

**Écriture de lois de comportement mécanique en grandes
transformations avec le générateur de code `mfront`**
T. Helfer, C. Ling
2014

RÉSUMÉ

Nous décrivons dans cette note l'utilisation de `mfront` pour écrire des lois de comportement en grandes transformations.

Nous commençons par introduire les principaux concepts cinématiques et sthéniques nécessaires à l'exposé.

S O M M A I R E

1 INTRODUCTION	4
2 NOTIONS GÉNÉRALES	6
2.1 TRANSFORMATION, GRADIENT DE LA TRANSFORMATION, TENSEURS DE DÉFORMATIONS, TAUX DE DÉFORMATION	6
2.1.1 <i>Configurations intermédiaires</i>	7
2.1.2 <i>Décompositions polaires de la transformation</i>	7
2.1.3 <i>Tenseurs de déformation</i>	9
2.1.4 <i>Vitesses, taux de déformation et de rotation</i>	10
2.2 ÉQUILIBRE MÉCANIQUE, CONTRAINE DE CAUCHY, PUissance MÉCANIQUE ET CONTRAINTES DÉFINIES PAR DUALITÉ	11
2.2.1 <i>Équilibre mécanique, contrainte de CAUCHY</i>	11
2.2.2 <i>Puissance mécanique</i>	11
2.2.3 <i>Contraintes définies par dualité</i>	12
3 LOIS EN GRANDES TRANSFORMATIONS	13
3.1 APPROCHES LAGRANGIENNES	13
3.1.1 <i>Lois lagrangiennes hyperélastiques</i>	14
3.1.2 <i>Grandes rotations, petites déformations</i>	15
3.1.3 <i>Les déformations logarithmiques</i>	16
4 LA DÉCOMPOSITION FEFp	17
4.1 ASPECTS CINÉMATIQUES	17
4.2 LE TENSEUR DE MANDEL	18
4.3 THERMODYNAMIQUE	19
4.4 APPLICATION À LA PLASTICITÉ CRISTALLINE	20
RÉFÉRENCES	21
LISTE DES TABLEAUX	22
LISTE DES FIGURES	23
ANNEXE A DESCRIPTION DE LA DILATATION THERMIQUE DES CORPS	24
ANNEXE A.1 CAS DES PETITES DÉFORMATIONS	24
A.1.1 <i>Décomposition multiplicative de la transformation dans le cas élastique</i>	25
A.1.2 <i>Cas des déformations de GREEN-LAGRANGE dans le cas isotrope</i>	26
A.1.3 <i>Application aux déformations logarithmiques dans le cas isotrope</i>	27
A.1.4 <i>Application aux déformations logarithmiques dans le cas isotrope, en l'absence d'autres phénomènes</i>	27
ANNEXE B AUTRES REPRÉSENTATIONS DE LA DILATATION THERMIQUE	29
ANNEXE B.1 COEFFICIENT DE DILATATION VOLUMIQUE	29
ANNEXE B.2 COEFFICIENT DE DILATATION LINÉIQUE « INSTANTANÉ »	29

ANNEXE C	REPRÉSENTATION VECTORIELLE DES TENSEURS D'ORDRE 2 NON SYMÉTRIQUES	30
ANNEXE D	DÉRIVATION DE LA MULTIPLICATION MATRICIELLE	30

1 INTRODUCTION

Les transformations finies sont considérées comme difficiles d'accès, en particulier par les étudiants et les ingénieurs en mécanique. Pour comprendre une partie leur malaise, nous pouvons reprendre la métaphore de François Sidoroff, dont l'influence sur le sujet a été énorme [Sidoroff 82] :

Comme dans une bonne recette de cuisine, il y a dans toute théorie en grandes transformations deux composantes : des ingrédients de base, [c'est à dire] les hypothèses physiques ou mécaniques qui sont le plus souvent voisines de celles faites en petites déformations, et une sauce, [c'est à dire] le formalisme traduisant ces hypothèses de manière convenable. Ce formalisme, très technique et géométrique, constitue pour le profane un obstacle majeur à la compréhension...

Cette « sauce » est précisément ce que nous avons qualifié de « magique » au paragraphe précédent. Nous voyons là toute la difficulté des grandes transformations : l'ingénieur - le profane de la métaphore - se retrouve à manipuler des concepts presque familiers mais dont la définition précise lui échappe ou lui est cachée.

Notons que les hypothèses physiques vraiment importantes, les ingrédients de base, sont en fait en nombre réduit :

- on veut garantir que les écoulements plastiques et viscoplastiques se font de manière isochore ;
- on veut garantir que les lois sont indépendantes de l'observateur et qu'une rotation d'ensemble n'induit pas de contraintes : c'est la notion d'objectivité ;
- on veut être cohérent d'un point de vue thermodynamique ;

Dans l'idéal, on souhaiterait également :

- pouvoir garantir que lorsque le comportement du matériau est réversible, il n'y a pas de dissipation d'énergie : on parle d'hyperélasticité ;
- pouvoir écrire nos lois de comportement comme en transformations infinitésimales, cela signifie pouvoir décomposer de manière additive la déformation (reste à préciser laquelle) en une partie élastique et une partie plastique ;
- pouvoir traiter des matériaux anisotropes ;
- pouvoir décrire des dilatations libres, comme la dilatation thermique, des gonflements dus à l'irradiation, ou des changements de phases ;
- pouvoir traiter des comportements complexes, par exemple incluant des écrouissages cinématiques ;

Nous verrons différentes sauces, plus ou moins élaborées que nous pourrons juger à l'aune de ces critères.

Au lecteur pressé, donnons déjà une des conclusions : l'approche la plus adaptée pour décrire des comportements macroscopiques est aujourd'hui celle des déformations logarithmiques, introduites par Miehe en 2002 [Miehe 02]¹. Les déformations logarithmiques ont des caractéristiques qui en font, pour reprendre la métaphore de F. Sidoroff, la meilleure sauce que l'on connaisse actuellement :

- les lois s'écrivent comme en « petites perturbations », c'est à dire que l'on peut, sans état d'âme, décomposer les déformations de manière additive. Cette décomposition sera « cohérente » au sens où une déformation de trace nulle décrit un écoulement (plastique ou viscoplastique) isochore : cette propriété est la base de la formulation de la plupart des lois de comportement plastique ou viscoplastique. Une autre façon de voir les choses est dire que le formalisme des déformations logarithmiques permet de construire une loi grandes transformations en partant d'une loi écrite dans le cadre des transformations infinitésimales.
- les lois ainsi obtenues sont parfaitement valides en grandes transformations : elles sont en particulier objectives, ce qui est une des grandes difficultés des grandes transformations. Nous reviendrons sur la notion d'objectivité dans le texte ;
- pour peu que l'on se base sur une loi « petites perturbations » cohérente du point de vue thermodynamique, on obtiendra via le formalisme des déformations logarithmiques, une loi grandes transformations cohérente du point de vue thermodynamique. Ceci est dû à la construction énergétique du formalisme.

1. Nous avons appris l'existence lors de notre travail avec l'équipe Aster qui nous l'a chaudement recommandé : nous les en remercions [Bargellini 13].

- à la limite des petites perturbations, on retrouvera les mêmes résultats que la loi « petites déformations » de départ.
- le formalisme se base sur une mesure logarithmique des déformations, le tenseur de HENCKY. Ce choix est très naturel aux expérimentateurs, dans les cas des métaux notamment, qui parlent parfois de « déformation vraie ».
- il s'agit d'un formalisme portable entre les différents codes aux éléments finis (le seul ?) : il est disponible dans Aster et ZeBuLoN notamment. Dans les autres cas, Cast3M notamment, il peut être géré par mfront.

Ce formalisme se décrit en un petit paragraphe, à condition d'avoir introduit quelques notions préalables. Celles-ci sont nécessaires pour ne pas substituer à une « magie » (la stratégie par défaut de Cast3M) une autre magie (les déformations logarithmiques).

La présentation des seules déformations logarithmiques n'est cependant pas suffisante pour notre propos :

- il nous faut comprendre les diverses stratégies proposées par Cast3M.
- il nous semble dommage d'exclure la multitude des lois écrites en grandes transformations : de nombreuses lois intéressantes sont écrites sans tenter de rentrer dans le formalisme HPP.
- le formalisme des déformations logarithmiques ne permet pas de décrire tous les cas. Notamment, les lois de plasticité cristalline ne peuvent être écrites dans ce cadre pour traiter convenablement les effets dus à la rotation du réseau.

2 NOTIONS GÉNÉRALES

2.1 TRANSFORMATION, GRADIENT DE LA TRANSFORMATION, TENSEURS DE DÉFORMATIONS, TAUX DE DÉFORMATION

L'évolution de la géométrie d'un corps se traduit par l'existence d'une transformation $\vec{\phi}$ qui associe à chaque position initiale \vec{X} sa nouvelle position \vec{x} à l'instant t :

$$(1) \quad \vec{x} = \vec{\phi}(\vec{X}, t)$$

Le champ de déplacement \vec{u} est défini par la différence entre la position actuelle du point et sa position initiale :

$$\vec{u} = \vec{x} - \vec{X} = \vec{\phi}(\vec{X}) - \vec{X}$$

Le déplacement ne peut servir à caractériser la sollicitation locale du matériau : il suffit pour s'en convaincre de considérer que la sollicitation du matériau doit être la même pour deux observateurs animés d'un mouvement relatif rectiligne à vitesse uniforme. Par contre, le gradient du déplacement, qui est identique pour ces deux observateurs, est une mesure possible (de la sollicitation).

Les théories de premier gradient, les plus usuelles en mécanique, supposent que seul le gradient de la transformation \underline{F} caractérise la sollicitation locale d'un point matériel :

$$(2) \quad \underline{F} = \frac{d\vec{x}}{d\vec{X}} = \underline{\mathbf{I}} + \vec{\nabla} \vec{u}$$

Seules ces théories seront considérées dans le cadre de cette note.

Le changement de volume est caractérisé par le déterminant J de \underline{F} :

$$(3) \quad J = \det(\underline{F})$$

L'incompressibilité se traduit par la relation :

$$(4) \quad J = 1$$

La condition d'incompressibilité (4) est centrale dans nos discussions, car les écoulements plastiques et visco-plastiques sont supposés isochores.

Transports géométriques Nous renvoyons aux ouvrages de référence qui démontrent comment un segment, une surface et un volume se transforment par le gradient de la transformation [Forest 13]. Nous avons les relations suivantes :

- pour le transport d'un segment $d\vec{X}$ joignant deux points infiniment proches dans la configuration initiale :

$$(5) \quad d\vec{x} = \underline{F} \cdot d\vec{X}$$

Cette relation est évidente d'après la définition (2) de \underline{F} .

- pour le transport d'un élément de surface :

$$(6) \quad d\vec{s} = J \underline{F}^{-T} \cdot d\vec{S}$$

- pour le transport d'un élément de volume :

$$(7) \quad d\vec{v} = J dV$$

2.1.1 Configurations intermédiaires

Supposons qu'une transformation, notée $\vec{\phi}_{0 \rightarrow 2}$, puisse se faire en deux étapes :

- la première transformation, notée $\vec{\phi}_{0 \rightarrow 1}$, permet de passer de la géométrie initiale à une géométrie intermédiaire ;
- la seconde transformation, notée $\vec{\phi}_{1 \rightarrow 2}$, permet de passer de cette géométrie intermédiaire à la géométrie finale.

La transformation $\vec{\phi}_{0 \rightarrow 2}$ est la composition de ces deux transformations :

$$\vec{\phi}_{0 \rightarrow 2}(\vec{X}) = \vec{\phi}_{1 \rightarrow 2}(\vec{\phi}_{0 \rightarrow 1}(\vec{X}))$$

Par dérivation en chaîne, cette relation permet de relier les gradients de la transformation mesurée sur chacune des géométries :

$$(8) \quad \mathbf{F}_{0 \rightarrow 2} = \mathbf{F}_{1 \rightarrow 2} \cdot \mathbf{F}_{0 \rightarrow 1}$$

En pratique, le mouvement est décrit de manière incrémentale, l'équation (9) permet alors de décomposer le passage de la configuration à l'instant initial t_0 à la configuration en fin de pas de temps, à l'instant $t + \Delta t$, en passant par la configuration en début de pas, à l'instant t :

$$(9) \quad \mathbf{F}_{t_0 \rightarrow t + \Delta t} = \mathbf{F}_{t \rightarrow t + \Delta t} \cdot \mathbf{F}_{t_0 \rightarrow t}$$

2.1.2 Décompositions polaires de la transformation

La première décomposition polaire du gradient de la transformation F s'écrit :

$$(10) \quad \mathbf{F} = \mathbf{R} \cdot \mathbf{U}$$

où : — \mathbf{R} est une rotation ;
— \mathbf{U} est un tenseur symétrique défini positif décrivant l'élongation du milieu.

On montre que cette décomposition est unique [Forest 13].

En comparant les expressions (9) et (10), nous pouvons décomposer localement le mouvement en deux :

- la transformation de la géométrie initiale en une géométrie intermédiaire dilatée ;
- la rotation de cette géométrie intermédiaire.

Le tenseur \mathbf{U} étant mesuré à partir de la configuration initiale, il est dit *lagrangien*.

Une seconde décomposition polaire de la transformation existe :

$$(11) \quad \mathbf{F} = \mathbf{V} \cdot \mathbf{R}$$

où : — \mathbf{R} est une rotation ;
— \mathbf{V} est un tenseur symétrique défini positif décrivant l'élongation du milieu ;

On montre que cette décomposition est là aussi unique et que la rotation \mathbf{R} est la même que celle définie par la première décomposition (10).

Le tenseur \mathbf{V} étant mesuré à partir d'un référentiel donné par rotation \mathbf{R} , il est dit *eulérien*.

Ces deux décompositions sont illustrées en figure 1.

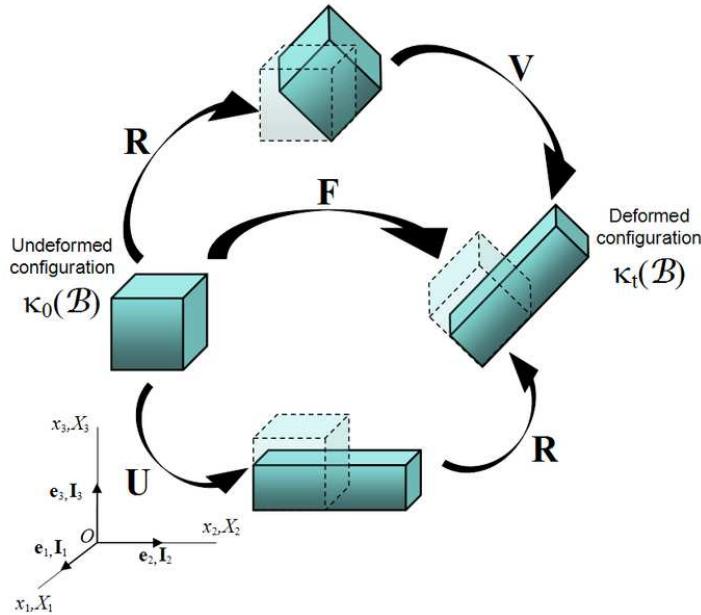


FIGURE 1 : Décompositions de la transformation en une dilatation et une rotation. Illustration de la signification physique des décompositions polaires du gradient de la transformation. Figure tirée de WIKIPÉDIA [Wikipédia 14].

Changement de volume Une rotation étant une transformation isochore, le changement de volume est lié à \underline{U} ou à \underline{V} :

$$J = \det(\underline{F}) = \det(\underline{U}) = \det(\underline{V})$$

Remarque sur les lois de comportement et l'objectivité Une rotation d'ensemble d'une structure ne doit pas générer de contraintes. Ceci signifie que la rotation \underline{R} ne doit pas intervenir dans la loi de comportement.

Ceci exprime, sous une forme quelque peu simplifiée, ce que l'on appelle le principe d'objectivité.

Il semble très simple d'écrire une loi objective. C'est le cas si l'on exprime les lois de comportement qu'en fonction de \underline{U} ou de \underline{V} . D'autres solutions existent, mais elles sont en général plus complexes.

Sur l'évolution des tenseurs eulériens Le fait que les tenseurs eulériens soient définis sur une configuration variable dans le temps est la principale difficulté à leur utilisation.

En effet, dès que l'on travaillera sur des lois de comportement, il faudra prendre garde à porter les quantités d'intérêt (contraintes, déformations, variables internes, etc...) d'un référentiel à l'autre. De notre point de vue, il nous semble que plus de 30 ans de littérature sur le sujet montre qu'il s'agit en fait d'une boîte de Pandore qui repose de manière insidieuse la question de l'objectivité des lois : il est souvent très technique de proposer des formules de transport ad hoc.

Comment donc expliquer le recours systématique aux approches eulériennes en élasto-plasticité ? Le fait est que les approches eulériennes se prêtent bien à la description des fluides et que l'image, le dogme pourrait-on dire, qui a prévalu est que l'écoulement plastique est l'écoulement d'un fluide.

Cette vision de la plasticité a favorisé l'expression de lois écrites en vitesse qui amènent aux pires difficultés : formalismes hypoélastiques, formalisme de lagrangien réactualisé, dérivées objectives, référentiels corotatifs, etc...

Ces notions, leurs complexités intrinsèques, ont fait fuir de nombreux ingénieurs. On comprendra alors pourquoi nous privilégierons les approches lagrangiennes. Cependant, les approches eulériennes imprègnent encore la plupart des codes de calcul, dont Cast3M, et c'est pour cette raison que nous en parlerons dans cette note.

2.1.3 Tenseurs de déformation

Dans le cadre des petites perturbations, il est classique de définir la déformation linéarisée $\underline{\epsilon}_{\text{HPP}}^{to}$ qui est égale à :

$$\underline{\epsilon}_{\text{HPP}}^{to} = \frac{1}{2} \left(\vec{\nabla} \vec{u} + \vec{\nabla} \vec{u}^T \right)$$

Ce tenseur n'est pas une bonne mesure des déformations puisqu'il ne filtre pas la rotation $\underline{\mathbf{R}}$. Il faut donc adopter une autre définition valide en grandes rotations. Nous verrons qu'il en existe une infinité.

Rappelons tout d'abord que les $\underline{\mathbf{U}}$ et $\underline{\mathbf{V}}$ sont diagonalisables. Pour simplifier, considérons $\underline{\mathbf{U}}$ uniquement. Soient λ_i ses valeurs propres et $\underline{\mathbf{n}}_i$ les tenseurs propres associés :

$$\underline{\mathbf{U}} = \sum_{i=1}^3 \lambda_i \underline{\mathbf{n}}_i$$

Pour toute fonction scalaire f , il est possible de définir un tenseur $f(\underline{\mathbf{U}})$ par la relation :

$$f(\underline{\mathbf{U}}) = \sum_{i=1}^3 f(\lambda_i) \underline{\mathbf{n}}_i$$

On définira un tenseur de déformation lagrangien à partir de l'application d'une fonction scalaire f possédant les caractéristiques suivantes :

- f est strictement croissante ;
- f est nulle en 0 ;
- f est dérivable en 0 et de dérivée 1 ;

au tenseur $\underline{\mathbf{U}}$. Les deux dernières propriétés visent à imposer qu'à la limite des petites perturbations, le tenseur ainsi défini tende vers $\underline{\epsilon}_{\text{HPP}}^{to}$.

Citons deux exemples classiques :

- le tenseur de GREEN-LAGRANGE $\underline{\epsilon}_{GL}^{to}$:

$$(12) \quad \underline{\epsilon}_{GL}^{to} = \frac{1}{2} (\underline{\mathbf{U}}^2 - \underline{\mathbf{I}}) = \frac{1}{2} (\underline{\mathbf{C}} - \underline{\mathbf{I}})$$

- le tenseur de HENCKY $\underline{\epsilon}_{\log}^{to}$:

$$(13) \quad \underline{\epsilon}_{\log}^{to} = \log(\underline{\mathbf{U}}) = \frac{1}{2} \log(\underline{\mathbf{C}})$$

où nous avons fait apparaître le tenseur de CAUCHY droit :

$$(14) \quad \underline{\mathbf{C}} = \underline{\mathbf{F}}^T \cdot \underline{\mathbf{F}}$$

Ce tenseur est intéressant en pratique car il évite de devoir faire la décomposition polaire de $\underline{\mathbf{F}}$.

On peut définir de la même manière une infinité de tenseurs de déformation eulériens. Le plus utilisé est le tenseur d'ALMANSI-EULEUR défini par :

$$\frac{1}{2} (\underline{\mathbf{I}} - \underline{\mathbf{V}}^{-2})$$

Du choix d'un tenseur de déformation Soulignons encore qu'aucun tenseur de déformation n'est plus physique qu'un autre : ils contiennent tous la même information physique. Le choix d'un tenseur de déformation pour exprimer la loi de comportement est essentiellement un choix d'habitude et de convenance.

Certains seront cependant plus pratiques que d'autres, pour l'expression des lois de comportement. Par exemple, le tenseur de HENCKY vérifie² :

$$(15) \quad J = \exp(\operatorname{tr} \underline{\epsilon}_{\log}^{to})$$

C'est à dire qu'un écoulement de trace nulle est isochore. Cette propriété est essentielle puisqu'elle nous permettra de décrire les comportements élasto-plastiques avec le même formalisme qu'en petites déformations : on pourra décomposer additivement la déformation logarithmique totale en une partie élastique et une partie plastique de trace nulle. Ce tenseur a de plus l'autre avantage d'être familier des expérimentateurs qui l'appellent parfois la déformation « vraie » (expression qui n'a pas de sens en réalité).

2.1.4 Vitesses, taux de déformation et de rotation

La vitesse d'un point décrit la variation de sa position entre deux instants infiniment proches. Dans une description eulérienne, la vitesse sera fonction de la position \vec{x} du point dans la configuration déformée, alors que dans une description lagrangienne, on considérera la vitesse comme une fonction de la position \vec{X} du point dans la configuration initiale.

La vitesse ne peut pas intervenir pour décrire les variations de sollicitation d'un matériau, pour les mêmes raisons que le déplacement ne peut intervenir pour décrire la sollicitation : seul le gradient de ces quantités doit intervenir. Désignons par \underline{L} le gradient de la vitesse par rapport à \vec{x} :

$$(16) \quad \underline{L} = \frac{\partial \vec{x}}{\partial \vec{x}}$$

Le gradient de la vitesse \underline{L} peut être relié à la dérivée temporelle du gradient de la transformation $\dot{\underline{F}}$. Pour cela, considérons l'évolution d'un segment $d\vec{x}$ joignant deux points infiniment proches dans la configuration actuelle. D'après l'équation (16), nous avons :

$$d\vec{x} = \underline{L} \cdot d\vec{x}$$

Par dérivation par rapport au temps de l'équation (5), nous avons par ailleurs :

$$d\vec{x} = \dot{\underline{F}} \cdot d\vec{X} = \dot{\underline{F}} \cdot \underline{F}^{-1} \cdot d\vec{x}$$

Nous déduisons des deux équations précédentes l'égalité suivante :

$$(17) \quad \underline{L} = \dot{\underline{F}} \cdot \underline{F}^{-1}$$

Le tenseur \underline{L} est classiquement décomposé en partie symétrique \underline{D} et anti-symétrique \underline{w} :

$$(18) \quad \begin{cases} \underline{D} = \frac{1}{2} (\underline{L} + \underline{L}^T) \\ \underline{w} = \frac{1}{2} (\underline{L} - \underline{L}^T) \end{cases}$$

2. Afin d'obtenir le résultat (15), considérons les trois valeurs propres λ_i de \underline{U} . J est égal au produit des λ_i . Nous avons alors :

$$\operatorname{tr} \underline{\epsilon}_{\log}^{to} = \sum_{i=1}^3 \log(\lambda_i) = \log \left(\prod_{i=1}^3 \lambda_i \right) = \log(J)$$

Le tenseur $\underline{\mathbf{D}}$ est appelé *taux de déformation* du matériau, tandis que $\underline{\mathbf{w}}$ est le *taux de rotation*.

Pour justifier la définition de $\underline{\mathbf{D}}$, regardons comment évolue la longueur d'un segment infinitésimal $d\vec{x}$:

$$\frac{d}{dt} (d\vec{x} \cdot d\vec{x}) = d\vec{x} \cdot d\vec{x} + d\vec{x} \cdot d\vec{x} = d\vec{x} \cdot \underline{\mathbf{L}}^T \cdot d\vec{x} + d\vec{x} \cdot \underline{\mathbf{L}} \cdot d\vec{x} = 2 d\vec{x} \cdot \underline{\mathbf{D}} \cdot d\vec{x}$$

Changement de volume La formule de dérivation du déterminant s'écrit [Petersen 08] :

$$\frac{dJ}{dt} = \frac{d}{dt} \det(F) = \det(F) \operatorname{tr} \left(\dot{\underline{\mathbf{F}}} \cdot \underline{\mathbf{F}}^{-1} \right) = J \operatorname{tr} \underline{\mathbf{D}}$$

Ainsi, un écoulement dont le taux de déformation est de trace nulle est isochore.

Lien entre $\underline{\mathbf{D}}$ et $\dot{\underline{\mathbf{C}}}$ Nous avons la relation suivante :

$$(19) \quad \underline{\mathbf{D}} = \underline{\mathbf{F}}^{-T} \cdot \underline{\dot{\epsilon}_{GL}} \cdot \underline{\mathbf{F}}^{-1} = \frac{1}{2} \underline{\mathbf{F}}^{-T} \cdot \dot{\underline{\mathbf{C}}} \cdot \underline{\mathbf{F}}^{-1}$$

Cette relation s'obtient par dérivation de la définition (14) de $\underline{\mathbf{C}}$:

$$\underline{\mathbf{F}}^{-T} \cdot \dot{\underline{\mathbf{C}}} \cdot \underline{\mathbf{F}}^{-1} = \underline{\mathbf{F}}^{-T} \cdot \left(\dot{\underline{\mathbf{F}}}^T \cdot \underline{\mathbf{F}} + \underline{\mathbf{F}}^T \cdot \dot{\underline{\mathbf{F}}} \right) \cdot \underline{\mathbf{F}}^{-1} = \underline{\mathbf{F}}^{-T} \dot{\underline{\mathbf{F}}}^T + \dot{\underline{\mathbf{F}}} \cdot \underline{\mathbf{F}}^{-1} = 2 \underline{\mathbf{D}}$$

2.2 ÉQUILIBRE MÉCANIQUE, CONTRAINTE DE CAUCHY, PUISSANCE MÉCANIQUE ET CONTRAINTES DÉFINIES PAR DUALITÉ

2.2.1 Équilibre mécanique, contrainte de CAUCHY

La contrainte de CAUCHY $\underline{\sigma}$ est la contrainte associant à une surface unitaire $d\vec{s}$ de la configuration déformée la force $d\vec{f}$ agissant sur cette surface :

$$d\vec{f} = \underline{\sigma} \cdot d\vec{s}$$

De ce fait, la contrainte de CAUCHY est souvent appelée contrainte « vraie » et se calcule, dans un essai de traction, en rapportant la force mesurée à la section actuelle de l'échantillon. Il s'agit d'un tenseur symétrique en l'absence de moments magnétiques.

En l'absence de forces volumiques, l'équilibre mécanique de la structure s'écrit, en chaque point de la géométrie déformée :

$$\operatorname{div} \underline{\sigma} = 0$$

où l'opérateur divergence se calcule sur la géométrie actuelle.

2.2.2 Puissance mécanique

On montre que la puissance mécanique \mathcal{P} est égale à :

$$\mathcal{P} = \int_{\Omega_t} \underline{\sigma} : \underline{\mathbf{D}} \, d\mathbf{v}$$

Dans la suite, nous nous intéresserons principalement aux approches lagrangiennes. La dissipation s'écrit, dans la configuration initiale :

$$\mathcal{P} = \int_{\Omega_0} J \underline{\sigma} : \underline{\mathbf{D}} \, dV$$

Contrainte de KIRCHHOFF La quantité $\underline{\sigma} = J \underline{\varepsilon}$ définit un nouveau tenseur des contraintes, la contrainte de KIRCHHOFF.

2.2.3 Contraintes définies par dualité

Une idée extrêmement puissante est de relier à un taux de déformation une contrainte par dualité énergétique. Plus précisément, soit $\underline{\varepsilon}$ un tenseur de déformation, sa contrainte duale $\underline{S}_\varepsilon$ sera telle que :

$$(20) \quad p_{v_0} = \tau : \underline{D} = \underline{S}_\varepsilon : \dot{\underline{\varepsilon}}$$

où p_{v_0} est la densité de puissance mécanique dans la configuration de référence.

Puisqu'il existe infinité de tenseur de déformation, il existe une infinité de tenseur de contrainte. Par dualité, puisque tous les tenseurs de déformation tendent vers la même limite pour des transformations infinitésimales, tous ces tenseurs de déformations tendront vers la même limite.

Nous verrons différentes applications de ce principe. Pour l'instant, nous nous contenterons de définir deux tenseurs de contrainte classique : les première et seconde contraintes de PIOLA-KIRCHHOFF.

Seconde contrainte de PIOLA-KIRCHHOFF Si nous considérons le tenseur de GREEN-LAGRANGE, on démontre à partir de la relation (19), que son tenseur des contraintes dual, appelé second tenseur de Piola-Kirchhoff et noté \underline{S} , est défini par :

$$(21) \quad \underline{S} = J \underline{F}^{-1} \underline{\sigma} \underline{F}^{-T}$$

Cette relation s'inverse en :

$$(22) \quad \underline{\sigma} = \frac{1}{J} \underline{F} \underline{S} \underline{F}^T$$

Première contrainte de PIOLA-KIRCHHOFF Même si \underline{F} n'est pas un tenseur de déformation, il est possible de définir par dualité un tenseur $\underline{\Pi}$ non symétrique, nommé première contrainte de PIOLA-KIRCHHOFF :

$$(23) \quad J \underline{\sigma} = \underline{\Pi} \cdot \underline{F}^T$$

Par définition, ce tenseur vérifie :

$$p_{v_0} = \underline{\Pi} : \dot{\underline{F}}$$

La première contrainte de PIOLA-KIRCHHOFF a deux propriétés intéressantes :

- l'équation d'équilibre dans la configuration initiale s'écrit :

$$(24) \quad \text{Div } \underline{\Pi} = 0$$

où Div est la divergence dans la configuration initiale.

- la première contrainte de PIOLA-KIRCHHOFF permet d'obtenir les forces d' \vec{f} dans la configuration déformée pour un élément de surface d' \vec{S} dans la configuration initiale :

$$(25) \quad d\vec{f} = \underline{\Pi} \cdot d\vec{S}$$

Si la relation (24) est assez sympathique (on travaille sur une configuration initiale, qui est fixe et connue), la relation (25) montre que les conditions aux limites vérifiées par $\underline{\Pi}$ sont assez complexes puisque l'on doit

calculer les forces sur la déformation déformée : la non linéarité géométrique du problème est concentrée dans la détermination des conditions aux limites.

L'utilisation de la première contrainte de PIOLA-KIRCHHOFF (à la place de la contrainte de CAUCHY) est en réalité particulièrement intéressante pour les applications combustible 1D telles qu'alcyone ou germinal car les forces, dues aux pressions appliquées sur le combustible et la gaine, restent de direction constante. Les variations d'intensité dues aux variations de géométrie peuvent être traitées de manière explicite, ce qui permet de supprimer la non linéarité géométrique du problème.

3 LOIS EN GRANDES TRANSFORMATIONS

Une manière simplifiée de décrire une loi de comportement en grandes transformations est de dire qu'il s'agit d'une boîte noire qui, en chaque point d'intégration de la structure discrétisée et pour un intervalle de temps $[t : t + \Delta t]$ donné, prend en entrée :

- $\underline{\mathbf{F}}|_t$, le gradient de la transformation vers la configuration en début de pas ;
- $\underline{\mathbf{F}}|_{t+\Delta t}$, le gradient de la transformation vers la configuration en fin de pas ;
- la valeur des variables internes $Y|_t$ en début de pas ;

et qui fournit :

- la valeur de la contrainte de CAUCHY $\underline{\sigma}|_{t+\Delta t}$ définie en fin de pas sur la configuration en fin de pas ;
- la valeur des variables internes $Y|_{t+\Delta t}$ en fin de pas ;
- une matrice tangente cohérente. Le problème est ici que la définition de l'opérateur tangent dépend du code considéré, et, parfois au sein d'un même code, du choix du formalisme utilisé pour traiter les grandes transformations³. Dans mfront, l'utilisateur peut donner, parmi un nombre fini de possibilité, un ou plusieurs opérateurs tangents. En général, il choisira l'opérateur « le plus naturel » pour la loi considérée (voir ci-dessous). Nous effectuons alors un ensemble de conversions pour calculer l'opérateur tangent effectivement attendu par le code.

Certaines formulations hypoélastiques, définies plus loin, des grandes transformations se basent sur la donnée en entrée de la contrainte de CAUCHY $\underline{\sigma}|_t$ en début de pas sur la configuration de début de pas. Cette information est fournie par mfront, mais nous déconseillons son emploi.

Hyperélasticité La notion d'hyperélasticité généralise la notion classique d'élasticité. Plus précisément, une loi hyperélastique est une loi reliant une mesure de déformation à son tenseur dual par la définition d'une densité d'énergie Ψ :

$$\underline{\mathbf{S}}_\varepsilon = \frac{\partial \Psi}{\partial \underline{\varepsilon}}$$

Une propriété essentielle des lois hyperélastiques est la dissipation mécanique est nulle pour tout trajet fermé dans l'espace des déformations.

Une autre propriété intéressante en pratique est qu'on peut montrer que l'opérateur tangent cohérent est symétrique.

3.1 APPROCHES LAGRANGIENNES

Au vu de ce qui précède, les approches lagrangiennes sont les plus simples d'emploi :

3. À titre d'exemple, ZeBuLoN propose trois formalismes différents [Han 10].

- on se donne une mesure des déformations : soit \underline{U} , soit \underline{C} , soit un des tenseurs de déformation construits sur \underline{U} . Ce choix définit un tenseur des contraintes par dualité, par l'équation (20). Un point important est que ces différents tenseurs sont tous définis dans la configuration initiale.
- on construit alors la loi de comportement en reliant la mesure des déformations à sa contrainte duale. On utilisera de préférence une approche basée sur la thermodynamique, ce qui est possible par la définition énergétique de la contrainte duale.

Calcul de la contrainte de CAUCHY La dernière étape de la loi de comportement consiste à calculer la contrainte de CAUCHY. Supposons avoir choisi un tenseur des déformations $\underline{\varepsilon}$ fonction explicite de \underline{C} et soit $\underline{S}_\varepsilon$ sa contrainte duale, nous avons :

$$\frac{1}{2} \underline{S} : \dot{\underline{C}} = \underline{S}_\varepsilon : \dot{\underline{\varepsilon}} = \underline{S}_\varepsilon : \frac{\partial \underline{\varepsilon}}{\partial \underline{C}} : \dot{\underline{C}}$$

Cette relation étant valide pour tous les valeurs de $\dot{\underline{C}}$, on en déduit :

$$\underline{S} = 2 \underline{S}_\varepsilon : \frac{\partial \underline{\varepsilon}}{\partial \underline{C}}$$

La relation (22) permet alors de calculer la contrainte de CAUCHY.

Opérateur tangent L'opérateur tangent naturel est la dérivée de la contrainte duale en fin de pas par rapport à l'incrément du tenseur de déformation choisi.

3.1.1 Lois lagrangiennes hyperélastiques

Toute généralisation de la loi de HOOKE de la forme :

$$\underline{S}_\varepsilon = \underline{D} : \underline{\varepsilon}$$

où $\underline{\varepsilon}$ est un tenseur de déformation lagrangien, $\underline{S}_\varepsilon$ son tenseur dual et \underline{D} un tenseur d'élasticité possédant les bonnes propriétés⁴, conduira à une loi hyperélastique.

Dans ce l'opérateur tangent naturel est évidemment \underline{D} .

Loi hyperélastique de SAINT-VENANT KIRCHHOFF La loi de SAINT-VENANT KIRCHHOFF est la loi hyperélastique la plus classique. Elle généralise la loi de HOOKE isotrope en reliant le tenseur de GREEN-LAGRANGE au second tenseur de PIOLA-KIRCHHOFF \underline{S} :

$$\underline{S} = \lambda \operatorname{tr} \underline{\varepsilon}_{GL}^{to} \mathbf{I} + 2 \mu \underline{\varepsilon}_{GL}^{to}$$

où λ et μ sont les premier et second coefficients de LAME.

L'implantation de cette loi en `mfront` est donnée en figure 2. Nous avons montré comment il était possible de définir l'opérateur tangent de deux manières différentes. La première, la plus simple, est donnée par la dérivée de la seconde contrainte de PIOLA-KIRCHHOFF par rapport à l'incrément du tenseur de GREEN-LAGRANGE. La seconde est directement l'opérateur tangent attendu par Aster.

4. On se rappellera par exemple que, dans le cas isotrope, le coefficient de POISSON ne peut pas prendre n'importe quelle valeur.

```

@Parser DefaultFiniteStrainParser;
@Behaviour SaintVenantKirchhoffElasticity;
@Author T. Helfer;
@Date 19/10/2013;

@MaterialProperty stress young;
young.setGlossaryName("YoungModulus");
@MaterialProperty real nu;
nu.setGlossaryName("PoissonRatio");
@MaterialProperty real rho;
rho.setGlossaryName("MassDensity");
@MaterialProperty real alpha;
alpha.setGlossaryName("ThermalExpansion");

@LocalVariable stress lambda;
@LocalVariable stress mu;

@Includes{
#include "TFL/Material/Lame.hxx"
}

@Integrator{
using namespace tfl::material::lame;
// Lame coefficients
lambda = computeLambda(young,nu);
}

mu      = computeMu(young,nu);
// Green-Lagrange tensor
const StrainStensor e = computeGreenLagrangeTensor(F1);
// second Piola-Kirchhoff stress
const StressStensor s =
lambda*trace(e)*StrainStensor::Id() + 2*mu*e;
// conversion to Cauchy stress tensor
sig = convertSecondPiolaKirchhoffStressToCauchyStress(s,F1);
if(computeTangentOperator_){
    string msg("tangent operator not yet available");
    throw(runtime_error(msg));
}
@TangentOperator<DTAU_DF>{
static_cast<void>(smt); // suppression d'un warning : la
matrice
// tangente est toujours l'élastique
StiffnessTensor De = lambda*Stensor4::IxI() + 2*mu*Stensor4::Id();
t2tost2<N,stress> dS = 0.5*De*t2tost2<N,strain>::dCdF(F1);
t2tost2<N,stress> dtau;
computePushForwardDerivative(dtau,dS,s,F1);
Dt = dtau;
}

```

FIGURE 2 : Implantation de la loi hyperélastique de SAINT-VENANT KIRCHHOFF.

3.1.2 Grandes rotations, petites déformations

Ce paragraphe s'inspire de la formulation éponyme d'Aster [Proix 13]. L'interprétation physique du formalisme est également décrit par Doghri [Doghri 00].

Il s'agit d'un moyen de réutiliser, sans ré-identification, des lois de comportement écrites pour décrire des transformations infinitésimales dans le cas où les rotations du matériau peuvent être extrêmement importantes.

Les déformations de GREEN-LAGRANGE en début et fin de pas de temps sont calculées ainsi :

$$\underline{\epsilon}_{GL}^{to}|_t = \frac{1}{2} (\underline{\mathbf{C}}|_t - \underline{\mathbf{I}})$$

$$\underline{\epsilon}_{GL}^{to}|_{t+\Delta t} = \frac{1}{2} (\underline{\mathbf{C}}|_{t+\Delta t} - \underline{\mathbf{I}})$$

$\underline{\epsilon}_{GL}^{to}|_t$ et $\underline{\epsilon}_{GL}^{to}|_{t+\Delta t}$ sont deux tenseurs lagrangiens (tous deux relatifs à la configuration initiale) que l'on peut légitimement soustraire pour calculer l'incrément de déformation totale $\Delta \underline{\epsilon}_{GL}^{to}$:

$$\Delta \underline{\epsilon}_{GL}^{to} = \underline{\epsilon}_{GL}^{to}|_{t+\Delta t} - \underline{\epsilon}_{GL}^{to}|_t$$

Cet incrément est envoyé à la loi de comportement qui retourne une contrainte qui est interprétée, conformément à la relation de dualité (20), comme le second tenseur de PIOLA-KIRCHHOFF. Le tenseur de CAUCHY $\underline{\sigma}$, utilisé par Cast3M pour le calcul de l'équilibre, s'en déduit alors par la relation (22).

Interprétation physique Dans le cas des petites déformations, la décomposition polaire de $\underline{\mathbf{F}}$ montre que :

$$\underline{\mathbf{F}} = \underline{\mathbf{R}} \cdot \underline{\mathbf{U}} \approx \underline{\mathbf{R}}$$

J , égal au déterminant de $\underline{\mathbf{U}}$ est également proche de 1.

La relation (22) s'écrit alors :

$$(26) \quad \underline{\sigma} = \frac{1}{J} \mathbf{F} \cdot \underline{\sigma} \cdot \mathbf{F}^T \approx \mathbf{R} \cdot \underline{\sigma} \cdot \mathbf{R}^T$$

Cette dernière relation montre qu'au premier ordre, les contraintes de CAUCHY se déduisent du second tenseur de PIOLA-KIRCHHOFF par la rotation qu'a subit localement le matériau.

Changement de volume Si les déformations sont petites, le changement de volume est, au premier ordre, égal à la trace de $\underline{\epsilon}_{GL}^{tot}$.

Cas de l'élasticité isotrope Si la loi HPP est la loi de HOOKE isotrope, l'utilisation de la stratégie « grandes rotations, petites déformations », permet de retrouver la loi de SAINT-VENANT KIRCHHOFF décrite au paragraphe 3.1.1.

Du choix particulier du tenseur de GREEN-LAGRANGE On peut se poser la question du choix du tenseur de GREEN-LAGRANGE pour traiter le problème des grandes rotations : tout autre tenseur aurait pu faire l'affaire puisque tous les tenseurs lagrangiens tendent vers la même limite aux petites déformations. En particulier, nous pourrions utiliser directement les déformations logarithmiques que nous avons présenté comme la meilleure approche disponible dans l'introduction.

Il s'agit essentiellement d'une question d'efficacité numérique : le tenseur de GREEN-LAGRANGE se calcule très facilement à partir de \mathbf{F} et la relation entre le second tenseur PIOLA-KIRCHHOFF et le tenseur de CAUCHY est directe. Ce n'est pas le cas des déformations logarithmiques qui nécessitent des calculs importants en amont et en aval de la loi de comportement.

Utilisation via l'interface umat de mfront L'interface `umat` de `mfront` a été étendue. La directive `@UMAT-FiniteStrainStrategy` permet de préciser une stratégie d'adaptation d'une loi HPP en grandes transformations. La stratégie `FiniteRotationSmallStrain` permet de sélectionner celle présentée dans cette section.

3.1.3 Les déformations logarithmiques

Le formalisme des déformations logarithmiques, introduit par Miehe [Miehe 02], se base sur la déformation de HENCKY et son tenseur dual, noté $\underline{\mathbf{T}}$.

L'idée de cette approche est qu'il est possible d'utiliser les ingrédients classiques des lois écrites pour des transformations infinitésimales :

- décomposition additive la déformation totale en différentes contributions (élastique, plastique, thermique, gonflement, etc...);
- décomposition des tenseurs en une partie sphérique, associée au changement de volume, et une partie déviatorique. Cette décomposition est possible par la propriété essentielle (15) qui relie la trace des déformations logarithmiques au changement de volume ;
- dérivation possible des modèles par une approche thermodynamique cohérente (mais ce point est commun à tous les formalismes lagrangiens grâce à l'utilisation de la notion de tenseur dual).

Dit d'une autre manière, il suffit d'appeler n'importe quelle loi écrite dans le formalisme des petites transformations avec un pré-traitement (le calcul de la déformation logarithmique de HENCKY) et un post-traitement (le calcul de la contrainte de CAUCHY à partir de $\underline{\mathbf{T}}$) appropriés, pour obtenir une loi valides en grandes transformations.

Bien entendu, il s'agit d'une réutilisation *formelle* : une loi particulière identifiée dans le contexte des petites transformations ne devient pas miraculeusement capables de décrire de très grandes déformations.

Il s'agit néanmoins d'un avantage considérable : l'écriture de lois de comportement capables de décrire de très grandes déformations dans un cadre théorique solide devient accessible aux ingénieurs puisque ceux-ci n'ont pas à apprendre de formalisme nouveau. Tous les concepts qui leurs sont devenus classiques (écrouissages, endommagement, etc...) sont utilisables tels quels.

Autres avantages Ce formalisme a d'autres avantages, en particulier si on le compare à d'autres approches qui visent les mêmes objectifs :

- il n'y a aucune restriction sur la loi de comportement. On peut traiter les dilatations libres (gonflement et/ou dilatation thermique), l'orthotropie initiale ou induite du matériau

Utilisation via l'interface `umat` de `mfront` Dans la directive `@UMATFiniteStrainStrategy`, le mot clé `MieheApelLambrechtLogarithmicStrain` permet de sélectionner la stratégie présentée dans cette section.

Traitement des dilatations thermiques À faire.

4 LA DÉCOMPOSITION $\tilde{\mathbf{F}} \cdot \mathbf{F}$

Une grande partie de la littérature sur l'élastoplasticité en grandes transformations a été consacrée à ce que l'on appelle la décomposition $\tilde{\mathbf{F}}_e \cdot \mathbf{F}_p$ [Lee 69, Mandel 73].

La décomposition $\tilde{\mathbf{F}}_e \cdot \mathbf{F}_p$ est essentiellement une hypothèse cinématique. Nous commencerons par décrire cette cinématique, puis nous introduirons un nouveau tenseur, le tenseur de MANDEL, par dualité énergétique, ce qui nous permettra de d'introduire des premières notions de thermodynamique. Enfin, nous décrirons le cadre, actuellement standard, permettant de décrire les lois de plasticité en grandes transformations.

4.1 ASPECTS CINÉMATIQUES

Il s'agit de postuler l'existence d'une configuration intermédiaire $\tilde{\mathbf{F}}_p$, résultant de l'écoulement plastique. Cette configuration définit une configuration du matériau « au repos » après déformation, c'est à dire à contrainte nulle. Cette configuration permet de définir la transformation élastique $\tilde{\mathbf{F}}_e$ qui permet au matériau d'accommorder le gradient de déformation total :

$$(27) \quad \tilde{\mathbf{F}} = \tilde{\mathbf{F}}_e \cdot \mathbf{F}_p$$

Notons que

Compte tenu de la décomposition multiplicative (27) du gradient de transformation, le gradient du vecteur vitesse $\tilde{\mathbf{L}}$ s'exprime, défini par l'équation (16), s'écrit :

$$(28) \quad \tilde{\mathbf{L}} = \dot{\tilde{\mathbf{F}}} \cdot \tilde{\mathbf{F}}^{-1} = \dot{\tilde{\mathbf{F}}}_e \cdot \tilde{\mathbf{F}}_e^{-1} + \tilde{\mathbf{F}}_e \cdot \dot{\tilde{\mathbf{F}}}_p \cdot \tilde{\mathbf{F}}_p^{-1} \cdot \tilde{\mathbf{F}}_e^{-1} = \tilde{\mathbf{L}}_e + \tilde{\mathbf{F}}_e \cdot \tilde{\mathbf{L}}_p \cdot \tilde{\mathbf{F}}_e^{-1}$$

avec $\tilde{\mathbf{L}}_e = \dot{\tilde{\mathbf{F}}}_e \cdot \tilde{\mathbf{F}}_e^{-1}$ et $\tilde{\mathbf{L}}_p = \dot{\tilde{\mathbf{F}}}_p \cdot \tilde{\mathbf{F}}_p^{-1}$.

4.2 LE TENSEUR DE MANDEL

Nous avons déjà rencontré différents tenseurs des contraintes dont l'utilisation va s'avérer utile :

1. le tenseur des contraintes de CAUCHY $\underline{\sigma}$, défini dans la configuration actuelle, symétrique ;
2. le second tenseur de Piola-Kirchhoff \underline{S}_e , défini dans la configuration intermédiaire, symétrique :

$$(29) \quad \underline{S}_e = J_E \underline{F}_e^{-1} \cdot \underline{\sigma} \cdot \underline{F}_e^{-T}, \text{ avec } J_E = \det \underline{F}_e = \frac{\rho_i}{\rho}$$

où ρ la masse volumique du matériau dans la configuration actuelle et ρ_i la masse volumique dans la configuration intermédiaire.

Nous allons utiliser la décomposition (28) pour introduire un nouveau tenseur de contraintes, par dualité.

La puissance des efforts intérieurs est :

$$(30) \quad \frac{1}{\rho} \underline{\sigma} : \underline{D} = \frac{1}{\rho} \underline{\sigma} : \underline{L} = \frac{1}{\rho} \underline{\sigma} : \dot{\underline{F}} \underline{F}^{-1}$$

$$(31) \quad = \frac{1}{\rho} \underline{\sigma} : (\dot{\underline{F}}_e \underline{F}_e^{-1} + \underline{F}_e \dot{\underline{F}}_p \underline{F}_p^{-1} \underline{F}_e^{-1})$$

$$(32) \quad = \frac{1}{\rho} \underline{\sigma} : (\dot{\underline{F}}_e \underline{F}_e^{-1}) + \frac{1}{\rho} \underline{\sigma} : (\underline{F}_e \dot{\underline{F}}_p \underline{F}_p^{-1} \underline{F}_e^{-1})$$

Dans l'équation (30), comme $\underline{\sigma}$ est un tenseur symétrique, on peut donc remplacer \underline{D} par \underline{L} . Dans l'équation (32), tenant compte de la relation entre le second tenseur de Piola-Kirchhoff \underline{S}_e et le tenseur de CAUCHY $\underline{\sigma}$, on a :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\rho} \underline{\sigma} : \underline{D} &= \frac{1}{\rho_i} (\underline{F}_e \underline{S}_e \underline{F}_e^T) : (\dot{\underline{F}}_e \underline{F}_e^{-1}) + \frac{1}{\rho_i} (\underline{F}_e \underline{S}_e \underline{F}_e^T) : (\underline{F}_e \dot{\underline{F}}_p \underline{F}_p^{-1} \underline{F}_e^{-1}) \\ &= \frac{1}{\rho_i} (F_e)_{ik} (S_e)_{kl} (F_e^T)_{lj} (\dot{F}_e)_{im} (F_e^{-1})_{mj} + \\ &\quad \frac{1}{\rho_i} (F_e)_{ik} (S_e)_{kl} (F_e^T)_{lj} (F_e)_{im} (\dot{F}_p)_{mn} (F_p^{-1})_{np} (F_e^{-1})_{pj} \\ &= \frac{1}{\rho_i} (S_e)_{kl} (F_e^T)_{ki} (\dot{F}_e)_{im} (F_e^{-1})_{mj} (F_e)_{jl} + \\ &\quad \frac{1}{\rho_i} (F_e^T)_{mi} (F_e)_{ik} (S_e)_{kl} (F_e^T)_{lj} (F_e)_{jp}^{-T} (\dot{F}_p)_{mn} (F_p^{-1})_{np} \\ &= \frac{1}{\rho_i} (S_e)_{kl} (F_e^T)_{ki} (\dot{F}_e)_{il} + \frac{1}{\rho_i} (F_e^T)_{mi} (F_e)_{ik} (S_e)_{kp} (\dot{F}_p)_{mn} (F_p^{-1})_{np} \\ &= \frac{1}{\rho_i} \underline{S}_e : (\underline{F}_e^T \dot{\underline{F}}_e) + \frac{1}{\rho_i} (\underline{F}_e^T \underline{F}_e \underline{S}_e) : (\dot{\underline{F}}_p \underline{F}_p^{-1}) \end{aligned}$$

Comme le second tenseur de Piola-Kirchhoff est symétrique, on a :

$$(33) \quad \frac{1}{\rho} \underline{\sigma} : \underline{D} = \frac{1}{\rho_i} \underline{S}_e : \frac{1}{2} \left(\underline{F}_e^T \dot{\underline{F}}_e + \dot{\underline{F}}_e^T \underline{F}_e \right) + \frac{1}{\rho_i} (\underline{F}_e^T \underline{F}_e \underline{S}_e) : (\dot{\underline{F}}_p \underline{F}_p^{-1})$$

$$(34) \quad = \frac{1}{\rho_i} \underline{S}_e : \dot{\underline{\epsilon}}_{GL} + \frac{1}{\rho_i} \underline{M} : (\dot{\underline{F}}_p \underline{F}_p^{-1}) = \frac{1}{\rho_i} \underline{S}_e : \dot{\underline{\epsilon}}_{GL} + \frac{1}{\rho_i} \underline{M} : \underline{L}_p$$

où nous avons introduit le tenseur des contraintes de MANDEL, noté \underline{M} , non symétrique, et définit par :

$$(35) \quad \underline{M} = J_E \underline{F}_e^T \cdot \underline{\sigma} \cdot \underline{F}_e^{-T} = \underline{F}_e^T \cdot \underline{F}_e \cdot \underline{S}_e = \underline{C}_e \cdot \underline{S}_e$$

avec \underline{C}_e le tenseur des dilatations CAUCHY-GREEN droit.

4.3 THERMODYNAMIQUE

Le deuxième principe de la thermodynamique dans sa forme locale, connu sous le nom d'inégalité de CLAUSIUS-DUHEM s'écrit :

$$(36) \quad -\rho(\dot{e} - T\dot{s}) + \underline{\sigma} : \mathbf{D} - \frac{\vec{q}}{T} \cdot \vec{\nabla} T \geq 0$$

avec ρ la masse volumique dans la configuration actuelle, e la densité d'énergie interne, T la température, s la densité d'entropie, et \vec{q} le flux de chaleur.

Pour un matériau sans écrouissage, la densité d'énergie interne e est une fonction de la déformation élastique de Green-Lagrange $\underline{\epsilon}_{GL}^e$ et de la densité d'entropie s :

$$(37) \quad e = e(\underline{\epsilon}_{GL}^e, s)$$

la densité d'énergie libre ψ est une fonction de $\underline{\epsilon}_{GL}^e$ et de la température T :

$$(38) \quad \psi = \psi(\underline{\epsilon}_{GL}^e, T)$$

On sait que la relation entre la densité d'énergie libre ψ et la densité d'énergie interne e s'écrit :

$$(39) \quad \psi = e - Ts$$

Compte tenu des équations (34) et (39), l'inégalité de Clausius-Duhem devient :

$$(40) \quad \rho \left(\frac{\mathbf{S}_e}{\rho_i} - \frac{\partial \psi}{\partial \underline{\epsilon}_{GL}^e} \right) : \underline{\epsilon}_{GL}^e - \rho \left(s + \frac{\partial \psi}{\partial T} \right) \dot{T} + \frac{\rho}{\rho_i} \mathbf{M} : \mathbf{L}_p - \frac{\vec{q}}{T} \cdot \vec{\nabla} T \geq 0$$

où on a la dissipation thermique D^{th} :

$$(41) \quad D^{th} = -\frac{\vec{q}}{T} \cdot \vec{\nabla} T$$

et la dissipation intrinsèque D^i :

$$(42) \quad D^i = \rho \left(\frac{\mathbf{S}_e}{\rho_i} - \frac{\partial \psi}{\partial \underline{\epsilon}_{GL}^e} \right) : \underline{\epsilon}_{GL}^e - \rho \left(s + \frac{\partial \psi}{\partial T} \right) \dot{T} + \frac{\rho}{\rho_i} \mathbf{M} : \mathbf{L}_p$$

Considérons un processus réversible tel que $\dot{T} = 0$, $\dot{\mathbf{F}}_p \mathbf{F}_p^{-1} = 0$ et $\vec{\nabla} T = 0$. Pour le processus réversible, l'inégalité (40) réduit à l'égalité, puisqu'il n'y a pas de dissipation. Par conséquent, on obtient

$$(43) \quad \mathbf{S}_e = \rho_i \frac{\partial \psi}{\partial \underline{\epsilon}_{GL}^e}$$

De même, considérons un autre processus réversible tel que $\underline{\epsilon}_{GL}^e = 0$, $\dot{\mathbf{F}}_p \mathbf{F}_p^{-1} = 0$ et $\vec{\nabla} T = 0$, on a

$$(44) \quad s = -\frac{\partial \psi}{\partial T}$$

Enfin, la dissipation intrinsèque se réduit à

$$(45) \quad D^i = \frac{\rho}{\rho_i} \mathbf{M} : \mathbf{L}_p$$

4.4 APPLICATION À LA PLASTICITÉ CRISTALLINE

Pour la plasticité cristalline, $\underline{\mathbf{L}}_p$ peut être déterminé sur les N_g systèmes de glissement par :

$$(46) \quad \underline{\mathbf{L}}_p = \sum_{s=1}^{N_g} \dot{\gamma}^s \underline{\mathbf{N}}^s$$

avec le tenseur d'orientation $\underline{\mathbf{N}}^s$ pour le système de glissement s et le taux de glissement $\dot{\gamma}^s$ pour le système de glissement s .

Selon les équations (34) et (45), le second tenseur de Piola-Kirchhoff $\underline{\mathbf{S}}$ est utilisé pour la loi d'élasticité et le tenseur de MANDEL $\underline{\mathbf{M}}$ pour la loi d'écoulement. Vu que la dissipation décrite par $\underline{\mathbf{M}} : \underline{\mathbf{L}}_p$ est liée au glissement des dislocations dans le monocristal, on a :

$$(47) \quad \underline{\mathbf{M}} : \underline{\mathbf{L}}_p = \sum_{s=1}^{N_g} \dot{\gamma}^s \tau^s$$

où τ^s est la cission résolue du système de glissement s . Compte tenu l'équation (46), on a :

$$(48) \quad \underline{\mathbf{M}} : \underline{\mathbf{L}}_p = \underline{\mathbf{M}} : \left(\sum_{s=1}^{N_g} \dot{\gamma}^s \underline{\mathbf{N}}^s \right) = \sum_{s=1}^{N_g} \dot{\gamma}^s \underline{\mathbf{M}} : \underline{\mathbf{N}}^s$$

Si on compare l'équation (47) et l'équation (48), la cission résolue τ^s du système de glissement s s'écrit donc :

$$(49) \quad \tau^s = \underline{\mathbf{M}} : \underline{\mathbf{N}}^s$$

Les différentes lois de plasticité cristalline se différencient par la relation entre la cission résolue τ^s et la vitesse de glissement $\dot{\gamma}^s$.

RÉFÉRENCES

- [Bargellini 13] BARGELLINI R. *Modèles de grandes déformations GDEF_LOG et GDEF_HYPO_ELAS*. Référence du Code Aster R5.03.24 révision : 10464, EDF-R&D/AMA, 2013.
- [Doghri 00] DOGHRI ISSAM. *Mechanics of deformable solids : linear, nonlinear, analytical, and computational aspects*. Springer, Berlin ; New York, 2000.
- [Forest 13] FOREST SAMUEL, AMESTOY MICHEL, DAMAMME GILLES, KRUCH SERGE, MAUREL VINCENT et MAZIÈRE MATTHIEU. *Mécanique des milieux continus*, 2013.
- [Han 10] HAN XU. *Implantation en grandes transformations d'une loi cristalline pour un matériau CFC à haute température : rapport pour la réunion d'avancement de la thèse*, Juillet 2010.
- [Lee 69] LEE E.H. *Elastic-plastic Deformation at Finite Strains*. Journal of Applied Mechanics, 1969, vol 36, n° 1.
- [Lubarda 04] LUBARDA VLADO A. *Constitutive theories based on the multiplicative decomposition of deformation gradient : Thermoelasticity, elastoplasticity, and biomechanics*. Applied Mechanics Reviews, Avril 2004, vol 57, n° 2, p 95–108.
- [Mandel 73] MANDEL JEAN. *Equations Constitutives et Directeurs dans les Milieux Plastiques et Viscoplastiques*. International Journal of Solids and Structures, 1973.
- [Miehe 02] MIEHE C., APEL N. et LAMBRECHT M. *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, Novembre 2002, vol 191, n° 47–48, p 5383–5425.
- [Petersen 08] PETERSEN KAARE BRANDT et PEDERSEN MICHAEL SYSKIND. *The Matrix Cookbook*, Novembre 2008.
- [Proix 13] PROIX JEAN-MICHEL. *Loi de comportement en grandes rotations et petites déformations*. Référence du Code Aster R5.03.22 révision : 11536, EDF-R&D/AMA, Septembre 2013.
- [Sidoroff 82] SIDOROFF FRANÇOIS. *Cours sur les grandes transformations*. Rapport GRECO 51/1982, CNRS, Sophia-Antipolis, Septembre 1982.
- [Wikipédia 14] WIKIPÉDIA . *Finite strain theory*, Janvier 2014. Page Version ID : 589861339.

L I S T E D E S T A B L E A U X

L I S T E D E S F I G U R E S

FIGURE 1	Décompositions de la transformation en une dilatation et une rotation. Illustration de la signification physique des décompositions polaires du gradient de la transformation. Figure tirée de WIKIPÉDIA [Wikipédia 14].	8
FIGURE 2	Implantation de la loi hyperélastique de SAINT-VENANT KIRCHHOFF.	15
FIGURE 3	Décomposition multiplicative du grandient de la transformation en une partie élastique et une partie thermique (d'après LUBARDA [Lubarda 04]).	26

ANNEXE A DESCRIPTION DE LA DILATATION THERMIQUE DES CORPS

Expérimentalement, on mesure la variation de longueur d'un corps entre une température de référence T_α et une température finale T .

Si l'on note l_{T_α} et l_T les longueurs respectives du corps à ces deux températures, le coefficient de dilatation thermique linéique $\alpha(T)$ est défini par :

$$(50) \quad \frac{l_T - l_{T_\alpha}}{l_{T_\alpha}} = \alpha(T) (T - T^\alpha)$$

ANNEXE A.1 CAS DES PETITES DÉFORMATIONS

Dans le cas des petites déformations, l'équation (50) définit une déformation associée à la dilatation thermique :

$$\epsilon_{T_\alpha}^{th}(T) = \alpha(T) (T - T^\alpha)$$

Cette déformation prend comme état de référence la longueur du corps à la température l_{T_α} .

Lors d'un calcul thermo-mécanique, on suppose généralement que la température initiale T_i est supposée être celle à laquelle la géométrie est fournie.

Il est donc nécessaire de modifier la définition de la dilatation thermique pour que l'état de référence soit la géométrie initiale, de longueur l_i .

Pour cela, nous pouvons définir la déformation thermique $\epsilon_{T^i}^{th}(T)$ du corps à la température T comme sa déformation qu'il aurait si aucune contrainte ne s'exerçait sur lui par la relation :

$$\epsilon_{T^i}^{th}(T) = \frac{l_T - l_{T^i}}{l_{T^i}}$$

En introduisant la longueur de référence l_{T_α} , nous obtenons :

$$\begin{aligned} \epsilon_{T^i}^{th}(T) &= \frac{l_{T_\alpha}}{l_{T^i}} \frac{l_T - l_{T^i}}{l_{T_\alpha}} = \frac{1}{1 + \frac{l_{T^i} - l_{T_\alpha}}{l_{T_\alpha}}} \left[\frac{l_T - l_{T_\alpha} + l_{T_\alpha} - l_{T^i}}{l_{T_\alpha}} \right] \\ &= \frac{1}{1 + \alpha(T^i)(T^i - T^\alpha)} \left[\frac{l_T - l_{T_\alpha}}{l_{T_\alpha}} - \frac{l_{T^i} - l_{T_\alpha}}{l_{T_\alpha}} \right] \end{aligned}$$

Nous obtenons finalement la relation :

$$\begin{aligned} (51) \quad \epsilon_{T^i}^{th}(T) &= \frac{1}{1 + \alpha(T^i)(T^i - T^\alpha)} [\alpha(T)(T - T^\alpha) - \alpha(T^i)(T^i - T^\alpha)] \\ &= \frac{1}{1 + \epsilon_{T_\alpha}^{th}(T^i)} [\epsilon_{T_\alpha}^{th}(T) - \epsilon_{T_\alpha}^{th}(T^i)] \end{aligned}$$

Dans les codes aux éléments finis Code-Aster et dans la procédure PASAPAS de Cast3M, la relation précédente s'écrit de manière approchée, en négligeant le terme $\epsilon_{T_\alpha}^{th}(T^i)$ par rapport à 1 :

$$\epsilon_{T^i}^{th}(T) = \epsilon_{T_\alpha}^{th}(T) - \epsilon_{T_\alpha}^{th}(T^i)$$

Dilatation pure Dans le cas d'une dilatation pure, le gradient de la transformation est uniforme et proportionnel à l'identité. Si l'on se restreint au cas 1D, une dilatation pure s'écrit :

$$F = 1 + \eta$$

La dilatation pure d'un barreau le fait passer d'une longueur initiale l_i à une longueur finale l telle que :

$$l = \int_0^{l_i} F(X) \, dX = (1 + \eta) l_i$$

ce qui permet d'identifier η à la variation relative du corps entre son état initial et son état final :

$$\eta = \frac{\Delta l}{l_i}$$

Ainsi, la description de la dilatation thermique pure est très simple en grandes transformations, tant que d'autres effets ne sont pas pris en compte.

Traduction de la dilatation thermique en terme de gradient de la transformation Dans le cas des transformations finies, nous pouvons traduire la dilatation thermique par un gradient de la transformation $F_{T^\alpha}^\theta$ ainsi :

$$(52) \quad F_{T^\alpha}^\theta = 1 + \frac{l_T - l_{T^\alpha}}{l_{T^\alpha}} = 1 + \alpha(T)(T - T^\alpha)$$

Dans le cas où la géométrie du corps est définie à la température initiale T^i , la formule (51) peut s'adapter en :

$$(53) \quad F_{T^i}^\theta = 1 + \frac{1}{1 + \alpha(T^i)(T^i - T^\alpha)} [\alpha(T)(T - T^\alpha) - \alpha(T^i)(T^i - T^\alpha)]$$

Dilatation thermique orthotrope Le cas orthotrope fait apparaître trois directions particulières de l'espace $\vec{n}_0, \vec{n}_1, \vec{n}_2$. Notons η_0, η_1 et η_2 les dilatations thermiques dans chacune de ces trois directions et données par :

$$\begin{aligned} \eta_0 &= \frac{1}{1 + \alpha_0(T^i)(T^i - T^\alpha)} [\alpha_0(T)(T - T^\alpha) - \alpha_0(T^i)(T^i - T^\alpha)] \\ \eta_1 &= \frac{1}{1 + \alpha_1(T^i)(T^i - T^\alpha)} [\alpha_1(T)(T - T^\alpha) - \alpha_1(T^i)(T^i - T^\alpha)] \\ \eta_2 &= \frac{1}{1 + \alpha_2(T^i)(T^i - T^\alpha)} [\alpha_2(T)(T - T^\alpha) - \alpha_2(T^i)(T^i - T^\alpha)] \end{aligned}$$

Nous pouvons donner une valeur intrinsèque au tenseur du gradient de la transformation :

$$\underline{\mathbf{F}} = (1 + \eta_0) \underline{\mathbf{I}} + (\eta_1 - \eta_0) \vec{n}_1 \otimes \vec{n}_1 + (\eta_2 - \eta_0) \vec{n}_2 \otimes \vec{n}_2$$

A.1.1 Décomposition multiplicative de la transformation dans le cas élastique

Adoptons une décomposition multiplicative du gradient de la transformation en une partie élastique et une partie thermique [Lubarda 04] :

$$(54) \quad \underline{\mathbf{F}} = \underline{\mathbf{F}}^e \underline{\mathbf{F}}_{T^i}^\theta$$

Le tenseur de CAUCHY droit C s'écrit alors :

$$\underline{\mathbf{C}} = \underline{\mathbf{F}}^T \underline{\mathbf{F}} = \underline{\mathbf{F}}_{T^i}^{\theta \, T} \underline{\mathbf{F}}^{e \, T} \underline{\mathbf{F}}^e \underline{\mathbf{F}}_{T^i}^\theta$$

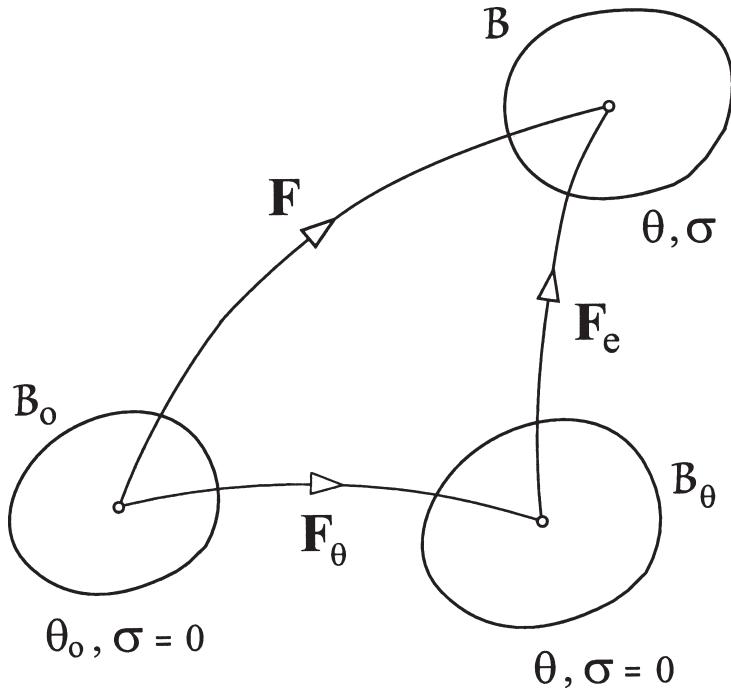


FIGURE 3 : Décomposition multiplicative du grandient de la transformation en une partie élastique et une partie thermique (d'après LUBARDA [Lubarda 04]).

Cas d'une dilatation thermique isotrope Dans le cas d'une dilatation thermique isotrope, $\underline{\mathbf{F}}^e$ et $\underline{\mathbf{F}}_{T^i}^\theta$ commutent et l'on peut écrire :

$$(55) \quad \underline{\mathbf{C}} = \underline{\mathbf{F}}^{e\ T} \underline{\mathbf{F}}^e \underline{\mathbf{F}}_{T^i}^{\theta\ T} \underline{\mathbf{F}}_{T^i}^\theta = \underline{\mathbf{C}}^m \underline{\mathbf{C}}_{T^i}^\theta = (1 + \eta)^2 \underline{\mathbf{C}}^m$$

A.1.2 Cas des déformations de GREEN-LAGRANGE dans le cas isotrope

Dans le cas isotrope, suivant Lubarda [Lubarda 04], il est possible de définir trois déformations de GREEN-LAGRANGE :

- le tenseur des déformations totales $\underline{\epsilon}_{GL}^{to} = \frac{1}{2} (\underline{\mathbf{F}}^T \underline{\mathbf{F}} - \underline{\mathbf{I}})$, mesure relative au référentiel initial ;
- le tenseur des déformations élastiques $\underline{\epsilon}_{GL}^{el} = \frac{1}{2} (\underline{\mathbf{F}}^{e\ T} \underline{\mathbf{F}}^e - \underline{\mathbf{I}})$, mesure relative au référentiel intermédiaire après dilatation thermique ;
- le tenseur des déformations thermiques $\underline{\epsilon}_{GL}^{th} = \frac{1}{2} (\underline{\mathbf{F}}_{T^i}^{\theta\ T} \underline{\mathbf{F}}_{T^i}^\theta - \underline{\mathbf{I}})$, mesure relative au référentiel initial.

Le tenseur des déformations thermiques a l'expression suivante :

$$\underline{\epsilon}_{GL}^{th} = ((1 + \eta)^2 - 1) \underline{\mathbf{I}}$$

L'équation (55) permet de relier ces différents tenseurs :

$$\underline{\epsilon}_{GL}^{el} = \frac{1}{(1 + \eta)^2} [\underline{\epsilon}_{GL}^{to} - \underline{\epsilon}_{GL}^{th}]$$

Cette relation est l'équivalent de la partition des déformations des petites déformations⁵.

A.1.3 Application aux déformations logarithmiques dans le cas isotrope

En prenant le logarithme de l'expression (54) pour définir la déformation de HENKY $\underline{\varepsilon}_{\ln}^{to}$, nous obtenons :

$$\underline{\varepsilon}_{\ln}^{to} = \frac{1}{2} \ln (\underline{\mathbf{C}}) = \frac{1}{2} \ln (\underline{\mathbf{C}}^m) + \frac{1}{2} \ln \left(\underline{\mathbf{C}}_{T^i}^\theta \right)$$

ce qui permet de retrouver la partition classique de la déformation :

$$\underline{\varepsilon}_{\ln}^{to} = \underline{\varepsilon}_{\ln}^m + \underline{\varepsilon}_{\ln}^{th}$$

en définissant la déformation thermique par la relation :

$$\underline{\varepsilon}_{\ln}^{th} = \frac{1}{2} \ln \left(\underline{\mathbf{C}}_{T^i}^\theta \right)$$

$\underline{\mathbf{F}}_{T^i}^\theta$ étant proportionnel à l'identité, nous pouvons également écrire que :

$$\underline{\varepsilon}_{\ln}^{th} = \ln \left(\underline{\mathbf{F}}_{T^i}^\theta \right)$$

où $\underline{\mathbf{F}}_{T^i}^\theta$ se calcule par la formule (54).

Ainsi, les composantes diagonales (qui sont égales) du tenseur des dilatations thermiques s'écrivent :

$$(56) \quad \underline{\varepsilon}_{\ln}^{th} = \ln \left(1 + \frac{\alpha(T)(T - T^\alpha) - \alpha(T^i)(T^i - T^\alpha)}{1 + \alpha(T^i)(T^i - T^\alpha)} \right)$$

Si la dilatation thermique est petite, un développement limité au premier ordre permet de retrouver l'expression (51) de la dilatation thermique en transformations infinitésimales.

A.1.4 Application aux déformations logarithmiques dans le cas isotrope, en l'absence d'autres phénomènes

Dans le cas anisotrope, F^e et $F_{T^i}^\theta$ ne commutent *a priori* plus.

Si aucun autre phénomène ne contribue à la déformation du corps, ou que le corps est élastique et au repos, la formule (56) s'étendre au cas anisotrope. Dans le repère du matériau, le tenseur des déformations thermiques

5. La relation hyperélastique de SAINT-VENANT-KIRCHHOFF peut être étendue en thermoélasticité ainsi [Lubarda 04] :

$$\underline{\mathbf{S}} = \frac{1}{1 + \eta} [\lambda(T) \operatorname{tr} (\underline{\varepsilon}_{GL}^{to}) \underline{\mathbf{I}} + 2\mu(T) \underline{\varepsilon}_{GL}^{to}] - \frac{1}{2} \left(1 + \eta - \frac{3}{1 + \eta} \right) K(T) \underline{\mathbf{I}}$$

où $\underline{\mathbf{S}}$ est le second tenseur de PIOLA-KIRCHHOFF dans la configuration initiale, $\lambda(T)$, $\mu(T)$ les premiers et seconds coefficients de LAME, $K(T)$ le module de compressibilité.

logarithmiques s'écrit, en notation vectorielle :

$$\underline{\varepsilon}_{\ln}^{th} = \begin{pmatrix} \ln \left(1 + \frac{\alpha_0(T)(T - T^\alpha) - \alpha_0(T^i)(T^i - T^\alpha)}{1 + \alpha_0(T^i)(T^i - T^\alpha)} \right) \\ \ln \left(1 + \frac{\alpha_1(T)(T - T^\alpha) - \alpha_1(T^i)(T^i - T^\alpha)}{1 + \alpha_1(T^i)(T^i - T^\alpha)} \right) \\ \ln \left(1 + \frac{\alpha_2(T)(T - T^\alpha) - \alpha_2(T^i)(T^i - T^\alpha)}{1 + \alpha_2(T^i)(T^i - T^\alpha)} \right) \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

ANNEXE B AUTRES REPRÉSENTATIONS DE LA DILATATION THERMIQUE

ANNEXE B.1 COEFFICIENT DE DILATATION VOLUMIQUE

La définition thermodynamique de la dilatation volumique est :

$$(57) \quad \alpha_V = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_p = \left(\frac{\partial \ln V}{\partial T} \right)_p$$

Partant d'une température de référence T^α , le volume de la structure sera à la température T :

$$\frac{V_T}{V_{T^\alpha}} = \exp \left(\int_{T^\alpha}^T \alpha_V(u) \, du \right)$$

et l'expression de la variation de volume $\Delta V/V_{T^\alpha}$:

$$\frac{\Delta V}{V_{T^\alpha}} = \exp \left(\int_{T^\alpha}^T \alpha_v(u) \, du \right) - 1$$

Le lien avec le coefficient de dilatation thermique linéique s'en déduit :

$$\frac{\Delta V}{V_{T^\alpha}} = \frac{V_T}{V_{T^\alpha}} - 1 = \left(\frac{l_T}{l_{T^\alpha}} \right)^3 - 1 = \left(\frac{l_T - l_{T^\alpha}}{l_{T^\alpha}} + 1 \right)^3 - 1 = \left(\frac{\Delta l}{l_{T^\alpha}} + 1 \right)^3 - 1$$

Ceci nous permet de retrouver la définition (50) du coefficient de dilatation thermique α :

$$\alpha(T) = \frac{1}{T - T^\alpha} \left[\exp \left(\frac{1}{3} \int_{T^\alpha}^T \alpha_v(u) \, du \right) - 1 \right]$$

ANNEXE B.2 COEFFICIENT DE DILATATION LINÉIQUE « INSTANTANÉ »

On rencontre souvent un coefficient de dilatation thermique linéique dite instantané α_l :

$$(58) \quad \alpha_l = \frac{1}{l} \frac{dl}{dT} = \frac{d \ln l}{dT}$$

Cette définition est proche de la définition du coefficient de dilatation volumique (57).

Le lien avec la définition (50) du coefficient de dilatation thermique moyen α s'obtient de la même manière qu'au paragraphe B.1 :

$$\alpha(T) = \frac{1}{T - T^\alpha} \left[\exp \left(\int_{T^\alpha}^T \alpha_l(u) \, du \right) - 1 \right]$$

ANNEXE C REPRÉSENTATION VECTORIELLE DES TENSEURS D'ORDRE 2 NON SYMÉTRIQUES

Les tenseurs d'ordre 2 non symétriques, généralement décrit par des matrices, sont représentés dans `tfe1` par un vecteur dont les composantes sont, en 3D :

$$\underline{\mathbf{F}} = \begin{pmatrix} F_{00} \\ F_{11} \\ F_{22} \\ F_{01} \\ F_{10} \\ F_{02} \\ F_{20} \\ F_{12} \\ F_{21} \end{pmatrix}$$

Il est possible de vérifier que le produit scalaire des représentations vectorielles de deux tenseurs est égal au produit scalaire usuel sur les matrices :

$$\underline{\mathbf{F}} \cdot \underline{\mathbf{G}} = \text{tr} \left(\underline{\mathbf{F}}^T \cdot \underline{\mathbf{G}} \right)$$

ANNEXE D DÉRIVATION DE LA MULTIPLICATION MATRICIELLE

Les lois en grandes transformations introduisent une nouvelle opération entre tenseurs : la multiplication matricielle. Pour simplifier, nous la noterons \star dans le cadre de cette annexe.

Soient deux tenseurs $\underline{\mathbf{A}}(\underline{\mathbf{X}})$ et $\underline{\mathbf{B}}(\underline{\mathbf{X}})$ dépendant d'un troisième tenseur $\underline{\mathbf{X}}$. L'objet de cet annexe est de calculer la dérivée suivante :

$$(59) \quad \frac{\partial}{\partial \underline{\mathbf{X}}} (\underline{\mathbf{A}}(\underline{\mathbf{X}}) \star \underline{\mathbf{B}}(\underline{\mathbf{X}}))$$

La multiplication matricielle étant bilinéaire, il existe deux tenseurs d'ordre 4 linéaires tels que :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \underline{\mathbf{A}}} (\underline{\mathbf{A}} \star \underline{\mathbf{B}}) &= \partial_*^l (\underline{\mathbf{B}}) \\ \frac{\partial}{\partial \underline{\mathbf{B}}} (\underline{\mathbf{A}} \star \underline{\mathbf{B}}) &= \partial_*^r (\underline{\mathbf{A}}) \end{aligned}$$

Ces tenseurs d'ordre 4 permettent de développer la dérivée (59) ainsi :

$$(60) \quad \frac{\partial}{\partial \underline{\mathbf{X}}} (\underline{\mathbf{A}}(\underline{\mathbf{X}}) \star \underline{\mathbf{B}}(\underline{\mathbf{X}})) = \partial_*^l (\underline{\mathbf{B}}) \frac{\partial \underline{\mathbf{A}}}{\partial \underline{\mathbf{X}}} + \partial_*^r (\underline{\mathbf{A}}) \frac{\partial \underline{\mathbf{B}}}{\partial \underline{\mathbf{X}}}$$

Cette expression est extrêmement utile en pratique, car elle simplifie les expressions de toutes les opérations de dérivation.

L'expression des tenseurs d'ordre 4 $\partial_*^l (\underline{\mathbf{B}})$ et $\partial_*^r (\underline{\mathbf{A}})$ est assez complexe, d'autant plus que l'on utilise dans `mfront` la représentation vectorielle des tenseurs décrite en annexe C.

En utilisant cette représentation vectorielle, il est possible de donner une représentation matricielle des tenseurs d'ordre 4 $\partial_*^l (\underline{\mathbf{B}})$ et $\partial_*^r (\underline{\mathbf{A}})$.

En 3D, $\partial_*^l(\underline{\mathbf{B}})$ s'exprime ainsi :

$$\begin{pmatrix} B_0 & 0 & 0 & B_4 & 0 & B_6 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & B_1 & 0 & 0 & B_3 & 0 & 0 & B_8 & 0 \\ 0 & 0 & B_2 & 0 & 0 & 0 & B_5 & 0 & B_7 \\ B_3 & 0 & 0 & B_1 & 0 & B_8 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & B_4 & 0 & 0 & B_0 & 0 & 0 & B_6 & 0 \\ B_5 & 0 & 0 & B_7 & 0 & B_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & B_6 & 0 & 0 & 0 & B_0 & 0 & B_4 \\ 0 & B_7 & 0 & 0 & B_5 & 0 & 0 & B_2 & 0 \\ 0 & 0 & B_8 & 0 & 0 & 0 & B_3 & 0 & B_1 \end{pmatrix}$$

On constate que cette expression est :

- non triviale. Un opérateur, noté $\underline{\otimes}$ permet d'en donner une écriture plus compacte :

$$\partial_*^l(\underline{\mathbf{B}}) = \underline{\mathbf{I}} \underline{\otimes} \underline{\mathbf{B}}^T$$

De manière similaire, l'opérateur $\partial_*^l(\underline{\mathbf{A}})$ s'écrit :

$$\partial_*^l(\underline{\mathbf{A}}) = \underline{\mathbf{A}} \underline{\otimes} \underline{\mathbf{I}}$$

De manière générale, cette opérateur transforme deux tenseurs d'ordre 2 $\underline{\mathbf{A}}$ et $\underline{\mathbf{B}}$ en un tenseur d'ordre 4 $\underline{\mathbf{C}}$

tel que :

$$\underline{\mathbf{C}}_{ijkl} = \underline{\mathbf{A}}_{ik} \underline{\mathbf{B}}_{jl}$$

L'introduction de cet opérateur ne nous a pas semblé opportun.

- creuse. Cette particularité sera utilisée pour optimiser le calcul de la dérivée par la formule (60) au paragraphe ??.

Calcul de la dérivée d'un produit matriciel La classe `t2tot2`, qui représente les opérations linéaires entre tenseurs d'ordre 2 non symétriques (elle représente donc des tenseurs d'ordre 4), fournit deux méthodes statiques nommées respectivement `tpld` (tensor product left derivative) et `tprd` (tensor product right derivative) pour calculer les tenseurs d'ordre 4 $\partial_*^l(\underline{\mathbf{B}})$ et $\partial_*^l(\underline{\mathbf{A}})$.

Optimisation La formule (60) montre que les tenseurs $\partial_*^l(\underline{\mathbf{B}})$ et $\partial_*^l(\underline{\mathbf{A}})$ sont souvent amenés à être composés avec d'autres tenseurs d'ordre 4. En 3D, cette composition est équivalente au produit de deux matrices de taille 9×9 . Il est intéressant de l'optimiser en tenant compte de la nature creuse de $\partial_*^l(\underline{\mathbf{B}})$ et $\partial_*^l(\underline{\mathbf{A}})$.

La classe `t2tot2` fournit donc également deux méthodes statiques, également nommées `tpld` et `tprd`. La première prend en argument le tenseur $\underline{\mathbf{B}}$ et le tenseur d'ordre 4 $\frac{\partial \underline{\mathbf{A}}}{\partial \underline{\mathbf{X}}}$ et retourne un tenseur d'ordre 4 égal à

$$\partial_*^l(\underline{\mathbf{B}}) \frac{\partial \underline{\mathbf{A}}}{\partial \underline{\mathbf{X}}}. \text{ La seconde méthode réalise un travail symétrique.}$$

La classe `st2tot2`, qui représente les opérations linéaires entre tenseurs d'ordre 2 symétriques (qui représente donc aussi des tenseurs d'ordre 4), fournit également quatre méthodes statiques nommées respectivement `tpld` (tensor product left derivative) et `tprd` (tensor product right derivative) dont le rôle est similaire à celui des leurs homologues du cas non symétrique.