9)$$

avec $\beta^a(0) = 0$. Cette équation introduite dans la formulation de la dissipation microscopique donne par (10.3.4, 10.3.8)

$$D = \beta^a \frac{d\varepsilon^a}{dt} = \frac{\mu^a}{\tau^a} (\ln(\lambda) - \varepsilon^a)^2. \quad (10.3.10)$$

Ceci montre qu'il y a consistance thermodynamique pour τ^a strictement positif. On vient donc de rajouter $2s$ paramètres matériau au problème élastique :

- $\{\mu^a\}_{a=1..s}$ le module de sur-contrainte des différentes chaînes prototypes,
- $\{\tau^a = \frac{\eta^a}{\mu^a}\}_{a=1..s}$ le temps de relaxation de ces chaînes.

10.4 Construction d'un modèle à directions : la micro-sphère

10.4.1 Cadre macroscopique

Soit $\varphi : \mathbf{X} \rightarrow \mathbf{x}$ la transformation entre la configuration non-déformée et déformée. Le gradient de déformation s'écrit

$$\mathbf{F} = \nabla_{\mathbf{X}} \varphi, \quad (10.4.1)$$

et le jacobien est noté

$$J = \det(\mathbf{F}). \quad (10.4.2)$$

On note ensuite le tenseur de Cauchy-Green à droite $\mathbf{C} = \mathbf{F}^\top \cdot \mathbf{F}$. Ensuite, on considère un ensemble de variables internes \mathbf{k} . On propose alors d'écrire l'énergie libre macroscopique Ψ sous la forme

$$\Psi = \Psi(\mathbf{k}, \mathbf{C}). \quad (10.4.3)$$

Elle se décompose additivement en quatre éléments :

- l'énergie libre viscoélastique $\Psi_\nu(\{\varepsilon^a(t, \mathbf{R}), a = 1..s\}, \mathbf{C})$ dont l'expression micro est décrite en (10.3.3),
- l'énergie libre de tube $\Psi_{tube}(\mathbf{C})$ dont l'expression micro en terme de variation de section ν est décrite en (10.1.3),
- l'énergie libre du système semi-cristallin réduit $\Psi_\chi(\lambda_\chi(t, \mathbf{R}), T, \mathbf{C})$ dont l'expression micro s'écrit

$$\psi_{semi-cris-res}(\lambda, \lambda_\chi, T) = n_{ch} R_A T F_\beta \left(\frac{\lambda - \lambda_\chi}{\sqrt{N_{seg}}} \right) + n_{ch} g(\lambda_\chi) + n_{ch} \lambda_\chi (s_f T - h_f), \quad (10.4.4)$$

- l'énergie libre du mécanisme élastique activé en λ^* qui s'écrit $\bar{\Psi}_{el}(\mathbf{C})$ et dont l'expression micro est décrite en (10.1.8).

Nous allons maintenant exprimer les relations micro-macro sur les variables internes.

10.4.2 Relation micro-macro

Dans cette section, on construit les relations micro-macro pour :

- la mesure d'élongation,
- la variation de section utilisée en (10.1.3).

On fait pour cela l'hypothèse d'une déformation localement affine.

Mesure d'élongation

On doit relier la déformation macroscopique \mathbf{F} à la déformation d'une chaîne unique. Considérons alors \mathbf{R} , le vecteur d'orientation lagrangien tel que

$$|\mathbf{R}| = \sqrt{\mathbf{R} \cdot \mathbf{R}} = 1. \quad (10.4.5)$$

Il caractérise l'orientation d'une chaîne matérielle donnée en configuration de référence. Dans une hypothèse de déformation localement affine, le vecteur d'élongation s'écrit alors

$$\mathbf{t} = \mathbf{F} \cdot \mathbf{R}. \quad (10.4.6)$$

L'élongation macroscopique le long de la direction \mathbf{R} s'écrit donc

$$\bar{\lambda} = |\mathbf{t}| = \sqrt{\mathbf{t} \cdot \mathbf{t}}, \quad (10.4.7)$$

ce qui donne par construction

$$\lambda(\mathbf{R}) = \bar{\lambda}(\mathbf{R}) = \sqrt{\mathbf{R} \cdot \mathbf{C} \cdot \mathbf{R}}. \quad (10.4.8)$$

Mesure d'aire

Tout d'abord, on rappelle que d'un point de vue macroscopique on peut définir le vecteur surface $\mathbf{N}dA$ normal à une surface dans un contexte lagrangien et le vecteur surface déformée $\mathbf{n}da = \mathbf{F}^{-T} \cdot \mathbf{N}dA$. On peut alors mesurer la déformation d'un élément d'aire [53] sous la forme

$$\bar{\nu} = \frac{|da|}{|dA|} = |\mathbf{F}^{-T} \cdot \mathbf{N}| = \sqrt{\mathbf{N} \cdot \mathbf{C}^{-1} \cdot \mathbf{N}} \quad (10.4.9)$$

en prenant \mathbf{N} tel que $|\mathbf{N}| = 1$ et \mathbf{n} tel que $|\mathbf{n}| = 1$.

Microscopiquement, en considérant la déformation d'un élément d'aire de normale \mathbf{R} sur la micro-sphère dans la configuration de référence, on peut proposer d'écrire une mesure de la déformation d'un élément d'aire micro sur la sphère sous la forme

$$\nu = \sqrt{\mathbf{R} \cdot \mathbf{C}^{-1} \cdot \mathbf{R}}, \quad (10.4.10)$$

et, on propose la relation micro-macro

$$\nu = \bar{\nu}. \quad (10.4.11)$$

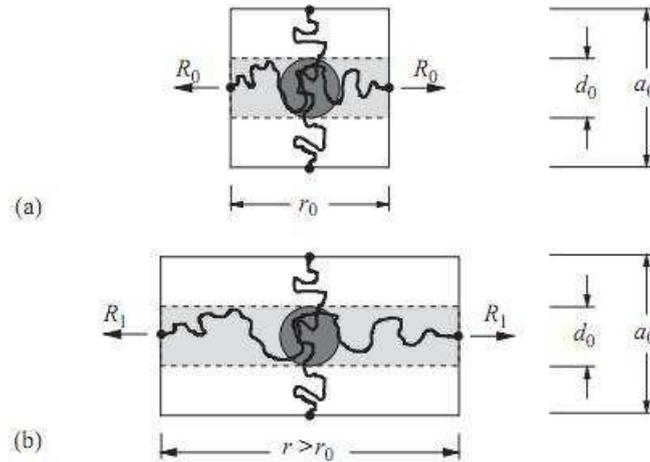


FIGURE 10.4.1: Lien entre les variables micro et macro. (a) Elément de volume macroscopique non-déformé. (b) Elément de volume macroscopique déformé (figure tirée de [53]).

Dans le cas d'une extension de l'aire macroscopique, les chaînes dans la direction perpendiculaire à la chaîne considérée sont allongées. On suppose, en effet, que les chaînes perpendiculaires font obstacle à l'extension de la chaîne considérée et qu'elles permettent donc la décroissance du diamètre de fluctuation à l'intersection. Ce modèle constitue une relation inverse entre le diamètre du tube microscopique et le changement d'aire macroscopique.

10.4.3 Energie libre et équations du modèle de micro-sphère

Par direction \mathbf{R} , on a un ensemble $(\lambda_\chi(t, \mathbf{R}), \{\varepsilon^a(t, \mathbf{R})\}_{a=1..s})$ de variables internes micro associées aux processus dissipatifs. L'évolution de $\lambda_\chi(t, \mathbf{R})$ suit direction par direction la loi d'évolution pilotée par le taux d'élongation $\lambda(t, \mathbf{R})$ et la température $T(t)$ du point matériel (10.1.23, 10.1.24). L'évolution de $\{\varepsilon^a(t, \mathbf{R})\}_{a=1..s}$ suit direction par direction la loi d'évolution pilotée par le taux d'élongation $\lambda(t, \mathbf{R})$ subie par la direction dans la déformation macroscopique et calculée par (10.4.8). Pour résumer, on a tout d'abord l'énergie libre du modèle par unité de volume non déformé

$$\Psi = \Psi_\nu(\{\varepsilon^a(t, \mathbf{R}), a = 1..s\}, \mathbf{C}) + \Psi_\chi(\lambda_\chi(t, \mathbf{R}), T, \mathbf{C}) + \Psi_{el}(\mathbf{C}) + \Psi_{tube}(\mathbf{C}). \quad (10.4.12)$$

Dans (10.4.12), les termes sont calculés direction par direction. On a respectivement par (10.3.3)

$$\Psi_\nu(\{\varepsilon^a(t, \mathbf{R}), a = 1..s\}, \mathbf{C}) = \frac{1}{8\pi} \int_{\mathbb{S}^2} \sum_{a=1}^s \left\{ \mu^a (\ln(\lambda(\mathbf{C}, \mathbf{R})) - \varepsilon^a(t, \mathbf{R}))^2 \right\} dA(\mathbf{R}), \quad (10.4.13)$$

puis par (10.1.9)

$$\Psi_\chi(\lambda_\chi(t, \mathbf{R}), T, \mathbf{C}) = \frac{n_{ch}}{4\pi} \int_{\mathbb{S}^2} R_A T F_\beta \left(\frac{\lambda(\mathbf{C}, \mathbf{R}) - \lambda_\chi(t, \mathbf{R})}{\sqrt{N_{seg}}} \right) dA(\mathbf{R}) + \frac{n_{ch}}{4\pi} \int_{\mathbb{S}^2} g(\lambda_\chi(t, \mathbf{R})) + \lambda_\chi(t, \mathbf{R}) (s_f T - h_f) dA(\mathbf{R}), \quad (10.4.14)$$

avec $\lambda_\chi(t, \mathbf{R})$ la variable interne micro par direction décrivant la cristallinité puis par (10.1.8)

$$\Psi_{el}(\mathbf{C}) = \frac{n_{ch} R_B T}{4\pi} \int_{\mathbb{S}^2} F(\langle \lambda(\mathbf{C}, \mathbf{R}) - \lambda^* \rangle_+) dA(\mathbf{R}), \quad (10.4.15)$$

et pour finir par (10.1.3)

$$\Psi_{tube}(\mathbf{C}) = \frac{n_{ch} k_B T N_{seg} U}{4\pi} \int_{\mathbb{S}^2} \nu(\mathbf{C}, \mathbf{R}) dA(\mathbf{R}). \quad (10.4.16)$$

avec $\nu(\mathbf{C}, \mathbf{R})$ donné par (10.4.10). Ce modèle se couple aux lois d'évolution (10.1.18, 10.1.19) et (10.3.8) à écrire point par point et direction par direction. Ce modèle va nous permettre de construire simplement une anisotropie évolutive, observée en cristallisation sous contrainte, puisque chaque direction de l'espace à une histoire différente.

Chapitre 11

Méthode numérique pour la loi de cristallisation sous contrainte anisotrope

Dans ce chapitre, on présente les algorithmes qui nous permettent de travailler avec les lois de comportement construites dans le chapitre précédent. On détaille d'abord les algorithmes pour les lois 1D (section 11.1) puis on met en place ces algorithmes sur la micro-sphère pour passer d'une loi 1D à une loi 3D anisotrope (section 11.2). Enfin, on détaille l'intégration de la loi de comportement dans le code éléments finis Febio [90] (section 11.3).

11.1 Comportements 1D

11.1.1 Changement de phase indépendant du temps : Algorithme de retour radial

Les lois d'évolution proposées (10.1.18, 10.1.19) sont de type plasticité avec écrouissage. On peut donc obtenir à l'instant t_{n+1} la variable interne $\lambda_{\chi,n+1}$ et le module tangent $\mathcal{C}_{ct} = \frac{d^2\psi_{semi-cris}}{d(\Delta\lambda_n)^2}$ avec $\Delta\lambda_n = \lambda_{n+1} - \lambda_n$ par un algorithme de retour radial utilisant une projection aux points de saturation.

Présentation de l'algorithme

Le problème de l'intégration du comportement est posé de la façon suivante. On considère une direction dans un élément de matière dont l'état mécanique $\mathcal{S}_n = \{\lambda_n, \lambda_{\chi,n}, T_n, P_n\}$ à l'instant t_n est connu. On impose alors à cette direction un incrément d'élongation $\Delta\lambda_n$ et un incrément de température ΔT_n donné de sorte qu'à l'instant t_{n+1} son élongation

soit $\lambda_{n+1} = \lambda_n + \Delta\lambda_n$ et sa température soit $T_{n+1} = T_n + \Delta T_n$. On doit alors déterminer la contrainte P_{n+1} et l'élongation inélastique $\lambda_{\chi,n+1}$ prédites par les relations de comportement. Pour cela, on utilise un schéma implicite. Les relations de comportement (10.1.2) sont donc écrites à l'instant $t = t_{n+1}$

$$\begin{cases} P_{1,n+1} = P_{am}(\lambda_{n+1}, \lambda_{\chi,n+1}, T_{n+1}), \\ \text{cristallisation } \Delta\lambda_{\chi,n} > 0, f_{cris}(P_{1,n+1}, T_{n+1}, \lambda_{\chi,n+1}) \leq 0, \Delta\lambda_{\chi,n} f_{cris}(P_{1,n+1}, T_{n+1}, \lambda_{\chi,n+1}) = 0, \\ \text{fusion } \Delta\lambda_{\chi,n} < 0, f_{fus}(P_{1,n+1}, T_{n+1}, \lambda_{\chi,n+1}) \leq 0, \Delta\lambda_{\chi,n} f_{fus}(P_{1,n+1}, T_{n+1}, \lambda_{\chi,n+1}) = 0. \end{cases} \quad (11.1.1)$$

sous les définitions

$$f_{cris} = P_{1,n+1} - \overset{\circ}{g}'(\lambda_{\chi,n+1}) - n_{ch}(s_f T_{n+1} - h_f) - n_{ch}Y(\lambda_{\chi,sat} - \lambda_{\chi,n+1}), \quad (11.1.2)$$

et

$$f_{fus} = -P_{1,n+1} + \overset{\circ}{g}'(\lambda_{\chi,n+1}) + n_{ch}(s_f T_{n+1} - h_f). \quad (11.1.3)$$

La première étape consiste alors à réaliser une prédiction thermo-élastique en supposant que $\Delta\lambda_{\chi,n} = 0$. Cette hypothèse nous permet d'obtenir :

$$\begin{aligned} - \lambda_{\chi,n+1} &= \lambda_{\chi,n}, \\ - P_{1,n+1}^{elas} &= P_{am}(\lambda_{n+1}, \lambda_{\chi,n}, T_{n+1}). \end{aligned}$$

On évalue alors les deux critères de transformation $f_{cris} \leq 0$ et $f_{fus} \leq 0$. Ces évaluations nous permettent de distinguer trois cas différents :

1. Les deux critères de transformation sont respectés et la prédiction thermo-élastique est bonne.
2. Le critère de cristallisation n'est pas respecté ($f_{cris}^{elas}(P_{1,n+1}^{elas}, T_{n+1}, \lambda_{\chi,n}) > 0$) mais le critère de fusion l'est et on doit faire une correction de la prédiction avec le premier critère.
3. Le critère de fusion n'est pas respecté ($f_{fus}^{elas}(P_{1,n+1}^{elas}, T_{n+1}, \lambda_{\chi,n}) > 0$) mais le critère de cristallisation l'est et on doit faire une correction de la prédiction avec le second critère.

Les deux critères ne peuvent pas ne pas être respectés en même temps par construction.

Si on est dans le cas 2, on doit alors corriger la cristallisation prédite, de manière à vérifier la condition de cristallisation qui s'écrit sous la forme

$$P_{1,n+1} - \overset{\circ}{g}'(\lambda_{\chi,n+1}) - n_{ch}(s_f T_{n+1} - h_f) - n_{ch}Y(\lambda_{\chi,sat} - \lambda_{\chi,n+1}) = 0. \quad (11.1.4)$$

Cette condition est résolue par une méthode de Newton se basant sur la linéarisation

$$f_{cris}(\lambda_{n+1}, T_{n+1}, \lambda_{\chi,n}, \Delta\lambda_{\chi,n}^{(k)}) + \delta\lambda_{\chi,n}^{(k)} \frac{\partial f_{cris}}{\partial \Delta\lambda_{\chi,n}}(\lambda_{n+1}, T_{n+1}, \lambda_{\chi,n}, \Delta\lambda_{\chi,n}^{(k)}) = 0, \quad (11.1.5)$$

ce qui permet d'actualiser l'accroissement de cristallisation par

$$\Delta\lambda_{\chi,n}^{(k+1)} = \Delta\lambda_{\chi,n}^{(k)} - \frac{f_{cris}(\lambda_{n+1}, T_{n+1}, \lambda_{\chi,n}, \Delta\lambda_{\chi,n}^{(k)})}{\frac{\partial f_{cris}}{\partial \Delta\lambda_{\chi,n}}(\lambda_{n+1}, T_{n+1}, \lambda_{\chi,n}, \Delta\lambda_{\chi,n}^{(k)})}. \quad (11.1.6)$$

Une fois que la méthode de newton a convergé à l'itération N , on peut obtenir l'itération $\Delta\lambda_{\chi,n}$ sous la forme

$$\Delta\lambda_{\chi,n} = \min\left(\Delta\lambda_{\chi,n}^{(N)}, \lambda_{\chi,sat} - \lambda_{\chi,n}\right) > 0, \quad (11.1.7)$$

par définition de f_{cris}^{elas} . Ici $\Delta\lambda_{\chi,n}$ est majoré par $\lambda_{\chi,sat} - \lambda_{\chi,n}$ car l'énergie élastique devient infinie si $\lambda_{\chi,n+1} > \lambda_{\chi,sat}$. D'un point de vue algorithmique, il est plus efficace de faire la projection à l'intérieur de la boucle de Newton.

Si on est dans le cas 3, on doit alors corriger la prédiction de manière à vérifier la condition de fusion qui s'écrit sous la forme

$$P_{1,n+1} - \overset{\circ}{g}'(\lambda_{\chi,n+1}) - n_{ch}(s_f T_{n+1} - h_f) = 0. \quad (11.1.8)$$

Cette condition est résolue par une méthode de Newton se basant sur la linéarisation

$$f_{fus}(\lambda_{n+1}, T_{n+1}, \lambda_{\chi,n}, \Delta\lambda_{\chi,n}^{(k)}) + \delta\lambda_{\chi,n}^{(k)} \frac{\partial f_{fus}}{\partial \Delta\lambda_{\chi,n}}(\lambda_{n+1}, T_{n+1}, \lambda_{\chi,n}, \Delta\lambda_{\chi,n}^{(k)}) = 0, \quad (11.1.9)$$

ce qui permet d'actualiser la cristallisation par

$$\Delta\lambda_{\chi,n}^{(k+1)} = \Delta\lambda_{\chi,n}^{(k)} - \frac{f_{fus}(\lambda_{n+1}, T_{n+1}, \lambda_{\chi,n}, \Delta\lambda_{\chi,n}^{(k)})}{\frac{\partial f_{fus}}{\partial \Delta\lambda_{\chi,n}}(\lambda_{n+1}, T_{n+1}, \lambda_{\chi,n}, \Delta\lambda_{\chi,n}^{(k)})}. \quad (11.1.10)$$

Une fois que la méthode de newton a convergé à l'itération N , on peut obtenir l'itération $\Delta\lambda_{\chi,n}$ sous la forme

$$\Delta\lambda_{\chi,n} = \max\left(\Delta\lambda_{\chi,n}^{(N)}, -\lambda_{\chi,n}\right) < 0 \quad (11.1.11)$$

par définition de f_{fus}^{elas} . Ici $\Delta\lambda_{\chi,n}$ est minorée par $-\lambda_{\chi,n}$ car l'énergie élastique devient infinie si $\lambda_{\chi,n+1} < 0$.

Puisqu'on sait maintenant résoudre le problème d'évolution, on peut exprimer le module tangent cohérent \mathcal{C}_{ct} qui est défini en l'absence de changement d'état par

$$\mathcal{C}_{ct} = \frac{dP_{n+1}}{d\Delta\lambda_n}. \quad (11.1.12)$$

Par (10.2.6,11.1.1), ce module se développe, dans le cadre de l'approximation de Padé pour la fonction de Langevin (10.1.6)) sous la forme

$$\mathcal{C}_{ct} = \begin{cases} n_{ch} R_A T_{n+1} \frac{(\lambda_{n+1} - \lambda_{\chi,n} - \Delta\lambda_{\chi,n})^4 + 3N_{seg}^2}{\sqrt{N_{seg}} (N_{seg} - (\lambda_{n+1} - \lambda_{\chi,n} - \Delta\lambda_{\chi,n})^2)^2} \left(1 - \frac{d\Delta\lambda_{\chi,n}}{d\Delta\lambda_n}\right) & \text{si } \lambda_{n+1} < \lambda_*, \\ n_{ch} T_{n+1} \left[\frac{R_A (\lambda_{n+1} - \lambda_{\chi,n} - \Delta\lambda_{\chi,n})^4 + 3N_{seg}^2}{\sqrt{N_{seg}} (N_{seg} - (\lambda_{n+1} - \lambda_{\chi,n} - \Delta\lambda_{\chi,n})^2)^2} \left(1 - \frac{d\Delta\lambda_{\chi,n}}{d\Delta\lambda_n}\right) + R_B \frac{\partial^2 F}{\partial \lambda^2} (\lambda_{n+1} - \lambda_*) \right] & \text{si } \lambda_{n+1} \geq \lambda_*. \end{cases} \quad (11.1.13)$$

Ensuite, on peut développer $\frac{d\Delta\lambda_{\chi,n}}{d\Delta\lambda_n}$ en différentiant la condition de consistance

– en cristallisation avec (11.1.4) $\frac{d\Delta\lambda_{\chi,n}}{d\Delta\lambda_n} = - \left(\frac{\partial f_{cris}}{\partial \Delta\lambda_{\chi,n}} \right)^{-1} \frac{\partial f_{cris}}{\partial \Delta\lambda_n},$

– en fusion avec (11.1.8) $\frac{d\Delta\lambda_{\chi,n}}{d\Delta\lambda_n} = - \left(\frac{\partial f_{fus}}{\partial \Delta\lambda_{\chi,n}} \right)^{-1} \frac{\partial f_{fus}}{\partial \Delta\lambda_n}.$

Finalement, l'algorithme sur chaque direction se présente sous la forme suivante :

Algorithme 11.1 Algorithme de retour radial pour le changement de phase 1D

1. Poser les incréments $\Delta\lambda_n$ et ΔT_n ;
 2. Former $P_{1,n+1}^{elas} = P_{am}(\lambda_{n+1}, \lambda_{\chi,n}, T_{n+1})$ (prédicteur élastique) ;
 3. Calculer $f_{cris}^{elas}(P_{1,n+1}^{elas}, T_{n+1}, \lambda_{\chi,n})$ et $f_{fus}^{elas}(P_{1,n+1}^{elas}, T_{n+1}, \lambda_{\chi,n})$; Trois cas :
 - a) Si $f_{cris}^{elas} \leq 0$ et $f_{fus}^{elas} \leq 0$, actualiser par $P_{1,n+1} = P_{1,n+1}^{elas}$, $\lambda_{\chi,n+1} = \lambda_{\chi,n}$ et former le module tangent cohérent élastique ; $\frac{d\Delta\lambda_{\chi,n}}{d\Delta\lambda_n} = 0$
 - b) Si $f_{cris}^{elas} > 0$ et $f_{fus}^{elas} \leq 0$:
 - i. Calculer $\Delta\lambda_{\chi,n}$ par la méthode de Newton ;
 - ii. Actualiser par $\lambda_{\chi,n+1} = \lambda_{\chi,n} + \Delta\lambda_{\chi,n}$, puis calculer $P_{1,n+1} = P_{am}(\lambda_{n+1}, \lambda_{\chi,n+1}, T_{n+1})$;
 - iii. Former le module tangent cohérent \mathcal{C}_{ct} ;
 - c) Si $f_{cris}^{elas} \leq 0$ et $f_{fus}^{elas} > 0$:
 - i. Calculer $\Delta\lambda_{\chi,n}$ par la méthode de Newton ;
 - ii. Actualiser par $\lambda_{\chi,n+1} = \lambda_{\chi,n} + \Delta\lambda_{\chi,n}$, puis calculer $P_{1,n+1} = P_{am}(\lambda_{n+1}, \lambda_{\chi,n+1}, T_{n+1})$;
 - iii. Former le module tangent cohérent \mathcal{C}_{ct} ;
-

11.1.2 Viscoélasticité

Le problème de l'intégration du comportement est posé de la façon suivante. On considère une direction dans un élément de matière dont l'état mécanique $\mathcal{S}_n = \{\lambda_n, P_n^v, \beta_n^a\}$ à l'instant t_n est connu $\forall a \in \{1, \dots, s\}$. On impose alors à cette direction un incrément d'élongation $\Delta\lambda_n$ donné de sorte qu'à l'instant t_{n+1} son élongation soit $\lambda_{n+1} = \lambda_n + \Delta\lambda_n$. On doit alors déterminer la force thermodynamique β_{n+1}^a et la contrainte P_{n+1}^v prédites

par les relations de comportement. On utilise pour cela un schéma d'Euler implicite. Par intégration de (10.3.9), on obtient donc

$$\Delta\beta_n^a \left(\frac{\Delta t + \tau^a}{\tau^a \Delta t} \right) + \frac{\beta_n^a}{\tau^a} = \mu^a \frac{\ln(\lambda_{n+1}/\lambda_n)}{\Delta t}, \quad (11.1.14)$$

ce qui donne

$$\Delta\beta_n^a = \frac{\mu^a \tau^a \ln(\lambda_{n+1}/\lambda_n) - \Delta t \beta_n^a}{\Delta t + \tau^a}. \quad (11.1.15)$$

La contrainte s'écrit alors sous la forme

$$P_{n+1}^v = \sum_{a=1}^s \left\{ \frac{\beta_n^a + \Delta\beta_n^a}{\lambda_{n+1}} \right\}. \quad (11.1.16)$$

Puisqu'on sait maintenant résoudre le problème d'évolution, on peut exprimer le module tangent cohérent pour la partie viscoélastique \mathcal{C}_{ct}^ν qui est défini par

$$\mathcal{C}_{ct}^\nu = \frac{dP_{n+1}^v}{d\Delta\lambda_n}. \quad (11.1.17)$$

En dérivant (11.1.16), on obtient

$$\mathcal{C}_{ct}^\nu = \sum_{a=1}^s \left\{ \frac{1}{\lambda_{n+1}} \frac{\partial \Delta\beta_n^a}{\partial \Delta\lambda_n} - \frac{\beta_n^a + \Delta\beta_n^a}{\lambda_{n+1}^2} \right\}. \quad (11.1.18)$$

Par dérivation de (11.1.15), on obtient ensuite

$$\frac{d\Delta\beta_n^a}{d\Delta\lambda_n} = \frac{\mu^a \tau^a}{(\Delta t + \tau^a) \lambda_{n+1}}. \quad (11.1.19)$$

Le module tangent cohérent est alors

$$\mathcal{C}_{ct}^\nu = \sum_{a=1}^s \left\{ \left(\frac{\mu^a \tau^a}{\Delta t + \tau^a} - \beta_{n+1}^a \right) \lambda_{n+1}^{-2} \right\}. \quad (11.1.20)$$

On peut donc écrire notre algorithme sous la forme

Algorithme 11.2 Algorithme pour le problème d'évolution viscoélastique

1. Poser l'incrément $\Delta\lambda_n$;
 2. Calculer $\Delta\beta_n^a = \frac{\mu^a \tau^a \ln(\lambda_{n+1}/\lambda_n) - \Delta t \beta_n^a}{\Delta t + \tau^a}$;
 3. Actualiser par $\beta_{n+1}^a = \beta_n^a + \Delta\beta_n^a$, et $P_{n+1}^v = \sum_{a=1}^s \left\{ \frac{\beta_n^a + \Delta\beta_n^a}{\lambda_{n+1}} \right\}$;
 4. Former le module tangent cohérent $\mathcal{C}_{ct}^\nu = \sum_{a=1}^s \left\{ \left(\frac{\mu^a \tau^a}{\Delta t + \tau^a} - \beta_{n+1}^a \right) \lambda_{n+1}^{-2} \right\}$;
-

11.2 Intégration à la micro-sphère

11.2.1 Algorithme générique

Sur la micro-sphère, on utilise de manière générique l'algorithme suivant quelque soit la loi de comportement.

Algorithme 11.3 Modèle de micro-sphère

1. Initialisation : Obtenir \mathbf{F}_{n+1} à l'instant t_{n+1} et les variables internes \mathbf{k}_n à l'instant t_n ; Obtenir les vecteurs d'orientation discrets \mathbf{R}_i et les poids d'intégration w_i ;
 2. Utiliser les relations micro-macro pour obtenir dans chaque direction discrète λ_{n+1} et ν_{n+1} ;
 3. Résoudre le problème d'évolution 1D dans chaque direction; Mettre à jour les variables; Obtenir le module tangent cohérent dans chaque direction pour l'instant t_{n+1} ;
 4. Assembler les directions pour obtenir les variables 3D à l'instant t_{n+1} grâce à la règle de quadrature;
-

Pour commencer, on présente la règle de quadrature.

11.2.2 Intégration numérique sur la sphère \mathbb{S}^2 [64]

Éléments de base

On cherche une approximation de l'intégrale de la fonction $f(\mathbf{R})$ sur \mathbb{S}^2

$$\mathbb{I}f = \int_{\mathbb{S}^2} f(\mathbf{R}) \, dA(\mathbf{R}), \quad (11.2.1)$$

par une formule de quadrature à N points d'intégration de la forme

$$\mathbb{Q}_N f = \sum_{j=1}^N w_j f(\mathbf{R}_j), \quad (11.2.2)$$

avec :

- $\{w_j\}_{j=1..N}$ l'ensemble des poids de la règle,
- $\{\mathbf{R}_j\}_{j=1..N}$ l'ensemble des points d'évaluation.

Toutes les règles de quadrature présentées dans la suite vérifient

$$\sum_{j=1}^N w_j = 4\pi. \quad (11.2.3)$$

Cette condition permet que les constantes soit intégrées exactement. Si on suppose que l'erreur sur les valeurs de f est bornée par ε alors, l'erreur en $\mathbb{Q}_N f$, $e(f)$ sera bornée par

$$e(f) = \varepsilon \sum_{j=1}^N |w_j|. \quad (11.2.4)$$

Numériquement, il est donc préférable d'avoir uniquement des poids positifs dans l'ensemble des règles de quadratures de manière à ce que l'erreur soit bornée par

$$e(f) = 4\pi\varepsilon. \quad (11.2.5)$$

De plus, d'un point de vue de nos problèmes d'évolution, il est préférable de n'avoir que des poids positifs de manière à ce que la dissipation intégrée sur la sphère soit positive si la dissipation dans chaque direction $D(\mathbf{R})$ est positive.

Quadrature à précision polynomiale

Une règle de quadrature \mathbb{Q}_N a un degré de précision L si

$$\mathbb{Q}_N p = \mathbb{I}p \quad \forall p \in \mathbb{P}_L(\mathbb{S}^2). \quad (11.2.6)$$

L'espace $\mathbb{P}_L(\mathbb{S}^2)$ des polynômes sphériques de degré inférieur ou égal à L est la restriction à la sphère de l'ensemble des polynômes de \mathbb{R}^3 de degré inférieur ou égal à L . Cette espace a pour dimension $(L+1)^2$. Parmi l'ensemble des méthodes de construction des règles de quadrature à précision polynomiale, on va s'intéresser en particulier aux quadrature qui sont invariantes par rapport à toutes les rotations d'un sous-groupe fini G du groupe des rotations dans \mathbb{R}^3 . Ce type de méthode de construction repose sur le théorème suivant : Supposons qu'on ait construit une règle de quadrature sur la sphère invariante par rapport à toutes les rotations d'un sous-groupe fini G du groupe des rotations dans \mathbb{R}^3 . Cette règle a une précision de degré L , si et seulement si elle est exacte pour tous les G -invariants polynômes sphériques de degré inférieur ou égal à L . Ce théorème permet de réduire la taille du système non-linéaire à résoudre pour construire la règle de quadrature puisqu'on peut construire le système sur les G -invariants polynômes sphériques de degré inférieur ou égal à L . Pour la plupart des règles de quadratures, le groupe utilisé est souvent représenté par : un octaèdre (règle de Lebedev), un icosaèdre (règle de Popov). Les quadratures construites de cette façon sont très proches du rapport optimal entre L et N dans la plupart des cas connus. On peut en effet montrer que l'ensemble de ces règles possède un nombre de points qui suit la relation

$$N = \frac{1}{3}L^2 + O(L), \quad (11.2.7)$$

et que le nombre de points pour n'importe quelle règle vérifie

$$N \geq \left(\left\lfloor \frac{L}{2} \right\rfloor + 1 \right)^2. \quad (11.2.8)$$

Enfin, on note que la règle de quadrature à précision polynomiale de degré L et à poids positifs possède la propriété suivante sur l'erreur d'intégration : Si $f \in H^s(\mathbb{S}^2)$ avec $s > 1$ et $N = O(L^2)$ alors il existe une constante $c = c(s, f)$ telle que

$$|\mathbb{I}f - \mathbb{Q}_N f| \leq \frac{c}{N^{s/2}}. \quad (11.2.9)$$

Cette borne est optimale. Toutes ces règles peuvent être calculées par des codes présentés dans [164]. Les premières règles en nombre de points d'intégration sont résumées dans le tableau 11.1.

N	L	Code source	Efficacité
6	3	LEB	0.88
12	5	DES	1
24	7	DES	0.88
32	9	DITK	1.04
50	11	LEB	0.96
72	14	MCLAREN	1.04

TABLE 11.1: Règles de quadrature des codes sources [164].

Sur ce tableau, l'efficacité s'exprime par

$$\frac{\lfloor L + 1 \rfloor^2}{3N}. \quad (11.2.10)$$

Lors des calculs numériques (chapitre 12, 13, et 14) on utilise uniquement des règles qui vérifient :

- la propriété de symétrie centrale car la loi de comportement possède cette symétrie ($\lambda(\mathbf{R}) = \lambda(-\mathbf{R})$ et $\nu(\mathbf{R}) = \nu(-\mathbf{R})$), l'intégration se faisant alors sur la demi-sphère,
- la positivité des poids d'intégration, de manière à vérifier le second principe de la thermodynamique indépendamment de la méthode d'intégration numérique.

Il faut alors pouvoir obtenir un critère de choix sur le nombre de points de la règle de quadrature. Une comparaison des différentes règles de quadrature avec une règle de référence, celle de [47] à 900 points, en présence d'anisotropie a été réalisée par Ehret [44]. En accord avec cette étude, nous avons déterminé qualitativement que les trois règles de quadrature permettant le meilleur compromis entre erreur numérique et temps de calcul sont :

1. la règle à 45 points d'Heo et Xu [63],
2. la règle à 61 points de Bazant et Oh [9],
3. la règle à 72 points de McLaren [164].

Pour l'ensemble des cas tests sur éprouvette, on utilise la règle de Maclaren à 72 points. Cependant, lorsqu'on analyse les résultats direction par direction, on utilise la règle à 900 points pour rendre négligeable le bruit numérique dans la représentation des grandeurs direction par direction.

11.2.3 Grandeurs pour l'intégration sur la micro-sphère

On explicite successivement dans le cas continu et discret la forme intégrée en direction de l'énergie libre, du second tenseur de Piola-Kirchhoff et de l'opérateur tangent. Dans ces formules, au niveau discret, chaque intégrale est à remplacer par une quadrature (11.2.2) adaptée choisie dans la table 11.1.

Énergie libre

Même si on peut utiliser l'énergie libre sous la forme (10.4.12), le caoutchouc est un matériau ne subissant que de très petites variations de volume. Après approximation par éléments finis et sous intégration éventuelle des termes de variation de volume, on peut être face à des variations de volume numérique non négligeables. Pour éviter de pénaliser le modèle de micro-sphère par des difficultés numériques de traitement de l'incompressibilité, on sépare l'énergie libre Ψ en un terme isochore $\bar{\Psi}$ et un terme volumétrique $W(J)$ traité séparément dans le solveur.

L'énergie libre s'écrit alors sous la forme

$$\Psi = W(J) + \bar{\Psi}_\nu(\mathbf{k}_\nu, \bar{\mathbf{C}}) + \bar{\Psi}_\chi(\mathbf{k}_\chi, T, \bar{\mathbf{C}}) + \bar{\Psi}_{el}(\bar{\mathbf{C}}) + \bar{\Psi}_{tube}(\bar{\mathbf{C}}), \quad (11.2.11)$$

avec $J = \det(\mathbf{F})$ le jacobien,

$$\bar{\mathbf{C}} = J^{-2/3}\mathbf{C}. \quad (11.2.12)$$

le tenseur de Cauchy-Green isochore à droite. Dans cette formule, on utilise les notations suivantes

$$\begin{aligned} - \bar{\Psi}_\nu(\{\varepsilon^a(t, \mathbf{R}), a = 1..s\}, \bar{\mathbf{C}}) &= \frac{1}{8\pi} \int_{\mathbb{S}^2} \sum_{a=1}^s \left\{ \mu^a \left(\ln \left(\lambda(\bar{\mathbf{C}}, \mathbf{R}) \right) - \varepsilon^a(t, \mathbf{R}) \right)^2 \right\} dA(\mathbf{R}), \\ - \bar{\Psi}_\chi(\lambda_\chi(t, \mathbf{R}), T, \bar{\mathbf{C}}) &= \frac{n_{ch}}{4\pi} \int_{\mathbb{S}^2} R_A T F_\beta \left(\frac{\lambda(\bar{\mathbf{C}}, \mathbf{R}) - \lambda_\chi(t, \mathbf{R})}{\sqrt{N_{seg}}} \right) dA(\mathbf{R}) \\ &\quad + \frac{n_{ch}}{4\pi} \int_{\mathbb{S}^2} g(\lambda_\chi(t, \mathbf{R})) + \lambda_\chi(t, \mathbf{R}) (s_f T - h_f) dA(\mathbf{R}), \\ - \bar{\Psi}_{el}(\bar{\mathbf{C}}) &= \frac{n_{ch} R_B T}{4\pi} \int_{\mathbb{S}^2} F \left(\left\langle \lambda(\bar{\mathbf{C}}, \mathbf{R}) - \lambda^* \right\rangle_+ \right) dA(\mathbf{R}), \\ - \bar{\Psi}_{tube}(\bar{\mathbf{C}}) &= \frac{n_{ch} k_B T N_{seg} U}{4\pi} \int_{\mathbb{S}^2} \nu(\bar{\mathbf{C}}, \mathbf{R}) dA(\mathbf{R}), \\ - \mathbf{R} &\text{ est une direction dans la micro-sphère,} \\ - dA(\mathbf{R}) &\text{ est un élément d'aire centré sur } \mathbf{R}, \\ - \lambda(\bar{\mathbf{C}}, \mathbf{R}) &= \sqrt{\bar{\mathbf{C}} : (\mathbf{R} \otimes \mathbf{R})}, \\ - \nu(\bar{\mathbf{C}}, \mathbf{R}) &= \sqrt{\bar{\mathbf{C}}^{-1} : (\mathbf{R} \otimes \mathbf{R})}. \end{aligned}$$

On note également

$$\bar{\Psi}(\mathbf{k}_\nu, \mathbf{k}_\chi, T, \bar{\mathbf{C}}) = \bar{\Psi}_\nu(\mathbf{k}_\nu, \bar{\mathbf{C}}) + \bar{\Psi}_\chi(\mathbf{k}_\chi, T, \bar{\mathbf{C}}) + \bar{\Psi}_{el}(\bar{\mathbf{C}}) + \bar{\Psi}_{tube}(\bar{\mathbf{C}}) \quad (11.2.13)$$

Second tenseur de Piola Kirchhoff

Ensuite, grâce à (11.2.11), on écrit le second tenseur de Piola-Kirchhoff $\mathbf{S} = 2 \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial \bar{\mathbf{C}}}$ sous la forme

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}_{vol} + \mathbf{S}_{iso}, \quad (11.2.14)$$

avec :

- $\mathbf{S}_{vol} = 2p \frac{\partial J}{\partial \bar{\mathbf{C}}}$, et $p = \frac{dW}{dJ}$ la partie sphérique du tenseur de Cauchy,
- $\mathbf{S}_{iso} = 2 \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial \bar{\mathbf{C}}} : \frac{\partial \bar{\mathbf{C}}}{\partial \bar{\mathbf{C}}}$ sa partie déviatorique.

Tout d'abord, on développe \mathbf{S}_{vol} . Par dérivation du jacobien J , on obtient

$$\frac{\partial J}{\partial \bar{\mathbf{C}}} = \frac{J}{2} \mathbf{C}^{-1}, \quad (11.2.15)$$

puis par application à \mathbf{S}_{vol}

$$\mathbf{S}_{vol} = pJ\mathbf{C}^{-1}. \quad (11.2.16)$$

Ensuite, on développe $\frac{\partial \bar{\mathbf{C}}}{\partial \bar{\mathbf{C}}}$ sous la forme

$$J^{2/3} \frac{\partial J^{-2/3} \mathbf{C}}{\partial \bar{\mathbf{C}}} = \mathbf{I} - \frac{1}{3} \mathbf{C} \otimes \mathbf{C}^{-1}, \quad (11.2.17)$$

avec $\mathbf{I}_{ijkl} = \delta_{ik} \delta_{jl}$. Le tenseur \mathbf{S}_{iso} s'écrit donc sous la forme

$$\mathbf{S}_{iso} = J^{-2/3} \bar{\mathbf{S}} : \mathcal{P}^\top, \quad (11.2.18)$$

avec :

- $\mathcal{P} = \mathbf{I} - \frac{1}{3} \mathbf{C}^{-1} \otimes \mathbf{C}$,
- $\bar{\mathbf{S}} = 2 \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial \bar{\mathbf{C}}}$.

Enfin, on développe $\bar{\mathbf{S}}$ à partir de l'écriture intégrale de l'énergie libre

$$\bar{\mathbf{S}} = \frac{1}{4\pi} \int_{\mathbb{S}^2} 2 \frac{\partial \psi_\nu + \psi_{semi-cris-res} + \psi_{el} + \psi_{tube}}{\partial \lambda} \frac{\partial \lambda}{\partial \bar{\mathbf{C}}} dA(\mathbf{R}), \quad (11.2.19)$$

avec :

- $\frac{\partial \psi_\nu}{\partial \lambda} = \sum_{a=1}^s \left\{ \mu^a \left(\frac{\ln(\lambda) - \varepsilon^a}{\lambda} \right) \right\}$, par (10.3.3),
- $\frac{\partial \psi_{semi-cris-res}}{\partial \lambda} = n_{ch} \frac{R_A}{\sqrt{N_{seg}}} T L^{-1} \left(\frac{\lambda - \lambda_\chi}{\sqrt{N_{seg}}} \right)$, par (10.4.4) et [99],
- $\frac{\partial \psi_{el}}{\partial \lambda} = \begin{cases} 0 & \text{si } \lambda < \lambda^*, \\ n_{ch} R_B T F'(\lambda - \lambda^*) & \text{si } \lambda \geq \lambda^*, \end{cases}$ par (10.1.8),
- $\frac{\partial \lambda}{\partial \bar{\mathbf{C}}} = \frac{\mathbf{R} \otimes \mathbf{R}}{2\lambda(\mathbf{R})}$,

– $\frac{\partial \psi_{tube}(\nu)}{\partial \nu} = n_{ch} R_A T U$, par (10.1.3),
 – $\frac{\partial \nu}{\partial \mathbf{C}} = - \left(\frac{\mathbf{R} \otimes \mathbf{R}}{2\nu} \right) : (\bar{\mathbf{C}}^{-1} \odot \bar{\mathbf{C}}^{-1})$
 avec l'opérateur \odot tel que

$$[\mathbf{A} \odot \mathbf{B}]_{ijkl} = \frac{1}{2} [\mathbf{A}_{ik} \mathbf{B}_{jl} + \mathbf{A}_{il} \mathbf{B}_{jk}]. \quad (11.2.20)$$

Opérateur tangent

On écrit enfin l'opérateur tangent continu $\mathcal{C} = 2 \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{C}} = 4 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \mathbf{C}^2}$ sous la forme

$$\mathcal{C} = \mathcal{C}_{vol} + \mathcal{C}_{iso}, \quad (11.2.21)$$

avec :

$$\begin{aligned}
 - \mathcal{C}_{vol} &= 2 \frac{\partial \mathbf{S}_{vol}}{\partial \mathbf{C}}, \\
 - \mathcal{C}_{iso} &= 2 \frac{\partial \mathbf{S}_{iso}}{\partial \mathbf{C}}.
 \end{aligned}$$

Par définition de \mathbf{S}_{vol} (11.2.16), \mathcal{C}_{vol} se développe en

$$\mathcal{C}_{vol} = 2 \frac{\partial (Jp \mathbf{C}^{-1})}{\partial \mathbf{C}}, \quad (11.2.22)$$

ce qui donne

$$\mathcal{C}_{vol} = 2 \left(p + J \frac{dp}{dJ} \right) \mathbf{C}^{-1} \otimes \frac{\partial J}{\partial \mathbf{C}} + 2Jp \frac{\partial \mathbf{C}^{-1}}{\partial \mathbf{C}}. \quad (11.2.23)$$

Le terme $\frac{\partial \mathbf{C}^{-1}}{\partial \mathbf{C}}$ se développe sous la forme

$$\frac{\partial \mathbf{C}^{-1}}{\partial \mathbf{C}} = -\mathbf{C}^{-1} \odot \mathbf{C}^{-1}, \quad (11.2.24)$$

Par introduction de (11.2.15) et (11.2.24) dans (11.2.23), on obtient donc

$$\mathcal{C}_{vol} = \left[Jp + J^2 \frac{dp}{dJ} \right] \mathbf{C}^{-1} \otimes \mathbf{C}^{-1} - 2Jp \mathbf{C}^{-1} \odot \mathbf{C}^{-1}. \quad (11.2.25)$$

Ensuite, on travaille sur le tenseur \mathcal{C}_{iso} . Par définition de \mathbf{S}_{iso} (11.2.18), \mathcal{C}_{iso} se développe en

$$\mathcal{C}_{iso} = 2 \frac{\partial J^{-2/3} \bar{\mathbf{S}} : \mathcal{P}^\top}{\partial \mathbf{C}}, \quad (11.2.26)$$

ce qui donne

$$\begin{aligned}
 \mathcal{C}_{iso} &= -\frac{2}{3} J^{-2/3} \bar{\mathbf{S}} : \mathcal{P}^\top \otimes \mathbf{C}^{-1} \\
 &\quad + 2J^{-2/3} \mathcal{P} : \frac{\partial \bar{\mathbf{S}}}{\partial \mathbf{C}} : \frac{\partial \bar{\mathbf{C}}}{\partial \mathbf{C}} \\
 &\quad - \frac{2}{3} J^{-2/3} (\bar{\mathbf{S}} : \mathbf{C}) \frac{\partial \bar{\mathbf{C}}^{-1}}{\partial \mathbf{C}} \\
 &\quad - \frac{2}{3} J^{-2/3} \mathbf{C}^{-1} \otimes \bar{\mathbf{S}}.
 \end{aligned} \quad (11.2.27)$$

On le développe enfin sous la forme

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_{iso} = & -\frac{2}{3}J^{-2/3}\bar{\mathbf{S}} \otimes \mathbf{C}^{-1} + \frac{2}{9}J^{-2/3}(\bar{\mathbf{S}} : \mathbf{C}) \mathbf{C}^{-1} \otimes \mathbf{C}^{-1} \\ & + 2J^{-4/3}\mathcal{P} : \frac{\partial \bar{\mathbf{S}}}{\partial \mathbf{C}} : \mathcal{P}^\top \\ & + \frac{2}{3}J^{-2/3}(\bar{\mathbf{S}} : \mathbf{C}) \mathbf{C}^{-1} \odot \mathbf{C}^{-1} \\ & - \frac{2}{3}J^{-2/3}\mathbf{C}^{-1} \otimes \bar{\mathbf{S}}. \end{aligned} \quad (11.2.28)$$

Le développement de $\bar{\mathbf{C}} = 2J^{-4/3}\frac{\partial \bar{\mathbf{S}}}{\partial \mathbf{C}}$, spécifique à chaque loi de comportement, est finalement réalisé par (11.2.19)

$$\begin{aligned} J^{4/3}\bar{\mathbf{C}} = & \frac{1}{4\pi} \int_{\mathbb{S}^2} 4 \left[\mathcal{C}_{ct} \frac{\partial \lambda}{\partial \mathbf{C}} \otimes \frac{\partial \lambda}{\partial \mathbf{C}} + \frac{\partial \psi_{semi-cris-res}}{\partial \lambda} \frac{\partial^2 \lambda}{\partial \mathbf{C}^2} \right] dA(\mathbf{R}) \\ & + \frac{1}{4\pi} \int_{\mathbb{S}^2} 4 \left[\frac{\partial^2 \psi_{el}}{\partial \lambda^2} \frac{\partial \lambda}{\partial \mathbf{C}} \otimes \frac{\partial \lambda}{\partial \mathbf{C}} + \frac{\partial \psi_{el}}{\partial \lambda} \frac{\partial^2 \lambda}{\partial \mathbf{C}^2} \right] dA(\mathbf{R}) \\ & + \frac{1}{4\pi} \int_{\mathbb{S}^2} 4 \left[\frac{\partial^2 \psi_{tube}}{\partial \nu^2} \frac{\partial \nu}{\partial \mathbf{C}} \otimes \frac{\partial \nu}{\partial \mathbf{C}} + \frac{\partial \psi_{tube}}{\partial \nu} \frac{\partial^2 \nu}{\partial \mathbf{C}^2} \right] dA(\mathbf{R}) \\ & + \frac{1}{4\pi} \int_{\mathbb{S}^2} 4 \left[\frac{\partial^2 \psi_\nu}{\partial \lambda^2} \frac{\partial \lambda}{\partial \mathbf{C}} \otimes \frac{\partial \lambda}{\partial \mathbf{C}} + \frac{\partial \psi_\nu}{\partial \lambda} \frac{\partial^2 \lambda}{\partial \mathbf{C}^2} \right] dA(\mathbf{R}) \end{aligned} \quad (11.2.29)$$

avec les dérivées d'ordre 2

- $\frac{\partial^2 \psi_\nu}{\partial \lambda^2} = \sum_{a=1}^s \left\{ \mu^a \left(\frac{1 - \ln(\lambda) + \varepsilon^a}{\lambda^2} \right) \right\}$, par (10.3.3),
- $\frac{\partial^2 \psi_{semi-cris-res}}{\partial \lambda^2} = n_{ch} \frac{R_A}{N_{seg}} T (L^{-1})' \left(\frac{\lambda - \lambda_\chi}{\sqrt{N_{seg}}} \right)$, par (10.1.2),
- $\frac{\partial^2 \psi_{tube}(\nu)}{\partial \nu^2} = 0$, par (10.1.3),
- $\frac{\partial^2 \psi_{el}}{\partial \lambda^2} = \begin{cases} 0 & \text{si } \lambda < \lambda^*, \\ n_{ch} R_B T F''(\lambda - \lambda^*) & \text{si } \lambda \geq \lambda^*, \end{cases}$, par (10.1.2),
- $\frac{\partial^2 \lambda}{\partial \mathbf{C}^2} = -\frac{\mathbf{R} \otimes \mathbf{R} \otimes \mathbf{R} \otimes \mathbf{R}}{4\lambda^3(\mathbf{R})}$,
- $\frac{\partial^2 \nu}{\partial \mathbf{C}^2} = \left(\frac{\mathbf{R} \otimes \mathbf{R}}{\nu(\mathbf{R})} \right) : (\bar{\mathbf{C}}^{-1} \odot \bar{\mathbf{C}}^{-1} \odot \bar{\mathbf{C}}^{-1}) + (\bar{\mathbf{C}}^{-1} \odot \bar{\mathbf{C}}^{-1}) : \left(\frac{\mathbf{R} \otimes \mathbf{R} \otimes \mathbf{R} \otimes \mathbf{R}}{4\nu^3(\mathbf{R})} \right) : (\bar{\mathbf{C}}^{-1} \odot \bar{\mathbf{C}}^{-1})$.

Les grandeurs détaillées dans cette section sont nécessaires et suffisantes pour l'implémentation de la loi de comportement proposée. Nous allons, pour finir, décrire l'intégration dans le code éléments finis orienté objets Febio.

11.3 Intégration au code élément finis orienté objets

Febio [90] (finite elements for biomechanics) (figure 11.3.1) est un logiciel opensource en C++ pour l'analyse éléments finis. Il a été spécialement conçu pour les applications en biomécanique et développé au Musculoskeletal Research Lab de l'université de l'Utah. Febio offre la possibilité de résoudre des problèmes en grandes déformations en quasi-statique et dynamique. Il possède également de nombreuses lois de comportement multi-phasique, pour matériaux poreux et à anisotropie évolutive. C'est cette dernière

11.3 Intégration au code élément finis orienté objets

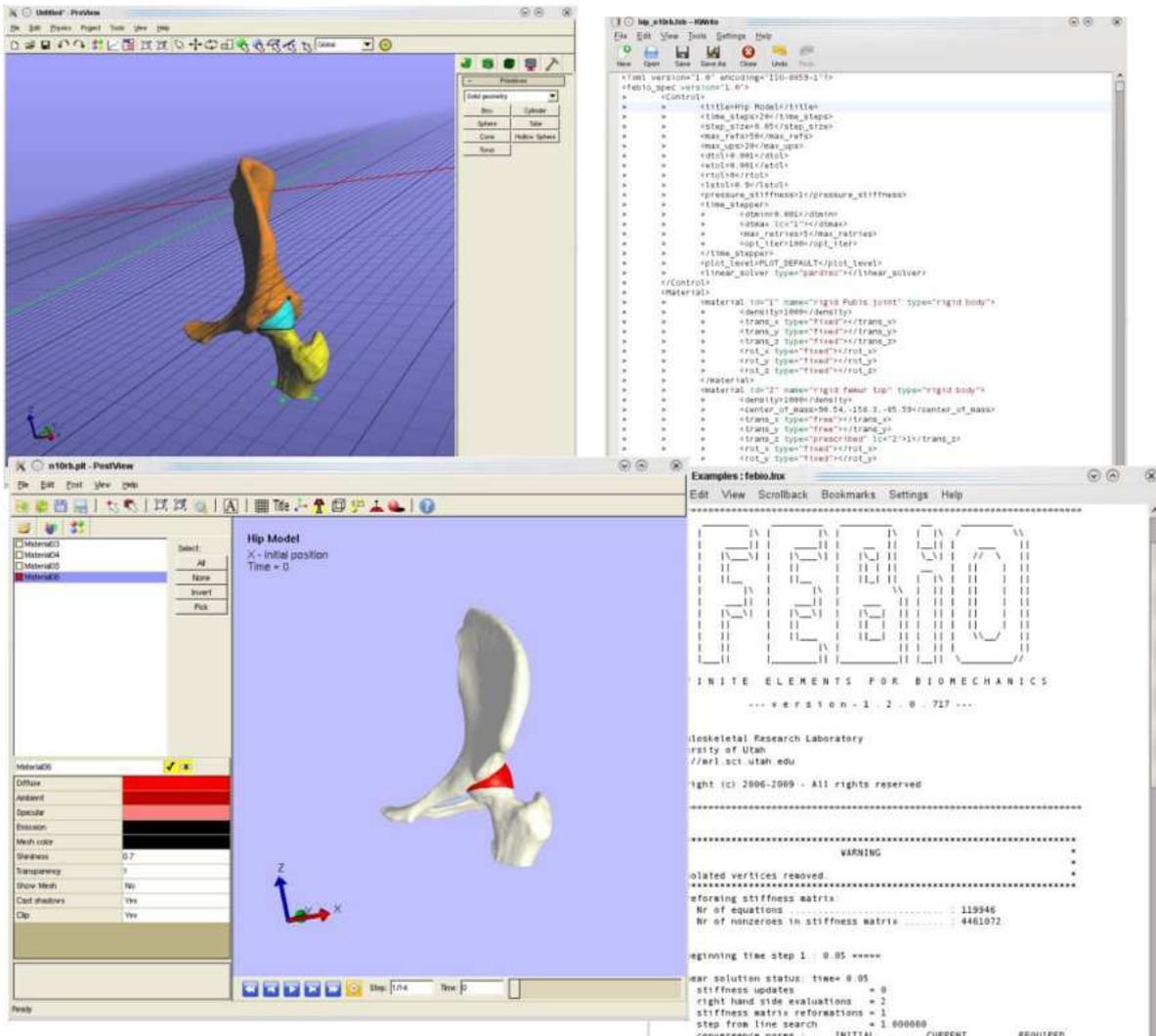


FIGURE 11.3.1: Febio

spécificité ainsi que son caractère opensource qui nous a amené à l'utiliser. Pour pouvoir intégrer notre loi de comportement dans ce code, il a fallu suivre les étapes suivantes : définition d'une nouvelle classe matériau, définition des paramètres matériau, implémentation de l'initialisation du matériau, définition d'une structure de point matériel, implémentation d'une routine calculant la contrainte (incluant la résolution du problème d'évolution par retour radial) et l'opérateur tangent. D'un point de vue de l'implémentation, nous avons donc créé deux classes (figure 11.3.2 pour le modèle simplifié) :

- la classe **FeCrisdMaterial**, héritant de la classe des matériaux découplés dans laquelle on déclare le matériau ainsi que les constantes. Les méthodes associées à cette classe permettent d'initialiser le matériau, de créer un point matériau contenant des variables internes par direction, de calculer la contrainte déviatorique ainsi que l'opérateur tangent déviatorique. Elle contient également le choix d'une méthode d'intégration numérique sur la sphère unité.
- la classe **FeCrisdMaterialPoint**, héritant de la classe point matériel dans laquelle on crée un point matériel pouvant gérer des variables internes par direction à chaque pas de temps. On se sert également de cette classe pour sauvegarder et écrire certaines données par direction pour chaque point de Gauss dans le fichier log. Les méthodes associées à cette classe permettent de gérer le point matériel contenant ces variables internes et de les mettre à jour.

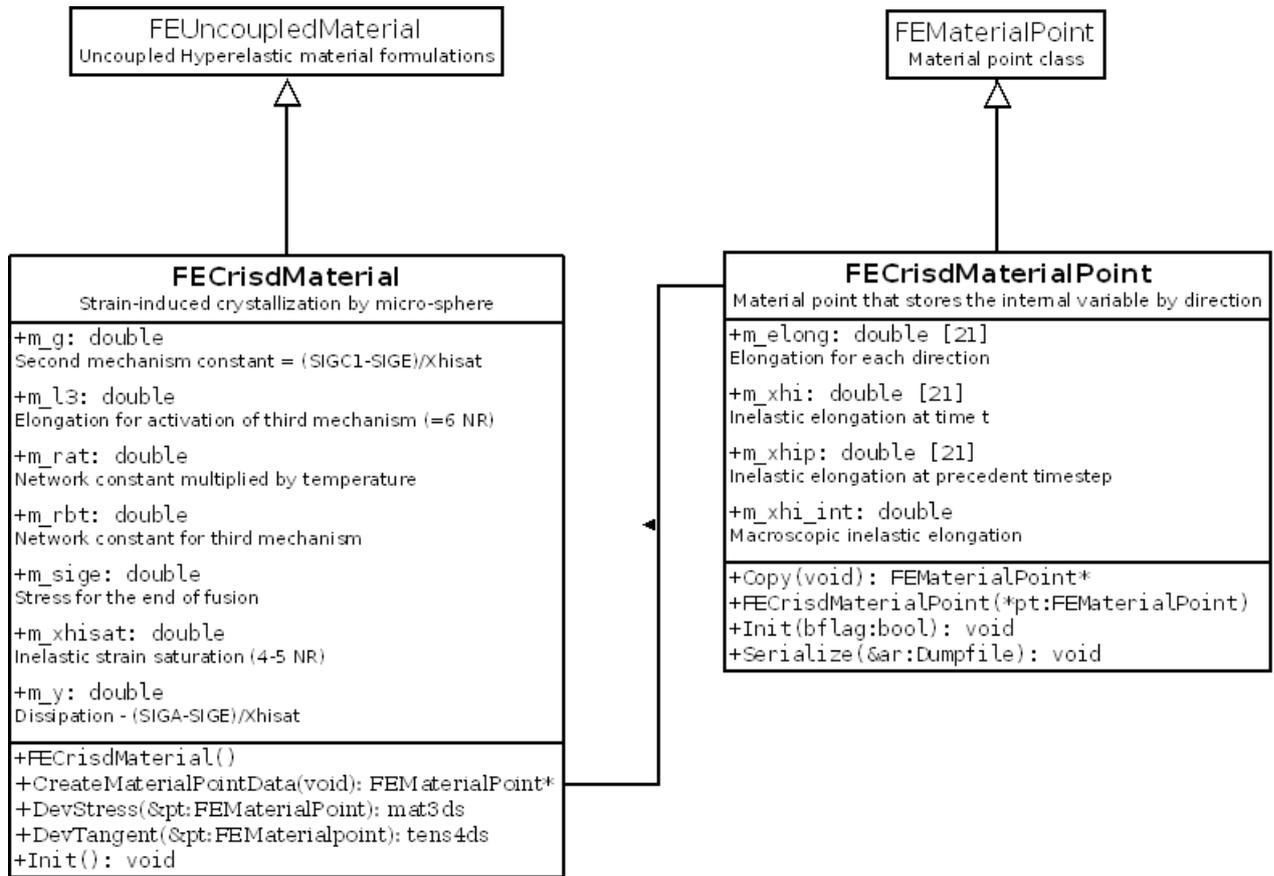


FIGURE 11.3.2: Diagramme UML des classes Febio telles que livrées pour le logiciel dans le cas de la loi de cristallisation sous contrainte simplifiée.

En plus de ces deux classes, dont les éléments sont détaillés dans la section suivante, qui suffisent à la création et à l'utilisation de la loi de comportement, les routines permettant d'écrire des résultats à partir du fichier binaire ont été modifiées pour accueillir certains résultats par direction en chaque point de Gauss ou sur un élément. Pour finir, les calculs les plus coûteux ont nécessité l'utilisation de la librairie MKL-Pardiso en remplacement de la librairie Skyline d'origine pour la résolution des systèmes linéaires. Pour permettre de comprendre plus en détails la figure 11.3.2, on détaille ces deux éléments principaux dans la suite. Pour plus de clarté, on montre ici le cas gaussien puisque c'est le plus utilisé dans la suite. On se place aussi dans la situation d'une intégration à 21 directions par demi sphère. Il faut néanmoins comprendre que l'implémentation est générale et ne nécessite donc pas d'être changée pour le modèle complet. De plus, on a suivi les règles d'implémentation de Febio dans la suite qui ne correspondent pas forcément à l'esprit de l'orienté objet.

11.3.1 FeCrisdMaterial

En suivant la méthode d'implémentation dans Febio, on a créé uniquement deux fichiers FeCrisdMaterial.h contenant les classes FeCrisdMaterial et FeCrisdMaterialPoint ainsi que le nom de deux fichiers .h : geodesic.h contenant les règles d'intégration numérique sur la sphère et FEUncoupledMaterial.h contenant la classe des matériaux découplés. Cette dernière classe nous permet tout simplement d'avoir une base de variables et de méthodes déjà codées pour accéder aux informations contenues dans le point matériel des matériaux élastiques découplés et de se limiter au développement de la partie déviatorique de la contrainte et de l'opérateur tangent. La classe FeCrisdMaterial codé à la suite est décrite dans la figure 11.3.2 et 5 méthodes sont codées dans le fichier FeCrisdMaterial.cpp :

1. FeCrisdMaterial() le constructeur du matériau,
2. Init() :void qui initialise le matériau et vérifie que les constantes respectent les conditions thermodynamiques.
3. CreateMaterialPointData(void) :FEMaterialPoint* qui retourne un pointeur sur le nouvel objet décrivant le point matériel à variables internes directionnelles FeCrisdMaterialPoint,
4. DevStress(&pt :FEMaterialPoint) :mat3ds qui prend en entrée « l'état » du point matériel à l'instant t_n et qui renvoie la contrainte déviatorique à l'instant t_{n+1} . Dans cette routine, on a codé le retour radial et mis à jour les 21 variables internes m_xhi. On a également passé au point matériel des informations par direction m_elong et une information intégrée sur la sphère m_xhi_int qui nous servent dans le post-processing.
5. DevTangent(&pt :FEMaterialPoint) :tens4ds qui prend en entrée « l'état » du point matériel à l'instant t_n et qui renvoie la partie déviatorique de l'opérateur tangent à l'instant t_{n+1} .

Ensuite, on doit ajouter à l'intérieur de FeCrisdMaterial.h le code complet du point matériel à variables internes.

11.3.2 FeCrisdMaterialPoint

Le but de cette classe est principalement de passer des informations (variables internes, variables particulières pour le post-processing) au fichier binaire stockant les informations de calcul. Puisque Febio n'a pas de structure bien définie pour les problèmes à variables internes, on doit recréer cette classe à chaque fois. Elle est constituée de 4 méthodes :

1. FeCrisdMaterialPoint(*pt :FEMaterialPoint) le constructeur du point matériel voulu appelant la classe abstraite FEMaterialPoint,

2. `Init(bflag :bool) :void`, la méthode appelée avant chaque pas de temps pour l'initialisation. Elle a un paramètre booléen `bflag` qui vérifie si on est au premier pas de temps. Dans ce cas, elle alloue et initialise les variables internes.
3. `Copy(void) :FEMaterialPoint*`, la méthode qui crée une copie de la classe point matériel. Cette méthode est donc utilisée pour stocker l'état courant avant que le pas de temps commence. Cette méthode permet également à Febio de redémarrer le pas de temps en cas d'échec de la convergence.
4. `Serialize(&ar :Dumpfile) :void`. Cette méthode est utilisée pour écrire et lire les informations du point matériel à l'état courant dans le fichier binaire.

Chapitre 12

Tests numériques homogènes

Dans ce chapitre, on réalise des tests numériques représentatifs sur la loi de comportement construite afin de valider le modèle et son approche numérique. Pour cela, on valide tout d'abord le modèle par des calculs 1D (section 12.1) pour vérifier que l'on retrouve bien les tendances principales recherchées. Ensuite, on analyse l'apport de la micro-sphère dans un cas homogène uniaxial (section 12.2) puis biaxial (section 12.3). Le modèle est testé sur des cas hétérogènes à grand nombre de degrés de liberté et présentant des difficultés particulières dans le chapitre 13.

Avant de commencer les tests numériques, il convient de noter le choix fait dans le reste du manuscrit en ce qui concerne la gestion de l'incompressibilité. On rappelle donc que le solveur utilisé est *Febio* et qu'on utilise la méthode de Lagrangien augmenté et que la constante d'incompressibilité prise est égale à 50000. De plus, on vérifie systématiquement à posteriori que le matériau est bien incompressible.

12.1 Calcul 1D de validation

12.1.1 Cas de charge-décharge : Comparaison à l'expérience

L'objectif de cette sous-section est de comparer un cycle de charge-décharge saturant à vitesse et température constantes à l'expérience dans le cadre du modèle 1D complet. Pour cela, on a choisi un cycle de [91] (figures 12.1.1, 12.1.2 et 12.1.4) où le caoutchouc naturel est soumis à une élongation uniaxiale cyclique à une vitesse de 2mm/min et une température de 40°C. On a choisi ce cas expérimental car les résultats présentés sont très complets. Toutes ces grandeurs sont fonctions de l'élongation moyenne. De plus, les trois mécanismes (relaxation, durcissement, activation de l'élasticité) sont clairement présents et séparés notamment en ce qui concerne le plateau de contrainte suivant l'initiation de la cristallisation. Pour finir, la comparaison est réalisée à partir du modèle 1D complet contenant l'énergie de Langevin et on décrit sous la forme de fonctions puissances :

- l'énergie stockée $\mathring{g}(\lambda_\chi) = g_1 \frac{\lambda_\chi^{\alpha_1}}{\alpha_1}$ pour $\lambda_\chi \in]0, \lambda_{\chi, sat}[$ avec α_1 une nouvelle constante de forme,
- l'énergie libre du troisième mécanisme $F = \frac{\langle \lambda - \lambda_* \rangle_+^{\alpha_2}}{\alpha_2}$ avec α_2 une nouvelle constante de forme,
- le seuil en cristallisation $Y(\lambda_{\chi, sat} - \lambda_\chi) = Y_1 \frac{(\lambda_{\chi, sat} - \lambda_\chi)^{\alpha_3}}{\alpha_3}$ avec α_3 une nouvelle constante de forme.

Ceci ajoute 3 constantes à celles déjà présentes sur le modèle simplifié. La valeur de la contrainte nominale observée durant la charge pour la phase amorphe de $\lambda = 1$ à $\lambda = 7$ est représentée à la figure 12.1.1.

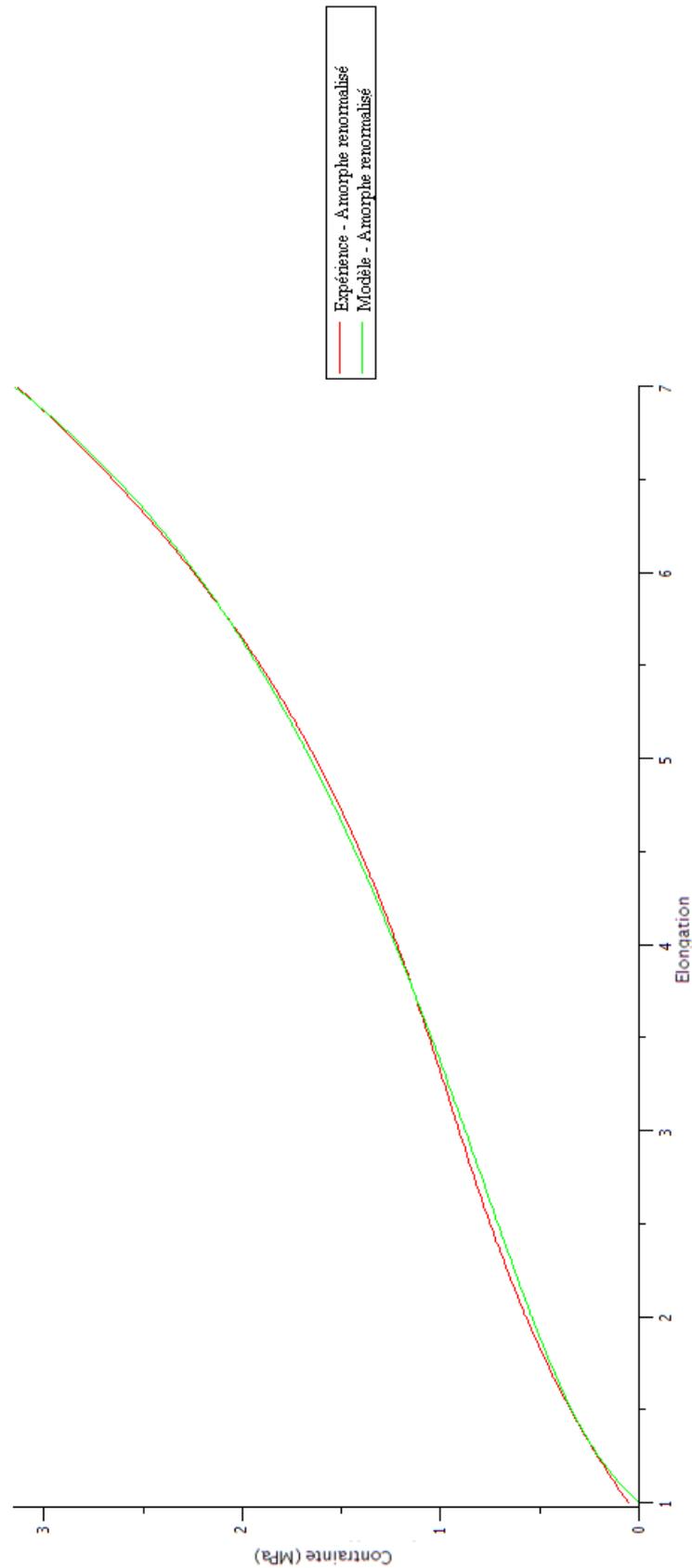


FIGURE 12.1.1: Contrainte nominale en fonction de l'élongation lors d'une traction uniaxiale amorphe à 80°C renormalisée à 40°C par la relation de Rivlin. Comparaison entre le résultat expérimental extrait de [91] et le modèle constitutif 1D. Expérience amorphe à 80°C renormalisée à 40°C (en rouge). Test numérique amorphe à 40°C (en vert)

On rappelle ici que le test amorphe est réalisé à 80°C, puis renormalisé à 40°C en considérant que la contrainte amorphe est proportionnelle à la température, ce qui est le cas expérimentalement (figure 9.1.19). Le modèle amorphe nécessite trois constantes :

- la raideur du réseau amorphe,
- le nombre de segments dans la chaîne représentative,
- le module du tube. Celui-ci est réglé de manière à avoir une contrainte nulle en $\lambda = 1$ comme pour l'analyse analytique (section 10.2).

Les deux premières constantes (raideur du réseau amorphe et nombre de segments) sont choisies de manière à minimiser l'écart modèle-expérience au sens des moindres carrés. On peut remarquer que le tube ne joue un rôle qu'aux petites élongations ($\lambda = 1 \dots 2.5$). On remarque également que la pente de la courbe augmente à partir de $\lambda = 5.5$ ce qui montre l'obligation d'utiliser une fonction de Langevin plutôt qu'une énergie de chaîne amorphe gaussienne. La figure 12.1.1 nous permet alors de montrer que l'écart entre la théorie et l'expérience est mineur. Cet écart est similaire à celui obtenu par le modèle amorphe de [91] qui est sensiblement basé sur les mêmes arguments.

Ensuite, on examine les résultats semi-cristallins. Pour obtenir la présence de cristallisation sous contrainte, l'essai est refait à 40°C. Tout d'abord, on se concentre sur les résultats des figures 12.1.2 et 12.1.3. Pour pouvoir comparer la contrainte entre l'expérience et le modèle constitutif, on commence par utiliser les constantes du cas amorphe puis on ajuste les constantes aux points A et E comme cela est fait dans le test analytique (section 10.2.2). Il reste alors deux constantes (α_2, α_3) et un point à ajuster (le point C) que l'on utilise pour minimiser l'écart entre les courbes au sens des moindres carrés. Cette méthode pour caler les constantes permet d'illustrer deux points essentiels :

- l'indépendance entre les constantes venant du problème amorphe et du problème semi-cristallin,
- l'équivalence entre les tendances présentes sur le modèle simplifié et sur le modèle complet.

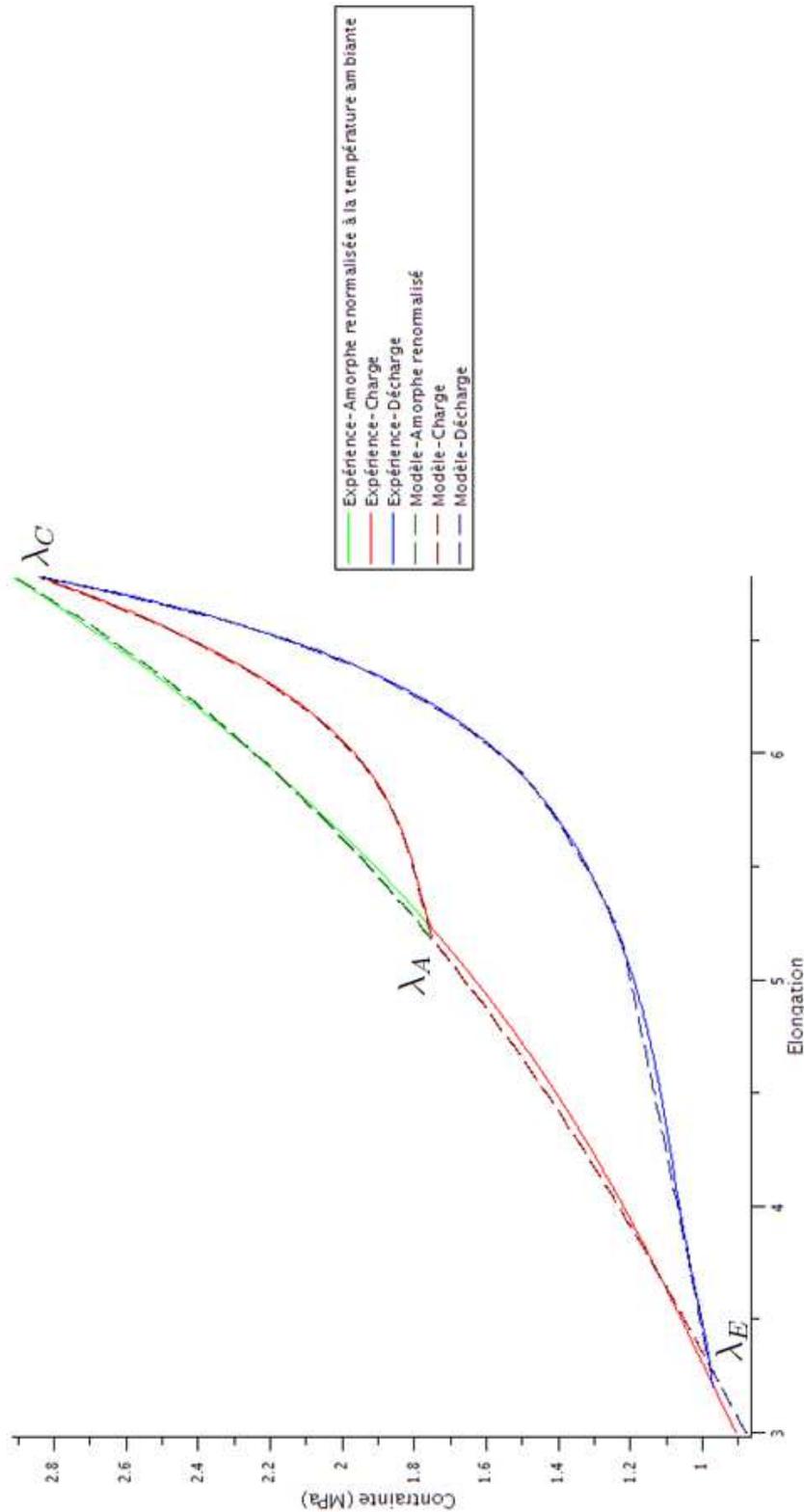


FIGURE 12.1.2: Contrainte nominale en fonction de l'élongation lors d'un test cyclique en élongation uniaxiale. Comparaison entre le résultat expérimental extrait de [91] et le modèle constitutif 1D. Comparaison des deux résultats amorphes avec les constantes de la figure 12.1.1 (En vert). Comparaison des deux résultats en charge pour une cristallisation de λ_A à λ_C (En rouge). Comparaison des deux résultats en décharge pour une fusion de λ_E à λ_C (En bleu).

La figure 12.1.2 montre alors que pour les contraintes le modèle peut être ajusté à 80°C puis à 40°C et être très proche du résultat expérimental. Les trois mécanismes sont en effet présents. La zone de relaxation juste après λ_A est en particulier bien représentée par le modèle. On montrera néanmoins à la section 13.3.1 que certaines formulations matériau sont moins adaptées au modèle que le caoutchouc naturel non chargé.

Ensuite, on représente l'élongation locale comme une fonction de $\lambda^2 - \lambda^{-1}$ (figure 12.1.3).

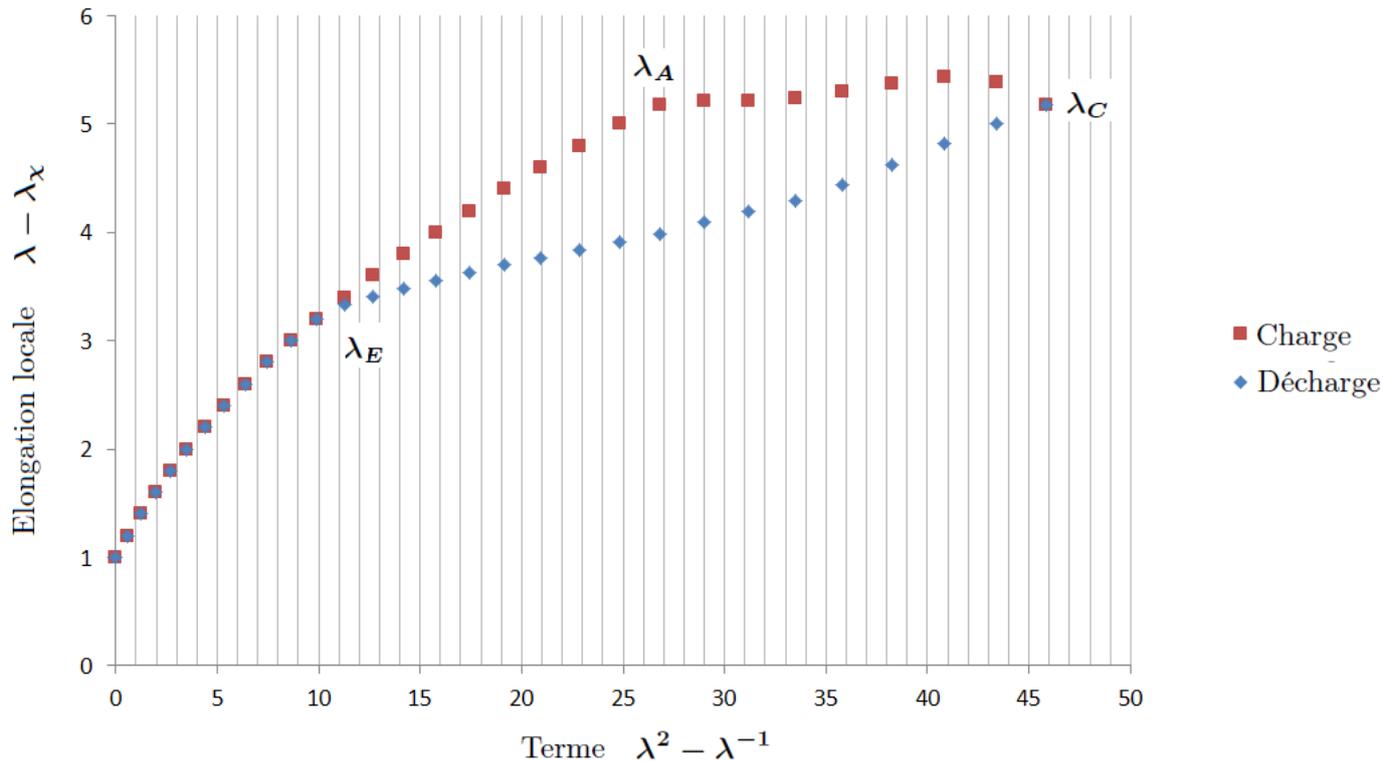


FIGURE 12.1.3: Elongation locale $\lambda_{local} = \lambda - \lambda_x$ en fonction de $\lambda^2 - \lambda^{-1}$ lors du test cyclique (figure 12.1.2), λ_{local} à la charge (en rouge), λ_{local} à la décharge (en bleu).

En ce qui concerne l'élongation locale, en dépit du fait que l'on ne peut faire de comparaison directe, la tendance est en accord qualitatif avec la figure 9.1.16. On peut notamment observer que l'élongation locale en charge pour $\lambda > \lambda_A$ présente grossièrement un plateau. Pour conclure avec cette partie de la comparaison, le comportement de cristallisation sous contrainte est facilement reproduit par le modèle même si l'on considère plusieurs états différents amorphe - semi-cristallin ainsi que plusieurs grandeurs différentes sur ce matériau.

Finalement, la relation entre le taux de cristallinité et le taux d'élongation inélastique peut être utilisé. On prend alors [77]

$$\frac{d\lambda_{\chi,charge}}{dt} = \chi_I P_{charge}^\beta \frac{d\chi_{charge}}{dt}, \quad (12.1.1)$$

avec β une constante de forme, χ_I la constante de proportionnalité assurant le recalage entre la cristallinité réelle et l'index de cristallinité et P_{charge} la contrainte 1D à la charge. On a de même

$$\frac{d\lambda_{\chi,décharge}}{dt} = \chi_C P_{décharge}^\beta \frac{d\chi_{décharge}}{dt}, \quad (12.1.2)$$

à la décharge avec χ_C la constante assurant la continuité de la fonction χ au maximum du cycle : $\chi_{décharge}(\lambda_{max}) = \chi_{charge}(\lambda_{max})$. Avec ce résultat, on peut construire la cristallinité en fonction de l'élongation (figure 12.1.4).

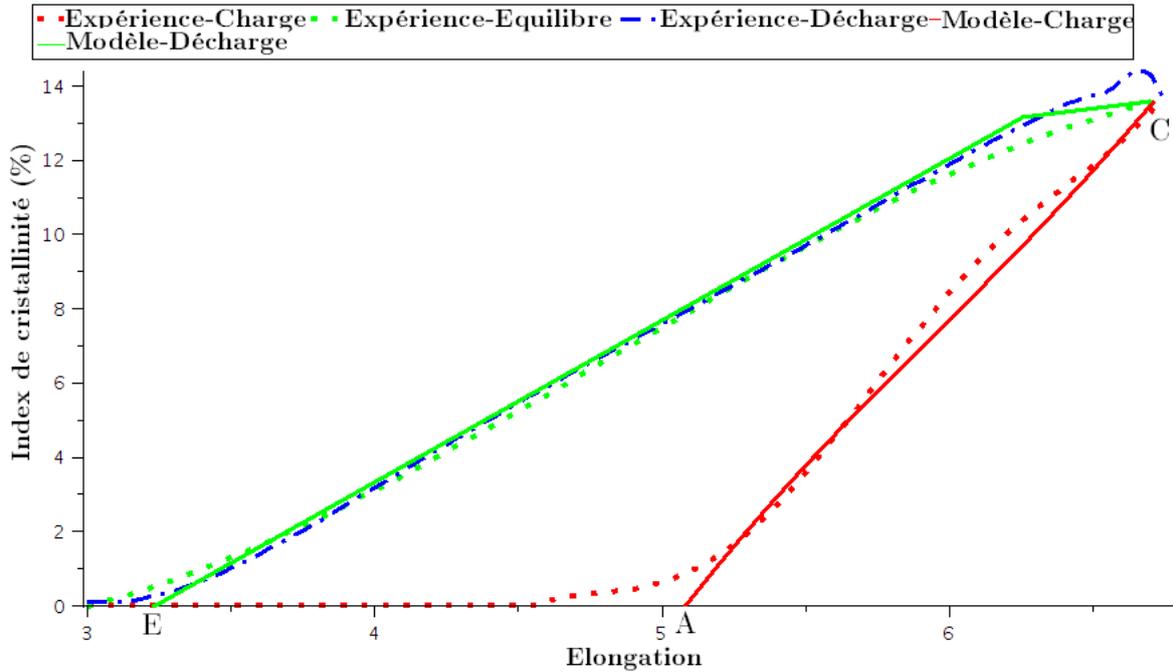


FIGURE 12.1.4: Index de cristallinité χ en fonction de l'élongation lors du test cyclique (figure 12.1.2). Comparaison entre l'expérience (en points rouge) et le modèle durant la charge (en ligne continue rouge). Comparaison entre l'expérience à l'équilibre (en points vert) et le modèle durant la décharge (en ligne continue verte). Expérience à la décharge (ligne bleue).

Il faut tout d'abord rappeler qu'on travaille sur un index de cristallinité dans l'expérience. Le recalage se fait donc toujours à, au moins, une constante multiplicative près.

On note ensuite que la cristallinité est bien reproduite par ce calcul 1D à l'exception de trois domaines :

- λ_A est significativement plus faible dans l'expérience que dans le modèle, le modèle ignorant toute une phase d'amorçage
- λ_E est plus faible dans l'expérience que dans le modèle,
- la surcristallisation au début de la décharge n'est pas prédite par le modèle.

12.1.2 Cas cycle partiel - modèle simplifié : Vérification de tendances

Ce test doit nous permettre de vérifier que notre modèle est capable de reproduire qualitativement la diminution de la décharge élastique lorsque $\lambda_\chi \rightarrow \lambda_\chi^{max,cycle}$ pour le modèle analytique 1D (section 10.2). On rappelle qu'avec le modèle simplifié, en négligeant le terme en λ^{-2} dans la gamme d'élongation qui nous intéresse, on a :

- la contrainte $P = \begin{cases} R_{A-G}T(\lambda - \lambda_\chi) & \text{si } \lambda < \lambda_*, \\ R_{A-G}T(\lambda - \lambda_\chi) + R_B T(\lambda - \lambda_*) & \text{si } \lambda \geq \lambda_*, \end{cases}$
- la condition de fusion $\lambda - \lambda_E - (\lambda_C - \lambda_E) \frac{\lambda_\chi}{\lambda_{\chi,sat}} = 0$,
- la condition de cristallisation $\lambda - \lambda_A - (\lambda_C - \lambda_A) \frac{\lambda_\chi}{\lambda_{\chi,sat}} = 0$.

Lors des cycles saturants, la charge dure jusqu'en λ_C . Supposons alors que l'on bloque la charge en $\lambda_B < \lambda_C$. Dans ce cas, on obtient

$$\lambda_{\chi,B} = \lambda_{\chi,sat} \frac{\lambda_B - \lambda_A}{\lambda_C - \lambda_A}. \quad (12.1.3)$$

Si on décharge à partir du point B, la cristallinité reste constante et la décharge est élastique jusqu'à λ_D vérifiant la condition de fusion pour $\lambda_\chi = \lambda_{\chi,B}$ ce qui donne par (12.1.3) et par définition de $\lambda_A, \lambda_B, \lambda_C$

$$\lambda_D = \lambda_E + \frac{(\lambda_B - \lambda_A)(\lambda_C - \lambda_E)}{\lambda_C - \lambda_A}. \quad (12.1.4)$$

La longueur de la décharge élastique peut ensuite être exprimée par $\lambda_B - \lambda_D$ ce qui donne par (12.1.4)

$$0 \leq \lambda_B - \lambda_D = (\lambda_A - \lambda_E) \frac{\lambda_C - \lambda_B}{\lambda_C - \lambda_A} \leq \lambda_A - \lambda_E. \quad (12.1.5)$$

On retrouve naturellement une décharge élastique décroissante lorsque $\lambda_B \rightarrow \lambda_C$. Finalement, la pente de cette décharge est soit $R_{A-G}T$ si $\lambda_B < \lambda_*$, soit $(R_{A-G} + R_B)T$ puis $R_{A-G}T$ si $\lambda_B \geq \lambda_*$. Ceci nous donne le résultat de la figure 12.1.5.

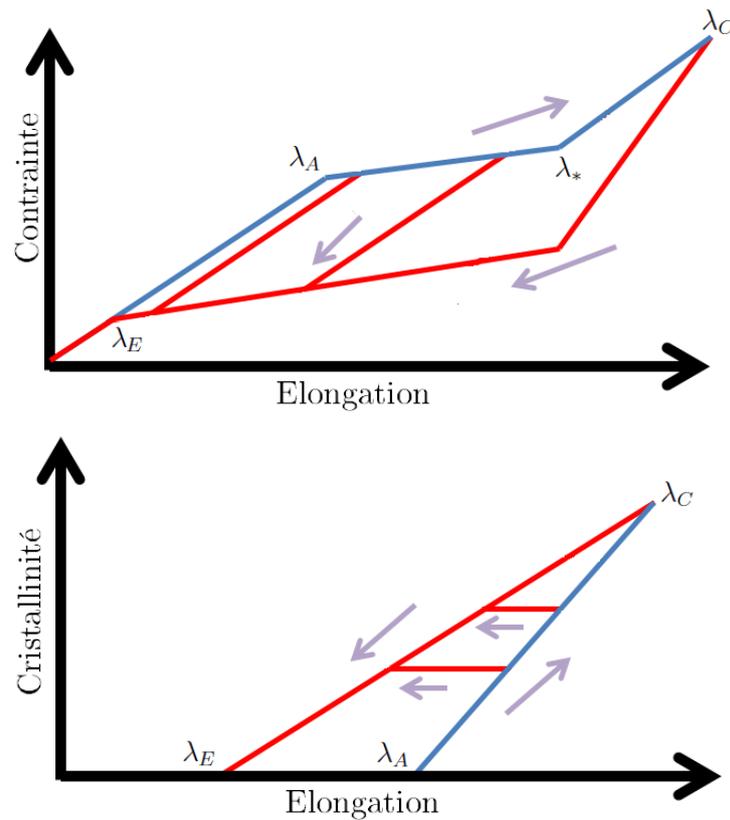


FIGURE 12.1.5: Résultat analytique de la contrainte (en haut) et de la cristallinité (en bas) en fonction de λ pour le modèle simplifié et différentes décharges partiels. (Bleu en charge) (Rouge en décharge). (Flèche violette) Indication du sens de l'évolution du chargement.

Notons que lors de charges partielles, le raisonnement et les résultats obtenus seraient du même type. Cette méthodologie à l'avantage de reproduire simplement et qualitativement les résultats présents lors de cycles non-saturants car le nombre de constantes n'a pas changé. On peut également remarquer que si on remplace le seuil Y linéaire par une fonction puissance l'évolution de la décharge élastique par rapport à $\lambda_{X,B}$ est modifiée. Néanmoins, on garde toujours une seule et unique courbe de fusion lors de décharges partielles ce qui ne correspond pas à l'expérience (figure 12.1.6). Mais, il faut rappeler que ce modèle 1D est conçu pour être fonctionnel après introduction dans la micro-sphère (section 12.2.2).

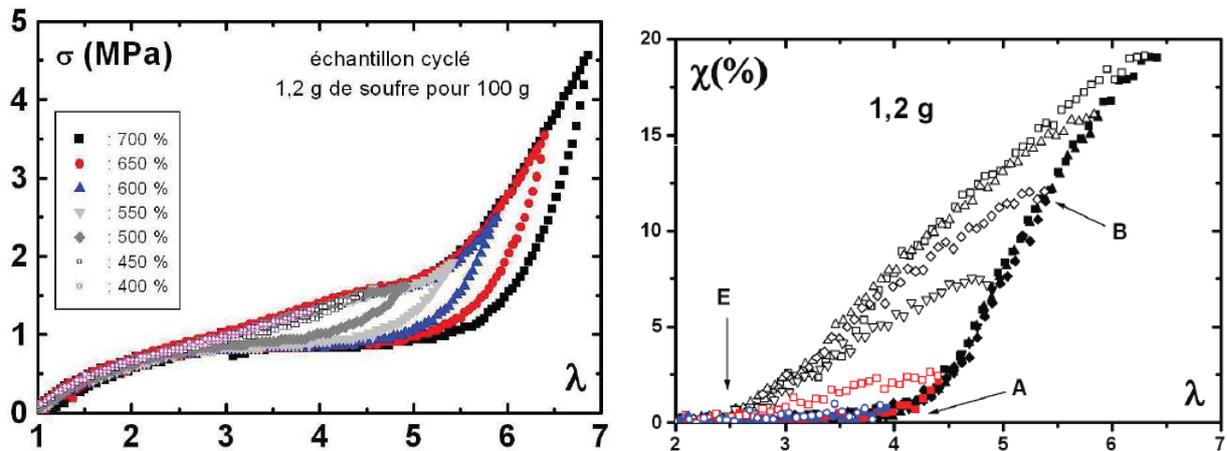


FIGURE 12.1.6: Résultats expérimentaux avec cycles mécaniques à elongations croissantes ($\dot{\lambda} = 2\text{mm}/\text{min}$), allant de 400 à 700% lors d'un test en elongation uniaxiale. (A gauche) Contrainte nominale en fonction de l'elongation. (A droite) Index de cristallinité en fonction de l'elongation (figure tirée de [91]).

12.1.3 Synthèse de la validation 1D

Les tests 1D nous ont permis de valider :

- les trois mécanismes,
- la modélisation correcte du problème amorphe uniaxial,
- la modélisation correcte d'un chargement cyclique semi-cristallin saturant ou non au niveau de la contrainte et de l'évolution qualitative des variables internes.

Cependant, nous avons identifié l'absence d'anisotropie inhérente au modèle 1D ainsi que l'insuffisance de l'hypothèse d'évolution sur le seuil Y . Nous allons voir dans la section suivante que ces défauts sont systématiquement corrigés par la micro-sphère, modèle qui nous permet de simuler des problèmes 3D sous chargement multi-axiaux dans un code éléments finis.

12.2 Calcul 3D uniaxial

L'intégration du comportement 1D dans la micro-sphère nous a permis d'obtenir une loi de comportement 3D (section 10.4). Cette loi a été codée dans le code éléments finis *Febio* [90] et sa mise en oeuvre numérique décrite dans le chapitre 11. Dans cette section, on se concentre donc sur les résultats issus de ce code. Les calculs ont d'abord été effectués sur des maillage à 1 élément pour valider l'implémentation. Ensuite, on s'intéresse à l'expression de l'elongation inélastique intégrée sur la micro-sphère dans un cas homogène uniaxial pour plusieurs types de cycle partiel. Puis, on s'attarde sur le principal

résultat que l'on attend en anisotropie évolutive, à savoir la prédiction de l'orientation des cristallites au cours d'un cycle. Enfin, on réalise un calcul sur un maillage à plusieurs éléments pour finir la validation de l'implémentation de la loi de comportement.

12.2.1 Réponse anisotrope pour un chargement uniaxial homogène à un élément

Pour ce premier cas, on considère un élément unique de type hexaédrique trilineaire à 8 noeuds. Cet élément subit une elongation λ_1 imposée dans la direction z et reste libre en déplacement selon les autres directions. La loi de comportement utilisée est celle du modèle simplifié (section 10.2) intégré sur la micro-sphère.

Considérons \mathbf{R} un vecteur d'orientation lagrangien sur la sphère unité définie sur le repère $(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z})$ (figure 12.2.1) par

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} \sin(\phi) \cos(\theta) \\ \sin(\phi) \sin(\theta) \\ \cos(\phi) \end{bmatrix}. \quad (12.2.1)$$

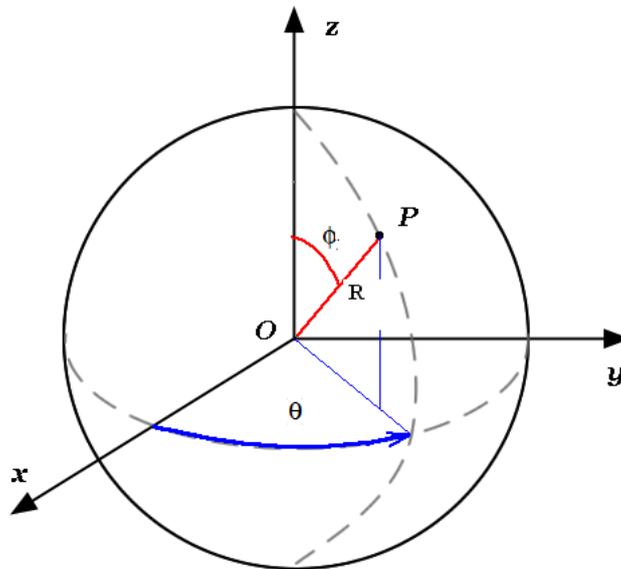


FIGURE 12.2.1: Coordonnées sphériques

Le tenseur de Cauchy-Green isochore à droite pour une elongation uniaxiale λ_1 dans la direction z vaut par ailleurs

$$\bar{\mathbf{C}}_{uni} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\lambda_1} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\lambda_1} & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_1^2 \end{bmatrix}. \quad (12.2.2)$$

L'élongation direction par direction est indépendante de θ et s'écrit analytiquement

$$\lambda(\phi) = \sqrt{\frac{\sin^2(\phi)}{\lambda_1} + \cos^2(\phi) \lambda_1^2}. \quad (12.2.3)$$

On représente alors l'élongation normalisée $\frac{\lambda(\phi)}{\lambda_1}$ obtenue par Febio pour différents λ_1 (figure 12.2.2). Pour commencer, il y a bien symétrie par rapport à l'axe $0-\pi$ du résultat obtenu comme cela est prévu par l'expression analytique ainsi qu'une indépendance par rapport à θ . Ensuite, on observe conformément à ce qui est attendu une plus forte élongation dans la direction de traction (axe $0-\pi$) et une diminution dans la direction perpendiculaire qui est la direction la plus comprimée.

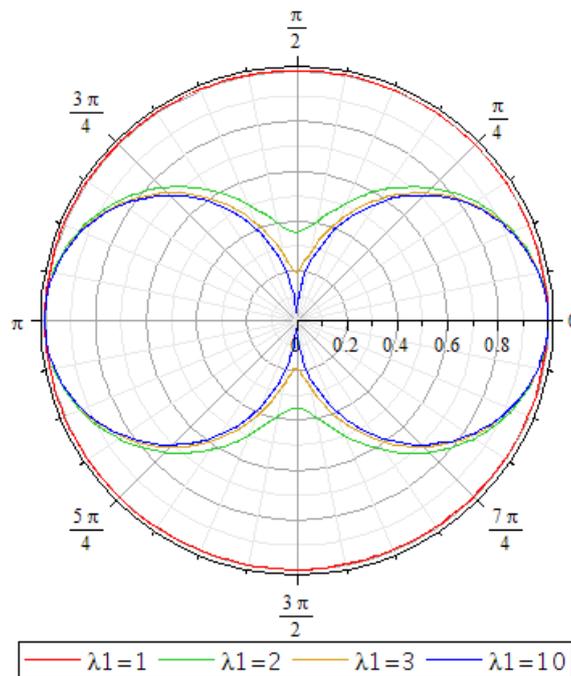


FIGURE 12.2.2: Représentation polaire de l'élongation normalisée $\frac{\lambda(\phi)}{\lambda_1}$ obtenue par Febio dans un cas élastique pour plusieurs élongations uniaxiales λ_1 sur un élément dans la direction z (**Erreur relative par rapport à la formulation analytique 12.2.3 inférieure à 0.5%**). (En rouge) $\frac{\lambda(\phi)}{\lambda_1}$ pour $\lambda_1 = 1$. (En vert) $\frac{\lambda(\phi)}{\lambda_1}$ pour $\lambda_1 = 2$. (En marron) $\frac{\lambda(\phi)}{\lambda_1}$ pour $\lambda_1 = 3$. (En bleu) $\frac{\lambda(\phi)}{\lambda_1}$ pour $\lambda_1 = 10$.

Ensuite, on reconstruit à partir des résultats Febio l'élongation inélastique $\lambda_\chi(\phi)$ pour différents λ_1 en cristallisation (figure 12.2.3) et en fusion (figure 12.2.4). Les constantes choisies sont :

- $\lambda_E = 2$,

- $\lambda_A = 3$,
- $\lambda_C = 6$,
- $\lambda_{\chi, sat} = 5$.

Sans revenir en détails sur les différents mécanismes qu'on a introduit en cristallisation, on peut dire que l'on observe bien le mécanisme de saturation en $\lambda_\chi = 0$ et $\lambda_\chi = \lambda_{\chi, sat} = 5$ ainsi que la différence entre la phase de cristallisation et la valeur de λ_χ à l'équilibre. La nouveauté présente par rapport au modèle 1D est la notion de saturation sur l'ensemble de la sphère. En effet, on voit que le $\lambda_{\chi, sat}$ par direction ne correspond pas au $\lambda_{\chi, sat}$ sur la sphère complète. Ceci est intrinsèquement dû à la répartition de l'élongation sur la sphère, ce qui fait que l'on ne sature pas sur l'ensemble des directions.

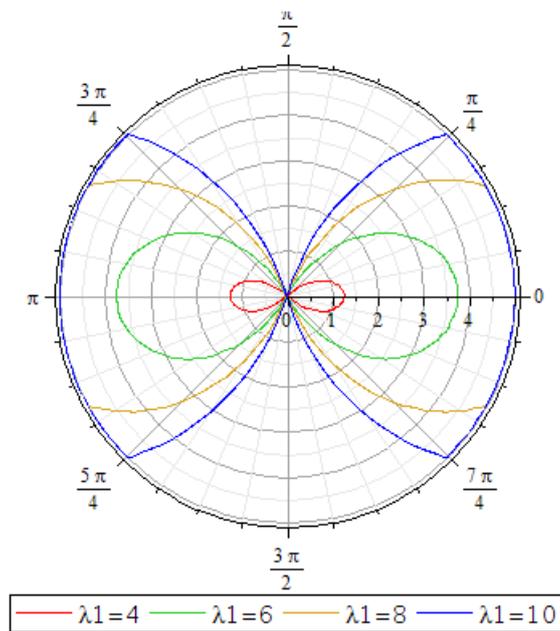


FIGURE 12.2.3: Représentation polaire de $\lambda_\chi(\phi)$ en cristallisation obtenue en phase de chargement pour plusieurs élongations uniaxiales λ_1 sur un élément dans la direction z avec $\lambda_{\chi, sat} = 5$. (En rouge) $\lambda_\chi(\phi)$ pour $\lambda_1 = 4$. (En vert) $\lambda_\chi(\phi)$ pour $\lambda_1 = 6$. (En marron) $\lambda_\chi(\phi)$ pour $\lambda_1 = 8$. (En bleu) $\lambda_\chi(\phi)$ pour $\lambda_1 = 10$.

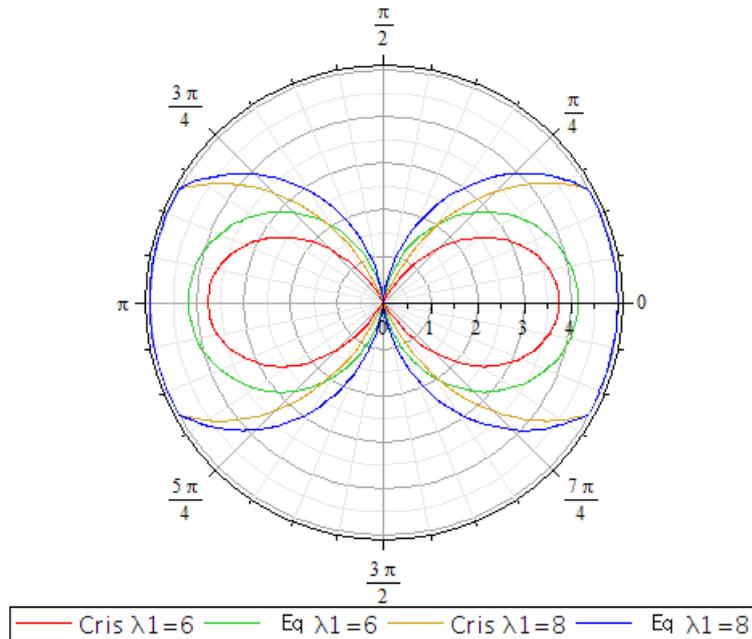


FIGURE 12.2.4: Représentation polaire de $\lambda_\chi(\phi)$ en cristallisation et à l'équilibre thermodynamique pour plusieurs élongations uniaxiales λ_1 sur un élément dans la direction z avec $\lambda_{\chi,sat} = 5$. (En rouge) $\lambda_\chi(\phi)$ en cristallisation pour $\lambda_1 = 6$. (En vert) $\lambda_\chi(\phi)$ à l'équilibre pour $\lambda_1 = 6$. (En marron) $\lambda_\chi(\phi)$ en cristallisation pour $\lambda_1 = 8$. (En bleu) $\lambda_\chi(\phi)$ à l'équilibre pour $\lambda_1 = 10$.

On remarque également (figure 12.2.4) que comme prévu la surface représentée par $\lambda_\chi(\phi)$ à l'équilibre thermodynamique est toujours supérieure à celle représentée par $\lambda_\chi(\phi)$ en cristallisation à λ_1 donné. Enfin, on représente la traction directionnelle $P(\phi) = \frac{\partial \psi}{\partial \lambda}(\phi)$ pour $\lambda_1 = 6.5$ sur le même cas test que précédemment (figure 12.2.5) pour différentes valeurs de $\lambda_{\chi,sat}$ dans le cas de la cristallisation et de l'équilibre thermodynamique.

Les constantes choisies sont :

- $\lambda_A = 3$,
- $\lambda_E = 2$,
- $\lambda_C = 6$,
- $R_{A-G} = 1$,
- $R_B = 1$,
- $\lambda_* = 5$.

De la même manière, on observe bien les différents mécanismes répartis par direction. Il est aussi intéressant de voir que ce n'est pas la direction d'élongation qui est la plus relaxée mais celle présente entre $\frac{\pi}{6}$ et $\frac{\pi}{3}$. Il sera intéressant de reprendre cette observation lors des calculs de fissuration où on peut directement observer les directions les plus relaxées.

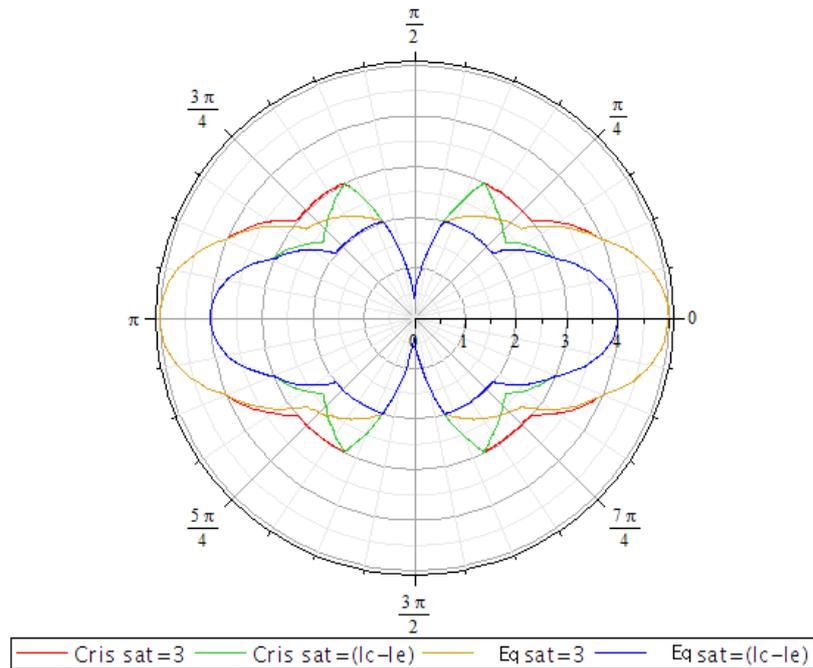


FIGURE 12.2.5: Représentation polaire de la traction directionnelle $P(\phi)$ en élongation uniaxiale $\lambda_1 = 6.5$ sur un élément dans la direction z . (En rouge) $P(\phi)$ en cristallisation avec $\lambda_{\chi,sat} = 3$. (En vert) $P(\phi)$ en cristallisation avec $\lambda_{\chi,sat} = 4$. (En marron) $P(\phi)$ à l'équilibre thermodynamique avec $\lambda_{\chi,sat} = 3$. (En bleu) $P(\phi)$ à l'équilibre thermodynamique avec $\lambda_{\chi,sat} = 4$.

Ces résultats nous permettent de valider uniquement l'implémentation du modèle. On examine ensuite le cas de l'index de cristallinité pour plusieurs cycles partiels.

12.2.2 Cristallinité

On se propose ensuite d'analyser la grandeur $\lambda_\chi(\lambda_1)$ moyennée sur la sphère lors de trois chargements à cycles partiels (λ_1 étant l'élongation uniaxiale appliquée à un élément) :

1. un cycle à décharges partielles (figure 12.2.6),
2. un cycle à charges partielles (figure 12.2.7),
3. un cycle mixte à charge et décharge partielle (figure 12.2.8).

Cycle à décharges partielles

Considérons pour cela le modèle simplifié (section 10.2) pour un cas d'élongation uniaxiale homogène sur un élément avec les constantes suivantes :

- $\lambda_{\chi, sat} = 3.9$,
- $\lambda_A = 3.8$,
- $\lambda_C = 5.8$,
- $\lambda_E = 2.43$,
- $n_{int} = 900$, le nombre de directions d'intégration pour cette mesure en particulier.

Avec les données obtenues, on compare à la figure 12.2.6 un résultat extrait de [91] et notre modèle en supposant qu'il y a proportionnalité entre λ_χ et χ . On rappelle que cette hypothèse n'en est pas une à proprement parler puisque le résultat expérimental présente un index de cristallinité et non la valeur réelle de la cristallinité dans le matériau. On travaille donc au moins à une constante multiplicative près.

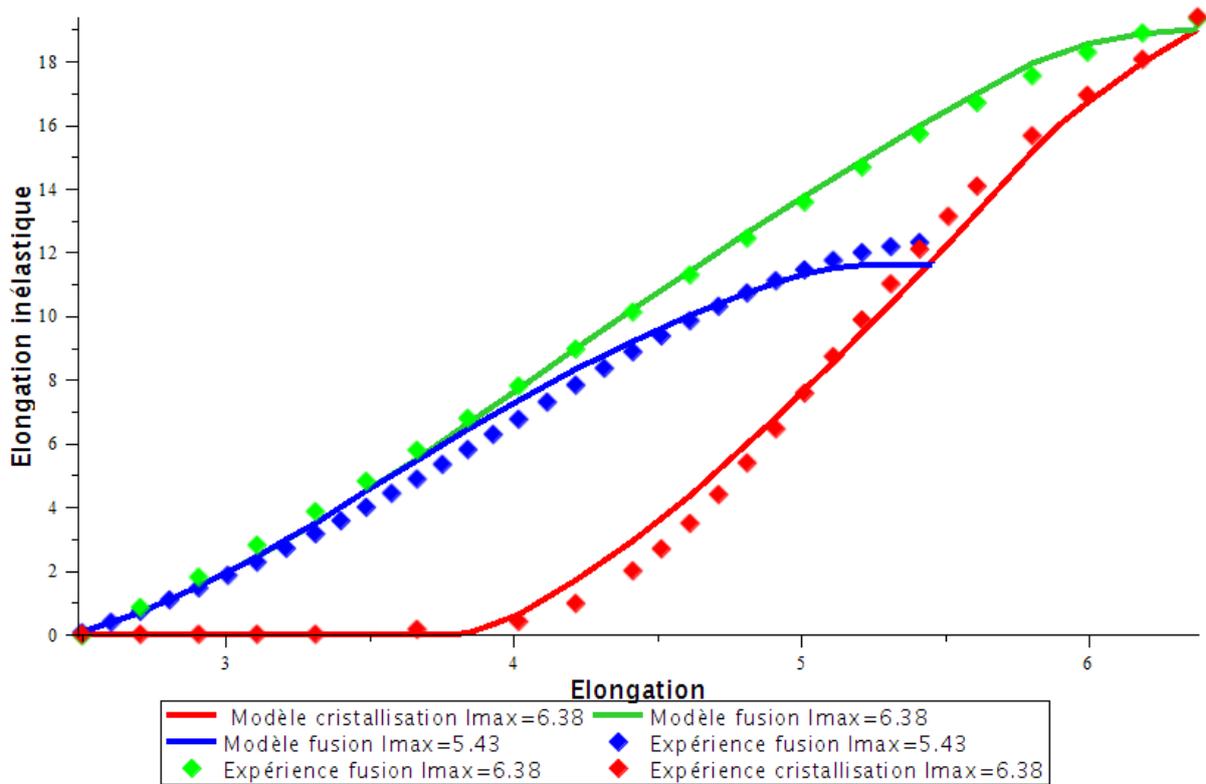


FIGURE 12.2.6: Comparaison entre le modèle et l'expérience [91] pour deux décharges dans un chargement cyclique uniaxial homogène. Représentation de l'élongation inélastique moyennée sur la sphère λ_χ (λ_1) à une constante multiplicative près (en lignes continues) et de l'index de cristallinité χ (en losanges pleins) pour deux λ_{max} croissants en fonction de l'élongation prescrite λ_1 . (Ligne et losanges rouges) Phase de cristallisation modèle et expérience pour $\lambda_{1,max} = 6.38$. (Ligne et losanges bleus) Phase de fusion modèle et expérience pour $\lambda_{1,max} = 5.43$. (Ligne et losanges verts) Phase de fusion modèle et expérience pour $\lambda_{1,max} = 6.38$.

D'un point de vue général, on observe qu'après intégration sur la micro-sphère le modèle donne de bien meilleurs résultats que dans le cas 1D (section 12.1.2) à trois niveaux :

- la progression régulière de l'index de cristallinité depuis $\chi = 0$ et vers $\chi = \chi_{sat}$, supposée proportionnelle à λ_χ pour le modèle simplifié,
- l'évolution de la décharge élastique avec $\lambda_{1,max,cycle}$,
- la variation de la position de la courbe de fusion avec $\lambda_{1,max,cycle}$,

et ce sans aucune constante supplémentaire. On comprend que cela est dû au fait que l'histoire de chargement dans chaque direction est différente. On observe donc le résultat d'une intégration d'un comportement micro simple sur un ensemble de directions dans l'espace ce qui crée un comportement macroscopique plus riche. La courbe de fusion après intégration sur la micro-sphère (au niveau macro) peut donc se déplacer alors que les courbes de fusion au niveau micro (dans chaque direction) sont bien toutes les mêmes par construction. Ce premier cas confirme les hypothèses faites à la section 12.1.2. De plus, l'accord quasi quantitatif entre les différentes courbes montre que la variable λ_χ dans notre représentation abstraite du réseau est très proche de χ . Ceci est en faveur de la présence tout à fait majoritaire de cristallites étendues dont chaque élément a un effet direct sur la relaxation du réseau. On continue ensuite notre étude avec un cas à charges partielles.

Cycle à charges partielles

Considérons pour cela le modèle simplifié (section 10.2) pour un cas d'élongation uniaxiale homogène sur un élément avec les constantes suivantes :

- $\lambda_{\chi,sat} = 3.9$,
- $\lambda_A = 3.8$,
- $\lambda_C = 5.8$,
- $\lambda_E = 2.43$,
- $n_{int} = 900$, le nombre de directions d'intégration pour cette mesure en particulier.

On peut alors comparer la tendance de la figure 12.2.7 avec les observations similaires à celles de Marchal [91] faites par Candau et ses co-auteurs [21]. On remarque simplement que même si les phases de charge et de décharge élastique ne semblent pas évoluer exactement de la même façon que dans le modèle après intégration sur la sphère, on observe néanmoins un accord qualitatif entre les courbes.

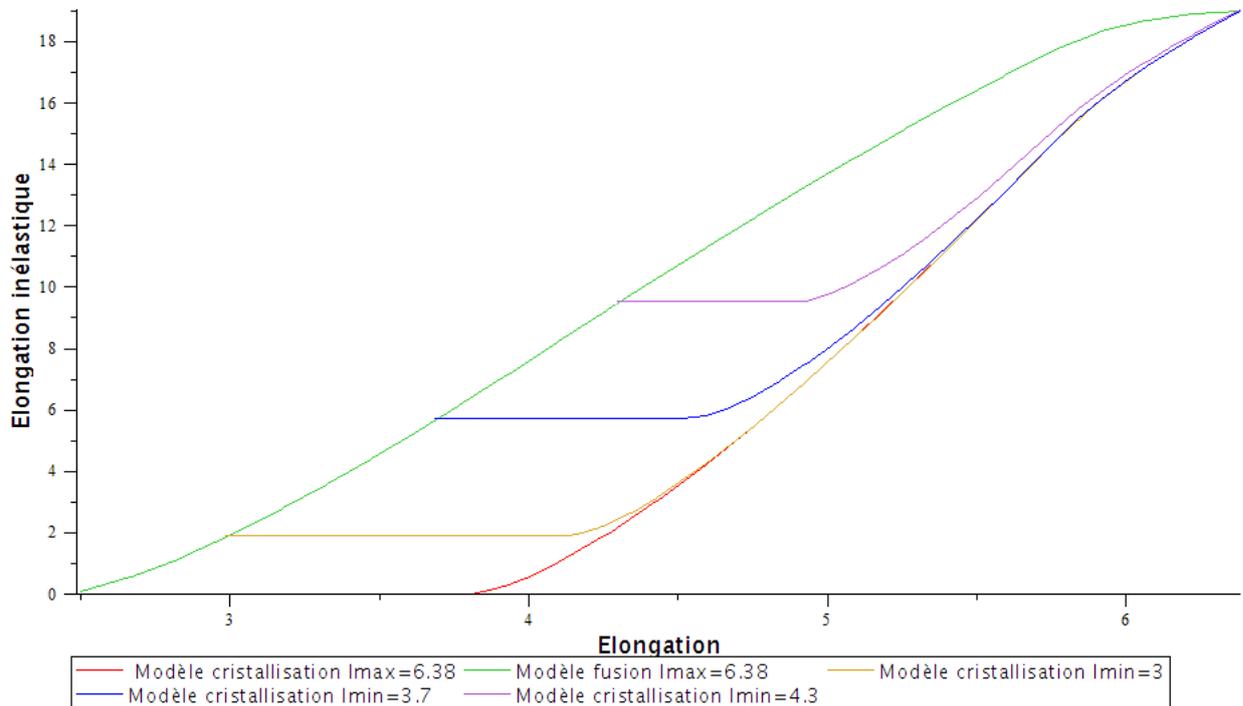


FIGURE 12.2.7: Cas de chargement à charges partielles pour un élément. Représentation de λ_x intégré sur la sphère pour différents $\lambda_{1,min,cycle}$ en fonction de l'élongation λ_1 appliquée à l'élément. (En rouge) Modèle phase de cristallisation $\lambda_{1,max,cycle} = 6.38$. (En vert) Modèle phase de fusion $\lambda_{1,max,cycle} = 6.38$. (En marron) Modèle phase de cristallisation $\lambda_{1,min,cycle} = 3$. (En bleu) Modèle phase de cristallisation $\lambda_{1,min,cycle} = 3.7$. (En violet) Modèle phase de cristallisation $\lambda_{1,max,cycle} = 4.3$.

De plus, on peut également remarquer que par direction le point de saturation est en $\lambda_C = 5.8$ alors que l'on va plus loin dans la simulation dans l'élongation appliquée. Dans ce cas, les directions moins sollicitées continuent à cristalliser et les directions saturées retrouvent un comportement élastique.

Cas avec sous-cycle de chargement

Schématiquement, la propriété observée en interne [56] et qui fait suite aux deux cas précédents est décrite à la figure 12.2.8. Comme on le voit schématiquement, les deux hystérèses se ferment exactement là où elles se sont ouvertes.

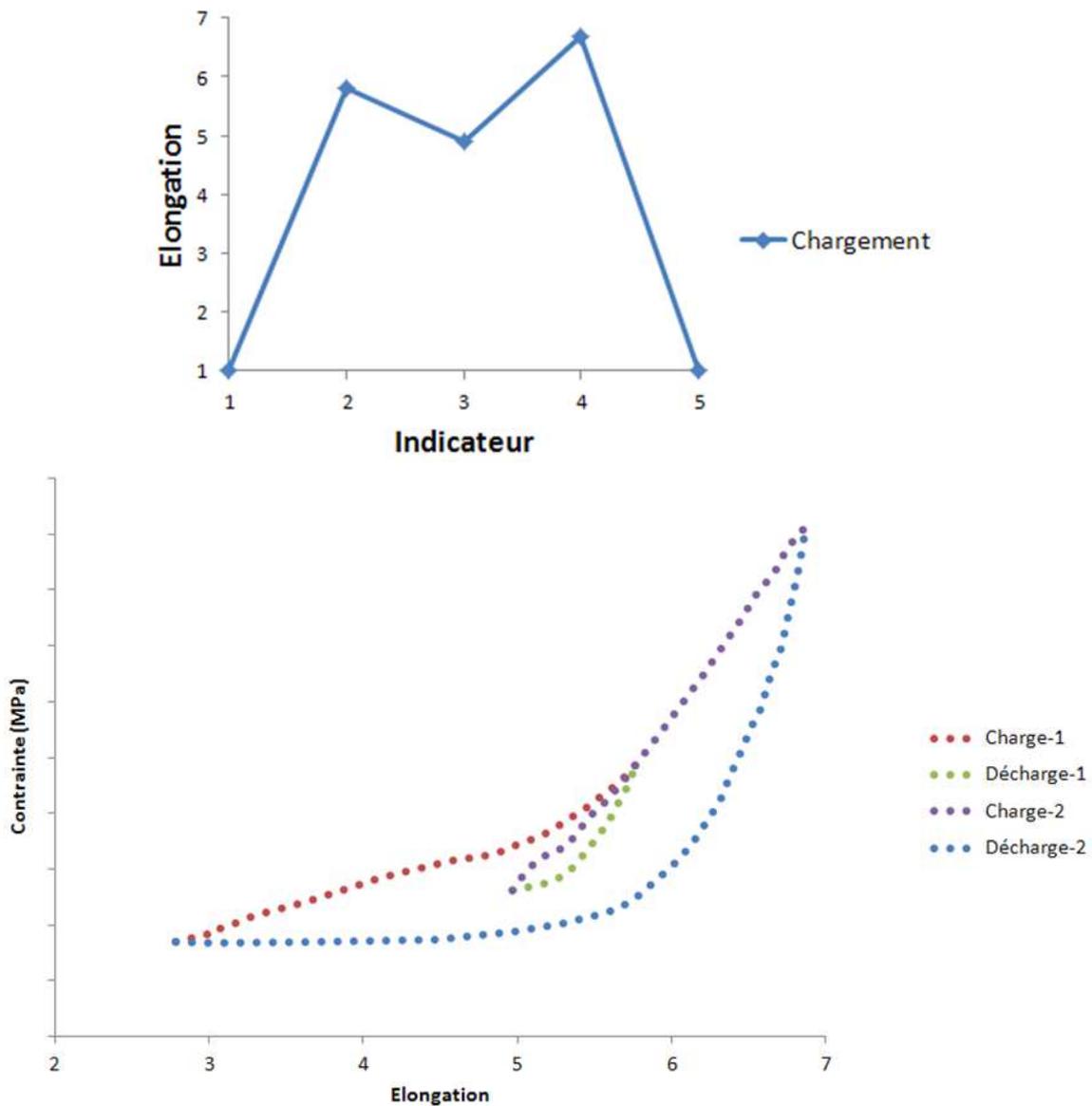


FIGURE 12.2.8: Cas de chargement à charge et décharge partielle. Schéma tiré de l'expérience réalisée par l'auteur au centre technique de Ladoux [56] pour du caoutchouc naturel sollicité à faible vitesse. (En haut) Elongation en fonction d'un indicateur de temps désignant l'évolution du chargement prescrit. (En bas) Représentation schématique de la contrainte nominale en fonction de l'élongation correspondant au chargement (en haut). Chaque couleur correspond à une phase de chargement (càd successivement rouge, vert, violet, bleu).

Cette propriété de certains phénomènes hystérétiques a été mis en avant pour la

première fois par [55] qui l'a nommée « mémoire discrète ». Pour pouvoir approcher cette propriété, nous avons utilisé sur la figure 12.2.8 le modèle simplifié (section 10.2) avec la micro-sphère. Pour pouvoir valider notre approche, on peut faire le raisonnement suivant par comparaison aux autres méthodes de modélisation des sous-cycles lors des changements de phase sous contrainte proposées dans la littérature :

- Au vu de la cohérence entre la courbe d'équilibre et la courbe de fusion sur un cycle (figure 9.1.19), la présence de plusieurs courbes de fusion différentes sur plusieurs cycles (figure 9.1.21) pourrait être dû à la différence d'histoire de chargement entre les différentes directions.
- Au vu de la ressemblance entre les différentes hystérèses, on peut supposer qu'à partir d'une hystérèse de référence, on peut construire toutes les autres en connaissant simplement les λ_{min} et λ_{max} de l'hystérèse. Cette approche se base sur les raisonnements constitutifs de Bouvet [15] qui modifie l'énergie stockée g pour qu'elle devienne une variable interne à part entière avec sa propre loi d'évolution. De plus, cette loi d'évolution doit contenir la propriété de mémoire discrète grâce à un nouveau paramètre h contenant la valeur de λ_x aux max et au min de tous les hystérons ouverts en un point du chargement. Ce type de méthode a fait l'objet d'une note interne [58].

Résumons rapidement les différentes modélisations proposées dans la littérature pour ces hystérèses emboîtées. Plusieurs auteurs [60, 15, 77] ont déjà utilisé avec succès des lois d'évolution dépendantes de λ_{min} , λ_{max} que ce soit pour le changement de phase ou pour modéliser l'effet Mullins. Elles ont l'avantage de rester simples dans leur formulation en dépit de la complexité du phénomène hystérétique observé en comparaison des lois basées sur l'étude du minimum d'un ensemble de systèmes semi-cristallins sur une chaîne composée d'éléments simples bi-stables [121]. Cependant, dans les études constitutives citées précédemment, la cohérence thermodynamique n'est soit vérifiée que pour un certain type de chargement [60], soit illustrée de manière empirique que pour une seule construction précise des fonctions seuils et sans précision sur la forme de l'énergie stockée [77]. Seul Bouvet [15] a abordé, sur un cas particulier la positivité de la dissipation et la construction de l'énergie stockée. Néanmoins, la construction proposée sur la loi 3D correspondante s'avère n'être pas fonctionnelle pour les chargements non-proportionnels.

Ce résultat montre finalement que l'utilisation d'une relation complexe entre $\frac{d\lambda_x}{dt}$ et $\frac{dx}{dt}$ n'est pas forcément nécessaire contrairement à ce qu'on peut observer sur les lois de changements de phase sous contrainte dans les alliages à mémoire de forme [77].

12.2.3 Evolution de l'orientation des cristallites

On s'attarde ici sur le principal résultat que l'on attend en anisotropie évolutive, à savoir la prédiction quantitative de l'orientation des cristallites pour des chargements uniaxiaux ainsi que l'évolution de cette orientation au cours d'un cycle (figure 12.2.9).

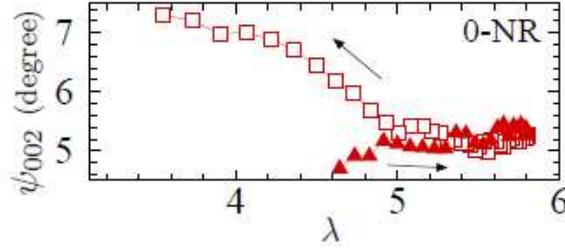


FIGURE 12.2.9: Evolution de la désorientation du plan de diffraction des cristallites parallèles à la direction de la chaîne en comparaison de leur orientation moyenne en fonction de l'élongation λ durant un cycle de chargement uniaxial à faible vitesse pour un caoutchouc naturel non-chargé 0-NR. Les indices de Miller sont mis dans l'ordre hkl. Triangles : charge, Carrés : décharge. Dans cette expérience $\lambda_E = 2.7$, $\lambda_A = 4$ et $\lambda_C = 5.8$ [12].

Pour étudier la distribution d'orientation des cristallites par rapport à la direction principale de chargement (direction la plus chargée), on a introduit expérimentalement l'angle de désorientation des cristallites (9.1.1) par rapport à cette direction Θ_{des} . Pour pouvoir obtenir une mesure similaire dans notre modèle, on utilise la procédure proposée par [157] et [74] pour le mesurer. Dans le cas de la cristallisation sous contrainte, l'axe long des cristallites tend à être orienté selon la direction principale de chargement. On considère alors que la distribution d'intensité provenant du cliché de diffraction rayons-X aux grands angles peut être approximée par la distribution gaussienne

$$I(\phi_C) = I_0 \exp\left(\frac{-\phi_C^2}{2w^2}\right), \quad (12.2.4)$$

avec :

- ϕ_C l'angle entre l'axe long de la cristallite et la direction principale de chargement,
- I_0 l'intensité maximale,
- w la mesure de dispersion.

Ensuite, l'approximation de l'intensité $I(\phi_C)$ est calée sur le résultat expérimental ce qui permet d'obtenir une estimation de w . L'angle de désorientation Θ_{des} des cristallites, défini comme la valeur à laquelle on atteint une demi intensité $I = \frac{I_0}{2}$, s'exprime alors par

$$\Theta_{des} = 2w\sqrt{-2\ln(1/2)}. \quad (12.2.5)$$

Dans le cadre du modèle, on rappelle que les cristallites sont représentées par des éléments 1D alignés dans la direction \mathbf{R} . On considère alors l'expression de $\lambda_\chi(\phi)$, supposée proportionnelle à $\chi(\phi)$, exprimée dans la configuration de référence. Puis, on transforme cette expression en $\lambda_{\chi,C}(\phi_C)$ dans la configuration déformée par égalité des indices du même secteur matériel qu'il soit calculé après ou avant déformation

$$\lambda_{\chi,C}(\phi_C) \sin(\phi_C) d\phi_C = \lambda_\chi(\phi) \sin(\phi) d\phi. \quad (12.2.6)$$

Ainsi construite, la fonction $\lambda_{\chi,C}(\phi_C)$ est alors approchée par une fonction du type $I(\phi_C)$. Ceci nous permet enfin d'obtenir une estimation de w puis de Θ_{des} par le modèle. Nous avons donc besoin de connaître la transformation de la configuration de référence à la configuration déformée.

Dans le cas uniaxial, on considère l'expérience de [12] (figure 12.2.9). Pour traduire l'expression fondamentale de l'anisotropie évolutive dans notre cadre de travail, on choisit d'utiliser le modèle simplifié intégré à la micro-sphère avec un index de cristallinité linéaire en λ . L'énergie libre s'écrit donc sous la forme (section 10.1.9)

$$\psi(\lambda, \lambda_\chi, T) = R_A T \frac{(\lambda - \lambda_\chi)^2}{2} + g_1 \frac{\lambda_\chi^2}{2} + R_A T \lambda_E(T) \lambda_\chi + R_B T \frac{\langle \lambda - \lambda_* \rangle_+^2}{2}, \quad (12.2.7)$$

avec $\lambda_E(T)$ l'élongation à la fin de la fusion. On a aussi pris le seuil sous la forme $Y = Y_1(\lambda_\chi - \lambda_{\chi,sat})$. Ceci nous laisse avec trois constantes (g_1, λ_E, Y_1) à déterminer à partir des mesures de WAXD en légende de la figure 12.2.9 et quatre autres constantes ($R_A, R_B, \lambda_{\chi,sat}$ et λ_*) qui ne sont pas significatives pour cette mesure. Les résultats Febio pour un calcul homogène nous permettent de construire par interpolation une fonction $\lambda_\chi(\lambda, \theta, \phi)$ dans la configuration de référence comme on l'a déjà fait à la section 12.2.1. Dans le cas uniaxial, on rappelle alors que le tenseur gradient de déformation isochores pour une élongation uniaxiale λ_1 dans la direction z s'écrit

$$\bar{\mathbf{F}}_{uni} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\lambda_1^{1/2}} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\lambda_1^{1/2}} & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_1 \end{bmatrix}. \quad (12.2.8)$$

et que $\lambda_\chi(\lambda, \theta, \phi)$ est indépendant de θ . On doit alors transformer λ_χ dans la configuration déformée. Pour cela, on considère \mathbf{R} un vecteur d'orientation lagrangien sur la sphère unité définie sur le repère $(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z})$ (figure 12.2.1) par

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} \sin(\phi) \cos(\theta) \\ \sin(\phi) \sin(\theta) \\ \cos(\phi) \end{bmatrix} \quad (12.2.9)$$

avec $\phi \in [0, \frac{\pi}{2}]$, $\theta \in [0, 2\pi]$ et \mathbf{r} le vecteur d'orientation eulérien correspondant

$$\mathbf{r} = \begin{bmatrix} \sin(\phi_C) \cos(\theta_C) \\ \sin(\phi_C) \sin(\theta_C) \\ \cos(\phi_C) \end{bmatrix}. \quad (12.2.10)$$

Dans le cadre de la micro-sphère affine, on a

$$\mathbf{r}^* = \bar{\mathbf{F}}_{uni} \cdot \mathbf{R} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\lambda_1^{1/2}} \sin(\phi) \cos(\theta) \\ \frac{1}{\lambda_1^{1/2}} \sin(\phi) \sin(\theta) \\ \lambda_1 \cos(\phi) \end{bmatrix}, \quad \mathbf{r} = \frac{\mathbf{r}^*}{|\mathbf{r}^*|}. \quad (12.2.11)$$

Ceci nous permet d'obtenir

$$\tan(\theta_C) = \frac{r_2}{r_1} = \frac{R_2}{R_1} = \tan(\theta) \quad (12.2.12)$$

donc $\theta = \theta_C$ puis

$$\tan(\phi_C) = \frac{\sqrt{r_1^2 + r_2^2}}{r_3} = \lambda_1^{-3/2} \frac{\sqrt{R_1^2 + R_2^2}}{R_3} = \lambda_1^{-3/2} \tan(\phi) \quad (12.2.13)$$

ce qui donne

$$\phi = \tan^{-1}(\lambda_1^{3/2} \tan(\phi_C)). \quad (12.2.14)$$

On retrouve l'invariance en θ dans le cas d'une élongation uniaxiale. Ensuite, on obtient l'expression de la cristallinité $\lambda_{x,C}(\phi_C)$ par (12.2.6) sous la forme

$$\lambda_{x,C}(\phi_C) = \lambda_x(\phi(\phi_C)) \frac{\sin(\phi(\phi_C)) d\phi(\phi_C)}{\sin(\phi_C) d\phi_C} \quad (12.2.15)$$

puis par (12.2.14)

$$\lambda_{x,C}(\phi_C) = \lambda_x(\tan^{-1}(\lambda_1^{3/2} \tan(\phi_C))) \frac{\lambda_1^{3/2} (1 + \tan^2(\phi_C))^{3/2}}{(1 + \lambda_1^3 \tan^2(\phi_C))^{3/2}}. \quad (12.2.16)$$

En utilisant la procédure de calcul de Θ_{des} pour $\phi_C \in [0, \frac{\pi}{2}]$ précédemment décrite, on obtient la figure 12.2.10.

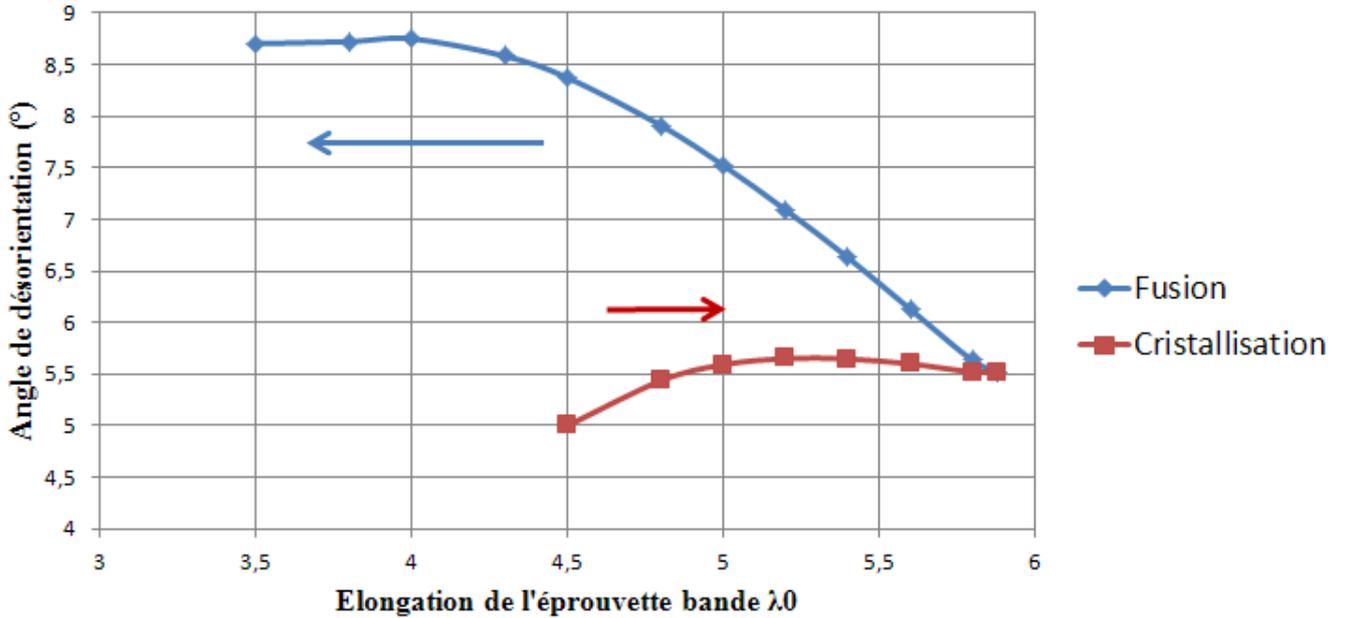


FIGURE 12.2.10: Angle Θ_{des} de désorientation des cristallites fonction de l'élongation de l'éprouvette bande (figure 12.2.11) dans un cas d'élongation uniaxiale recalée sur le test de [12] (figure 12.2.9).

Rappelons tout d'abord que pour ce calcul nous avons utilisé le schéma d'intégration à 900 points. Ehret [44] rappelle, que dans ce cas, les erreurs numériques sont de l'ordre de 0.001% sur l'intégration. Le schéma n'impacte donc pas notre mesure. Il faut alors remarquer que pour de très petits taux de cristallinité en charge et en décharge, les valeurs ne sont pas tracées. On a fait ce choix car pour ces valeurs, une distribution gaussienne n'est pas du tout représentative de $\chi_C(\phi_C)$. Ensuite, on remarque qu'en charge, Θ_{des} est presque constant et vaut en moyenne 5.5° . Ceci est qualitativement conforme à l'expérience. Lors de la décharge, on observe naturellement une plus grande désorientation puisqu'on cristallise plus à λ équivalent. On remarque alors que Θ_{des} croit plus vite dans le modèle que pour l'expérience mais que la tendance ainsi que les valeurs de Θ_{des} restent en accord avec cette dernière. L'étape finale pour la validation du modèle est de réaliser un cycle sur une éprouvette complète avec le modèle complet.

12.2.4 Analyse d'un chargement cyclique sur une éprouvette complète

Pour le cas uniaxial sur éprouvette complète de 3000 éléments, on utilise simplement une bande de caoutchouc (figure 12.2.11) dont une extrémité est encastrée et dont l'autre subit un déplacement imposé dans la direction y , les autres directions étant libres. Les éléments sont hexaédriques trilineaires à 8 noeuds comme dans la section précédente.

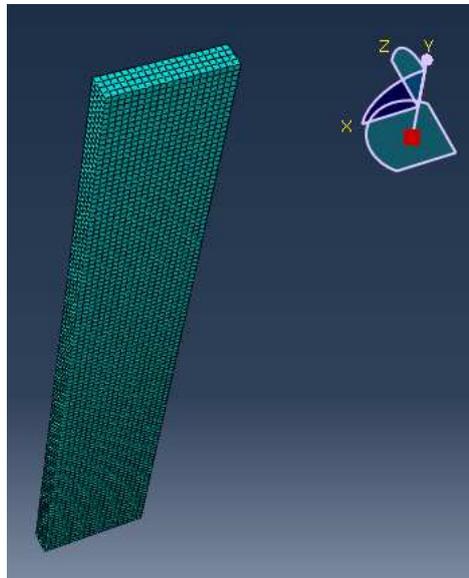


FIGURE 12.2.11: Eprouvette bande, maillage Abaqus transférable sur Febio en éléments hexahédriques à 8 noeuds.

A la figure 12.2.12, on compare le cas expérimental [154] (une éprouvette de caoutchouc polyisoprène synthétique matériau qui cristallise moins que le caoutchouc naturel) et le

modèle complet avec :

- l'énergie stockée $\hat{g}(\lambda_\chi) = g_1 \frac{\lambda_\chi^{\alpha_1}}{\alpha_1}$ pour $\lambda_\chi \in]0, \lambda_{\chi, sat}[$ avec α_1 une nouvelle constante de forme,
- l'énergie libre du troisième mécanisme $F = \frac{(\lambda - \lambda_*)^{\alpha_2}}{\alpha_2}$ avec α_2 une nouvelle constante de forme,
- le seuil en cristallisation $Y(\lambda_{\chi, sat} - \lambda_\chi) = Y_1 \frac{(\lambda_{\chi, sat} - \lambda_\chi)^{\alpha_3}}{\alpha_3}$ avec α_3 une nouvelle constante de forme.

On peut remarquer que ce choix et donc la méthode de recalage des constantes est identique à la section 12.1. La fonction inverse de Langevin est remplacée par son développement de Padé (10.1.6). On peut remarquer que le modèle est toujours proche du résultat expérimental et que les mécanismes sont moins marqués que sur le modèle 1D. De plus, ce cas est quasi-homogène et très proche d'un cas purement uniaxial.

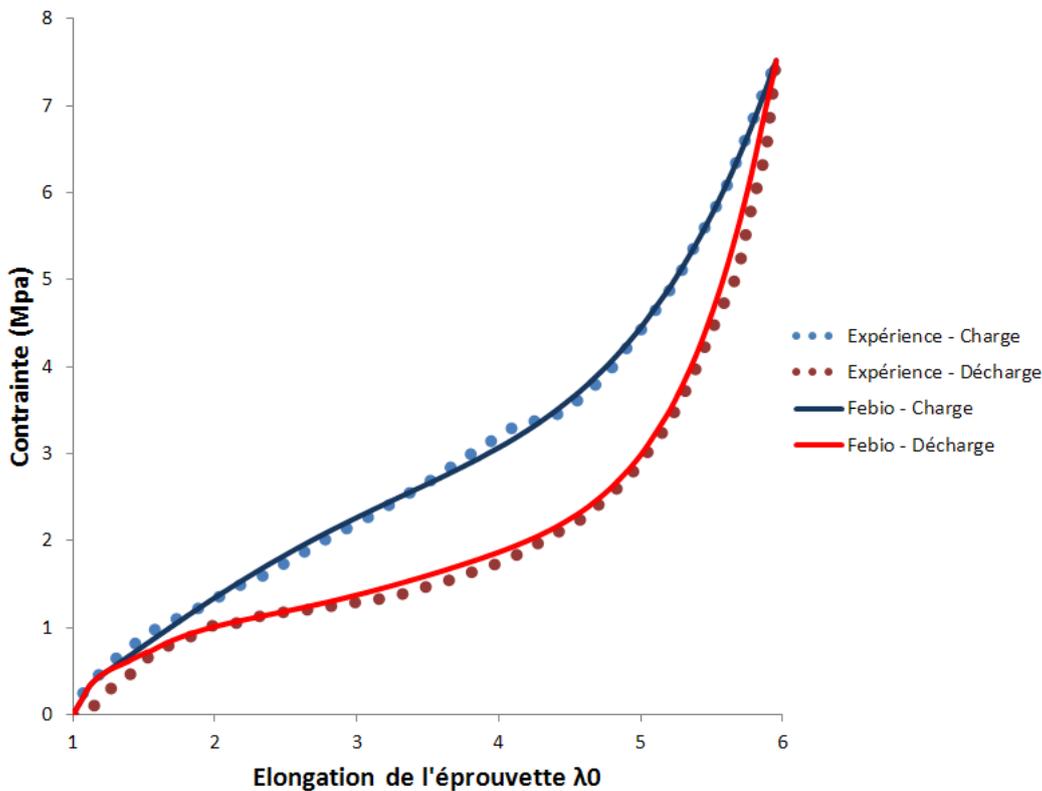


FIGURE 12.2.12: Comparaison modèle-expérience pour un test cyclique pour un caoutchouc synthétique polyisoprène à 0°C et 10 mm/min, Contrainte nominale en fonction de l'élongation appliquée à l'éprouvette λ_0 . Comparaison de la contrainte entre simulation (points) et expérience (ligne) à la charge (en bleu). Comparaison de la contrainte entre simulation (points) et expérience (ligne) à la décharge (en rouge).

12.2.5 Synthèse des tests uniaxiaux 3D

Les différents tests uniaxiaux nous ont permis de valider :

- l'utilisation du formalisme de la micro-sphère,
- la présence d'une anisotropie évolutive basée sur une déformation affine (section 12.2.1),
- la validité du formalisme de la micro-sphère pour passer d'un modèle micro simple à un modèle macro plus riche dans le cas des chargements cycliques partiels (section 12.2.2),
- l'évolution qualitativement validée de l'orientation des cristallites lors d'un cycle (section 12.2.3),
- la modélisation d'une éprouvette cristallisant sous contrainte (section 12.2.4).

12.3 Calcul 3D homogène biaxial

Dans cette section, on s'intéresse uniquement à la modélisation d'un chargement biaxial sur un élément unique de type hexaédrique trinéaire à 8 noeuds comme à la section 12.2.1. Ce test va nous permettre de montrer la cohérence de l'évolution de l'anisotropie en fonction du facteur de biaxialité B . L'élément considéré subit une élongation dans les directions x et y . Il reste libre dans la direction z . La loi de comportement utilisée est celle du modèle simplifié intégré sur la micro-sphère (section 10.2). Dans ce cas, on considère le tenseur isochore de Cauchy-Green à droite sous la forme

$$\bar{\mathbf{C}}_{bi} = \begin{bmatrix} \lambda_1^2 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_1^{2B} & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_1^{-2(B+1)} \end{bmatrix} \quad (12.3.1)$$

avec $B \in \left[-\frac{1}{2}, 1\right]$ le facteur de biaxialité. L'élongation direction par direction peut s'écrire analytiquement par (12.2.11)

$$\lambda(\theta, \phi) = \sqrt{\lambda_1^2 \sin^2(\phi) \cos^2(\theta) + \lambda_1^{2B} \sin^2(\phi) \sin^2(\theta) + \lambda_1^{-2(B+1)} \cos^2(\phi)}. \quad (12.3.2)$$

L'élongation par direction calculée par FEBIO est représentée à la figure 12.3.1. Pour commencer, on retrouve bien une indépendance par rapport à θ dans le cas équi-biaxial. En effet, pour $B = 1$, on a

$$\lambda(\phi) = \sqrt{\lambda_1^2 \sin^2(\phi) + \lambda_1^{-4} \cos^2(\phi)}. \quad (12.3.3)$$

On peut également comparer la figure à gauche de 12.3.1 à la représentation polaire du cas uniaxial (figure 12.2.2).

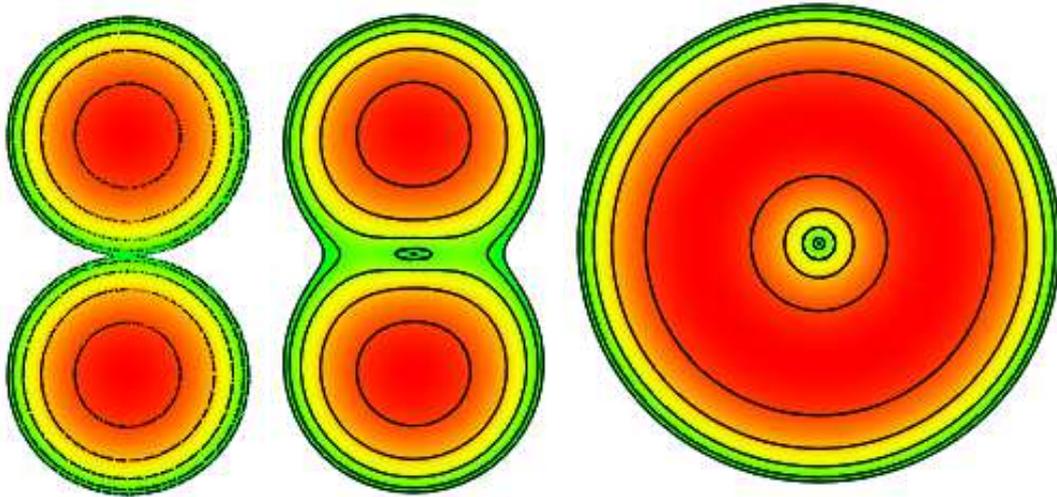


FIGURE 12.3.1: Représentation sphérique de $\lambda(\theta, \phi)$ en sortie de FEBIO pour $\lambda_1 = 7$ dans le plan x-y (θ est l'angle polaire dans ce plan) et pour $B = -\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$ et 1 respectivement de gauche à droite. L'axe x est vertical et l'axe y horizontal. Chaque ligne de niveau à une valeur de ϕ constant avec $\phi = \frac{\pi}{2}$ à l'extérieur et $\phi = 0$ au centre.

Ensuite, on reconstruit à partir des résultats Febio l'élongation inélastique $\lambda_\chi(\theta, \phi)$ pour différents B à l'équilibre et pour $\lambda_1 = 7$ (figure 12.3.2). Les constantes choisies sont : $\lambda_E = 2$, $\lambda_C = 6$, $\lambda_{\chi, sat} = 3$. Les autres constantes ne sont pas significatives dans ce cas. On observe, de la même manière que dans le cas uniaxial, des figures dont l'évolution est sensiblement équivalente à celle de λ ce qui est cohérent avec le modèle analytique (section 12.1.2). De plus, on remarque que dans un cas équibiaxial $B = 1$, on observe des cristallites uniformément dans toutes les directions du plan x-y (figure 12.3.2 à droite) ce qui correspond au résultat obtenu expérimentalement par Beurrot [12].

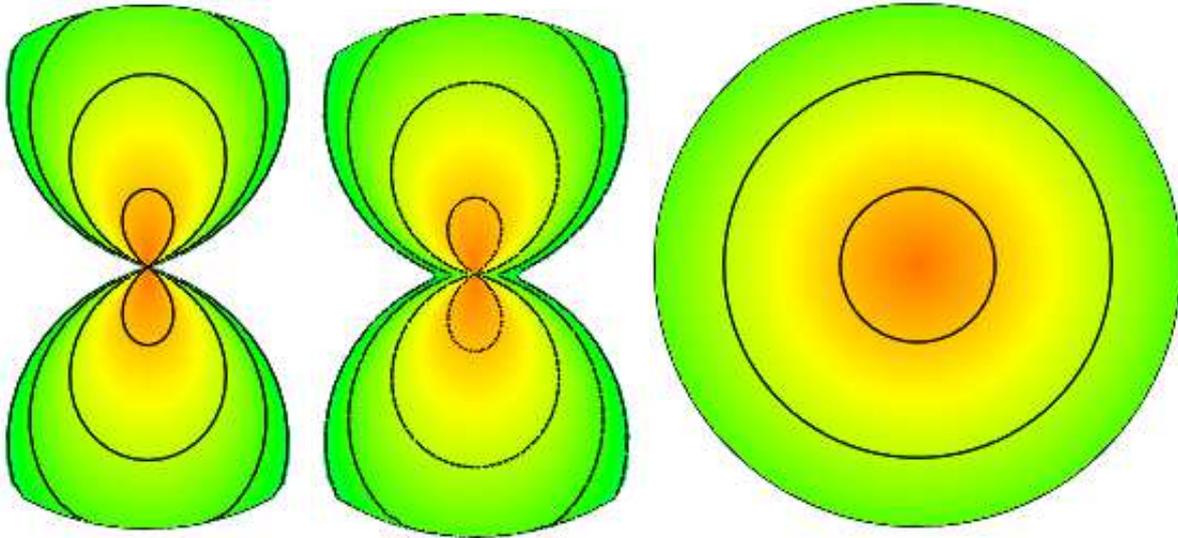


FIGURE 12.3.2: Représentation sphérique de $\lambda_\chi(\theta, \phi)$ en fusion pour $\lambda_1 = 7$ dans le plan x-y (θ est l'angle polaire dans ce plan) et pour $B = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ et 1 respectivement de gauche à droite. L'axe x est vertical et l'axe y horizontal. Chaque ligne de niveau à une valeur de ϕ constant avec $\phi = \frac{\pi}{2}$ à l'extérieur et $\phi = 0$ au centre.

12.4 Conclusion

La micro-sphère construite à partir d'une énergie libre et d'un potentiel de dissipation 1D décrivant localement la cristallisation sous contrainte, nous a permis d'obtenir un modèle à anisotropie évolutive de la cristallisation sous contrainte. On peut notamment remarquer que cette méthode, au delà d'une modélisation phénoménologique de la cristallisation, présente plusieurs aspects particulièrement intéressants :

1. un passage simple des cycles saturants aux cycles partiels reproduits qualitativement sans besoin d'une variable interne supplémentaire au contraire de [15] par exemple,
2. une séparation claire entre la contribution du réseau amorphe et des nano-renforcements créés par les cristallites à la contrainte

Néanmoins, on peut citer deux limitations du modèle. Tout d'abord, l'hypothèse de passage micro-macro affine reste très grossière et limite l'utilisation de la micro-sphère quelque soit le modèle. Cette hypothèse représente, à nos yeux, la plus intéressante perspective d'amélioration du modèle. La seconde limitation est l'absence de cinétique dans le modèle. On pourrait également proposer de relier ce modèle à des approches plus micro-mécanique de la cristallisation sous contrainte comme celle de Rabia Laghmach [76].

**Fissure en présence de cristallisation
sous contrainte**

L'étude de la propagation de fissure en fatigue dans les élastomères est d'une importance majeure pour l'industrie du pneu. Elle permet d'améliorer la durée de vie des pièces. Le caoutchouc naturel en particulier montre une tenue exceptionnelle à la fatigue en comparaison du caoutchouc synthétique pour certaines conditions de chargement (déchirure en traction, rapport de charge positif en fatigue). Cette propriété ne peut être expliquée en considérant uniquement les mécanismes d'endommagement classiques. En effet, les fissures dans les matériaux caoutchoutiques présentent un fort émoussement dont la cause semble difficile à appréhender en considérant un matériau purement élastique [67]. Parallèlement à cette émoussement, on peut même observer dans le caoutchouc naturel la création de fissures se propageant à partir des lèvres de l'entaille initiale et parallèlement au chargement [50]. Un mécanisme de renforcement fortement anisotrope doit être pris en compte pour pouvoir proposer un critère de fatigue capable de prédire ces propriétés particulières. Le mécanisme de renforcement, qui est supposé jouer un rôle majeur dans les propriétés de rupture du caoutchouc, est justement la cristallisation sous contrainte à travers la dissipation mais aussi à travers le rôle des nano-renforcements que créent les cristallites dans le réseau.

Dans cette partie, le but n'est pas de proposer un critère de fatigue mais plutôt de rendre compte de l'impact de la cristallisation sur la fissuration du caoutchouc par les méthodes proposées dans les deux parties précédentes : la loi de comportement anisotrope de la cristallisation sous contrainte et la grandeur caractéristique de la rupture prenant en compte qualitativement l'effet de la dissipation.

On se propose alors de commencer par montrer que la loi de comportement anisotrope nous permet d'obtenir un profil de fissure et une zone de cristallisation en pointe de fissure sensiblement équivalents à ceux obtenus dans l'expérience. Ensuite, c'est l'évolution observée expérimentalement de la vitesse de fissuration en fatigue en fonction du rapport de charge et du type de caoutchouc (cristallisant ou non) que l'on compare à l'évolution de la grandeur caractéristique construite précédemment.

Chapitre 13

Cristallisation en pointe de fissure

Pour pouvoir caractériser l'impact de la cristallisation sous contrainte sur la fissuration dans le caoutchouc, il est nécessaire de commencer par l'analyse de la cristallisation en pointe de fissure sur un cas de référence puisque cette zone cristallisée n'a jamais été modélisée à la connaissance de l'auteur. Dans un premier temps, on fait un état de l'art des résultats expérimentaux sur la présence de cristallisation en pointe de fissure (section 13.1). Ensuite, on présente un cas expérimental de référence présentant de la cristallisation en pointe de fissure sur un caoutchouc chargé dans des conditions de fatigue (section 13.2) puis on commente les hypothèses que l'on va faire pour modéliser ce cas. Enfin, on compare ce résultat à la simulation (section 13.3).

Nous notons également que le travail expérimental présenté dans ce chapitre est basé sur les études expérimentales de Rublon [128, 129, 130].

13.1 Etat de l'art

Peu de travaux ont abordé le problème de la cristallisation sous contrainte dans des conditions de fatigue. En 1975, Kawai [71] a détecté la présence de cristallisation sous contrainte en fatigue en utilisant une méthode stroboscopique de manière à pouvoir accumuler la faible intensité diffractée à chaque cycle. Plus récemment, Rouvière [126] a réalisé des essais de fatigue durant lesquels on stoppe le chargement pendant 45 min pour acquérir des informations sur la cristallisation. Cette méthode rend malheureusement difficile la séparation entre la cristallisation sous contrainte due à la fatigue et la cristallisation sous contrainte due au maintien de la déformation. Beurrot [12] a pu dépasser cette difficulté en utilisant la radiation du synchrotron qui réduit le temps de pose à 1s. Finalement, on peut noter que seuls deux articles ont abordé le problème de la cristallinité en pointe de fissure : Lee & Donovan [81] ont mesuré la distribution de cristallinité le long de la direction de propagation d'une fissure dans du caoutchouc chargé et non chargé et Trabelsi [150] a étendu cette mesure au voisinage de la pointe de la fissure dans du caoutchouc non chargé. Dans les deux cas, les mesures ont été réalisées à

déformation fixée. Pour finir, on peut noter que le mécanisme d'endommagement associé à la cristallinité en pointe de fissure a été étudié au microscope électronique à balayage par Beurrot et Cailletaud [12, 132].

13.2 Cas expérimental de référence

Dans cette section, on détaille et on caractérise une expérience de fatigue réalisée par Pierre Rublon [129]. Cette expérience permet d'obtenir le profil d'une fissure dans un matériau cristallisant sous contrainte pour différentes elongations ainsi que la valeur de l'index de cristallinité au voisinage de la pointe de la fissure dans des conditions de fatigue. Cette expérience est choisie à cause de la précision des résultats : le nombre de points de mesure dans la zone cristalline est bien plus important (environ 100 points [129]) que dans celle réalisée par Trabelsi (environ 3 points [150]). **Dans un souci de rigueur, la description du cas expérimental est une reformulation des écrits de Pierre Rublon sur le sujet [128, 129, 130].**

13.2.1 Description de l'expérience

Pour cette expérience, on utilise un caoutchouc naturel contenant 50 p.h.r. de noirs de carbone N347. La formulation du matériau est détaillée à la table 13.1.

Ingrédients	Contenu (p.h.r.)
Caoutchouc naturel	100
Noirs de carbone	50
Acide stéarique	2
Oxyde de Zinc	2.5
Accélérateur CBS	1.6
6PPD	1.9
Soufre	1.6

TABLE 13.1: Formulation du matériau (tableau tiré de [129]).

Ce matériau est alors utilisé pour préparer une éprouvette PS « Pure shear ». Ces éprouvettes sont communément utilisées dans les tests de fatigue en traction plane [78, 114]. Elles font 78 mm de long, 13 mm de hauteur et 2 mm d'épaisseur (figure 13.2.1).

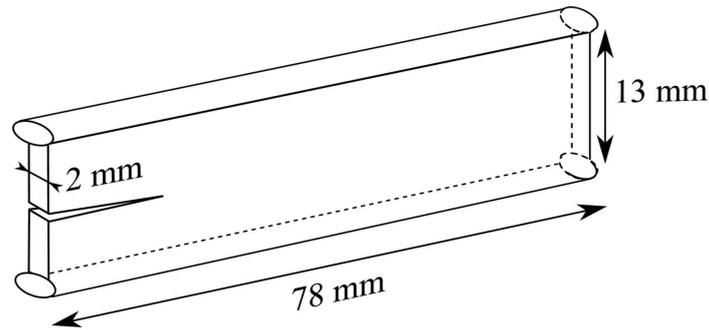


FIGURE 13.2.1: Epreuve PS (figure tirée de [129]).

L'éprouvette est encastrée dans deux mors au niveau des boudins dont les mouvements sont synchronisés pour garder le centre de l'éprouvette fixe durant les tests. Une fois attachée, l'éprouvette est tout d'abord soumise à 300 cycles relaxants de fréquence 2Hz et à une elongation globale de 1.92 de manière à éliminer au maximum la déformation résiduelle due à la viscoélasticité et à l'effet Mullins. Après cette étape de préconditionnement, le déplacement des mors est ajusté de manière à atteindre une force de 0 N au repos. Une coupure de 20 mm est alors faite au rasoir. Cette longueur est suffisante pour pouvoir négliger les effets de bords sur la contrainte en pointe de fissure. Ensuite, on la soumet à quelques cycles pour en émousser la pointe et la transformer en fissure de fatigue. La fissure se propage alors d'environ 1 mm. Cette procédure d'émoussement est appliquée avant chaque expérience. Il faut noter que, dans la zone dans laquelle se trouve la pointe de fissure, le taux de restitution d'énergie ainsi que la forme du champ de contrainte autour de la pointe de la fissure sont indépendants de la longueur de celle-ci [129] ce qui permet de ne pas avoir la longueur de la fissure comme paramètre critique dans la simulation et dans l'expérience.

Procédure de mesure de la cristallinité

La cristallinité est mesurée grâce à une machine de diffraction rayons-X aux grands angles dont le faisceau fait approximativement $300\ \mu\text{m} \times 200\ \mu\text{m}$ durant un temps d'exposition de 1s. La plage de mesure de la zone cristallisée pour chaque elongation est détaillée à la table 13.2 et à la figure 13.2.2.

Elongation globale	Hauteur globale (H) (mm)	Largeur globale (W) (mm)	Espace en hauteur (H) (mm)	Espace en largeur (W) (mm)
1.46	1	2	0.111	0.25
1.61	1.5	3.5	0.167	0.389
1.77	2.5	5	0.278	0.625
1.92	3	7	0.333	0.875

TABLE 13.2: Caractéristiques de la zone de mesure (hauteur et largeur globales) et des points de mesure (espace en hauteur et en largeur) pour chaque élongation globale (figure tirée de [129]).

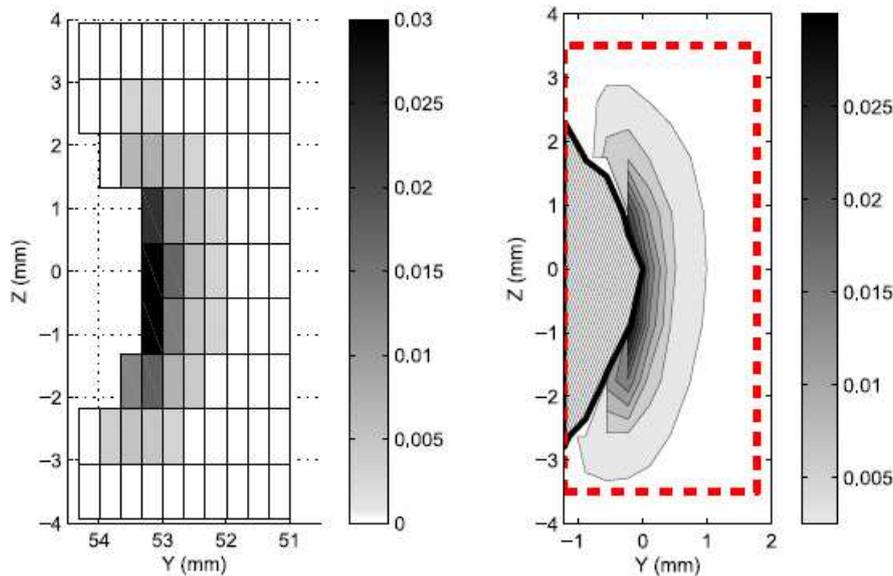


FIGURE 13.2.2: (A gauche) Mesure brute de l'index de cristallinité. (A droite) Lissage de la mesure pour $\lambda = 1.92$. La zone hachurée représente la fissure. Le contour discontinu rouge indique la zone de mesure. L'échelle en niveaux de gris représente les valeurs de l'index de cristallinité (figure tirée de [128]).

De manière à pouvoir prendre un point de mesure durant 1s à chaque maximum du cycle, la vitesse de chargement est ralenti à 0.1 Hz au voisinage de ce point. Puisque la cristallisation sous contrainte est un processus rapide, Pierre Rublon [128] suppose que le changement de vitesse ne perturbe pas significativement les résultats. Il faut également noter que la mesure dure 90 cycles et que la croissance de fissure durant la mesure est négligeable. Cette hypothèse est confirmée à posteriori à la fin du test.

13.2.2 Résultats

L'expérience précédente nous permet d'obtenir les résultats présentés à la figure 13.2.3. On note tout d'abord une différence dans l'index entre les figures 13.2.2 et 13.2.3. Cette différence semble être une conséquence de la date de publication de chaque figure. Nous n'en tenons pas compte dans la suite. Ces résultats montrent que l'élongation globale a une influence notable sur la zone cristallisée en pointe de fissure. En effet, les dimensions de la zone dans les deux directions sont doublées entre $\lambda = 1.61$ et $\lambda = 1.92$. Même si ce résultat est intuitif, il n'a jamais été mesuré dans des conditions de fatigue.

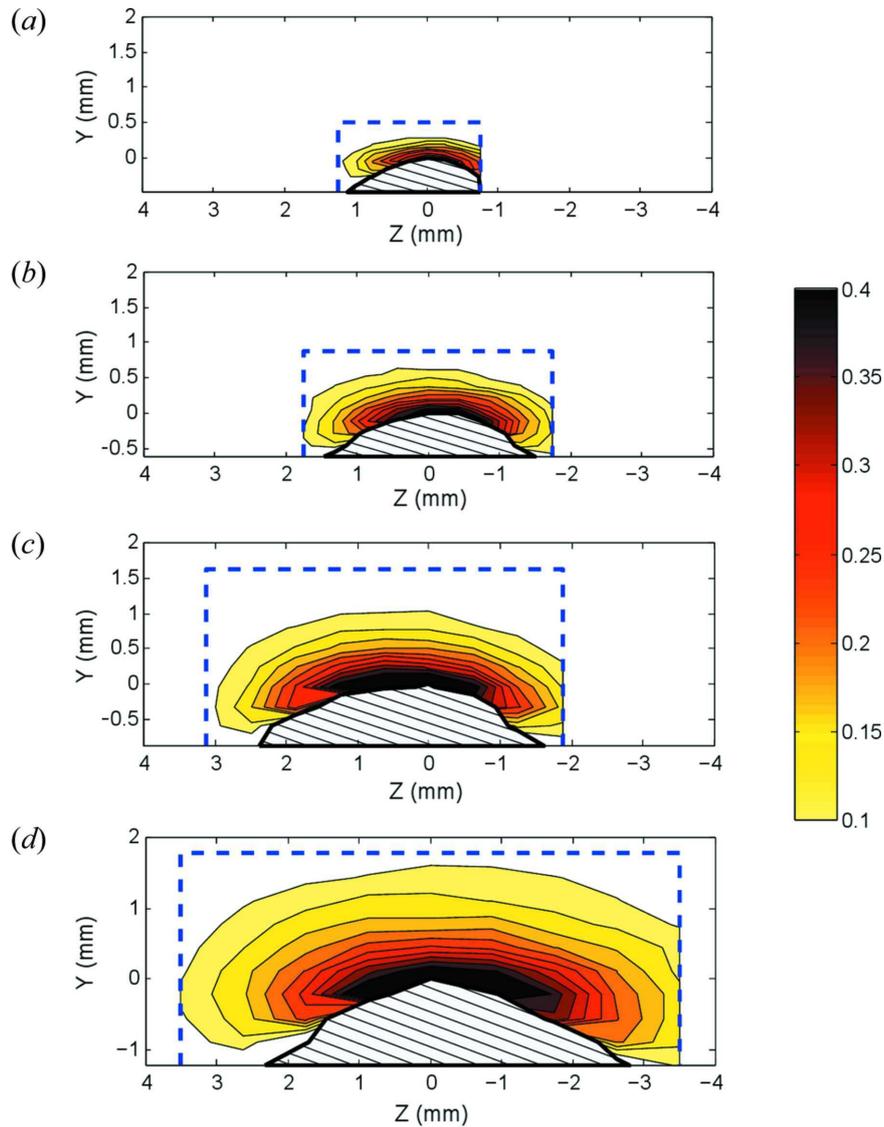


FIGURE 13.2.3: Index de cristallinité autour de la pointe d'une fissure de fatigue après lissage des résultats pour des elongations globales de : (a) $\lambda = 1.46$, (b) $\lambda = 1.61$, (c) $\lambda = 1.77$ et (d) $\lambda = 1.92$. Les lignes en pointillés montrent la zone de mesure et la zone hachurée la fissure (figure tirée de [129]).

13.2.3 Caractérisation du NR 50

La caractérisation expérimentale du matériau (figure 13.2.4) a été réalisée sur une éprouvette TR30 (figure 13.2.5).

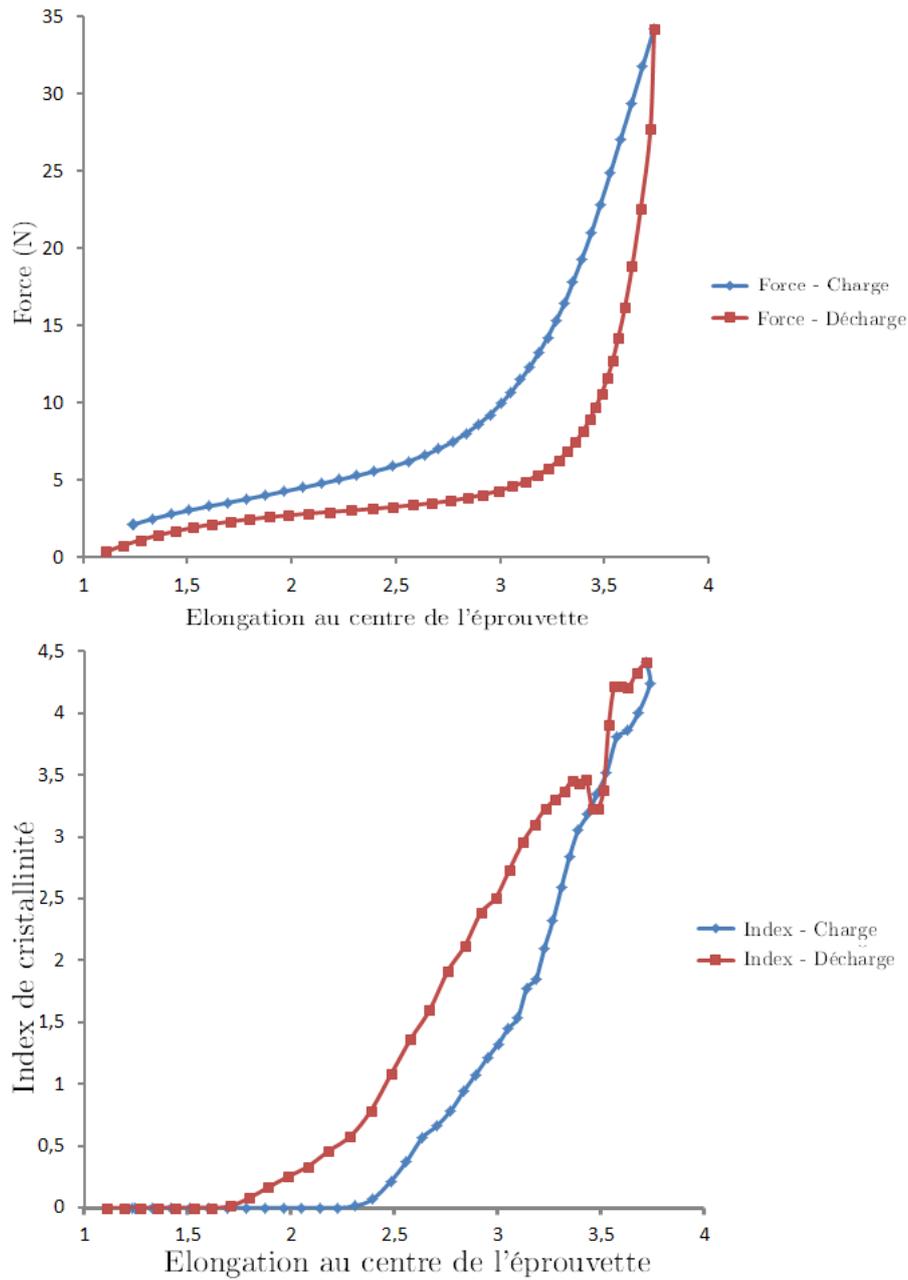


FIGURE 13.2.4: (En haut) Force mesurée sur l'éprouvette en fonction de l'élongation locale mesurée sur le centre de l'éprouvette TR30 (partie utile). (En bas) Index de cristallinité en fonction de l'élongation au centre de l'éprouvette. Test à 2mm/min sur l'éprouvette TR30 (figure reproduite à l'aide des données de [128]).

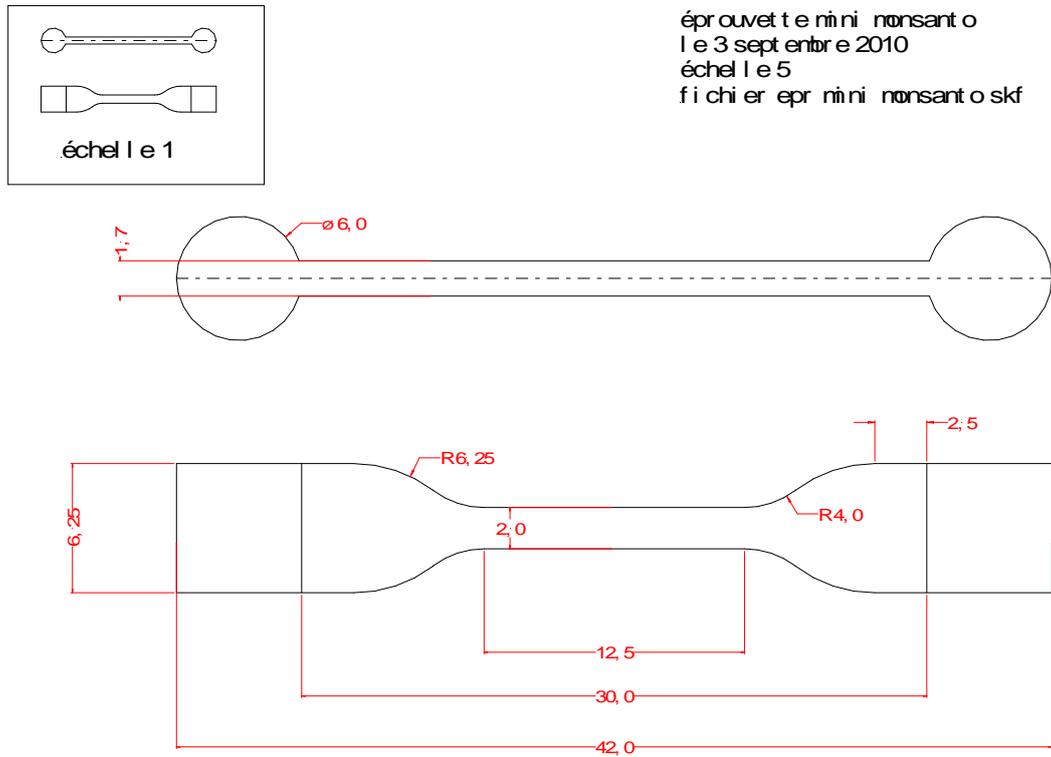


FIGURE 13.2.5: Schéma de l'éprouvette TR30 (figure tirée de [128]).

On peut remarquer que l'hystérèse ne se referme pas complètement lorsqu'il n'y a plus de cristallites dans le matériau. Pour ce matériau, cet effet est habituellement attribué aux désenchevêtrements qu'on ne prend pas en compte par la suite. Pour finir, le début de la cristallisation est mesuré à $\lambda_A = 2.3$ et la fin de la fusion à $\lambda_E = 1.7$.

13.2.4 Modélisation

Pour ce cas d'étude, on se propose de suivre la procédure suivante :

1. Caractérisation de la loi de comportement sur le test non-fissuré cyclique de la section précédente en se basant sur la procédure du chapitre 12,
2. Calcul en traction simple sur la demi-éprouvette fissurée avec les constantes obtenues à l'étape précédente,
3. Post-processing Matlab des résultats éléments-finis en configuration déformée.

A la connaissance de l'auteur, le présent test de fatigue est la seule caractérisation de cristallisation en pointe de fissure présentant les détails suffisants pour être exploité par le modèle. Malgré ces qualités, ce test présente deux difficultés :

1. la modélisation géométrique de la fissure. La transformation de l'entaille réalisée au cutter en fissure de fatigue implique notamment un émoussement de celle-ci. Cette entaille a donc une épaisseur non-nulle à l'état non-déformé. Or, on se propose de la modéliser par une fissure sans prendre en compte le rayon d'entaille. On se base pour cela sur des études internes [13], montrant l'adéquation de la déformée et du taux de restitution d'énergie pour un modèle de fissure hyperélastique sur une éprouvette PS et sur l'étude de Samy Mzabi [104] où la valeur mesurée de l'épaisseur d'une fissure de fatigue dans l'état non-déformé pour un caoutchouc chargé était d'environ $2 - 3 \mu m$. L'épaisseur caractéristique trouvée est négligeable devant la taille de la zone cristallisée.
2. les différentes échelles de temps à l'oeuvre. Les échelles de temps présentes sont la cinétique rapide de cristallisation de temps caractéristique $\sim 20 \cdot 10^{-3} s$ pour $\lambda \neq \lambda_A$ et augmentant très fortement au voisinage de λ_A , la vitesse de sollicitation de l'éprouvette fissurée $\sim 1 s^{-1}$ et $\sim 10^{-1} s^{-1}$ pour la prise de mesure, et la vitesse de sollicitation de l'éprouvette non-fissurée $\sim 10^{-3} s^{-1}$.

Notre modèle, lui, ne prend pas en compte les différentes échelles de temps. On suppose que les tests réalisés sont quasi-statiques par rapport à l'échelle de temps rapide de la cristallisation. Ceci est raisonnable en regard aux expériences de chargement cyclique à différentes vitesses de sollicitation pour des ordres de grandeurs similaires (de $7 s^{-1}$ à $7 \cdot 10^{-4} s^{-1}$ section 9.1.4). Néanmoins, plusieurs auteurs ont montré [129][3] qu'il n'existait pas qu'une seule échelle de temps dans la cristallisation. De plus, au voisinage de λ_A ([3], figure 9.1.14), il semble que le temps caractéristique de la première cinétique de cristallisation augmente d'un facteur au moins égal à dix. Ceci ne joue pas en faveur de la mesure que nous allons réaliser sur la taille de la zone cristallisée modélisée même si dans l'expérience (figure 13.2.3), on se limite à un index de cristallinité minimum de 0.1 ce qui correspond à une élongation $\lambda = \lambda_A + 0.2$ pour laquelle le temps caractéristique pourrait ne pas avoir encore explosé.

13.3 Test numérique

13.3.1 Caractérisation du matériau

Pour pouvoir caractériser le matériau, on utilise une représentation 3D de la moitié de l'éprouvette TR30 (figure 13.3.1). Cette demi-éprouvette est maillée avec 3672 éléments hybrides hexahédriques à 8 noeuds. Sur la face supérieure de l'éprouvette on impose le déplacement selon l'axe X de l'éprouvette et on bloque les autres degrés de liberté. Sur la face inférieure de l'éprouvette, on impose une condition de symétrie en X pour modéliser les conditions de chargement d'une éprouvette complète. Le chargement en déplacement selon l'axe X est découpé en 50 pas sur un cycle complet relaxant. La tolérance en déplacement est imposée à 10^{-4} . On a vérifié a posteriori que ces critères et le maillage proposé étaient suffisants pour obtenir un résultat convergé à moins de 2% près sur les

contraintes dans la partie utile de l'éprouvette. Enfin, la loi de comportement utilisée est une loi de cristallisation sous contrainte par micro-sphère utilisant une fonction de Langevin L ($L(\beta) = \coth\beta - \beta^{-1}$) avec $N_{seg} = 10$ pour la chaîne représentative, un seuil Y linéaire, une énergie stockée $\overset{\circ}{g}$ quadratique et un énergie supplémentaire après durcissement F sous la forme $F = \frac{(\lambda - \lambda_*)^2}{\alpha_2}$ avec $\alpha_2 = 9$. On peut remarquer que la valeur de N_{seg} est très faible et peu réaliste comparativement aux valeurs obtenues sur de cas de chargements uniaxiaux pour du caoutchouc naturel non-chargé [91] qui semblent plus physique au regard de la définition de cette constante. Ceci est dû à la présence d'une quantité importante de noirs de carbone dont l'effet renforçant n'est pas pris en compte par le modèle de base. Ceci laisse 4 constantes indépendantes λ_A , λ_E , λ_C et R_{bt} . Nous connaissons déjà la valeur des constantes λ_A et λ_E par l'expérience (figure 13.2.4) : $\lambda_A = 2.7$, $\lambda_E = 1.7$. Les constantes restantes sont alors calibrées de manière à diminuer l'écart entre expérience et théorie en mettant l'accent sur la décharge et l'aire de l'hystérèse totale (figure 13.3.2) ou sur la charge (figure 13.3.3).

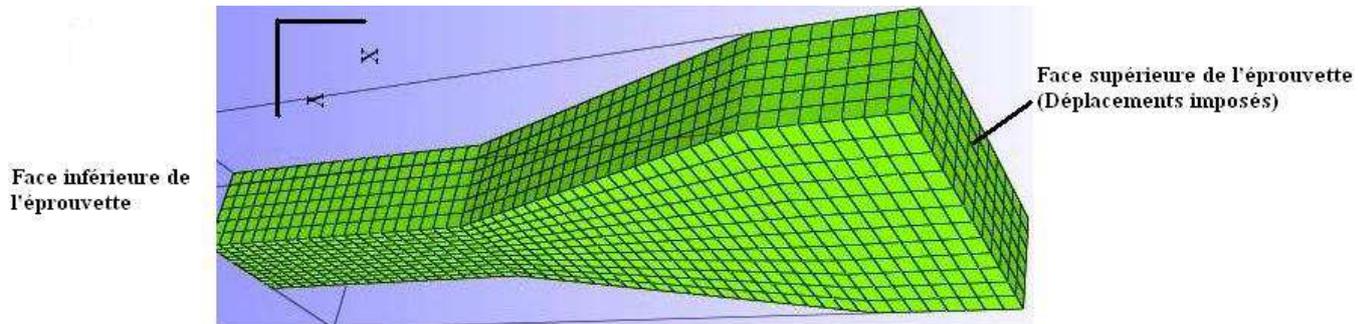


FIGURE 13.3.1: Maillage non-déformé de l'éprouvette TR30 3D. 3672 éléments hybrides hexahédriques à 8 noeuds. Déplacement imposé en X sur la face supérieure de l'éprouvette et condition de symétrie en X sur la face inférieure.

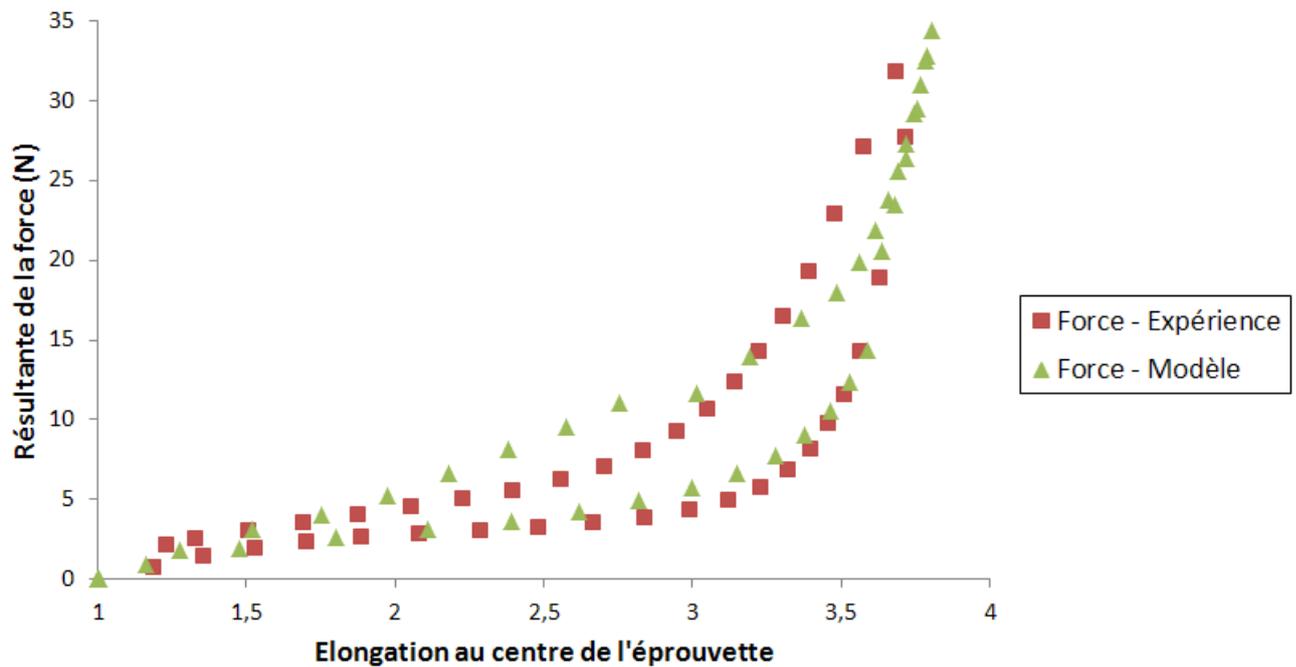


FIGURE 13.3.2: Comparaison de la force de rappel résultante sur l'éprouvette en fonction de l'élongation à la surface de la partie utile de l'éprouvette. Recalage sur la décharge et l'aire de l'hystérèse. (Carrés rouges) Expérience. (Triangles verts) Modèle. Les données expérimentales sont extraites de [128].

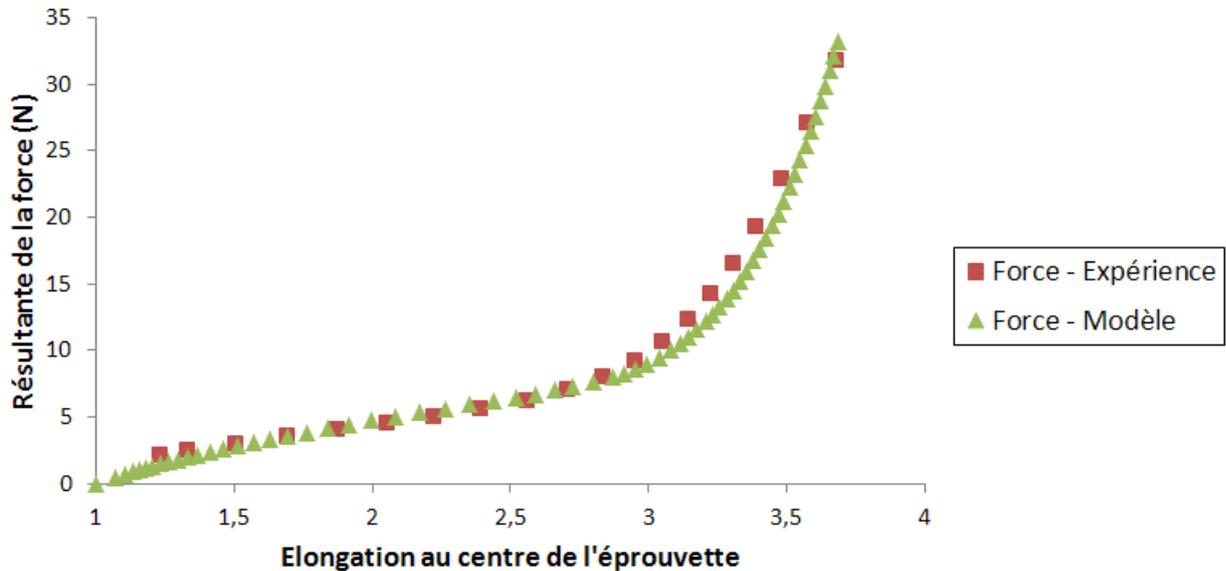


FIGURE 13.3.3: Comparaison de la force de rappel résultante sur l'éprouvette en fonction de l'élongation à la surface de la partie utile de l'éprouvette entre modèle et expérience. Recalage sur la charge. (Carrés rouges) Expérience. (Triangles verts) Modèle. Les données expérimentales sont extraites de [128].

Pour obtenir le résultat présenté aux figures 13.3.2 et 13.3.3, on utilise une procédure identique à celle de l'expérience : on mesure la force résultante sur l'éprouvette en fonction de l'élongation mesurée dans la section utile selon l'axe X. On remarque alors que par rapport aux précédents tests, la comparaison entre expérience et modèle est moins bonne. Cet écart a été identifié par Marchal et Kroon [91, 74] comme étant dû aux désenchevêtrements modélisable par une loi viscoélastique [53] (section 10.3). Il peut être également dû à l'absence de modélisation du renforcement aux noirs de carbones. Dans tous les cas, cette réduction très rapide de l'hystérèse en comparaison de ce qui est observé expérimentalement se retrouve systématiquement dans les cas où des mécanismes autres qu'une cristallisation (indépendante du temps) sont à l'oeuvre. Pour plus de détails, on peut se reporter à une comparaison de modèles réalisée par Govindjee [101]. Si le recalage du modèle est fait uniquement sur l'adéquation charge et décharge, on obtient une hystérèse de 35% plus faible avec le modèle en comparaison de l'expérience ce qui motive l'utilisation d'un modèle simple de désenchevêtrements tel que proposé à la section 10.3. Lors de la comparaison modèle-expérience faite dans ce chapitre, on utilise le modèle de la figure 13.3.3 car nous n'avons besoin que des résultats en charge. Dans le chapitre 14, on utilisera le modèle de la figure 13.3.2 avec recalage de l'hystérèse car on s'intéresse à la dissipation et aux grandeurs énergétiques.

13.3.2 Description du calcul

Pour reproduire l'expérience présentée à la section 13.2, on maille une demi-éprouvette PS 3D dans laquelle on introduit une fissure de 21 mm (figure 13.3.4). Cette demi-éprouvette est maillée avec 42250 éléments hybrides hexahédriques à 8 noeuds avec 20 éléments dans l'épaisseur. Avec un maillage adaptatif (figure 13.3.4), cela nous permet d'avoir une taille d'élément d'environ 0.05 mm en pointe de fissure et un temps de calcul de 1h environ pour un cycle complet. Considérons alors la plus petite zone cristallisée donnée par l'expérience (mesure à $\lambda = 1.46$) (figure 13.2.3). Si on mesure la taille de cette zone dans le plan de fissure au milieu de l'éprouvette en épaisseur, elle correspond à :

- 3 éléments pour la mesure expérimentale,
- 5 éléments pour le modèle.

Cela nous permet d'obtenir une mesure assez précise de la taille de cette zone comme on le verra par la suite.

Sur la face supérieure de l'éprouvette, on impose le déplacement selon l'axe Z de l'éprouvette et on bloque les autres degrés de liberté. Sur la face inférieure (plan de fissure) de l'éprouvette, on impose une condition de symétrie en Z pour modéliser les conditions de chargement d'une éprouvette complète.

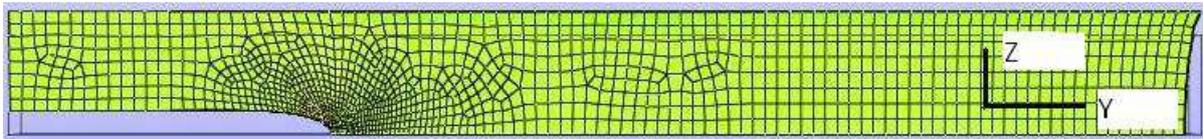


FIGURE 13.3.4: Maillage déformé de l'éprouvette Pure-Shear (PS) 3D. 42250 éléments hybrides hexahédriques à 8 noeuds. Taille de l'élément en pointe de fissure $h = 0.046 \text{ mm}$. Déplacement imposé sur la face supérieure de l'éprouvette et condition de symétrie en Z sur le plan de fissure. Environ 4600 éléments dans la zone cristallisée pour $\lambda = 1.92$.

La tolérance en déplacement est de 10^{-5} . De plus, le chargement est découpé en 100 pas de $\lambda = 1$ à $\lambda = 1.92$ de manière à éviter les retournements d'élément au niveau des bords libres en pointe de fissure. Pour finir, on se limite au calcul en charge car les résultats expérimentaux proviennent eux-mêmes d'une mesure en charge. A la figure 13.3.5, on peut voir la déformée de l'éprouvette PS complète ainsi que la pointe de fissure. On peut remarquer que la pointe de fissure est anguleuse ce qui est probablement dû à la présence d'une énergie de Langevin dans la micro-sphère [87].

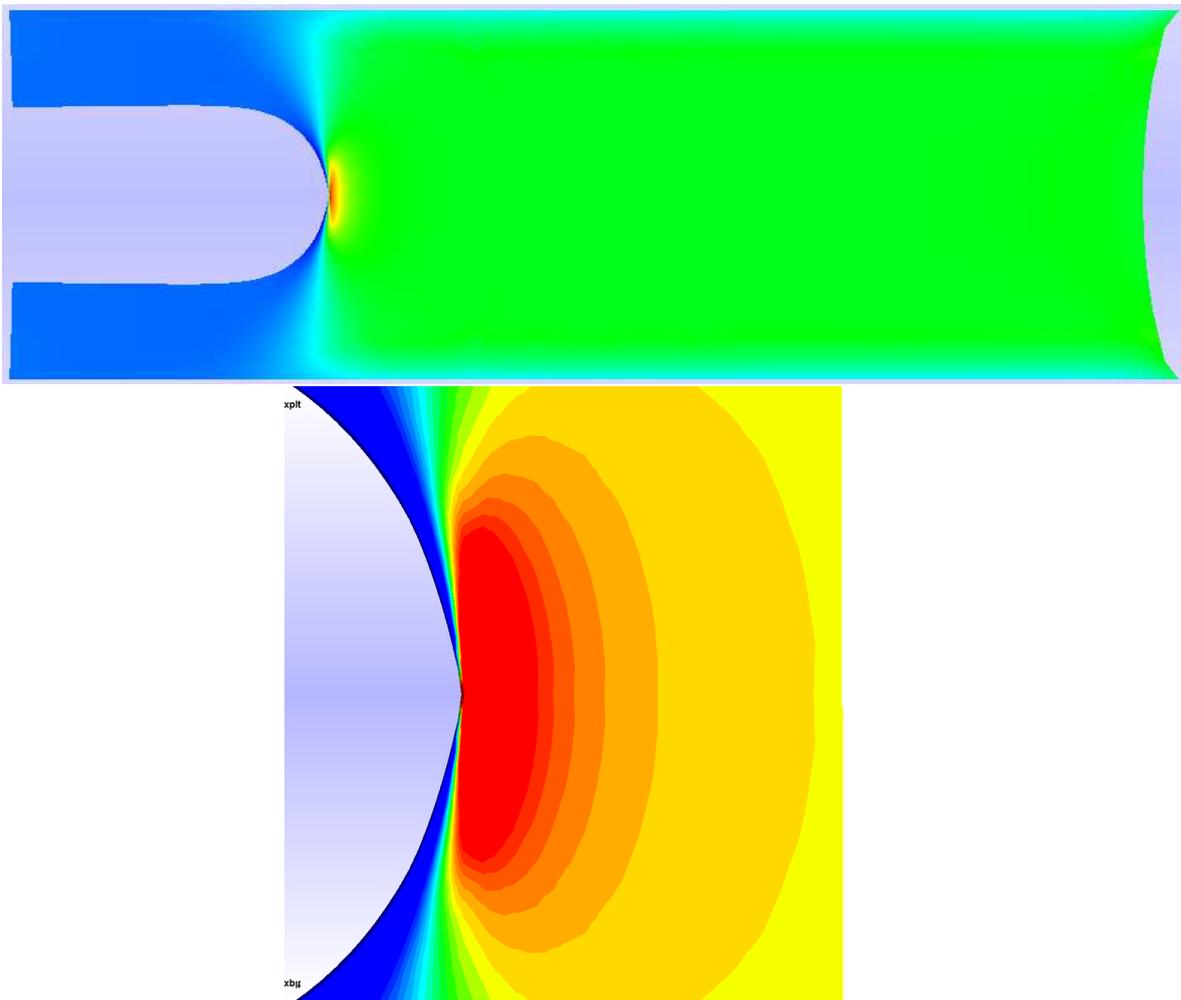


FIGURE 13.3.5: (En haut) Déformation nominale en Z sur l'éprouvette PS complète à $\lambda = 1.92$. (En bas) Zoom sur la pointe de fissure.

13.3.3 Comparaison à l'expérience

Le résultat expérimental décrit à la section 13.2 donne trois caractéristiques : la forme de la zone de cristallisation, la taille de la zone de cristallisation, et la forme du profil de fissure (figure 13.3.6).

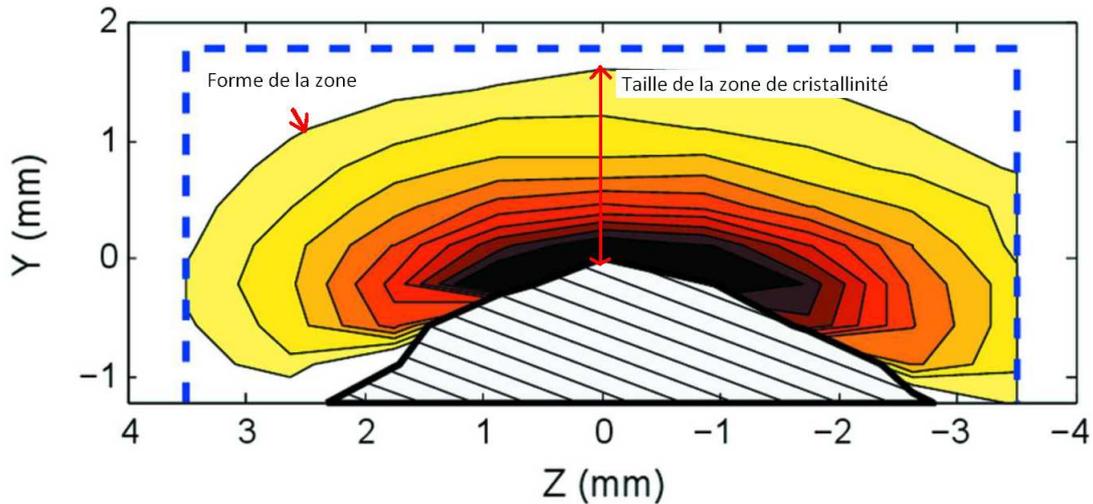


FIGURE 13.3.6: Schéma de la mesure de taille et de forme de la zone de cristallinité. La mesure de taille est réalisée dans le plan de fissure en regroupant préalablement les données selon l'axe X (épaisseur) et en sommant la taille des éléments cristallisés selon l'axe X. La mesure de forme, noté iso expérimentale dans la suite, est caractérisée par la courbe de cristallinité constante minimum mesurée $\chi = 0.1$ que l'on observe autour de la pointe de fissure (figure tirée de [129]).

On remarque également que nos résultats sont 3D alors qu'ils sont 2D dans l'expérience. En effet, lors de l'expérience, une somme des résultats selon l'axe X (épaisseur de l'éprouvette) est réalisée. Pour obtenir des résultats équivalents, on procède de la même manière. Pour cela, on se place en configuration déformée et on somme les résultats en cristallinité selon l'axe X. Notons que la somme est réalisée même si pour certaines coordonnées (Z, Y) , on n'a pas de matière à chaque coordonnée X.

On commence alors par comparer la taille (table 13.3) et la forme (figure 13.3.7) de la zone de cristallinité. On rappelle que la longueur d'un élément dans le modèle est d'environ 0.05 mm et que dans l'expérience elle varie entre 0.1 et 0.3 mm. On remarque alors qu'à part pour $\lambda = 1.61$, l'écart entre expérience et modèle reste très faible et inférieur à la taille caractéristique de l'élément de mesure expérimental.

Elongation λ	d_p Modèle en mm	d_p Taille d'élément à d_p ($\chi = 0.1$) en mm	Expérience en mm
1.46	0.31	0.04	0.29
1.61	0.53	0.04	0.65
1.77	0.90	0.06	1.02
1.92	1.51	0.07	1.62

TABLE 13.3: Mesure de la taille d_p telle que définie au schéma 13.3.6 de la zone de cristallinité par rapport à la pointe de fissure dans le plan de la fissure. Pour ramener la représentation 3D à une représentation 2D, on utilise la même procédure que dans l'expérience en sommant les valeurs de cristallinité selon l'axe X (épaisseur de l'éprouvette) ainsi que la présence de matière pour déterminer le profil de fissure dans l'état déformé. Les mesures expérimentales sont réalisées à partir de la figure 13.2.3. La cristallinité minimum dans le modèle pour la mesure de distance a été prise égale à 0.1 comme dans l'expérience.

Ensuite, on s'intéresse à la forme de la zone de cristallisation pour $\lambda = 1.92$ seulement grâce à la procédure précisée à la figure 13.3.7. On remarque encore une fois que l'écart entre expérience et modèle est de l'ordre de grandeur de l'erreur de mesure expérimentale. Elle est caractérisée ici par la dissymétrie entre les zones de cristallisation de part et d'autre du plan de fissure puisque l'état de contrainte dans le test est symétrique par rapport au plan de fissure.

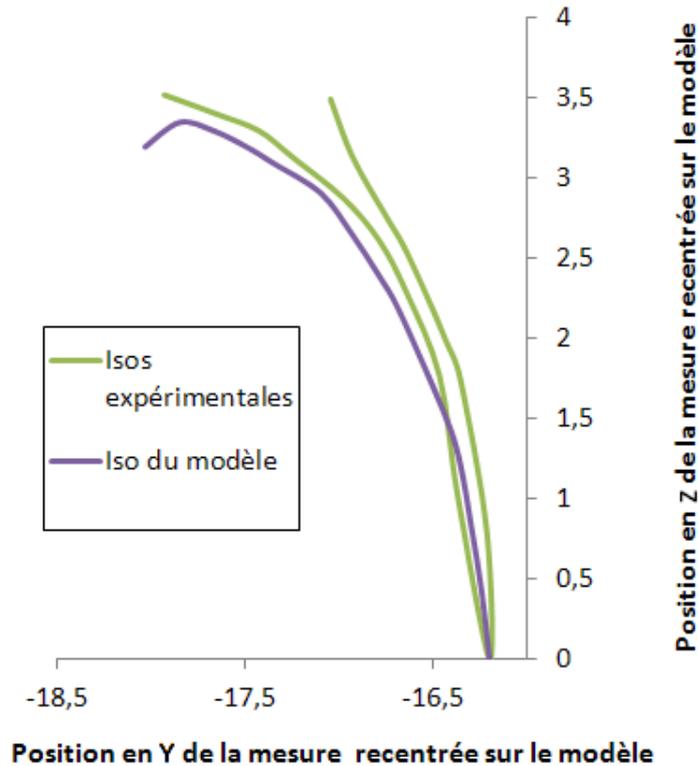


FIGURE 13.3.7: Comparaison à $\lambda = 1.92$ entre la forme de la zone de cristallinité pour le modèle et pour l'expérience. La position de l'iso expérimentale est préalablement recalée sur celle du modèle à la **pointe de fissure** en ($Z = 0, Y = -16$). La présence de deux isos expérimentales est due au fait qu'on posttraite une éprouvette fissurée qui n'est pas parfaitement symétrique par rapport au plan de fissure. Le modèle lui est parfaitement symétrique par rapport au plan de fissure par construction

Enfin, on compare le profil de fissure expérimental au profil de fissure modélisé en configuration déformée. Cette comparaison est réalisée à la figure 13.3.8 pour deux temps $t = 0.5 \leftrightarrow \lambda = 1.46$ et $t = 1 \leftrightarrow \lambda = 1.92$. Pour pouvoir réaliser cette comparaison, on regroupe toujours les résultats selon l'axe X dans un premier temps (ici la présence de matière). Ensuite, puisqu'il y a dissymétrie des lèvres de fissure dans l'expérience contrairement au modèle, on symétrise le résultat expérimental en prenant une moyenne des deux profils déformés. On remarque alors que la tendance est bonne sans pour autant être complètement quantitative notamment lorsque la déformation est plus importante à $t = 1$. On peut également remarquer que l'adéquation des deux résultats est meilleure en pointe de fissure que sur le reste du profil. Pour finir, on précise que la fissure se déforme systématiquement plus dans le modèle sans que l'on puisse expliquer pourquoi.

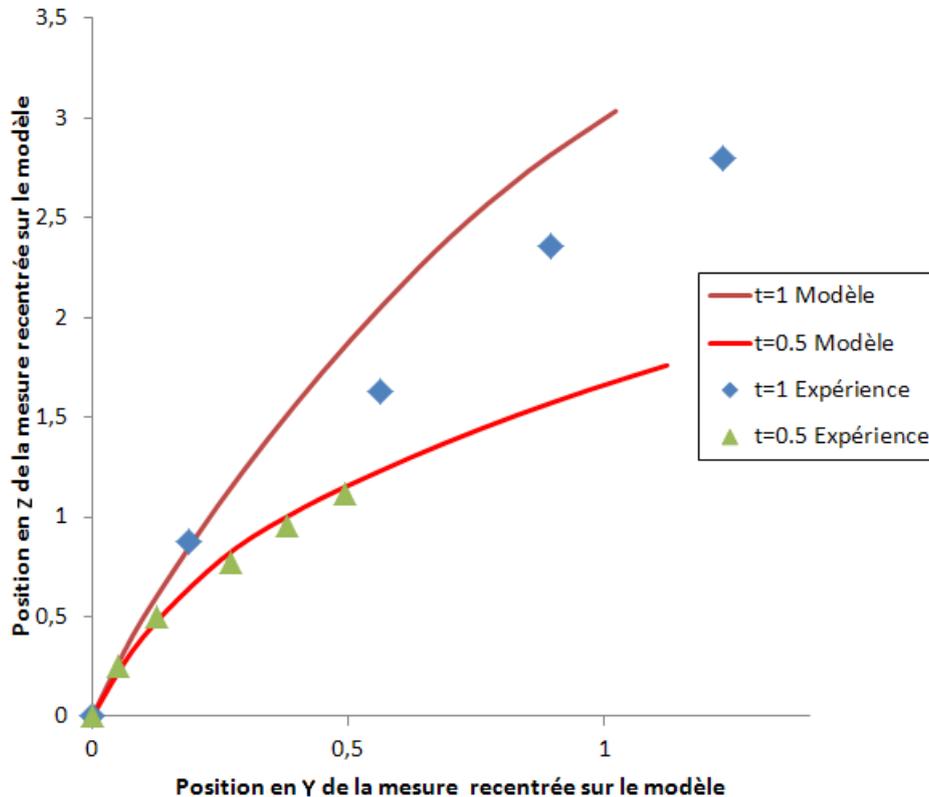


FIGURE 13.3.8: Comparaison entre les profils de fissure expérimentaux et théorique pour $t = 1 \leftrightarrow \lambda = 1.92$ et $t = 0.5 \leftrightarrow \lambda = 1.46$. Pour ramener la représentation 3D à une représentation 2D, on utilise la même procédure que décrite précédemment. Le profil de fissure expérimental présenté sur la figure est une moyenne faite sur le profil des deux lèvres de la fissure pour palier à la dissymétrie présente dans l'expérience. Le profil de fissure théorique est recalée à la pointe de fissure en ($Z = 0, Y = 0$).

13.3.4 Anisotropie en fond de fissure

Pour finir, on montre que la cristallisation est bien anisotrope en fond de fissure. Même si nous n'avons aucune mesure expérimentale de l'anisotropie locale en fond de fissure, on peut extraire de notre calcul la représentation sphérique de λ_χ . Pour cela, on reprend la demi-éprouvette PS en configuration déformée (figure 13.3.5) et on se place au milieu de l'éprouvette dans le plan de fissure. On prend ensuite 4 éléments depuis la pointe de fissure dans la direction de propagation et on extrait la représentation sphérique de λ_χ (figure 13.3.9).

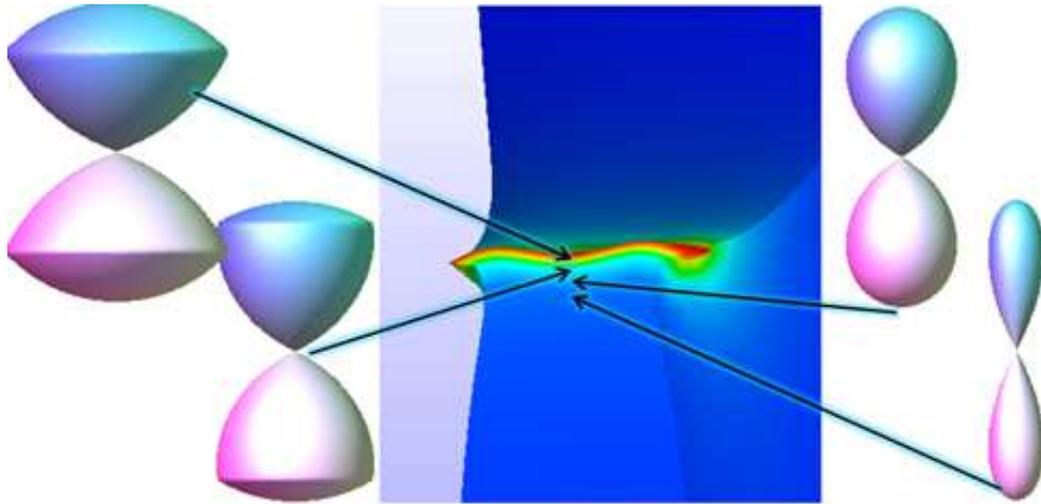


FIGURE 13.3.9: Anisotropie en fond de fissure. Déformée 3D de la demi-éprouvette PS (figure 13.3.5) avec Zoom au niveau de la pointe de fissure (en rouge). De haut en bas, lèvres déformées de la fissure puis pointe (première flèche) puis plan de fissure. Les flèches désignent des points matériels en configuration déformée pour lesquels, on a fait représentée λ_χ sur la sphère (en rose et bleu) (méthode identique à la figure 12.3.2).

On peut alors remarquer que la répartition de λ_χ est bien anisotrope et semblable à celle obtenue dans un cas d'élongation uniaxiale (section 12.2). De plus, on observe que plus on s'éloigne de la pointe de fissure plus λ_χ diminue sur l'ensemble de la sphère.

13.4 Conclusion

Dans l'ensemble on peut remarquer que la cristallisation en pointe de fissure est bien reproduite par le modèle dans ce cas malgré sa simplicité en comparaison de l'expérience réalisée. Il serait donc intéressant de pouvoir faire la même comparaison sur d'autres cas tests.

Chapitre 14

Caractérisation de la fissuration en fatigue pour un matériau cristallisant : Premières tendances

Dans cette section, on pose les premières tendances résultantes de l'étude d'une fissure de fatigue en présence de cristallisation sous contrainte. Cette étude n'est pas suffisante pour obtenir une loi de propagation de fissure dans ce type de matériau mais elle est réalisée dans cette perspective.

Dans un premier temps, on fait donc un état de l'art des résultats sur l'influence de la cristallisation sur la propagation de fissure en fatigue (section 14.1). Ensuite, on présente un cas expérimental récent sur un caoutchouc chargé montrant les deux principales influences de la cristallisation sur la fissuration en fatigue (section 14.2) puis on compare certains de ces résultats avec la simulation en utilisant la grandeur explicite proposée au chapitre 8 (section 14.3).

Nous notons également que le travail expérimental présenté dans ce chapitre est basé sur les études expérimentales de Rublon [128, 129, 130].

14.1 Etude expérimentale de l'influence de la cristallisation sur la propagation de fissure en fatigue

Comme nous l'avons vu au chapitre 13, la présence d'une structure fortement anisotrope en pointe de fissure peut être détectée par des mesures de diffraction rayons-X aux grands angles. De plus, la présence de cette structure est supposée jouer un rôle majeur dans la propagation de fissure en opposant une structure beaucoup plus dure dans la direction de propagation de fissure que dans la direction perpendiculaire à celle-ci. Hamed et Kim [59] ont notamment étudié la forme de la surface d'une fissure se

propageant dans un caoutchouc cristallisant et non-cristallisant sous un chargement de mode I. Ils ont alors observé que, dans le caoutchouc non-cristallisant, la propagation se faisait majoritairement en ligne droite alors que dans l'autre cas, la surface fissurée résultait de multiples initiations, propagations et déviations autour de la fissure principale. Ces déviations ont ensuite été mises en relation avec un mécanisme purement élastique d'émoussement par Albouy et al. [49] dans le cas de la rupture brutale. Saintier et al. [132] ont quant à eux observé la propagation d'une fissure en fatigue sous des conditions similaires à Hamed mais uniquement avec un caoutchouc naturel cristallisant et ce pour deux rapports de charge différents (figure 14.1.1).

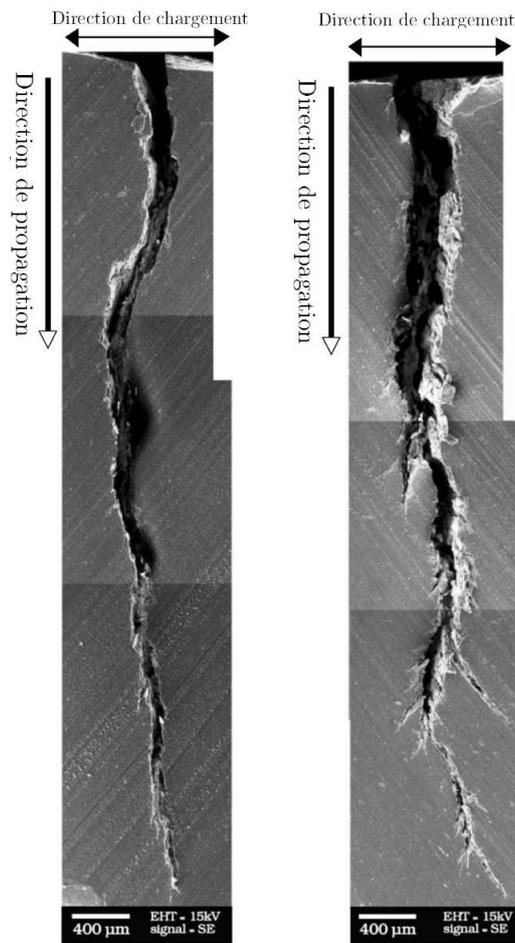


FIGURE 14.1.1: Surface fissurée en fatigue sous des conditions de chargement en mode I dans un cas relaxant (à gauche) $R = -0.3$ et un cas non-relaxant (à droite) $R = 4.2$. R est le rapport de charge défini par la fraction entre la charge minimum et maximum lors du cycle (figure tirée de [132]).

Dans le cas non-relaxant, toutes les cristallites disparaissent lors de la décharge alors

qu'un taux de cristallisation non-nul perdure toujours dans le cas non-relaxant. On observe alors également une morphologie de fissuration très différente dans les deux cas. Dans le cas non-relaxant, des branchements à l'échelle macroscopique sont présents et la propagation de la fissure est le résultat de la propagation de plusieurs fronts dans des directions différentes. L'observation de la surface fissurée à l'échelle macroscopique peut donc déjà nous apporter une première explication sur l'augmentation de la durée de vie en fatigue pour ces conditions de chargement : l'augmentation drastique de la surface fissurée autorise une plus grande dissipation d'énergie ce qui réduit significativement la vitesse de propagation en fatigue. En utilisant, le concept de force thermodynamique pour la rupture développé à la section 4.2.1, on peut également dire que les observations précédentes sont le témoin d'une compétition entre le processus de rupture et un processus de renforcement du matériau en pointe de fissure qui permet l'apparition de fissures secondaires. Néanmoins, certaines questions restent ouvertes :

- Comment la cristallisation sous contrainte crée les conditions favorables à l'apparition de ces fissures secondaires ?
- Comment peut on caractériser qualitativement cette compétition avec une grandeur énergétique ?

Observations au microscope électronique à balayage (MEB) [12]

Pour poursuivre cette réflexion, nous allons nous intéresser au processus de propagation de fissure à une échelle mésoscopique grâce aux observations que l'on peut faire avec un microscope électronique à balayage.

A la figure 14.1.2, on peut observer deux vues d'une pointe de fissure de fatigue dans un caoutchouc chargé aux noirs de carbone. Comme cela a été mentionné par Beurrot [12], la pointe de fissure est composée de nombreuses zones en forme de diamant séparées par des ligaments.

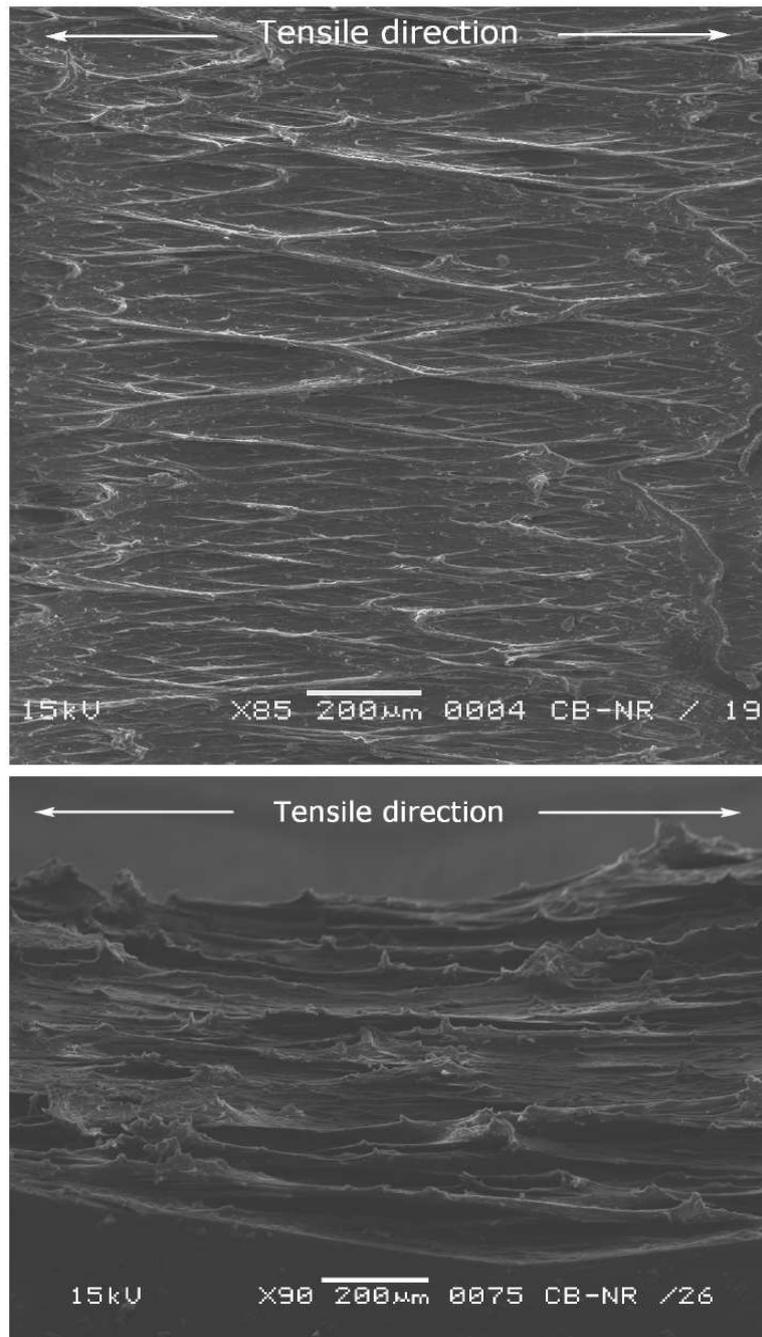


FIGURE 14.1.2: (En haut) Vue de dessus de la pointe de fissure dans l'état déformé. (En bas) Vue de côté de la pointe de fissure dans l'état déformé (figure extraite de [12]).

La régularité de ce motif ainsi que l'orientation des ligaments dans deux directions symétriques mais non-alignées par rapport à la direction de chargement peut surprendre

14.1 Etude expérimentale de l'influence de la cristallisation sur la propagation de fissure en fatigue

au premier abord. Néanmoins, on rappelle que dans le modèle construit au chapitre 10 et notamment dans les cas les plus relaxants au niveau macroscopique, on peut observer une relaxation plus importante dans les directions cristallisées les plus chargées si la cristallisation est suffisamment importante (ceci se traduisant par un module directionnel négatif) et ce malgré une dissipation toujours positive par direction. Cette observation pourrait être rapprochée de la présence de ligaments orientés symétriquement à la direction de traction. Beurrot décrit ensuite la propagation de fissure à l'échelle mésoscopique comme suit :

- à l'état initial, une zone en forme de diamant avec ses ligaments la délimitant forme une partie de la pointe de fissure,
- la zone devient avec l'évolution du chargement sur plusieurs cycles plus profonde et plus large et par conséquent les ligaments deviennent plus étirés et plus fins,
- le ligament le plus fin casse et la matière se réorganise autour de la coalescence de deux zones voisines précédemment séparées par le ligament cassé.

Cette observation a également été associée à un mécanisme expliquant la présence de fissures secondaires (figure 14.1.3) :

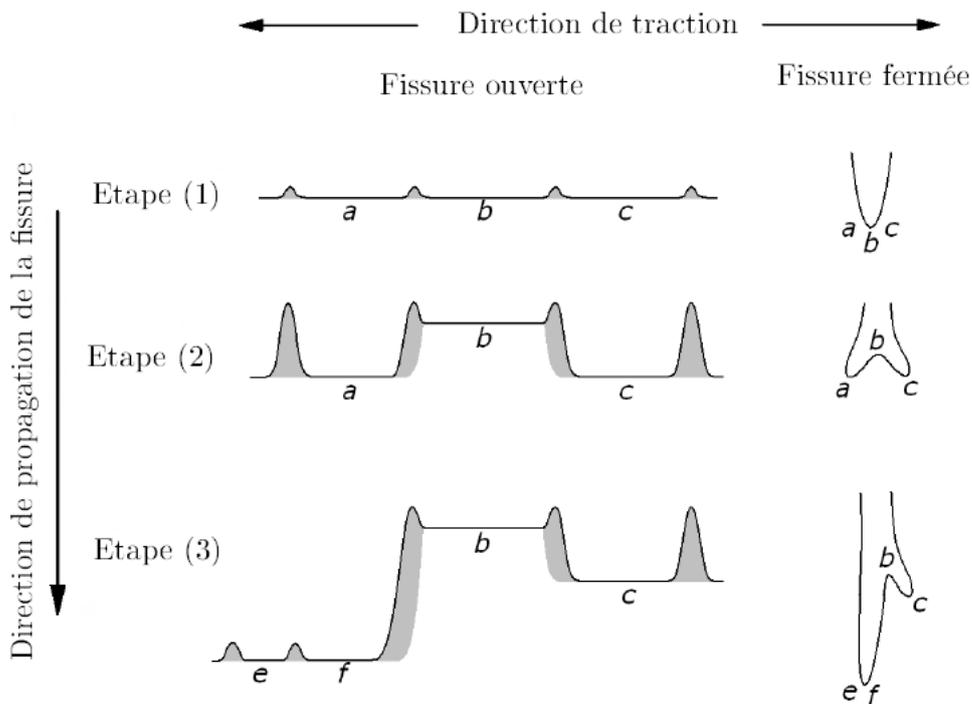


FIGURE 14.1.3: Phénomène d'apparition des fissures secondaires (figure tirée de [12]).

- initialement, trois zones de même profondeur *a*, *b*, et *c* sont séparées par des ligaments (en gris),

- ensuite, lorsque la fissure a propagé, les zones a et c ont cru plus profondément que la zone b ,
- lorsque la fissure continue de se propager, une des deux branches (a ou c) devient la branche fissurée principale (zone a dans la figure 14.1.3). Cette zone s'est alors transformée en deux nouvelles zones plus relaxées e et f . La zone c devient alors la plus contrainte et forme une fissure secondaire.

Pour conclure, on peut remarquer que les observations au MEB montrent que la pointe de fissure présente un émoussement significatif et que la présence de fissures secondaires semble d'être à une anisotropie illustrée par l'orientation des ligaments. De plus, il semble assez clair que la fissure se propage préférentiellement dans la zone la moins relaxée.

Loi phénoménologique de propagation en fatigue

La vitesse de propagation de fissure en fatigue dans un caoutchouc cristallisant dépend de l'énergie de déchirement maximum durant le cycle T_{max} et du rapport de charge $R = \frac{\lambda_{min}-1}{\lambda_{max}-1}$. La notion « d'énergie de déchirement » est historiquement appliquée aux élastomères. Elle s'écrit, dans le cadre des grandes déformations élastiques, sous la forme [147]

$$T = -\frac{\partial W}{\partial A}|_U, \quad (14.1.1)$$

avec W l'énergie de déformation, A la surface de fissure et le suffixe $|U$ indique que la dérivation s'effectue à un déplacement constant des zones d'application des forces. En faisant la synthèse de plusieurs travaux expérimentaux sur cette propriété [95, 85, 18], Mars et Fatemi [94], ont proposé un modèle phénoménologique pour décrire l'influence de T_{max} et de R sur la vitesse de propagation de fissure en fatigue. Ce modèle se base sur les observations suivantes :

- à R constant, l'effet de T_{max} sur la vitesse de propagation obéit à une loi puissance,
- les lois puissances pour chaque rapport de charge R convergent vers un taux de restitution d'énergie critique pour une vitesse de fissuration maximale,
- l'augmentation de R entraîne une diminution du facteur puissance dans la loi de propagation convergeant vers une vitesse de fissuration minimum indépendante de T_{max} pour R grand.

Le modèle proposé, valide pour des vitesses de propagation $\frac{da}{dN} \in]10^{-8}, 10^{-3}[$ mm/cycle et un nombre de cycles $N \in]10^3, 10^6[$, s'écrit alors sous la forme

$$\frac{da}{dN} = r_c \left(\frac{T_{max}}{T_c} \right)^{F(R)} \quad (14.1.2)$$

avec :

- $F(R) = F_0 + F_1R + F_2R^2 + F_3R^3$ ou $F(R) = F_0 \exp(F_4R)$ une fonction phénoménologique,
- T_c l'énergie de déchirement critique auquel la fissuration débute,
- T_{max} l'énergie de déchirement au maximum du cycle,

– r_c la vitesse maximum de propagation de fissure.

14.2 Cas expérimental de référence

Dans cette section, on détaille la mise en place d'une expérience de fatigue réalisée par Pierre Rublon [128]. Cette expérience est sensiblement équivalente à celle présentée à la section 13.2. **Dans un souci de rigueur, la description du cas expérimental est une reformulation des écrits de Pierre Rublon sur le sujet** [128, 129, 130].

14.2.1 Description de l'expérience

Les éprouvettes PS utilisées sont plus longues (157 mm) que les éprouvettes précédemment utilisées. Mais nous devons noter que le taux de restitution est indépendant de la longueur de la fissure et de la longueur de l'éprouvette PS pour ce test.

Après avoir fixé l'éprouvette, elle subit une première sollicitation de 300 cycles à une élongation globale de $\lambda = 1.92$ et une fréquence de 2 Hz de manière à diminuer les contraintes résiduelles dues à la viscosité et à l'effet Mullins. Ensuite, on mesure l'énergie de déchirement (équivalent au taux de restitution d'énergie dans un cas hyperélastique en déplacements imposés) par la méthode expérimentale de Rivlin et Thomas [125] à plusieurs élongations globales inférieures à $\lambda = 1.92$. Dans la méthode de Rivlin, on calcule le taux de restitution d'énergie à partir des dimensions de l'éprouvette non-déformée et du niveau d'énergie libre stockée à une élongation prescrite. On introduit alors trois coupures dans l'éprouvette : deux aux bords (2 cm de long) et une au milieu de l'éprouvette (3cm de long) et on cycle un peu de manière à obtenir une fissure de fatigue. Enfin, plusieurs tests de fatigue sont réalisés à différents rapports de charge R s'écrivant sous la forme

$$R = \frac{\lambda_{min} - 1}{\lambda_{max} - 1}, \quad (14.2.1)$$

avec λ_{min} l'élongation en bas du cycle et λ_{max} l'élongation en haut du cycle. On mesure alors pour chaque pointe de fissure la vitesse de propagation et on la moyenne sur l'ensemble des quatres pointes. Cette mesure est également réalisée pour un caoutchouc isoprène synthétique comportant le même taux de charge car celui-ci cristallise beaucoup moins [130]. De plus, en utilisant la méthode décrite à la section 13.2.1, le volume cristallisé est mesuré en pointe de fissure pour les différents rapports de charge à $\lambda_{max} = 1.92$.

14.2.2 Résultats

Des expérience de Rublon [128], on retient trois éléments principaux :

- la mesure du « taux de restitution d'énergie » par la méthode de Rivlin et Thomas [125] en fonction du déplacement (table 14.1),
- la mesure du volume cristallisé par la méthode décrite à la section 13.2.1 dans le cas en fatigue (noté Volume cristallisé fatigue) et dans un cas où on a laissé l'éprouvette à λ_{max} pendant un temps long (noté Volume cristallisé pose),
- la comparaison entre la vitesse de fissuration en fatigue pour un caoutchouc synthétique (non-cristallisant) et naturel (cristallisant),
- la comparaison entre différentes vitesses de fissuration en fatigue pour un caoutchouc naturel à différents rapport de charge R .

La mesure du « taux de restitution d'énergie » tel que désigné par Pierre Rublon, est réalisé à partir de l'énergie de déchirement comme suit [128]. En considérant des éprouvettes de faible épaisseur constante e_0 et en notant l , la longueur de la fissure, l'expression de l'énergie de déchirement (14.1.1) se réduit à

$$T = -e_0^{-1} \frac{\partial W}{\partial l} \Big|_U, \quad (14.2.2)$$

Dans le cas de l'éprouvette Pure Shear, Rivlin et Thomas [125] ont montré par (14.2.2) que

$$T = W_v h, \quad (14.2.3)$$

avec h la hauteur de l'éprouvette non déformée et W_v la densité volumique d'énergie de déformation.

Déplacement en mm	Volume cristallisé fatigue en mm^3	Volume cristallisé pose en mm^3	Energie de déchirement en J/m^2
6	0.77	1.3	4620
8	2.2	3.3	7293
10	5.01	11	10394
12	9.1	50	14140

TABLE 14.1: Mesure de l'énergie de déchirement et du volume cristallisé pour $R = 0$ en fonction du déplacement pour du caoutchouc naturel chargé à 50 phr sur éprouvette PS. Le volume cristallisé en fatigue et en pose est mesuré sur une éprouvette fissurée. L'énergie de déchirement est mesurée sur une éprouvette non-fissurée avec la courbe de contrainte-élongation [125] (tableau construit à partir des données de [128]).

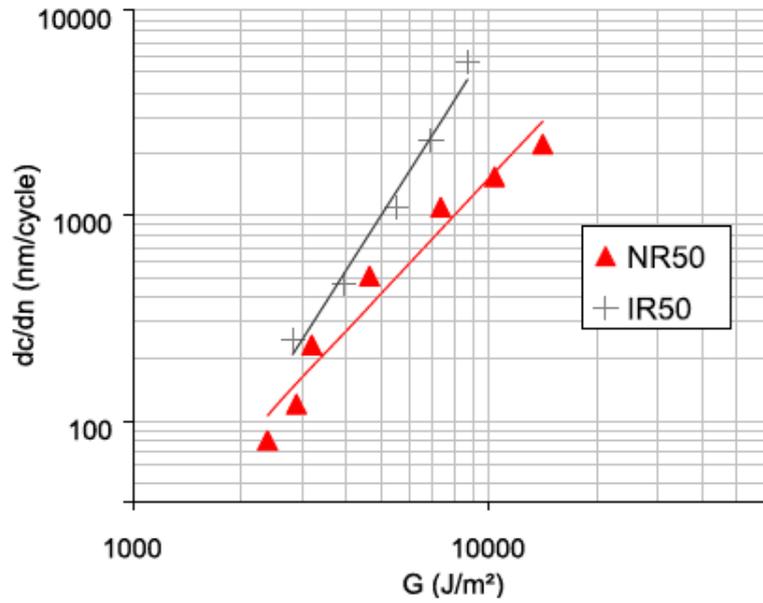


FIGURE 14.2.1: Vitesses de propagation de fissure $\frac{dc}{dn}$ pour $R = 0$ pour un caoutchouc naturel chargé à 50 phr (triangles rouges) et un caoutchouc synthétique chargé à 50 phr « caoutchouc peu cristallisant » (croix noirs) en fonction de G en haut du cycle (J/m^2). Courbes de régression en fonction puissance (figure tirée de [128]).

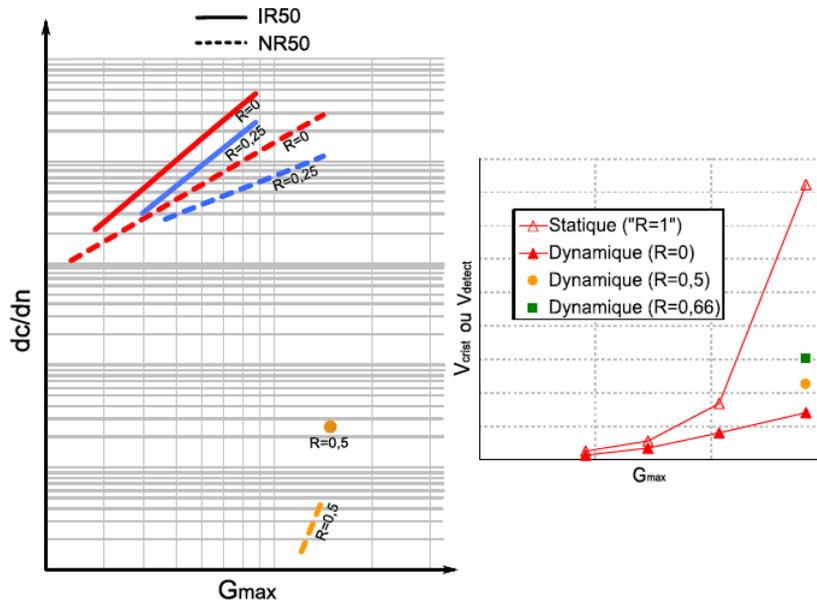


FIGURE 14.2.2: Comportement schématique des mélanges NR50 et IR50 en termes de vitesses de propagation de fissure de fatigue pour différents rapports de chargement R (à gauche), et évolution schématique du « volume cristallisé » V_{crist} ou V_{detect} (mesurés en haut des cycles) avec le taux de restitution d'énergie G pour différents rapports de chargement R dans le cas du mélange NR50 (à droite) (**Figure et légende extraites de [128]** (« Discussion générale »)).

On peut synthétiser les observations faites de la manière suivante :

- avec le déplacement, le taux de restitution d'énergie mesuré par la méthode de Rivlin et Thomas augmente ainsi que le volume cristallisé,
- la vitesse de fissuration en fatigue est inférieure dans un caoutchouc naturel par rapport à un caoutchouc synthétique et cet écart grandit rapidement avec le taux de restitution d'énergie en haut du cycle et donc avec le volume cristallisé,
- la vitesse de fissuration en fatigue décroît avec le rapport de charge (elle est notamment très faible pour $R = 0.5$) et le volume cristallisé augmente.
- le volume cristallisé est plus grand lors d'un essai de relaxation qu'en sollicitation cyclique.

14.3 Modélisation de l'influence de la cristallisation sur la vitesse de propagation de fissure en fatigue

14.3.1 Méthode

Pour commencer, on reprend le cas test de la section 13.3.2 sur la demi-éprouvette Pure-Shear auquel on applique un chargement cyclique à rapport de charge nul. La mise en place informatique du code FEBIO ne nous permettant pas une étude numérique du taux de restitution d'énergie aussi précise qu'au chapitre 8, on utilise les différences finies pour le calculer. Néanmoins, on vérifie la convergence en perturbation à posteriori en remaillant l'éprouvette (figure 13.3.4) de manière à avoir des perturbations allant de 10^{-3} à 10^{-1} mm. Le calcul est alors fait sur 5 maillages différents pour les perturbations $\Delta l = 10^{-3}$, $2 \cdot 10^{-3}$, $5 \cdot 10^{-3}$, $4 \cdot 10^{-2}$, $2 \cdot 10^{-1}$ et on ne considère que la valeur obtenue pour la plus petite perturbation. Lors de la perturbation, tous les points du front de fissure sont perturbés dans le plan de fissure (selon l'axe Y) et uniformément ce qui nous permet d'obtenir une grandeur scalaire pour le taux de restitution d'énergie. On choisit alors de calculer deux grandeurs différentes G_p et G_{am} par (section 4.2.1)

$$G_p = - \left(\frac{W_{ep}(l + \Delta l) - W_{ep}(l)}{\Delta l} \right)_{|\lambda_{\chi,i}, \bar{U}} \quad (14.3.1)$$

$$G_{am} = - \left(\frac{W_{ep,mec3}(l + \Delta l) - W_{ep,mec3}(l)}{\Delta l} \right)_{|\lambda_{\chi,i}, \bar{U}} \quad (14.3.2)$$

avec :

- Δl la perturbation de la longueur de la fissure l identique pour tous les points du front,
- $|\lambda_{\chi,i}, \bar{U}$ les variables fixées durant la perturbation, càd \bar{U} le chargement en déplacement et $\lambda_{\chi,i}$ l'élongation cristallisée par direction,
- $W_{ep} = \int_{B_{\mathbf{X}}} \{W(J) + \bar{\Psi}_{\chi}(\lambda_{\chi}, T, \bar{\mathbf{C}}) + \bar{\Psi}_{el}(\bar{\mathbf{C}}) + \bar{\Psi}_{tube}(\bar{\mathbf{C}})\} dV_{\mathbf{X}} - \int_{\partial B_{\mathbf{X}}} \mathbf{t} \cdot \boldsymbol{\xi} dS_{\mathbf{X}}$ l'énergie potentielle par (10.4.12),
- $W_{ep,mec3} = \int_{B_{\mathbf{X}}} \{W(J) + \bar{\Psi}_{\chi}(\lambda_{\chi}, T, \bar{\mathbf{C}}) + \bar{\Psi}_{tube}(\bar{\mathbf{C}})\} dV_{\mathbf{X}} - \int_{\partial B_{\mathbf{X}}} \mathbf{t} \cdot \boldsymbol{\xi} dS_{\mathbf{X}}$ l'énergie potentielle à laquelle on soustrait l'énergie libre liée au troisième mécanisme de cristallisation par (10.4.12).

On rappelle que la première grandeur G_p suppose à priori que l'énergie consommée par la cristallisation ne peut plus être consommée pour l'avancée de fissure et qu'il y a un découplage fort entre ces deux phénomènes. La grandeur G_{am} est basée sur le raisonnement suivant :

A la section 14.1, nous avons fait plusieurs observations qui nous amènent à penser que la fissure se propage préférentiellement dans la phase amorphe et que plus cette phase amorphe est relaxée moins la fissure se propage facilement. De plus, comme cela

a été observé par Marchal (figure 14.3.1), sous certaines conditions le matériau non-cristallisant présente un durcissement moins important que le matériau cristallisant à cause du réseau créé par les nano-renforcements (les cristallites) et ceux malgré le fait que la phase amorphe soit plus relaxée dans le matériau cristallisant (exemple à la figure 14.3.2).

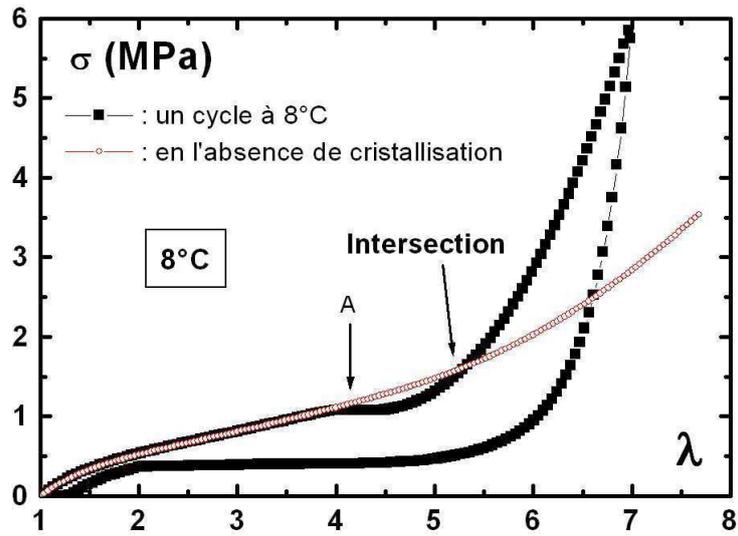


FIGURE 14.3.1: Évolution de la contrainte nominale σ (en noir) à 8°C, (en rouge) à 82°C (renormalisée à 8°C par la loi de Mooney Rivlin) au cours d'un cycle de traction de vitesse 2 mm/min (figure tirée de [91]).

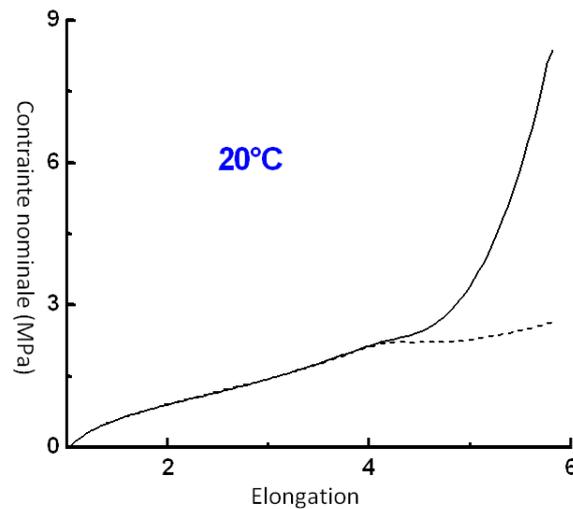


FIGURE 14.3.2: Caractérisation de l'effet de durcissement induit par les cristallites. (Lignes pleines) Contrainte nominale en fonction de l'élongation pour une charge cristallisante. (Pointillés) Contrainte calculée en utilisant la raideur amorphe combinée avec l'élongation de la partie amorphe du réseau pendant la cristallisation sous contrainte (figure tirée de [3]).

Or, dans notre modèle, l'effet de durcissement créé par les nano-renforcements est traduit par l'énergie $\bar{\Psi}_{el}(\bar{\mathbf{C}})$ s'activant en λ^* . Ceci nous amène à enlever cette contribution de manière à ce que, dans la grandeur caractéristique, on ne puisse restituer que de l'énergie provenant de la partie amorphe du réseau. Nous pouvons donc ainsi comparer qualitativement deux approches du calcul de taux de restitution.

14.3.2 Différence entre caoutchouc cristallisant et non-cristallisant

L'ensemble des calculs est reporté à la table 14.2. Dans cette table, on peut observer le calcul du taux de restitution des grandeurs proposées dans la section précédente auxquels on a ajouté G_{nc} . Pour calculer G_{nc} , on empêche le matériau de cristalliser. Cela nous permet de comparer nos résultats avec un matériau virtuel ayant les mêmes propriétés mais ne pouvant pas cristalliser. On remarque également que les constantes utilisées pour la loi de comportement sont celles qui ont permis d'obtenir la figure 13.3.2 et cela dans le but de se rapprocher de la courbe de décharge expérimentale comme nous l'avions expliqué (section 13.3.1).

Déplacement en mm	G_{nc} en J/m^2	G_{am} en J/m^2	G_p en J/m^2
6	4220	3520	3840
10	10660	8460	9520
12	14540	10210	15230
—	—	—	—
pente linéaire	(1700)	(1130)	(1830)

TABLE 14.2: Taux de restitution d'énergie en J/m^2 en fonction du déplacement appliqué à l'éprouvette. G_{nc} pour le test en l'absence de cristallisation. G_{am} pour le test cristallisant en supprimant l'énergie en λ^* dans le calcul du taux. G_p pour le test cristallisant. La « pente linéaire » correspond à la pente de la courbe de tendance linéaire successivement de G_{nc} , G_{am} et G_p en fonction du déplacement appliqué à l'éprouvette. Test réalisées à partir de la loi de comportement (figure 13.3.2)

Les observations que l'on peut faire sont les suivantes :

1. G_{am} est toujours plus petit que G_p . Cette observation semble logique puisqu'on a supprimé un terme strictement positif pour G_{am} . Ce terme correspond phénoménologiquement aux nano-renforcements.
2. G_{nc} est plus grand que G_{am} pour tous les déplacements et plus grand que G_p sauf pour 12 mm. Cette observation montre que G_{am} est la grandeur la plus faible, donc celle qui est le plus impactée par la cristallisation. De plus, orsqu'on prend en compte l'effet des nano-renforcements dans la grandeur caractéristique (cas G_p) alors cette dernière peut être plus élevé qu'en absence de cristallisation. Ceci pourrait être interprété par le fait que le raidissement dû uniquement aux cristallites est très important. Le matériau semi-cristallin devient alors plus raide que le matériau non-cristallisant. Expérimentalement, on a cependant observé qu'une fissure se propage moins vite lorsque les cristallites sont présentes (section 14.2.2). C'est cette observation qui nous a amené à supposer que la fissure ne se propageait que dans la partie amorphe.
3. G_{nc} croit plus vite que G_{am} et moins vite que G_p . Cette observation peut être rapprochée de la comparaison entre caoutchouc cristallisant et non-cristallisant (figure 14.2.2 gauche) où on observe un écartement entre la vitesse de propagation dans un caoutchouc cristallisant et non-cristallisant avec l'augmentation du déplacement au maximum du cycle.

En conséquence de ces différentes observation, on conclue que G_{am} est le meilleur candidat pour la construction d'une loi de propagation en fatigue.

14.3.3 Effet du rapport de charge sur la vitesse de propagation

De nombreuses lois de propagation de fissure s'écrivent sous la forme

$$\frac{dl}{dN} = C (\Delta G)^\alpha \quad (14.3.3)$$

avec : l la longueur de la fissure, N le nombre de cycles, C et α des constantes, $\Delta G = G_{max} - G_{min}$ le taux de restitution d'énergie en haut du cycle soustrait au taux de restitution d'énergie en bas du cycle. C'est donc la valeur de ΔG qui pilote la vitesse de fissure. Dans notre cadre de travail, le calcul correct de ΔG dépend de la bonne représentation de la cristallisation sous contrainte et de son évolution avec le chargement. Malheureusement, pour ce cas de chargement, on représente mal l'évolution de la cristallinité et par conséquent ΔG .

On observe, dans l'expérience, que l'augmentation du λ_{min} à λ_{max} identique appliqué à l'éprouvette sur un cycle crée une augmentation du volume cristallisé mesuré à λ_{max} . Beurrot [12] a par ailleurs précisé sur une éprouvette non-fissurée sollicitée en fatigue que cette augmentation se faisait seulement si l'élongation minimum atteinte pendant le cycle λ_{min} était supérieure à l'élongation minimum où des cristallites peuvent exister en fusion. Puisque la fissure propage très peu durant la mesure, les conditions mécaniques ne changent pas à λ_{max} mais le volume cristallisé augmente néanmoins.

Notre modèle de cristallisation ne peut reproduire ce phénomène. En effet, on travaille par rapport à une courbe d'équilibre unique ce qui ne permet pas de créer d'effets d'accumulation de la cristallinité. On pourrait proposer plusieurs modifications de notre modèle permettant de prendre en compte cet effet. Cependant, à notre connaissance, il n'y a pas aujourd'hui de mécanismes micro-mécaniques permettant d'expliquer l'effet observé.

Pour conclure, sur le multicycle apparaît un effet d'accumulation qui ne rentre pas encore dans le cadre de notre modèle prévu pour la description d'un ou de quelques cycles.

14.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons mis en oeuvre la loi de comportement de cristallisation sous contrainte développée dans la partie III sur un cas d'éprouvette fissurée. Une méthode de calcul du taux de restitution d'énergie développée au chapitre 8 permettant de prendre en compte qualitativement l'influence de la cristallisation a ensuite été utilisée de manière à obtenir quelques premières tendances sur l'influence de la cristallisation sur la propagation de fissure. Pour cela, nous avons utilisé les résultats provenant de plusieurs expériences de [128].

Nous avons alors comparé deux caractérisations différentes de la rupture pour comprendre la différence entre caoutchouc cristallisant et non-cristallisant. Ces deux caractérisations ont montré un bon accord avec les résultats expérimentaux.

Néanmoins, on peut citer deux limitations de cette étude. Tout d'abord, le cadre informatique dans lequel les simulations ont été réalisées ne nous a pas permis de déployer l'ensemble des outils de caractérisation de la fissuration développés dans ce manuscrit. De plus, sur le multicycle apparaît un effet d'accumulation qui ne rentre pas encore dans le cadre de notre modèle prévu pour la description d'un ou de quelques cycles.

Chapitre 15

Conclusion

L'objectif de ce travail était d'obtenir une loi de comportement anisotrope représentative de la cristallisation sous contrainte dans le caoutchouc, de l'intégrer dans un calcul macroscopique éléments finis, et de comprendre l'influence de ce phénomène sur la propagation de fissures dans ce matériau par un critère de taux de restitution d'énergie.

A la partie II « Calcul de taux de restitution d'énergie », nous nous sommes intéressés à l'extension formelle du calcul de grandeur caractéristique pour la fissuration dans un cadre dissipatif. Dans un premier temps, on s'est proposé d'introduire le temps physique dans la définition de la perturbation et d'examiner plusieurs hypothèses nous permettant de découpler la perturbation et l'évolution inélastique. Ensuite, nous avons examiné le cas où la perturbation et le processus d'évolution inélastique restent couplés. Ce cas a donné lieu à un calcul de grandeur caractéristique par une méthode d'état adjoint. La mise en oeuvre numérique de la variation de domaine a ensuite été proposée. Pour finir, nous nous sommes concentrés sur de cas de calcul :

1. une fissure dans un milieu élastoplastique pour le cas des grandeurs explicites,
2. la délamination d'une poutre viscoélastique linéaire pour le cas des grandeurs couplées calculées par état adjoint.

Ces deux cas nous ont permis d'améliorer la robustesse des méthodes de calcul dans le cas des grandeurs explicites et de valider l'approche par état adjoint pour les problèmes réguliers dans le cas des grandeurs couplées. Du point de vue des futurs défis à relever, un des axes majeurs pour l'aspect numérique reste l'obtention de méthodes robustes pour calculer les termes non-nuls en pointe de fissure. En ce qui concerne l'aspect mécanique, c'est le développement de critère de propagation pouvant s'associer à ce type de grandeur qui nous semble le plus essentiel.

A la partie III, nous avons obtenu une loi de comportement constitutive de la cristallisation sous contrainte dans le cadre du modèle de micro-sphère qui nous a permis de caractériser : la relation contrainte-déformation (effet relaxant et durcissant, hystérèse), l'anisotropie des réponses locales en prenant en compte l'histoire locale des directions principales de déformation, et les effets localement induits par la cristallisation en fond de

fissure. Cette loi, développée dans un cadre thermodynamique cohérent, a été comparée à plusieurs mesures expérimentales sur un panel exhaustif de chargement. Nous avons alors pu montrer une bonne reproductibilité des résultats expérimentaux. En terme de perspectives, nous pouvons noter tout d'abord l'importance de la prise en compte des différentes échelles de temps et d'espace dans la modélisation de la cristallisation sous contrainte. En effet, les aspects phénoménologiques de la loi gagneraient à être enrichis par une modélisation de la nucléation des cristaux comme celle de [76] par exemple. De plus l'hypothèse de passage méso-macro, ici affine, nous semble réductrice vis à vis du comportement réel du caoutchouc. Elle pourrait être améliorée en suivant la méthode développée par Gloria [52].

Pour finir, la partie IV nous a permis de débiter l'étude d'une fissure en présence de cristallisation sous contrainte. Nous avons alors démontré que la loi de comportement anisotrope était capable de reproduire un profil de fissure et une zone de cristallisation en pointe de fissure sensiblement équivalents à ceux obtenus dans l'expérience et ce malgré la complexité de la discussion sur les différentes échelles de temps à l'oeuvre. Ensuite, nous avons pu proposer une grandeur caractéristique de type taux de restitution d'énergie permettant de faire une distinction qualitative entre la vitesse de propagation de fissure dans un matériau cristallisant ou non grâce à la prise en compte de la dissipation et de la distinction réseau amorphe/réseau semi-cristallin. En terme de perspectives, nous pouvons tout d'abord noter notre incapacité à comprendre l'augmentation du volume cristallisé avec le rapport de charge et donc l'évolution de la vitesse de propagation avec ce même rapport. L'augmentation du volume cristallisé avec le rapport de charge est un phénomène qui, à notre connaissance, vient d'être identifié pendant le travail de Pierre Rublon. Une étude plus approfondie de ce phénomène devrait permettre de trouver une modélisation phénoménologique correspondante. Rappelons que la propagation de fissure à fort rapport de charge (figure 14.1.1) présente un faciès tout à fait unique dans le caoutchouc. La simulation de ce type de faciès semble nécessiter, non seulement la modélisation de la cristallisation sur des cycles de chargement complexe, mais en plus une représentation précise de l'anisotropie en fond de fissure ainsi qu'un critère d'initiation des fissures secondaires comparable avec le critère de propagation de la fissure principale. Ces différents ingrédients nécessitent encore des développements futurs conséquents de la modélisation de la cristallisation sous contrainte et de son influence sur la propagation d'une fissure de fatigue.

Bibliographie

- [1] Acken, M. F., Singer, W. E., & Davey, W. P. (1931). g) Kautschukchemie. *Scientia*, 49, 413.
- [2] Albouy, P. A., Guillier, G., Petermann, D., Vieyres, A., Sanseau, O., & Sotta, P. (2012). A stroboscopic X-ray apparatus for the study of the kinetics of strain-induced crystallization in natural rubber. *Polymer*, 53(15), 3313-3324.
- [3] Albouy, P. A., Vieyres, A., Sanseau, O., & Sotta, P. (2013). Strain-induced crystallization in natural rubber : Kinetics and strain relaxation. *Constitutive Models for Rubber VIII*, 461.
- [4] Allaire, G. (2007). *Conception optimale de structures, mathématiques and applications*, vol 58.
- [5] Ammar, K., Azzouz, F., Missoum-Benziane, D., Chiaruttini, V., Garaud, J. D., Feyel, F., ... & Ryckelynck, D. (2013). 1 Présentation générale de la suite Z-set.
- [6] Argyris, J. H., Doltsinis, J. S., & Kleiber, M. (1978). Incremental formulation in nonlinear mechanics and large strain elasto-plasticity—Natural approach. Part II. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 14(2), 259-294.
- [7] ASTM E1820-05, 2005. Standard test method for measurement of fracture toughness. In : *Annual Book of ASTM Standards*, vol. 03.01. ASTM International, West Conshohocken, PA, USA.
- [8] Ayhan, A. O. (2007). Stress intensity factors for three-dimensional cracks in functionally graded materials using enriched finite elements. *International Journal of Solids and Structures*, 44(25), 8579-8599.
- [9] Bazant, P., & Oh, B. H. (1986). Efficient numerical integration on the surface of a sphere. *ZAMM. Journal of Applied Mathematics and Mechanics/Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik*, 66(1), 37-49.
- [10] Bekkedahl, N., & Wood, L. A. (1941). Crystallization of vulcanized rubber. *Industrial & Engineering Chemistry*, 33(3), 381-384.

- [11] Besson, J. (2010). Non-linear mechanics of materials (Vol. 167). Springer.
- [12] Beurrot, S. (2012). Cristallisation sous contrainte du caoutchouc naturel en fatigue et sous sollicitation multiaxiale. Thèse de doctorat, Ecole centrale de nantes-ECN.
- [13] Bilbie, G., Guilie, J. (2009). Etude de la fissuration d'une éprouvette Pure-Shear 3D. Rapport interne MFPM.
- [14] Bo, Z., & Lagoudas, D. C. (1999). Thermomechanical modeling of polycrystalline SMAs under cyclic loading, Part IV : Modeling of minor hysteresis loops. *International Journal of Engineering Science*, 37(9), 1205-1249.
- [15] Bouvet, C., Calloch, S., & Lexcellent, C. (2004). A phenomenological model for pseudoelasticity of shape memory alloys under multiaxial proportional and nonproportional loadings. *European Journal of Mechanics-A/Solids*, 23(1), 37-61.
- [16] Brüning, K., Schneider, K., Roth, S. V., & Heinrich, G. (2012). Kinetics of Strain-Induced Crystallization in Natural Rubber Studied by WAXD : Dynamic and Impact Tensile Experiments. *Macromolecules*, 45(19), 7914-7919.
- [17] Burger, M. (2003). A framework for the construction of level set methods for shape optimization and reconstruction. *Interfaces and Free boundaries*, 5(3), 301-330.
- [18] Cadwell, S. M., Merrill, R. A., Sloman, C. M., & Yost, F. L. (1940). Dynamic fatigue life of rubber. *Industrial & Engineering Chemistry Analytical Edition*, 12(1), 19-23.
- [19] Candau, N., Chazeau, L., Chenal, J. M., Gauthier, C., Ferreira, J., Munch, E., & Rochas, C. (2012). Characteristic time of strain induced crystallization of crosslinked natural rubber. *Polymer*, 53(13), 2540-2543.
- [20] Candau, Nicolas (2014). Compréhension des mécanismes de cristallisation sous tension des élastomères en conditions quasi-statiques et dynamiques. Thèse de doctorat, INSA de Lyon.
- [21] Candau, Nicolas, Laghmach, Rabia, Chazeau, Laurent, Chenal, Jean-Marc, Gauthier, Catherine, Biben, Thierry, Munch, Etienne. Strain induced crystallization of natural rubber and crosslink densities heterogeneities. *Macromolecules*, 2014 "in revision".
- [22] Capasso, V. (Ed.). (2003). *Mathematical Modelling for Polymer Processing : Polymerization, Crystallization, Manufacturing (Vol. 2)*. Springer.
- [23] Chen, C. R., Kolednik, O., Scheider, I., Siegmund, T., Tatschl, A., & Fischer, F. D. (2003). On the determination of the cohesive zone parameters for the modeling of micro-ductile crack growth in thick specimens*. *International journal of fracture*, 120(3), 517-536.

-
- [24] Chenal, J. M., Gauthier, C., Chazeau, L., Guy, L., & Bomal, Y. (2007). Parameters governing strain induced crystallization in filled natural rubber. *Polymer*, 48(23), 6893-6901.
- [25] Chenal, J. M., Chazeau, L., Guy, L., Bomal, Y., & Gauthier, C. (2007). Molecular weight between physical entanglements in natural rubber : A critical parameter during strain-induced crystallization. *Polymer*, 48(4), 1042-1046.
- [26] Chiaruttini, V., Feyel, F., Chaboche, J.L. (2010). A robust meshing algorithm for complex 3D crack growth simulation, ECCM 2010.
- [27] Chiaruttini, V., Feyel, F., Rannou, J. and Guilie, J. (2011). An hybrid optimal approach for crack propagation : mixing conform remeshing and crack front enrichment. XFEM 2011 29th June - 1st July 2011, Cardiff University, UK ECCOMAS / IACM Special Interest Conference.
- [28] Chiaruttini, V., Guilie, J., Riolo, V. (2013). Fast and efficient stress intensity factors computations for 3D cracked structures Application to unstructured conform meshes or XFEM discretizations. In preparation.
- [29] Chiaruttini, V., Guilie, J. Fast and efficient stress intensity factors computations for 3D cracked structures Application to unstructured conform meshes or XFEM discretizations. In preparation.
- [30] Choi, I. S., & Roland, C. M. (1997). Strain-crystallization of guayule and hevea rubbers. *Rubber chemistry and technology*, 70(2), 202-210.
- [31] Ciarlet, P. G. (1988). *Mathematical Elasticity*, volume I. North-Holland, Amsterdam.
- [32] Cochelin, B., Damil, N., & Potier-Ferry, M. (2007). *Méthode asymptotique numérique*.
- [33] Cohen, A. (1991). A Padé approximant to the inverse Langevin function. *Rheologica Acta*, 30(3), 270-273.
- [34] Debruyne, G. (1995). An arbitrary Lagrangian description of 2D and 3D cracked structures. *Nuclear engineering and design*, 158(2), 285-294.
- [35] Delfour, M. C., & Zolésio, J. P. (2011). *Shapes and geometries : metrics, analysis, differential calculus, and optimization (Vol. 22)*. Siam.
- [36] de Gournay, F. (2006). Velocity extension for the level-set method and multiple eigenvalues in shape optimization. *SIAM journal on control and optimization*, 45(1), 343-367.
- [37] Denzer, R. (2006). *Computational Configurational Mechanics*. Thesis Kaiserslautern.
- [38] DeRose, T. D., & Barsky, B. A. (1988). Geometric continuity, shape parameters, and geometric constructions for Catmull-Rom splines. *ACM Transactions on Graphics (TOG)*, 7(1), 1-41.

- [39] Destuynder, P., Djaoua, P. E. M., Chesnay, L., & Nedelec, J. C. (1981). Sur une interprétation mathématique de l'intégrale de Rice en théorie de la rupture fragile. *Mathematical Methods in the Applied Sciences*, 3(1), 70-87.
- [40] Djaoua, M. (1983). *Analyse mathématique et numérique de quelques problèmes en mécanique de la rupture* (Doctoral dissertation).
- [41] Doi, M. (1988). *The theory of polymer dynamics* (Vol. 73). oxford university press.
- [42] Dolbow, J. E., & Gosz, M. (2002). On the computation of mixed-mode stress intensity factors in functionally graded materials. *International Journal of Solids and Structures*, 39(9), 2557-2574.
- [43] Dunning, D. J., & Pennells, P. J. (1967). Effect of Strain on Rate of Crystallization of Natural Rubber. *Rubber Chemistry and Technology*, 40(5), 1381-1393.
- [44] Ehret, A. E., Itskov, M., & Schmid, H. (2010). Numerical integration on the sphere and its effect on the material symmetry of constitutive equations—a comparative study. *International journal for numerical methods in engineering*, 81(2), 189-206.
- [45] Erdogan, F., & Wu, B. H. (1996). Crack problems in FGM layers under thermal stresses. *Journal of Thermal stresses*, 19(3), 237-265.
- [46] Erdogan, F., & Wu, B. H. (1997). The surface crack problem for a plate with functionally graded properties. *Journal of Applied Mechanics*, 64(3), 449-456.
- [47] Fliege, J., & Maier, U. (1999). The distribution of points on the sphere and corresponding cubature formulae. *IMA Journal of Numerical Analysis*, 19(2), 317-334.
- [48] Flory, P. J. (1961). Thermodynamic relations for high elastic materials. *Transactions of the Faraday Society*, 57, 829-838.
- [49] Gabrielle, B., Guy, L., Albouy, P. A., Vanel, L., Long, D. R., & Sotta, P. (2011). Effect of Tear Rotation on Ultimate Strength in Reinforced Natural Rubber. *Macromolecules*, 44(17), 7006-7015.
- [50] GABRIELLE, B. (2012). *Etude du renforcement et de la résistance à la propagation d'entaille dans les élastomères renforcés* (Doctoral dissertation, UNIVERSITE CLAUDE BERNARD LYON).
- [51] Gent, A. N. (1954). Crystallization and the relaxation of stress in stretched natural rubber vulcanizates. *Transactions of the Faraday Society*, 50, 521-533.
- [52] Gloria, A., Le Tallec, P., & Vidrascu, M. (2012). Comparison of network-based models for rubber.

-
- [53] Göktepe, S. (2007). Micro-macro approaches to rubbery and glassy polymers : Predictive micromechanically-based models and simulations. Dissertation, Report-No. I-20. Institute of Applied Mechanics (CE), Chair I, University of Stuttgart.
- [54] Green, A. E., & Naghdi, P. M. (1965). A general theory of an elastic-plastic continuum. *Archive for rational mechanics and analysis*, 18(4), 251-281.
- [55] Guélin, P. (1980). Remarques sur l'hystérésis mécanique. *Journal de Mécanique Théorique et Appliquée*. 19 (2) : 217–247.
- [56] Guilie, J. (2012). Mémoire interne dans un caoutchouc cristallisant sous contrainte. Rapport interne MFPM
- [57] Guilie, J., Le Tallec, P. (2012). On the coupling between shape variation and material dissipation for computation of the crack driving force. ECCOMAS.
- [58] Guilie, J. (2013). Etude bibliographique et loi de comportement à mémoire interne ponctuelle. Rapport interne Michelin.
- [59] Hamed, G. R., Kim, H. J., & Gent, A. N. (1996). Cut growth in vulcanizates of natural rubber, cis-polybutadiene, and a 50/50 blend during single and repeated extension. *Rubber chemistry and technology*, 69(5), 807-818.
- [60] Hartl, D. J. (2013). Modeling of shape memory alloys considering rate-independent and rate-dependent irrecoverable strains (Doctoral dissertation).
- [61] Hart-Smith, L. J. (1966). Elasticity parameters for finite deformations of rubber-like materials. *Zeitschrift für angewandte Mathematik und Physik ZAMP*, 17(5), 608-626.
- [62] Healey, A. M., Hendra, P. J., & West, Y. D. (1996). A Fourier-transform Raman study of the strain-induced crystallization and cold crystallization of natural rubber. *Polymer*, 37(18), 4009-4024.
- [63] Heo, S., & Xu, Y. (2001). Constructing fully symmetric cubature formulae for the sphere. *Mathematics of computation*, 70(233), 269-279.
- [64] Hesse, K., Sloan, I. H., & Womersley, R. S. (2010). Numerical integration on the sphere. *Handbook of Geomathematics*, 2, 1187-1220.
- [65] Hill, R. (1958). A general theory of uniqueness and stability in elastic-plastic solids. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 6(3), 236-249.
- [66] Hughes, T. J. (1994). *Mathematical foundations of elasticity*. Dover Publications. com.

- [67] Hui, C. Y., Jagota, A., Bennison, S. J., & Londono, J. D. (2003). Crack blunting and the strength of soft elastic solids. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 459(2034), 1489-1516.
- [68] Huneau, B. (2011). Strain-induced crystallization of natural rubber : a review of x-ray diffraction investigations. *Rubber chemistry and technology*, 84(3), 425-452.
- [69] Kaliske, M., & Heinrich, G. (1999). An extended tube-model for rubber elasticity : statistical-mechanical theory and finite element implementation. *Rubber Chemistry and Technology*, 72(4), 602-632.
- [70] Katz, J. R., & Bing, K. (1925). Is raw rubber partially crystallized?. *Zeit. Ang. Chemie*, 38, 439-441.
- [71] Kawai, H. (1975). Dynamic X-ray diffraction technique for measuring rheo-optical properties of crystalline polymeric materials. *Rheologica Acta*, 14(1), 27-47.
- [72] Khludnev, A. M., Kovtunenkov, V. A., & Tani, A. (2010). On the topological derivative due to kink of a crack with non-penetration. Anti-plane model. *Journal de mathématiques pures et appliquées*, 94(6), 571-596.
- [73] Krishnan, V. R., Hui, C. Y., & Long, R. (2008). Finite strain crack tip fields in soft incompressible elastic solids. *Langmuir*, 24(24), 14245-14253.
- [74] Kroon, M. (2010). A constitutive model for strain-crystallising Rubber-like materials. *Mechanics of Materials*, 42(9), 873-885.
- [75] Kwon, Y. W., & Bang, H. (2000). *The finite element method using MATLAB*. CRC press.
- [76] Laghmach, R., Biben, T., Chazeau, L., & Chenal, J. M. (2013). Strain-induced crystallization in natural rubber : A model for the microstructural evolution. *Constitutive Models for Rubber VIII*, 473.
- [77] Lagoudas, D. C. (Ed.). (2008). *Shape memory alloys : modeling and engineering applications*. Springer.
- [78] Lake, G. J. (1972). Mechanical fatigue of rubber. *Rubber Chemistry and Technology*, 45(1), 309-328.
- [79] Lalegname, A., Sändig, A. M., & Sewell, G. (2008). Analytical and numerical treatment of a dynamic crack model. *International journal of fracture*, 152(2), 97-125.
- [80] Laporte, E., & Le Tallec, P. (Eds.). (2003). *Numerical methods in sensitivity analysis and shape optimization*. Springer.

-
- [81] Lee, D. J., & Donovan, J. A. (1987). Microstructural changes in the crack tip region of carbon-black-filled natural rubber. *Rubber chemistry and technology*, 60(5), 910-923.
- [82] Le Tallec, P., Rahier, C., & Kaiss, A. (1993). Three-dimensional incompressible viscoelasticity in large strains : formulation and numerical approximation. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 109(3), 233-258.
- [83] Le Tallec, P. (1994). *Handbook of Numerical Analysis*, volume 3. North Holland.
- [84] Le Tallec, P. (2009). *Modélisation et calcul des milieux continus*. Editions Polytechnique.
- [85] Lindley, P. B. (1974). Non-relaxing crack growth and fatigue in a non-crystallizing rubber. *Rubber Chemistry and Technology*, 47(5), 1253-1264.
- [86] Long, J. D., Singer, W. E., & Davey, W. P. (1934). Fiberling of Rubber-Time Lag and Its Relation to Rubber Structure. *Industrial & Engineering Chemistry*, 26(5), 543-547.
- [87] Long, R., Krishnan, V. R., & Hui, C. Y. (2011). Finite strain analysis of crack tip fields in incompressible hyperelastic solids loaded in plane stress. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 59(3), 672-695.
- [88] Luch, D., & Yeh, G. S. Y. (1972). Morphology of strain induced crystallization of natural rubber. I. Electron microscopy on uncrosslinked thin film. *Journal of Applied Physics*, 43(11), 4326-4338.
- [89] Luch, D., & Yeh, G. S. (1973). Strain-induced crystallization of natural rubber. III. Reexamination of axial stress changes during oriented crystallization of natural rubber vulcanizates. *Journal of Polymer Science : Polymer Physics Edition*, 11(3), 467-486.
- [90] Maas, S. A., Ellis, B. J., Ateshian, G. A., & Weiss, J. A. (2012). FEBio : finite elements for biomechanics. *Journal of biomechanical engineering*, 134(1).
- [91] Marchal, J. (2006). *Cristallisation des caoutchoucs chargés et non chargés sous contrainte : Effet sur les chaines amorphes* (Doctoral dissertation, Université Paris Sud-Paris XI).
- [92] Mark, H., & Susich, G. V. (1928). Ueber geregelte Mizellarstrukturen von Kautschuk. *Kolloid-Zeitschrift*, 46(1), 11-21.
- [93] Markenscoff, X., & Gupta, A. (2006). *Collected Works of JD Eshelby : The mechanics of defects & inhomogeneities*, (Solid mechanics & its applications, Vol. 133). Springer.

- [94] Mars, W. V., & Fatemi, A. (2002). A literature survey on fatigue analysis approaches for rubber. *International Journal of Fatigue*, 24(9), 949-961.
- [95] Mars, W. V., & Fatemi, A. (2003). A phenomenological model for the effect of R ratio on fatigue of strain crystallizing rubbers. *Rubber chemistry and technology*, 76(5), 1241-1258.
- [96] Maugin, G. A. (2010). *Configurational forces : thermomechanics, physics, mathematics, and numerics*. Taylor & Francis US.
- [97] Mitchell, J. C., & Meier, D. J. (1968). Rapid stress induced crystallization in natural rubber. *Journal of Polymer Science Part A2 : Polymer Physics*, 6(10), 1689-1703.
- [98] Miehe, C., Apel, N., & Lambrecht, M. (2002). Anisotropic additive plasticity in the logarithmic strain space : modular kinematic formulation and implementation based on incremental minimization principles for standard materials. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 191(47), 5383-5425.
- [99] Miehe, C., Göktepe, S., & Lulei, F. (2004). A micro-macro approach to rubber-like materials—part I : the non-affine micro-sphere model of rubber elasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 52(11), 2617-2660.
- [100] Miehe, C., Welschinger, F., & Hofacker, M. (2010). A phase field model of electromechanical fracture. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 58(10), 1716-1740.
- [101] Mistry, S. J., & Govindjee, S. A Micro-Mechanically Based Continuum Model For Strain-Induced Crystallization in Natural Rubber.
- [102] Miyamoto, Y., Yamao, H., & Sekimoto, K. (2003). Crystallization and melting of polyisoprene rubber under uniaxial deformation. *Macromolecules*, 36(17), 6462-6471.
- [103] Murat, F., & Simon, J. (1976). Etude de problèmes d'optimal design. In *Optimization Techniques Modeling and Optimization in the Service of Man Part 2* (pp. 54-62). Springer Berlin Heidelberg.
- [104] Mzabi, S. (2010). *Caractérisation et analyse des mécanismes de fracture en fatigue des élastomères chargés* (Doctoral dissertation, Université Pierre et Marie Curie-Paris VI).
- [105] Nagtegaal, J. C., & De Jong, J. E. (1982). *Plasticity of metals at finite strain : theory, experiment and computation*, 65.
- [106] Nemat-Nasser, S. (1982). On finite deformation elasto-plasticity. *International Journal of Solids and Structures*, 18(10), 857-872.
- [107] Nguyen, Q. S. (1999). *Stabilité et mécanique non linéaire*. Hermès-Lavoisier.

-
- [108] Nguyen, Q. S. (2000). Stability and nonlinear solid mechanics.
- [109] Nguyen, S. T. (2010). Propagation de fissures et endommagement par microfissures des matériaux viscoélastiques linéaires non vieillissants (Doctoral dissertation, Université Paris-Est).
- [110] Nguyen, S. T., Dormieux, L., Le Pape, Y., & Sanahuja, J. (2010). Crack propagation in viscoelastic structures : Theoretical and numerical analyses. *Computational Materials Science*, 50(1), 83-91.
- [111] Ogden, R. W. (1972). Large deformation isotropic elasticity-on the correlation of theory and experiment for incompressible rubberlike solids. *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences*, 326(1567), 565-584.
- [112] Oono, R., Miyasaka, K., & Ishikawa, K. (1973). Crystallization kinetics of biaxially stretched natural rubber. *Journal of Polymer Science : Polymer Physics Edition*, 11(8), 1477-1488.
- [113] OUSSET, Y., & ROUDOLFF, F. (1992). Un modèle limite de bande mince présentant deux fissures longitudinales. *Comptes rendus de l'Académie des sciences. Série 2, Mécanique, Physique, Chimie, Sciences de l'univers, Sciences de la Terre*, 314(1), 7-12.
- [114] Papadopoulos, I. C., Thomas, A. G., & Busfield, J. J. C. (2008). Rate transitions in the fatigue crack growth of elastomers. *Journal of Applied Polymer Science*, 109(3), 1900-1910.
- [115] Pereira, C. E. L., & Bittencourt, M. L. (2008). Topological sensitivity analysis in large deformation problems. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 37(2), 149-163.
- [116] Pradeilles Duval, R. M. Evolution des systèmes avec frontières de discontinuités mobiles : application au délaminage (Doctoral dissertation).
- [117] Poompradub, S., Tosaka, M., Kohjiya, S., Ikeda, Y., Toki, S., Sics, I., & Hsiao, B. S. (2004). Lattice deformation of strain-induced crystallites in carbon-filled natural rubber. *Chemistry Letters*, 33(3), 220-221.
- [118] Poompradub, S., Tosaka, M., Kohjiya, S., Ikeda, Y., Toki, S., Sics, I., & Hsiao, B. S. (2005). Mechanism of strain-induced crystallization in filled and unfilled natural rubber vulcanizates. *Journal of applied physics*, 97(10), 103529-103529.
- [119] Poshtan, E. A., Dargazany, R., & Itskov, M. (2011). Modeling of strain induced crystallization in natural rubbers. *PAMM*, 11(1), 423-424.
- [120] Press, WH ; Teukolsky, SA ; Vetterling, WT ; Flannery, BP (2007), "Section 10.2. Golden Section Search in One Dimension", *Numerical Recipes : The Art of Scientific Computing (3rd ed.)*, New York : Cambridge University Press, ISBN 978-0-521-88068-8.

- [121] Puglisi, G., & Truskinovsky, L. (2002). A mechanism of transformational plasticity. *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, 14(5), 437-457.
- [122] Rault, J., Marchal, J., Judeinstein, P., & Albouy, P. A. (2006). Stress-induced crystallization and reinforcement in filled natural rubbers : 2H NMR study. *Macromolecules*, 39(24), 8356-8368.
- [123] Rivlin, R. S. (1948). Large elastic deformations of isotropic materials. II. Some uniqueness theorems for pure, homogeneous deformation. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, 240(822), 491-508.
- [124] Rivlin, R. S., & Saunders, D. W. (1951). Large elastic deformations of isotropic materials. VII. Experiments on the deformation of rubber. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, 243(865), 251-288.
- [125] Rivlin, R. S., & Thomas, A. G. (1953). Rupture of rubber. I. Characteristic energy for tearing. *Journal of Polymer Science*, 10(3), 291-318.
- [126] Rouvière, J.-Y., Bennani, A., Pachoutinsky, D., Besson, J. & Cantournet, S. (2007). *Constitutive Models for Rubber V*, edited by A. Boukamel, L. Laiarinandrasana, S. Méo and E. Verron, pp. 323-326. London : Taylor and Francis.
- [127] Rubinstein, R., & Atluri, S. N. (1983). Objectivity of incremental constitutive relations over finite time steps in computational finite deformation analyses. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 36(3), 277-290.
- [128] Rublon, P. (2013). Etude expérimentale multi-échelle de la propagation de fissure de fatigue dans le caoutchouc naturel. Thèse de doctorat, Ecole centrale de nantes-ECN.
- [129] Rublon, P., Huneau, B., Saintier, N., Beurrot, S., Leygue, A., Verron, E., Mocuta, C., Thiaudière, D., & Berghezan, D. (2012). In situ synchrotron wide-angle X-ray diffraction investigation of fatigue cracks in natural rubber. *Journal of synchrotron radiation*, 20(1), 105-109.
- [130] Rublon, P., Huneau, B., Verron, E., Saintier, N. & Berghezan, D. (2013). Effect of strain-induced crystallization on fatigue crack growth resistance of natural rubber. *Constitutive Models for Rubber VIII*, 349.
- [131] Runesson, K., Larsson, F., & Steinmann, P. (2009). On energetic changes due to configurational motion of standard continua. *International Journal of Solids and Structures*, 46(6), 1464-1475.
- [132] Saintier, N., Cailletaud, G., & Piques, R. (2011). Cyclic loadings and crystallization of natural rubber : An explanation of fatigue crack propagation reinforcement under a positive loading ratio. *Materials Science and Engineering : A*, 528(3), 1078-1086.

-
- [133] Salençon, J. (2005). Mécanique des milieux continus : Tome 1 : Concepts généraux (Vol. 1). Editions Ecole Polytechnique.
- [134] Samaca Martinez, J. R., Le Cam, J. B., Balandraud, X., Toussaint, E., & Caillard, J. (2013). Mechanisms of deformation in crystallizable natural rubber. Part 1 : Thermal characterization. *Polymer*.
- [135] Simha, N. K., Fischer, F. D., Shan, G. X., Chen, C. R., & Kolednik, O. (2008). J -integral and crack driving force in elastic–plastic materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 56(9), 2876-2895.
- [136] Simo, J. C., & Pister, K. S. (1984). Remarks on rate constitutive equations for finite deformation problems : computational implications. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 46(2), 201-215.
- [137] Simo, J. C. (1985). On the computational significance of the intermediate configuration and hyperelastic stress relations in finite deformation elastoplasticity. *Mechanics of Materials*, 4(3), 439-451.
- [138] Simo, J. C., & Ortiz, M. (1985). A unified approach to finite deformation elastoplastic analysis based on the use of hyperelastic constitutive equations. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 49(2), 221-245.
- [139] Simo, J. C. (1988). A framework for finite strain elastoplasticity based on maximum plastic dissipation and the multiplicative decomposition : Part I. Continuum formulation. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 66(2), 199-219.
- [140] Simo, J. C., & Hughes, T. J. R. *Computational inelasticity*. 1998. New York.
- [141] Sobotka, J. C. (2010). Steady crack growth through ductile metals : Computational studies.
- [142] Sokolowski, J., & Zochowski, A. (1999). On the topological derivative in shape optimization. *SIAM journal on control and optimization*, 37(4), 1251-1272.
- [143] Sokolowski, J., & Zochowski, A. (1999). Topological derivatives for elliptic problems. *Inverse problems*, 15(1), 123.
- [144] Sotta, P., Deloche, B., Herz, J., Lapp, A., Durand, D., & Rabadeux, J. C. (1987). Evidence for short-range orientational couplings between chain segments in strained rubbers : a deuterium magnetic resonance investigation. *Macromolecules*, 20(11), 2769-2774.
- [145] Stolz, C. (2009). Milieux continus en transformations finies. Editions Polytechnique.

- [146] Suquet, P. Rupture et plasticité Pierre Suquet, Ecole polytechnique (France). Département de Mécanique.
- [147] Thomas, A. (1994). The development of fracture mechanics for elastomers. *Rubber Chemistry and Technology*, 67 :G50–G60.
- [148] Tillberg, J., Larsson, F., & Runesson, K. (2010). On the role of material dissipation for the crack-driving force. *International Journal of Plasticity*, 26(7), 992-1012.
- [149] Trabelsi, S. (2002). Etude statique et dynamique de la cristallisation des élastomères sous tension. Paris 11, Orsay.
- [150] Trabelsi, S., Albouy, P. A., & Rault, J. (2002). Stress-induced crystallization around a crack tip in natural rubber. *Macromolecules*, 35(27), 10054-10061.
- [151] Trabelsi, S., Albouy, P. A., & Rault, J. (2003). Crystallization and melting processes in vulcanized stretched natural rubber. *Macromolecules*, 36(20), 7624-7639.
- [152] Trabelsi, S., Albouy, P. A., & Rault, J. (2003). Effective local deformation in stretched filled rubber. *Macromolecules*, 36(24), 9093-9099.
- [153] Treloar, L. R. G. (1943). The elasticity of a network of long-chain molecules—II. *Transactions of the Faraday Society*, 39, 241-246.
- [154] Toki, S., Sics, I., Ran, S., Liu, L., & Hsiao, B. S. (2003). Molecular orientation and structural development in vulcanized polyisoprene rubbers during uniaxial deformation by in situ synchrotron X-ray diffraction. *Polymer*, 44(19), 6003-6011.
- [155] Tosaka, M., Kohjiya, S., Murakami, S., Poompradub, S., Ikeda, Y., Toki, S., ... & Hsiao, B. S. (2004). Effect of network-chain length on strain-induced crystallization of NR and IR vulcanizates. *Rubber chemistry and technology*, 77(4), 711-723.
- [156] Tosaka, M., Murakami, S., Poompradub, S., Kohjiya, S., Ikeda, Y., Toki, S., ... & Hsiao, B. S. (2004). Orientation and crystallization of natural rubber network as revealed by WAXD using synchrotron radiation. *Macromolecules*, 37(9), 3299-3309.
- [157] Tosaka, M., Murakami, S., Poompradub, S., Kohjiya, S., Ikeda, Y., Toki, S., ... & Hsiao, B. S. (2004). Orientation and crystallization of natural rubber network as revealed by WAXD using synchrotron radiation. *Macromolecules*, 37(9), 3299-3309.
- [158] Tosaka, M., Kawakami, D., Senoo, K., Kohjiya, S., Ikeda, Y., Toki, S., & Hsiao, B. S. (2006). Crystallization and stress relaxation in highly stretched samples of natural rubber and its synthetic analogue. *Macromolecules*, 39(15), 5100-5105.

- [159] Tosaka, M. (2007). Strain-induced crystallization of crosslinked natural rubber as revealed by X-ray diffraction using synchrotron radiation. *Polymer journal*, 39(12), 1207-1220.
- [160] Tosaka, M. (2009). A route for the thermodynamic description of strain-induced crystallization in sulfur-cured natural rubber. *Macromolecules*, 42(16), 6166-6174.
- [161] Tosaka, M., Kohjiya, S., Ikeda, Y., Toki, S., & Hsiao, B. S. (2010). Molecular orientation and stress relaxation during strain-induced crystallization of vulcanized natural rubber. *Polymer journal*, 42(6), 474-481.
- [162] Tosaka, M., Senoo, K., Sato, K., Noda, M., & Ohta, N. (2012). Detection of fast and slow crystallization processes in instantaneously-strained samples of *cis*-1,4-polyisoprene. *Polymer*, 53(3), 864-872.
- [163] Walters, M. C., Paulino, G. H., & Dodds Jr, R. H. (2004). Stress-intensity factors for surface cracks in functionally graded materials under mode-I thermomechanical loading. *International Journal of Solids and Structures*, 41(3), 1081-1118.
- [164] [~jburkardt/f_src/sphere_lebedev_rule/sphere_lebedev_rule.html](#)
- [165] Zimmermann, D. (2008). Material forces in finite inelasticity and structural dynamics : topology optimization, mesh refinement and fracture.