Analyse thermo-mécanique tridimensionnelle fortement couplée des structures composites par la méthode FE²

Three-dimensional fully coupled thermo-mechanical analysis of composite structures by means of FE^2 computations

E. Tikarrouchine¹, G. Chatzigeorgiou¹, Y. Chemisky² et F. Meraghni¹

1 : Arts et Métiers ParisTech, LEM3-UMR 7239 CNRS, Address, 4 rue Augustin Fresnel, 57078 Metz, France e-mail : El-Hadi.TIKARROUCHINE@ensam.eu, Georges.chatzigeorgiou@ensam.eu et fodil.meraghni@ensam.eu

> 2 : Université de Bordeaux I2M-UMR CNRS 5295, Bordeaux, France e-mail : yves.chemisky@u-bordeaux.fr

Résumé

Le présent article propose une approche multi-échelles par éléments finis (FE²). Elle est basée sur le principe d'homogénéisation périodique pour les problèmes thermo-mécaniques fortement couplés. Le but de ce travail est de prédire la réponse macroscopique 3-D non linéaire des structures composites périodiques intégrant l'effet de vitesse de chargement en régime thermo-mécanique couplé. Les lois de comportement des constituants utilisées dans les analyses obéissent aux lois de matériaux standards généralisées, tandis que les équations caractéristiques du problème (loi d'équilibre, première loi de la thermodynamique) sont exprimées et satisfaites aux deux échelles (microscopique et macroscopique). Pour la mise en œuvre numérique de l'approche, le logiciel commercial de calcul par éléments finis Abaqus est utilisé aux deux échelles dans le cadre de petites déformations et rotations. Un ensemble de scripts python et sous-programme utilisateur (UMAT) sont développés pour permettre la connexion entre la structure macroscopique et la cellule unitaire microscopique attachée à chaque point d'intégration macroscopique. Le cadre développé est appliqué pour la simulation des structures composites 3-D complexes constitués d'une matrice thermo-élastique-viscoplastique et des fibres thermo-élastiques. Les capacités et les performances de l'approche sont illustrées à l'aide d'exemples numériques appropriés.

Abstract

The current paper presents a two scale Finite Element approach (FE²), adopting the periodic homogenization method, for fully coupled thermo-mechanical processes. The aim of this work is to predict the overall response of rate-dependent, non-linear, thermo-mechanically coupled problems of 3D periodic composite structures. The material constituents implicated in the analyses obey generalized standard materials laws, while the characteristic equations of the problem (balance law, first law of thermodynamics) are expressed and satisfied in both microscopic and macroscopic scales. For the numerical implementation in both scales, the finite element commercial software ABAQUS is utilized in the framework of small strains and rotations. A set of dedicated scripts and a specially designed Meta-UMAT subroutine allow the connection between the macroscopic structure and the microstructure attached to every macroscopic integration point. The two-scale finite element framework is applied to simulate thermo-elastic-viscoplastic response of complex 3D composite structures, and its capabilities are demonstrated with proper numerical examples. It is worth mentioning that the proposed computational strategy can be applied for any kind of 3D periodic microstructure and non-linear constitutive law.

Mots Clés : Calcul multi-échelles par élément finis, processus thermo-mécanique, homogénéisation périodique, thermoélastique-viscoplastique, méthode des EF².

Keywords : Multi-scale finite element computation, thermo-mechanical processes, periodic homogenization, thermoelastic-viscoplastic material, FE^2 method.

1. Introduction

Les matériaux composites ou plus particulièrement les composites à matrice thermo-plastique sont bien connus pour leur dépendance à la vitesse de chargement. Pour modéliser ces matériaux, il est essentiel de connaitre leur réponse thermo-mécanique en tenant compte de l'effet de la microstructure ainsi que les effets induits par la température résultant principalement de la dissipation mécanique et du couplage thermo-mécanique. Pour cela, des approches de modélisation avancées sont nécessaires. L'objectif principal de ce travail est de proposer un cadre d'homogénéisation multi-échelles pour les problèmes thermo-mécaniques fortement couplés pour prédire le comportement global des structures composites dissipatives hétérogènes, non linéaires à microstructure périodique. Pour des problèmes mécaniques non couplés des composites, de nombreux modèles multi-échelles considérant des matériaux non linéaires ont été proposés dans la littérature [1, 2, 3]. Pour la modélisation des matériaux composites périodiques, la technique EF² est une solution appropriée permettant de calculer la réponse globale de la structure, en tenant compte de l'effet de la microstructure hétérogène [4]. Cependant, très peu de travaux ont été réalisés pour le couplage thermo-mécanique fort dans le cadre de calcul par EF². En effet, la plupart des travaux présentés dans la littérature portant sur l'homogénéisation périodique se concentrent sur des problèmes purement mécaniques ou thermo-mécaniques non couplés.

L'homogénéisation périodique dans le cadre des problèmes thermo-mécaniques couplés a été présentée dans les travaux de Chatzigeorgiou et al [5] qui ont proposé un cadre d'homogénéisation fortement couplé, particulièrement adapté aux composites dissipatifs non linéaires stratifiés. Des applications de calcul par EF^2 basées sur la théorie d'homogénéisation ont été présentées également pour des alliages à mémoire de forme dans [6] ainsi que pour des composites thermo-viscoplastiques en 2-D dans [7]. Un problème thermo-mécanique fortement couplé est également traité par la technique d' EF^2 pour des structures composite 3-D dans [8].

L'originalité du présent travail réside dans le développement d'un cadre d'homogénéisation thermomécanique fortement couplé via un schéma de calcul par EF² pour des structures composites 3-D à l'aide du logiciel commercial d'EF ABAQUS/Standard. L'approche proposée prédit la réponse non linéaire de structures composites de manière générale, indépendamment du type de lois de comportement inélastiques des différents constituants du composite. La stratégie développée est basée sur le concept d'homogénéisation périodique. Elle identifie le comportement macroscopique à chaque point d'intégration macroscopique en y attachant une cellule unitaire périodique et en résolvant les lois d'équilibre microscopiques. Cette cellule unitaire contient toutes les caractéristiques matérielles et géométriques des différents constituants (matrice, fibre/particule) de la microstructure.

La présent manuscrit est organisé de la manière suivante : la section 2 décrit la théorie de l'homogénéisation pour les processus thermo-mécaniques fortement couplés, ainsi que la transition d'échelle entre les champs micro-macro. La section 3 présente l'algorithme de l'approche multi-échelles (EF²) du problème thermo-mécanique entièrement couplé. Les performances de la stratégie sont démontrées par la simulation de la réponse thermo-mécanique d'une structure composite complexe 3-D sous différents trajets de chargement thermo-mécaniques dans la section 4.

2. Principe de transition d'échelles pour les matériaux composites sous conditions thermomécaniques

La théorie d'homogénéisation des milieux périodiques décrit un matériau composite comme un problème à deux échelles : i) l'échelle microscopique définit la microstructure constituant le matériau (fibres, particules, matrice, ...) et ii) l'échelle macroscopique définit la structure global. Au niveau macroscopique, le corps déformable occupe un volume \overline{V} limité par la surface $\partial \overline{V}$, avec un vecteur normal sortant \overline{n} . Chaque point macroscopique est défini par un vecteur de position \overline{x} dans le volume \overline{V} connecté à une cellule unitaire. Au niveau microscopique le matériau est considéré hétérogène et la cellule unitaire contient toutes les informations des différents constituants et leur géométrie. Cette cellule d'unitaire, occupe un volume V délimité par la surface ∂V avec le vecteur normal sortant n. Selon la théorie de l'homogénéisation, la séparation d'échelles donne des résultats précis tant que le volume caractéristique de la cellule unitaire est beaucoup plus petit que le volume caractéristique de la structure $\left(V << \overline{V}\right)$ (Fig. 1). La théorie d'homogénéisation identifie la réponse global du composite à chaque point macroscopique \overline{x} , en calculant les champs thermo-mécaniques macroscopiques à partir



Fig. 1. Représentation schématique du problème de séparation d'échelles.

de leurs champs microscopiques équivalents. Pour cela, des règles de transition d'échelle appropriées entre les variables micro et macro sont introduites. Selon le théorème de la moyenne, lorsque une contrainte, une déformation, un gradient de température ou un flux de chaleur uniforme est appliqué aux limites de la cellule unitaire, les champs microscopiques moyens correspondants sont égaux aux champs appliqués [9] représentant directement la contrainte, la déformation, le gradient de température ou le flux chaleur macroscopique respectivement.

$$\overline{\boldsymbol{\sigma}} = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = \frac{1}{V} \int_{V} \boldsymbol{\sigma} \, dV = \frac{1}{V} \int_{\partial V} \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{n} \otimes \boldsymbol{x} \, dS, \tag{Eq. 1}$$

$$\overline{\boldsymbol{\varepsilon}} = \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle = \frac{1}{V} \int_{V} \boldsymbol{\varepsilon} \, dV = \frac{1}{2V} \int_{\partial V} (\boldsymbol{u} \otimes \boldsymbol{n} + \boldsymbol{n} \otimes \boldsymbol{u}) \, dS, \tag{Eq. 2}$$

$$\overline{\boldsymbol{\nabla}\theta} = \langle \boldsymbol{\nabla}\theta \rangle = \frac{1}{V} \int_{V} \boldsymbol{\nabla}\theta \, dV = \frac{1}{V} \int_{\partial V} \theta \boldsymbol{n} \, dS, \tag{Eq. 3}$$

$$\overline{\boldsymbol{q}} = \langle \boldsymbol{q} \rangle = \frac{1}{V} \int_{V} \boldsymbol{q} \, dV = \frac{1}{V} \int_{\partial V} (\boldsymbol{q} \cdot \boldsymbol{n}) \boldsymbol{x} \, dS.$$
(Eq. 4)

Dans les expressions ci-dessus σ , ε , $\overline{\sigma}$ et $\overline{\varepsilon}$ représentent les tenseurs de contrainte et de déformation microscopiques et macroscopiques respectivement, tandis que $\nabla \theta$, q, $\overline{\nabla \theta}$ et \overline{q} désignent le gradient de température et le flux de chaleur microscopiques et macroscopiques respectivement. De plus, u est le vecteur de déplacement microscopique. L'opérateur $\langle \bullet \rangle$ correspond à la valeur moyenne d'un champ microscopique.

Le mouvement de tout point matériel macroscopique et microscopique $\overline{M}(\overline{x})$ et $M(\overline{x}, x)$ respectivement, est régi par les équations macroscopiques et microscopiques présentées dans le Tab. 1. Dans ce tableau, $\overline{\rho b}$ et $\overline{\rho R}$ représentent les forces de volume macroscopique et le terme de source de chaleur respectivement. De plus, η et $\overline{\eta} = \langle \eta \rangle$ désignent l'entropie spécifique microscopique et macroscopique. Il est à noter que la température $\overline{\theta}$ apparaît uniquement par sa valeur macroscopique, c'est-à-dire que la cellule unitaire qui correspond à un point macroscopique est soumise à une température (macroscopique) uniforme $\theta = \overline{\theta}$. Cette condition dérive de la théorie d'homogénéisation par expansion asymptotique d'ordre zéro et de son application aux principes de la thermodynamique [5, 9].

2.1. Problème macroscopique

Le corps déformable \overline{V} présenté dans la Fig. 1 est soumis à des conditions aux limites thermomécaniques sur sa surface $\partial \overline{V}$. Si on néglige les effets d'inertie, la conservation de la quantité de mouvement linéaire et l'équation du bilan énergétique à l'échelle macroscopique sont écrites comme suit :

$$\overline{\operatorname{div}}(\overline{\sigma}) + \frac{\overline{\rho}}{3} \overline{\rho} \overline{b} = \mathbf{0}, \qquad (\text{Eq. 5})$$

Équations	Échelle-macro	Échelle-micro
	$\forall \overline{x} \in \overline{V}$	$\forall \overline{x} \in \overline{V}, \forall x \in V$
Terme d'énergie r	$\overline{r} = \overline{\sigma} : \dot{\overline{\varepsilon}} - \dot{\overline{e}} = \langle r \rangle$	$r = \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} - \dot{\boldsymbol{e}}$
Équilibre	$\overline{\operatorname{div}}(\overline{\sigma})+\overline{\rho b}=0$	$\operatorname{div}(\sigma) = 0$
Bilan énergétique	$\overline{r} - \overline{\operatorname{div}}\left(\overline{\boldsymbol{q}}\right) + \overline{\rho R} = 0$	$\operatorname{div}(\boldsymbol{q}) = 0$
Déformations	$\overline{\boldsymbol{\varepsilon}} = \overline{\mathbf{grad}}_{sym}(\overline{\boldsymbol{u}})$	$\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{grad}_{sym}(\boldsymbol{u})$
Lois constitutives	$\overline{\boldsymbol{\sigma}} \equiv \overline{\boldsymbol{\sigma}} \left(\overline{\boldsymbol{x}}, \overline{\boldsymbol{\varepsilon}}, \overline{\boldsymbol{\theta}} \right)$	$\boldsymbol{\sigma} \equiv \boldsymbol{\sigma}\left(\overline{\boldsymbol{x}}, \overline{\boldsymbol{\theta}}, \boldsymbol{x}, \boldsymbol{\varepsilon}\right)$
Énergies de déformation	$\dot{\overline{W}}_{\varepsilon} = \overline{\sigma} : \dot{\overline{\varepsilon}}$	$\dot{W}_{arepsilon} = oldsymbol{\sigma} : \dot{oldsymbol{arepsilon}}$
Inégalités d'entropie	$\overline{\theta}\overline{\overline{\eta}} + \overline{r} - \frac{\overline{q}}{\overline{\theta}} \cdot \overline{\nabla}\overline{\theta} \ge 0$	$\overline{\theta}\dot{\eta} + r - \frac{q}{\overline{\theta}} \cdot \boldsymbol{\nabla}\theta \ge 0$

Tab. 1. Transition d'échelle entre les champs macroscopiques et microscopiques [5]. Les scalaires e et \overline{e} désignent l'énergie interne microscopique et macroscopique respectivement.

$$\overline{r} - \overline{\operatorname{div}}\left(\overline{\boldsymbol{q}}\right) + \overline{\rho R} = 0.$$
(Eq. 6)

De plus, les relations entre la déformation et le gradient de température macroscopique sont données par :

$$\overline{\boldsymbol{\varepsilon}} = \overline{\mathbf{grad}}_{svm}(\overline{\boldsymbol{u}}) \quad \text{dans} \quad \overline{V}. \tag{Eq. 7}$$

$$\overline{\nabla \theta} = \overline{\mathbf{grad}}(\overline{\theta}) \quad \text{dans} \quad \overline{V}. \tag{Eq. 8}$$

Les lois de conservation sont généralement accompagnées des conditions aux limites de type Dirichlet, Neumann ou des conditions aux limites thermo-mécaniques mixtes : En règle générale, le déplacement prescrit $\overline{u}^{prescrit}$ peut être appliqué sur la surface $\overline{\partial V}^{EB}$, une traction externe \overline{t} peut être appliquée sur la surface $\overline{\partial V}^{NB}$, une température prescrit $\overline{\theta}^{prescrit}$ peut être considérée sur la surface $\overline{\partial V}^{\theta B}$ et un flux de chaleur externe \overline{q}^{s} peut être appliqué sur la surface $\overline{\partial V}^{QB}$,

$$\begin{cases}
\overline{\boldsymbol{u}} = \overline{\boldsymbol{u}}^{prescrit} & \text{sur } \overline{\partial V}^{EB}, \\
\overline{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \overline{\boldsymbol{n}} = \overline{\boldsymbol{t}} & \text{sur } \overline{\partial V}^{NB}, \\
\overline{\boldsymbol{\theta}} = \overline{\boldsymbol{\theta}}^{prescrit} & \text{sur } \overline{\partial V}^{\boldsymbol{\theta}B}, \\
-\overline{\boldsymbol{q}} \cdot \overline{\boldsymbol{n}} = \overline{\boldsymbol{q}}^{s} & \text{sur } \overline{\partial V}^{QB}.
\end{cases}$$
(Eq. 9)

2.2. Problème microscopique

Comme mentionné précédemment, une cellule unitaire périodique est attribuée à chaque point d'intégration macroscopique. Au niveau de cette cellule unitaire, l'équation d'équilibre microscopique est résolue en considérant que la température est constante en chaque point de la cellule unitaire. Celle-ci est égale à la température macroscopique comme défini par la théorie d'expansion asymptotique d'ordre zéro. Le terme énergétique r et les modules tangents thermo-mécaniques sont également identifiés pour la même température macroscopique voir [8].

Considérant le problème purement thermique, le bilan énergétique microscopique est réduit à l'équation de conduction de la chaleur en régime permanent. Dans ce sens, les problèmes thermo-mécaniques couplés et thermiques purs peuvent être traités séparément [5, 8].

Problème microscopique thermo-mécaniquement couplé

Dans la partie mécanique du problème, la contrainte microscopique est évaluée à travers l'équilibre microscopique, dans laquelle la déformation macroscopique et la température sont utilisées comme

données d'entrée. Une fois le problème mécanique microscopique résolu, la contrainte macroscopique est évaluée en faisant la moyenne des contraintes microscopiques sur le VER. Comme information supplémentaire, on obtient également le terme d'énergie macroscopique \overline{r} , qui correspond à la valeur moyenne de leurs équivalents microscopiques. Les informations sur les gradients de température microscopiques sont obtenues à partir du problème thermique pur microscopique et ne sont pas nécessaires à ce stade.

Le système d'équilibre microscopique est résolu à travers des conditions aux limites de déplacement périodique (CLPs) sous une température macroscopique uniforme $\overline{\theta}$. La condition de périodicité implique que le champ de déplacement u est décrit par une partie affine, ainsi qu'une fluctuation périodique \widetilde{u} :

$$\boldsymbol{u}\left(\overline{\boldsymbol{x}},\boldsymbol{x},t\right) = \overline{\boldsymbol{\varepsilon}}\left(\overline{\boldsymbol{x}},t\right) \cdot \boldsymbol{x} + \widetilde{\boldsymbol{u}}\left(\overline{\boldsymbol{x}},\boldsymbol{x},t\right).$$
(Eq. 10)

La partie fluctuante \tilde{u} prend les mêmes valeurs sur chaque paire de nœuds parallèles opposés de la cellule unitaire. La moyenne de la déformation produite par \tilde{u} est nulle. En revanche, la moyenne de la déformation microscopique totale est égale à la déformation macroscopique :

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}) = \boldsymbol{\overline{\varepsilon}} + \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\widetilde{u}}), \quad (\text{Eq. 11})$$

$$\langle \boldsymbol{\varepsilon} \left(\boldsymbol{u} \right) \rangle = \overline{\boldsymbol{\varepsilon}} + \langle \boldsymbol{\varepsilon} \left(\widetilde{\boldsymbol{u}} \right) \rangle = \overline{\boldsymbol{\varepsilon}}.$$
 (Eq. 12)

De plus, le vecteur de traction σ . *n* est anti-périodique. Le système d'équilibre mécanique microscopique en absence de force de volume est donné par le système d'équation suivant :

$$\begin{cases} \operatorname{div}\left(\sigma\left(\overline{x},\overline{\theta},x,\varepsilon\right)\right) = \mathbf{0} & \forall x \in V, \\ \sigma = F\left(\overline{x},\overline{\theta},x,\varepsilon\right) & \forall x \in V, \\ \theta = \overline{\theta} & \forall x \in V, \\ u_{i} - u_{j} = \overline{\varepsilon} \cdot (x_{i} - x_{j}) & \forall x \in \partial V. \end{cases}$$
(Eq. 13)

avec u_i et u_j les vecteurs de déplacement pour les positions x_i et x_j respectivement, qui représentent une paire des points matériels parallèles opposés sur les limites de la cellule unitaire.

Problème thermique pur : calcul du conductivité thermique macroscopique

La théorie d'homogénéisation d'ordre zéro réduit le bilan énergétique microscopique à l'équation de conduction de la chaleur en régime permanent :

div
$$\left(\boldsymbol{q}\left(\overline{\boldsymbol{x}},\overline{\boldsymbol{\theta}},\boldsymbol{x}\right)\right) = 0$$
, with $\boldsymbol{q} = -\boldsymbol{\kappa} \cdot \boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{\theta}$, $\forall \boldsymbol{x} \in V$. (Eq. 14)

Généralement dans les solides, le tenseur de conductivité thermique κ est considéré constant et indépendant de la température. Pour résoudre l'équation du bilan énergétique (Eq. 14), des conditions aux limites périodiques en température sont prises en compte. L'hypothèse de périodicité implique que le champ de température θ est égal à la somme d'une partie macroscopique $\overline{\nabla \theta}$ et une fluctuation périodique $\overline{\theta}$:

$$\theta\left(\overline{\mathbf{x}}, \mathbf{x}, t\right) = \overline{\mathbf{\nabla}\theta}\left(\overline{\mathbf{x}}, t\right) \cdot \mathbf{x} + \widetilde{\theta}\left(\overline{\mathbf{x}}, \mathbf{x}, t\right).$$
(Eq. 15)

La partie fluctuante prend la même valeur sur chaque point parallèle opposé sur les limites de la cellule unitaire. En appliquant l'opérateur gradient, l'équation (Eq. 15) donne :

$$\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{\theta} = \overline{\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{\theta}} + \boldsymbol{\nabla}\widetilde{\boldsymbol{\theta}}.$$
 (Eq. 16)

La moyenne de (Eq. 16) donne (Eq. 3). La périodicité de la température microscopique est accompagnée par l'anti-périodicité du vecteur de flux de chaleur $-q \cdot n$. Le bilan énergétique microscopique (Eq. 14) est un problème linéaire qui peut être résolu une fois pour calculer le tenseur de conductivité thermique macroscopique $\overline{\kappa}$. En effet, la substitution de (Eq. 16) dans (Eq. 14) donne :

div
$$\left(\boldsymbol{\kappa} \cdot \left(\overline{\boldsymbol{\nabla}\theta} + \boldsymbol{\nabla}\widetilde{\theta}\right)\right) = 0.$$
 (Eq. 17)

En supposant que le gradient de température macroscopique $\overline{\nabla \theta}$ est connu, la solution de l'équation homogène ci-dessus est écrite sous la forme suivante :

$$\widetilde{\theta} = \boldsymbol{\psi}^{\theta} \cdot \overline{\boldsymbol{\nabla}\theta}, \qquad (\text{Eq. 18})$$

où ψ^{θ} est un vecteur périodique appelé le vecteur correcteur. La substitution de (Eq. 18) dans (Eq. 17) donne :

$$\overline{\boldsymbol{\nabla}\theta}\operatorname{div}\left(\left[\boldsymbol{\kappa}+\boldsymbol{\kappa}\,\tilde{\cdot}\,\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{\psi}^{\theta}\right]^{T}\right)=0. \tag{Eq. 19}$$

La dernière expression doit être satisfaite pour toute valeur arbitraire de la variable macroscopique $\overline{\nabla \theta}$. À l'aide de (Eq. 16) et (Eq. 18), le flux de chaleur (Eq. 14)₂ est écrit comme :

$$\boldsymbol{q} = -\boldsymbol{\kappa} \cdot \boldsymbol{A}^{\kappa} \cdot \overline{\boldsymbol{\nabla}\theta}, \quad \text{avec} \quad \boldsymbol{A}^{\kappa} = \boldsymbol{I} + \left[\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{\psi}^{\theta}\right]^{T}.$$
 (Eq. 20)

En faisant la moyenne de Eq. 20 et en supposant également que le flux de chaleur macroscopique est exprimé par une loi de comportement similaire à sa contrepartie microscopique,

$$\overline{q} = -\overline{\kappa} \cdot \overline{\nabla \theta}, \tag{Eq. 21}$$

donne le tenseur de conductivité thermique macroscopique $\overline{\kappa}$,

$$\overline{\boldsymbol{\kappa}} = \langle \boldsymbol{\kappa} \cdot \boldsymbol{A}^k \rangle. \tag{Eq. 22}$$

3. Calcul multi-échelles par EF^2 d'un problème thermo-mécanique fortement couplé

Pour prédire le comportement macroscopique d'une structure composite tout en tenant compte des effets de la microstructure ainsi que le couplage thermo-mécanique fort, un schéma d'homogénéisation dans le cadre de la technique EF² a été mis en place. Le cadre décrit ici, est celui proposé dans [8]. Donc pour résoudre un tel type de problème fortement couplé, on suppose que le matériau est un milieu homogénéisé au niveau de la macro-structure. Cette dernière est soumise à des conditions aux limites thermo-mécaniques appropriées. Par conséquent, la réponse de tout point macroscopique est obtenue à partir de la solution d'un problème microscopique thermo-mécanique couplé au niveau de la cellule unitaire, en utilisant des conditions aux limites périodiques.

L'algorithme de la méthode d'éléments finis à deux échelles permet de calculer la réponse thermomécanique macroscopique non linéaire et totalement intégrée dans le logiciel EF Abaqus/Standard, il est présenté dans la Fig. 2.

Calcul des opérateurs tangents thermo-mécanique macroscopiques

Afin d'accélérer la convergence globale, les opérateurs tangents thermo-mécaniques macroscopiques $\overline{\mathbb{D}}^{\varepsilon}, \overline{D}^{\theta}, \overline{R}^{\varepsilon}$ et \overline{R}^{θ} sont introduits dans le processus de convergence du calcul EF [4]. Ces opérateurs tangents sont calculés en faisant le mappage des opérateurs tangents thermo-mécaniques microscopiques sur la cellule unitaire par l'intermédiaire des CLPs. Les CLPs peuvent être appliquées numériquement sur la cellule en utilisant le concept des nœuds de pilotage. Cette technique introduit six nœuds fictifs sous forme de degrés de liberté supplémentaires qui permettent d'appliquer n'importe quel état de déformation, de contrainte ou mixte contrainte/déformation macroscopique sur une cellule unitaire périodique. Ces degrés de liberté sont liés à la cellule unitaire par l'équation cinématique (Eq. 13)₄. Le déplacement attribué à ces nœuds de pilotages représente les déformations macroscopiques [4]. Pour calculer les opérateurs tangents thermo-mécaniques, sept cas de chargements élémentaires sont effectués au niveau microscopique (Fig. 3). Les opérateurs tangents microscopiques $\mathbb{D}^{\varepsilon}, D^{\theta}, R^{\varepsilon}$ et R^{θ} en chaque point d'intégration de la cellule unitaire sont utilisés comme entrées dans ces analyses et sont considérés comme constants.



Fig. 2. L'organigramme de l'algorithme de calcul par EF^2 pour une réponse thermo-mécanique non linéaire fortement couplée d'un composite dans Abaqus. \mathbb{A}^{ε} et \mathbf{A}^{θ} désignent les tenseurs de concentrations mécanique et thermique respectivement, tandis que V_k désigne l'ensemble des variables d'état internes.



Fig. 3. Connexion des nœuds de pilotages avec la cellule unitaire pour le calcul des modules tangents thermomécanique macroscopiques.

Calcul du tenseur de la conductivité thermique macroscopique

La conductivité thermique macroscopique $\overline{\kappa}$ est calculée une fois au début de la procédure d' EF^2 séparément de la procédure itérative. Pour appliquer un gradient de température macroscopique $\overline{\nabla \theta}$ sur la cellule unitaire en tenant compte des conditions aux limites périodiques en température, un champ de température est appliqué entre chaque paire de nœuds parallèles opposées. Ce champ de température est lié au gradient de température macroscopique par la relation générale suivante :

$$\theta^{i} - \theta^{j} = \overline{\nabla} \overline{\theta} \cdot \left(\mathbf{x}^{i} - \mathbf{x}^{j} \right).$$
 (Eq. 23)

D'un point de vue technique, à l'aide du concept des nœuds de pilotages, on peut appliquer numériquement les trois composantes du vecteur de gradient de température macroscopique $\nabla \theta$ sur la cellule unitaire, tout en tenant compte des conditions aux limites périodiques en température. L'analyse de transfert de chaleur dans Abaqus permet de calculer un vecteur de flux de chaleur sur ces nœuds fictifs, qui correspond directement au flux de chaleur macroscopique \overline{q} multiplié par le volume de la cellule unitaire. Pour obtenir le tenseur de conductivité thermique macroscopique, les trois cas de chargement thermique correspondant au gradient de température macroscopique unitaire sont appliqués sur la cellule unitaire :

$$\overline{\boldsymbol{\nabla}}\overline{\boldsymbol{\theta}}^{1} = (1 \ 0 \ 0)^{T}, \quad \overline{\boldsymbol{\nabla}}\overline{\boldsymbol{\theta}}^{2} = (0 \ 1 \ 0)^{T}, \quad \overline{\boldsymbol{\nabla}}\overline{\boldsymbol{\theta}}^{3} = (0 \ 0 \ 1)^{T}, \quad (\text{Eq. 24})$$

Les flux de chaleur macroscopiques \overline{q}^1 , \overline{q}^2 et \overline{q}^3 générés sur les nœuds de pilotages fictifs, correspondent directement aux trois colonnes du tenseur de conductivité thermique macroscopique :

$$(\overline{\kappa})_{ij} = (\overline{q}^i)_j.$$
 (Eq. 25)

Applications et capacités de l'approche EF² 4.

L'approche d'EF² proposée ici est appliquée sur une structure composite 3-D complexe constituée d'une matrice thermo-élastique-viscoplastique et renforcée par des fibres de verre courtes ayant un comportement thermo-élastique. L'objectif principal de cette section est de démontrer les performances de la technique d'EF² dans le cadre thermo-mécanique fortement couplé afin de prédire la réponse globale de structures composites soumises à des chargements thermo-mécaniques. Pour cela, une structure 3-D non symétrique constituée d'une matrice polymère renforcée par des fibres de verre courtes alignées et disposées selon un arrangement hexagonal périodique (Fig. 4-a) est simulée à travers l'approche EF². La Fig. 4b présente les conditions aux limites thermo-mécaniques macroscopiques



Fig. 4. (a) Dimensions et discrétisation spatiale de la macro-structure ainsi que la cellule unitaire utilisée. (b) Conditions aux limites thermo-mécaniques ainsi que le trajet de chargement mécanique appliqué sur la structure.

appliquées sur la structure. La structure est encastrée sur son côté gauche et soumise à un trajet de chargement mécanique sur son côté droit (Fig. 4b). Dans la Fig. 4b, \overline{q}_i est le flux de chaleur à travers la surface, h_{ci} est le coefficient d'échange thermique du fluide qui entoure la surface. $\overline{\theta}$ et $\overline{\theta}_0$ sont la température en un point de la surface et la température extérieur. La trajectoire de chargement consiste en deux étapes de chargement avec des vitesses différentes ($\dot{\overline{u}}_x^{(1)} = 2.0 \times 10^{-2} \, mm.s^{-1}$ et $\dot{u}_x^{(2)} = 2.0 \times 10^{-3} \, mm.s^{-1}$) suivies d'une étape de déchargement avec une vitesse de déplacement de $\dot{u}_x^{(3)} = 2.2 \times 10^{-2} \, mm.s^{-1}$. Les conditions convectives sont appliquées sur la surface avant avec un coefficient d'échange thermique $h_{c1} = 2.0 \times 10^{-4} \, W/mm^2 K$ et sur la surface de dessus avec $h_{c2} = 6.0 \times 10^{-4} W/mm^2 K$ (Fig. 4b). La température initiale de la structure est supposée égale à $\overline{\theta}_{int} = 293.15 \text{ K} (20^{\circ} \text{C})$ et la température extérieur égale à $\overline{\theta}_0 = 310.15 \text{ K} (37^{\circ} \text{C})$.

Les Fig. 5a et 5b présentent la distribution des champs de contraintes macroscopiques et microscopiques dans la direction 11 à t = 200s et t = 300s pour la macro-structure et la cellule unitaire observée au point A. Comme prévu, on voit clairement que la majeure partie de la contrainte est transférée aux fibres (la direction de sollicitation). La Fig. 6 montre les courbes en termes de contrainte-déformation au point A de la structure à la fin du chargement. Les résultats montrent bien que la réponse du composite soit fortement influencée par la présence de la matrice polymère par le biais des phénomènes de relaxation. D'autre part, la réponse en température présente une élévation de 16°C due principalement aux conditions thermiques macroscopique comme présenté dans les Fig. 7a et 7b pour des temps d'analyse de t = 100s, t = 200s et t = 300s.



Fig. 5. (a) Distribution spatio-temporelle du champ des contraintes macroscopiques dans la direction 11 (en MPa) en utilisant l'approche EF^2 pour les temps d'analyse de t = 200s et t = 300s. (b) Distribution spatio-temporelle du champ des contraintes microscopiques dans la direction 11 au point critique A de la structure pour les même temps.



Fig. 6. Évolution de la contrainte macroscopique en fonction de la déformation au point critique A de la structure (Fig. 5a) dans les directions 11, 22, 33 et le cisaillement 12.



Fig. 7. (a) Distribution spatio-temporelle de la température macroscopique (en K) dans la macro-structure pour les temps d'analyse de t = 100s, t = 200s et t = 300s. (b) Évolution de la température macroscopique aux points caractéristiques (A, B, C, D, E et F) pour la durée totale d'analyse.

5. Conclusion

Cet article présente une stratégie de modélisation multi-échelles, thermo-mécanique entièrement couplée (EF²), pour des structures composites tridimensionnelles, en considérant des comportements fortement non linéaires des constituants. L'approche est totalement implémentée dans le code commercial d'EF Abaqus/Standard, en utilisant le calcul parallèle pour la réduction de temps de calcul CPUs. L'avantage principal de la technique de simulation développée réside dans sa capacité à intégrer tous types de microstucture périodique 3-D avec ayant tout type de modèle constitutif thermo-mécanique non linéaire des phases (thermoplastique, thermo-viscoélastique, thermo-élastique-viscoplastique). Les applications numériques simulées ici traitent des comportements de type thermo-élastique-viscoplastique. Les résultats numériques obtenus capturent bien la dépendance de la réponse structurelle à la vitesse de chargement, ainsi que les couplages thermo-mécaniques dans les composites polymères sous un chargement thermo-mécanique complexe. Une structure 3-D complexe non symétrique à matrice polymère thermo-élastique-viscoplastique renforcée par des fibres de verre courtes thermo-élastiques a été étudiée sous un chargement thermo-mécanique complexe. Cet exemple montre

bien l'effet du trajet de chargement ainsi que les effets de couplage thermo-mécanique sur la réponse macroscopique de la structure composite.

Références

- P. M. Suquet « Elements of homogenization for inelastic solid mechanics », in : Lecture Notes in Physics, vol. 272, Springer, Berlin, , pp. 193–278, 1987.
- [2] F. Meraghni, F. Desrumaux, M.-L. Benzeggagh « Implementation of a constitutive micromechanical model for damage analysis in glass mat reinforced composite structures », *Composites Science and Technology* Vol. 62 n° 16, pp. 2087–2097, 2002.
- [3] G. Chatzigeorgiou, Y. Chemisky, F. Meraghni « Computational micro to macro transitions for shape memory alloy composites using periodic homogenization », *Smart Materials and Structures* Vol. 24 n° 3, pp. 035009, 2015.
- [4] E. Tikarrouchine, G. Chatzigeorgiou, F. Praud, P. Piotrowski, Y. Chemisky, F. Meraghni « Three-dimensional FE2 method for the simulation of non-linear, rate-dependent response of composite structures », *Composite Structures* Vol. 193, pp. 165–179, 2018.
- [5] G. Chatzigeorgiou, N. Charalambakis, Y. Chemisky, F. Meraghni « Periodic homogenization for fully coupled thermomechanical modeling of dissipative generalized standard materials », *International Journal of Plasticity* Vol. 81, pp. 18–39, 2016.
- [6] A. Sengupta, P. Papadopoulos, R. L. Taylor « A multiscale finite element method for modeling fully coupled thermomechanical problems in solids », *International Journal for Numerical Methods in Engineering* Vol. 91, pp. 1386–1405, 2012.
- [7] R. Berthelsen, R. Denzer, P. Oppermann, A. Menzel « Computational homogenisation for thermoviscoplasticity : application to thermally sprayed coatings », *Computational Mechanics* Vol. 60, pp. 739–766, 2017.
- [8] E. Tikarrouchine, G. Chatzigeorgiou, Y. Chemisky, F. Meraghni « Fully coupled thermo-viscoplastic analysis of composite structures by means of multi-scale three-dimensional finite element computations », *International Journal* of Solids and Structures Vol. 164, pp. 120 – 140, 2019, ISSN 0020-7683.
- [9] G. Chatzigeorgiou, N. Charalambakis, Y. Chemisky, F. Meraghni, Thermomechanical Behavior of Dissipative Composite Materials, ISTE Press Elsevier, London, 2018.