

# Un cadre variationnel pour l'intégration de modèles de comportement thermomécaniques couplés à des lois de conservation hyperboliques

T. Heuzé<sup>1</sup>, L. Stainier<sup>1</sup>

<sup>1</sup> GeM, Ecole Centrale Nantes, {thomas.heuze, laurent.stainier}@ec-nantes.fr

**Résumé** — On présente dans ce travail un cadre variationnel pour l'intégration de modèles de comportement thermomécaniques pilotés par les taux d'une mesure de déformation et de la densité d'énergie interne, quantités issues de lois de conservation hyperboliques. L'utilisation de ces dernières permet de satisfaire aux conditions de saut au travers des chocs, et de calculer les bonnes vitesses de choc numériquement. Des formulations variationnelles continue et discrète (précise à l'ordre un) sont présentées, et une illustration est faite sur un milieu thermo-élasto-viscoplastique.

**Mots clés** — Formulation variationnelle, Thermo-mécanique, Lois de conservations hyperboliques.

## 1 Introduction

De nombreuses applications de l'ingénieur nécessitent de réaliser des simulations numériques d'impacts sur des structures ayant un comportement dissipatif : crash, formage dynamique et bien d'autres. Dans ces applications, les effets thermiques sont généralement résolus en plus de la mécanique, et permettent entre autres de prendre en compte des équations d'état, l'élévation de température due à l'apparition de déformations inélastiques, ou encore l'adoucissement thermique. En mécanique des solides, la température est généralement choisie comme inconnue principale pour la résolution des effets thermiques [1], essentiellement parce que c'est une grandeur mesurable. En conséquence, les modèles de comportement sont écrits avec l'énergie libre qui est fonction de la température, et couplés avec l'équation de la chaleur et le bilan de la quantité de mouvement. Cependant, les solutions du système hyperbolique peuvent être continues ou discontinues (en présence de chocs en particulier) [2]. Mais l'équation de la chaleur généralement considérée n'est valide que pour des solutions continues et régulières. Pour les solutions discontinues, il faut plutôt considérer l'écriture d'un ensemble de lois de conservations, dont le premier principe de la thermodynamique écrit sur l'énergie totale, qui se réduit aux conditions de Rankine-Hugoniot au travers de discontinuités. Dès lors, il est possible d'envisager la conception d'intégrateurs de lois de comportement pilotés par des quantités directement issues de ces lois de conservation.

Le cadre variationnel est particulièrement intéressant pour construire des intégrateurs de lois de comportement efficaces et thermodynamiquement cohérents. Ce cadre présente des intérêts mathématiques -utilisation de l'analyse convexe, étude de l'existence/unicité des solutions-, physiques -travail sur une fonctionnelle de type énergétique-, et numériques -principe incrémentaux, utilisation d'algorithme d'optimisation, indicateur d'erreur, symétrie des opérateurs. Un intégrateur variationnel de lois de comportement thermomécaniques a tout d'abord été introduit par Yang et *al.* [3], se basant sur une formulation thermique à deux champs  $(T, \Theta)$  et sur l'introduction d'un facteur d'échelle  $T/\Theta$  dans le pseudo-potentiel de dissipation. Ce principe a ensuite été étendu par Mosler et ses collaborateurs (voir, entre autres, [4]) pour tenir compte de l'anisotropie du comportement et d'équations d'évolution non associées. Ce dernier a introduit la notion de pseudo-contraintes permettant une paramétrisation efficace de la direction d'écoulement, et conduisant à la résolution d'un problème d'optimisation non contraint pour une certaine classe de fonctions de charge.

Dans ce travail, on introduit un cadre variationnel pour l'intégration de modèles de comportement thermomécaniques pilotés par les taux d'une mesure de déformation et de la densité d'énergie interne, quantités issues de lois de conservation hyperboliques. L'utilisation de ces dernières permet de satisfaire naturellement aux conditions de saut au travers des chocs, et de calculer les bonnes vitesses de choc numériquement. Des formulations variationnelles continue et discrète (précise à l'ordre un) sont présentées,

et une illustration est faite sur un milieu thermo-élasto-viscoplastique.

## 2 Problème thermomécanique aux valeurs limites et initiales

### 2.1 Lois de conservations

On considère un milieu continu régi par le système de lois de conservation suivant

$$\frac{\partial \mathcal{U}}{\partial t} + \text{DIV } \mathcal{F} = 0, \quad (1)$$

où l'opérateur DIV est défini par rapport aux coordonnées matérielles, et  $\mathcal{U}$  et  $\mathcal{F}$  sont les vecteurs des quantités conservées et les flux associées, définis tels que

$$\mathcal{U} = \begin{Bmatrix} \mathbf{F} \\ \mathbf{p} \\ \mathcal{E} \end{Bmatrix} ; \quad \mathcal{F} = \begin{Bmatrix} -\mathbf{v} \otimes \mathbf{1} \\ -\mathbf{P} \\ -\mathbf{P}^T \cdot \mathbf{v} \end{Bmatrix}. \quad (2)$$

Le vecteur  $\mathcal{U}$  contient le gradient de la transformation  $\mathbf{F}$ , la densité de quantité de mouvement  $\mathbf{p} = \rho_0 \mathbf{v}$  et l'énergie totale

$$\mathcal{E} = E + \frac{\rho_0 \mathbf{v}^2}{2} \quad (3)$$

définie avec la densité d'énergie interne  $E$  et la densité d'énergie cinétique  $K = \rho_0 \mathbf{v}^2/2$ . Aussi, la première équation du système (1) exprime la compatibilité géométrique entre le gradient de la transformation  $\mathbf{F}$  et le champ de vitesse  $\mathbf{v}$ , la seconde est la conservation de la quantité de mouvement, et la troisième est la conservation de la densité d'énergie totale. Par ailleurs, le premier tenseur des contraintes de Piola-Kirchhoff  $\mathbf{P}$  apparaît dans les flux  $\mathcal{F}$  (2).

Des conditions aux limites et initiales appropriées doivent être ajoutées au système (1). Par ailleurs, il est important d'observer que le système (1) se réduit aux conditions de Rankine-Hugoniot au travers de discontinuités des champs

$$S[\mathcal{U}] = [\mathcal{F}] \cdot \mathbf{N}, \quad (4)$$

où  $\mathbf{N}$  est la normale à la surface de discontinuité se propageant à la vitesse  $S$ , et  $[\bullet]$  décrit le saut de la quantité  $(\bullet)$  au travers de la discontinuité, tel que  $[\bullet] = (\bullet)^+ - (\bullet)^-$ .

### 2.2 Loi de comportement

Les deux dernières lois de conservation du système (1) font apparaître le premier tenseur des contraintes de Piola-Kirchhoff  $\mathbf{P}$  qui est une fonction du gradient de la transformation  $\mathbf{F}$  et de la densité d'énergie interne  $E$

$$\mathbf{P} = \mathcal{G}(\mathbf{F}, E(\mathbf{F}, \eta, \mathbf{Z})) \quad (5)$$

au travers de la réponse constitutive, et où  $\mathbf{Z}$  définit un ensemble de variables internes. On considère une réponse constitutive suivant le cadre des matériaux standards généralisés, qui s'appuie sur la définition d'un potentiel d'état - l'énergie libre d'Helmholtz  $W(\mathbf{F}, T, \mathbf{Z})$  ici -, et sur la définition d'un pseudo-potential de dissipation  $\phi(\dot{\mathbf{F}}, \dot{\mathbf{Z}}; \mathbf{F}, \mathbf{Z}, T)$  qui est une fonction convexe de ses arguments, à valeur positive et qui s'annule à l'origine. À partir de ces deux potentiels, les lois d'état et d'évolution peuvent être écrites en suivant le cadre thermodynamique classique [5]. Elle ne sont pas rappelées ici pour des questions de concision du texte.

## 3 Formulation variationnelle du problème thermomécanique local constitutif

Suivant les travaux de Yang et *al.* [3], considérons la fonctionnelle suivante :

$$D(\dot{\mathbf{F}}, \dot{\eta}, \dot{\mathbf{Z}}, T; \mathbf{F}, \eta, \mathbf{Z}) = \dot{E}(\mathbf{F}, \eta, \mathbf{Z}) - T\dot{\eta} + \phi(\dot{\mathbf{F}}, \dot{\mathbf{Z}}; \mathbf{F}, \mathbf{Z}, T) \quad (6)$$

où  $\dot{E}$ ,  $\dot{\eta}$  et  $\phi$  sont le taux de la densité d'énergie interne, le taux de la densité d'entropie et le pseudo-potentiel de dissipation respectivement. Une façon parmi d'autres de combiner cette fonctionnelle avec la description du comportement avec l'énergie libre d'Helmholtz est d'en introduire le résidu du taux de sa transformée de Legendre, qu'on souhaite annuler via un multiplicateur de Lagrange. Aussi, on introduit le lagrangien suivant

$$\mathcal{L}(\dot{\mathbf{q}}, \lambda; \mathbf{q}) = \dot{E} - T\dot{\eta} + \phi(\dot{\mathbf{F}}, \dot{\mathbf{Z}}; \mathbf{F}, \mathbf{Z}, T) + \lambda \frac{d}{dt}(T\eta + W(\mathbf{F}, T, \mathbf{Z}) - E) \quad (7)$$

où le vecteur d'état  $\mathbf{q} = \{E, \mathbf{F}, \eta, \mathbf{Z}, T\}$  est introduit, *qui est supposé connu et donné ici*, et  $\lambda$  est le multiplicateur de Lagrange. On suppose par ailleurs que les valeurs du taux du gradient de la transformation  $\dot{\mathbf{F}}$  et taux de la densité d'énergie interne  $\dot{E}$  sont donnés et connus avec les lois de conservations (1). La formulation variationnelle s'écrit au travers du problème d'optimisation suivant

$$\mathcal{W} = \text{stat} \inf_{\dot{\eta}, \dot{T}, \lambda, \dot{\mathbf{Z}}} \mathcal{L}(\dot{\mathbf{q}}, \lambda; \mathbf{q}) \quad (8)$$

dans lequel on cherche la stationnarité de la fonctionnelle  $\mathcal{L}$  (7) par rapport au taux de la densité d'entropie  $\dot{\eta}$ , au taux de température  $\dot{T}$ , au multiplicateur de Lagrange  $\lambda$ , et au taux des variables internes  $\dot{\mathbf{Z}}$ . Ces équations de stationnarité s'écrivent

$$\text{stat}_{\dot{\eta}} \mathcal{L} \Leftrightarrow -T + \lambda T = 0 \quad (9)$$

$$\text{stat}_{\dot{T}} \mathcal{L} \Leftrightarrow \lambda \left( \eta + \frac{\partial W}{\partial T} \right) = 0 \quad (10)$$

$$\text{stat}_{\lambda} \mathcal{L} \Leftrightarrow \frac{d}{dt}(T\eta + W(\mathbf{F}, T, \mathbf{Z}) - E) = 0 \quad (11)$$

$$\inf_{\dot{\mathbf{Z}}} \mathcal{L} \Leftrightarrow \frac{\partial \phi}{\partial \dot{\mathbf{Z}}} + \lambda \frac{\partial W}{\partial \dot{\mathbf{Z}}} = 0 \quad (12)$$

La stationnarité par rapport à  $\dot{\eta}$  (9) donne l'expression du multiplicateur, ici égal à l'unité  $\lambda = 1$ . Sa substitution dans les équations (10) et (12) permettent d'obtenir la définition de la densité d'entropie et les équations d'évolution des variables internes. Les contraintes sont ensuite calculées en dérivant la fonctionnelle optimisée par rapport au taux du gradient de la transformation  $\dot{\mathbf{F}}$  :

$$\frac{\partial \mathcal{W}}{\partial \dot{\mathbf{F}}} = \lambda \frac{\partial W}{\partial \dot{\mathbf{F}}} + \frac{\partial \phi}{\partial \dot{\mathbf{F}}} = \mathbf{P}^{\text{rev}} + \mathbf{P}^{\text{irr}} = \mathbf{P}. \quad (13)$$

La substitution de la valeur du multiplicateur dans la fonctionnelle (7) permet d'appliquer une transformée de Legendre classique, et de retrouver l'expression de la fonctionnelle introduite dans [6]. Cependant, le point crucial de ce travail est justement de garder ce multiplicateur comme inconnue du problème d'optimisation (8), pour construire la formulation variationnelle incrémentale suivante.

## 4 Formulation variationnelle incrémentale

On considère un incrément de temps  $[t_n, t_{n+1}]$ , le vecteur d'état  $\mathbf{q}_n = \{E_n, \mathbf{F}_n, \eta_n, \mathbf{Z}_n, T_n\}$  connu à l'instant  $t_n$ , et les données d'entrée  $\{E, \mathbf{F}\}_{n+1}$  connues à l'instant  $t_{n+1}$  à partir de la solution discrète des lois de conservation (1). On cherche une fonctionnelle incrémentale  $\mathcal{J}(\mathbf{q}_{n+1}, \lambda_{n+1}; \mathbf{q}_n)$  qui soit telle qu'elle approxime l'intégrale du lagrangien (7) sur le pas de temps :

$$\begin{aligned} \mathcal{J}(\mathbf{q}_{n+1}, \lambda_{n+1}; \mathbf{q}_n) &\approx \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathcal{L}(\dot{\mathbf{q}}(\tau), \lambda(\tau); \mathbf{q}(\tau)) d\tau \\ &= \Delta E - T_n \Delta \eta + \Delta t \phi \left( \frac{\Delta \mathbf{F}}{\Delta t}, \frac{\Delta \mathbf{Z}}{\Delta t}; \mathbf{F}_{n+\alpha}, \mathbf{Z}_{n+\alpha}, T_{n+\alpha} \right) + \lambda_{n+1} \Delta (T\eta + W(\mathbf{F}, T, \mathbf{Z}) - E) \end{aligned} \quad (14)$$

où l'opérateur  $\Delta(\cdot) = (\cdot)_{n+1} - (\cdot)_n$  est une différence finie entre les valeurs de la quantité  $(\cdot)$  aux instants  $t_{n+1}$  et  $t_n$ . Par ailleurs, les arguments paramétriques du pseudo-potentiel de dissipation apparaissant après

le point-virgule sont évalués à l'instant  $t_{n+\alpha} = t_n + \alpha\Delta t$  tel que  $(\cdot)_{n+\alpha} = (1 - \alpha)(\cdot)_n + \alpha(\cdot)_{n+1}$ ,  $\alpha \in [0, 1]$ . La formulation variationnelle incrémentale prend la forme du problème d'optimisation suivant

$$\mathcal{W}_{n+1} = \underset{(\eta, T, \lambda)_{n+1}}{\text{stat}} \underset{\mathbf{Z}_{n+1}}{\text{inf}} \mathcal{J}(\mathbf{q}_{n+1}, \lambda_{n+1}; \mathbf{q}_n) \quad (15)$$

dans lequel on cherche la stationnarité de la fonctionnelle incrémentale (14) par rapport à la densité d'entropie, la température, au multiplicateur de Lagrange et à l'ensemble des variables internes, tous évalués à l'instant  $t_{n+1}$ . Ces équations de stationnarité discrètes s'écrivent :

$$\underset{\eta_{n+1}}{\text{stat}} \mathcal{J} \Leftrightarrow -T_n + \lambda_{n+1} T_{n+1} = 0 \quad (16)$$

$$\underset{T_{n+1}}{\text{stat}} \mathcal{J} \Leftrightarrow \Delta t \alpha \frac{\partial \phi}{\partial T} \left( \frac{\Delta \mathbf{F}}{\Delta t}, \frac{\Delta \mathbf{Z}}{\Delta t}; \mathbf{F}_{n+\alpha}, \mathbf{Z}_{n+\alpha}, T_{n+\alpha} \right) + \lambda_{n+1} \left( \eta_{n+1} + \frac{\partial W}{\partial T} \Big|_{n+1} \right) \quad (17)$$

$$\underset{\lambda_{n+1}}{\text{stat}} \mathcal{J} \Leftrightarrow \Delta(T\eta + W(\mathbf{F}, T, \mathbf{Z}) - E) = 0 \quad (18)$$

$$\underset{\mathbf{Z}_{n+1}}{\text{inf}} \mathcal{J} \Leftrightarrow \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{Z}} \left( \frac{\Delta \mathbf{F}}{\Delta t}, \frac{\Delta \mathbf{Z}}{\Delta t}; \mathbf{F}_{n+\alpha}, \mathbf{Z}_{n+\alpha}, T_{n+\alpha} \right) + \lambda_{n+1} \frac{\partial W}{\partial \mathbf{Z}} \Big|_{n+1} = 0 \quad (19)$$

À partir de (16), le multiplicateur est actualisé tel que

$$\lambda_{n+1} = \frac{T_n}{T_{n+1}}, \quad (20)$$

qui n'est plus égal à l'unité mais à un facteur proche de l'unité, d'autant plus d'ailleurs que les températures considérées sont absolues. Sa substitution dans les équations (17) and (19) donne les actualisations discrètes de la densité d'entropie, à un terme en  $\mathcal{O}(\Delta t)$  près qui tend vers zéro quand  $\Delta t \rightarrow 0$ , et des équations d'évolution des variables internes :

$$\eta_{n+1} = - \frac{\partial W}{\partial T} \Big|_{n+1} - \underbrace{\frac{T_{n+1}}{T_n} \Delta t \alpha \frac{\partial \phi}{\partial T} \left( \frac{\Delta \mathbf{F}}{\Delta t}, \frac{\Delta \mathbf{Z}}{\Delta t}; \mathbf{F}_{n+\alpha}, \mathbf{Z}_{n+\alpha}, T_{n+\alpha} \right)}_{\mathcal{O}(\Delta t)} \quad (21)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{Z}} \left( \frac{\Delta \mathbf{F}}{\Delta t}, \frac{\Delta \mathbf{Z}}{\Delta t}; \mathbf{F}_{n+\alpha}, \mathbf{Z}_{n+\alpha}, T_{n+\alpha} \right) + \frac{T_n}{T_{n+1}} \frac{\partial W}{\partial \mathbf{Z}} \Big|_{n+1} = 0 \quad (22)$$

où l'équation (22) est identique à celle obtenu dans [3]. Finalement, les contraintes sont actualisées de façon discrète comme suit :

$$\frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}} \Big|_{n+1} = \frac{T_n}{T_{n+1}} \frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}} \Big|_{n+1} + \Delta t \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{F}} \left( \frac{\Delta \mathbf{F}}{\Delta t}, \frac{\Delta \mathbf{Z}}{\Delta t}; \mathbf{F}_{n+\alpha}, \mathbf{Z}_{n+\alpha}, T_{n+\alpha} \right) \quad (23)$$

$$= \mathbf{P}_{n+1}^{\text{rev}} + \mathbf{P}_{n+1}^{\text{irr}} = \mathbf{P}_{n+1} \quad (24)$$

où le multiplicateur (20) pondère la dérivée de l'énergie libre dans la définition des contraintes élastiques actualisées.

## 5 Illustration numérique

On considère un volume hétérogène constitué d'une inclusion circulaire de rayon  $R$  centrée dans une matrice carrée de côté  $2a$ , dont la moitié et les conditions aux limites associées sont présentées sur la figure 1. Le problème est traité en déformations planes et dans l'hypothèse des petites perturbations. On associe un comportement thermo-élasto-viscoplastique à l'inclusion suivant une loi viscoplastique de type Johnson-Cook, et un comportement thermoélastique à la matrice, dont les détails peuvent être trouvés dans [7]. À partir d'un état initial naturel, un créneau de vitesse est imposé sur le bord gauche de la cellule, d'une durée  $t_u$ . Des conditions de symétrie sont prescrites sur les faces supérieure et inférieure, et des conditions de transmission parfaite sont considérées sur le bord droit. Les simulations numériques sont réalisées d'une part en couplant la formulation variationnelle incrémentale proposée à un schéma volumes finis [8], et d'autre part avec un schéma éléments finis (avec des éléments Q1/Q0

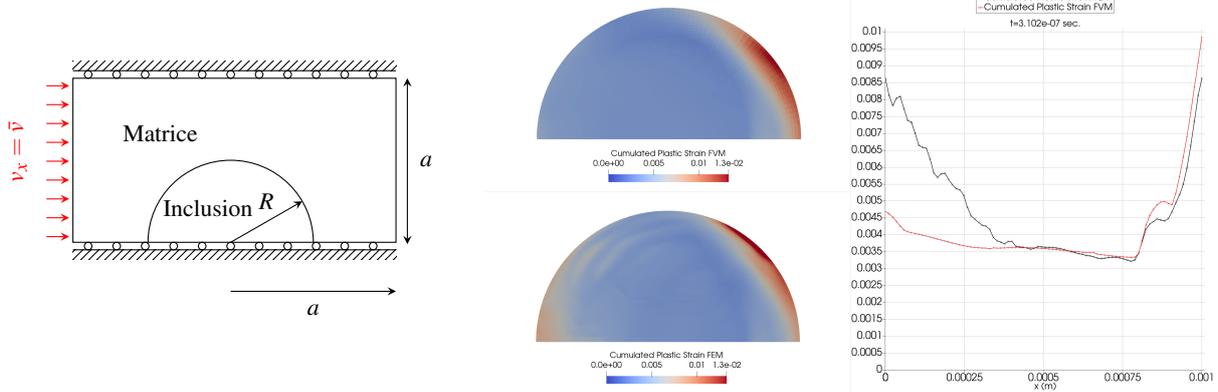


FIGURE 1 – Moitié du volume hétérogène, soumis à un créneau de vitesse sur son bord gauche.

FIGURE 2 – Isovaleurs et tracés le long de la ligne du bas de la déformation viscoplastique cumulée calculée à l’instant  $t = 2.88355 \times 10^7$  secondes avec les solutions volumes finis (FVM) et éléments finis (FEM).

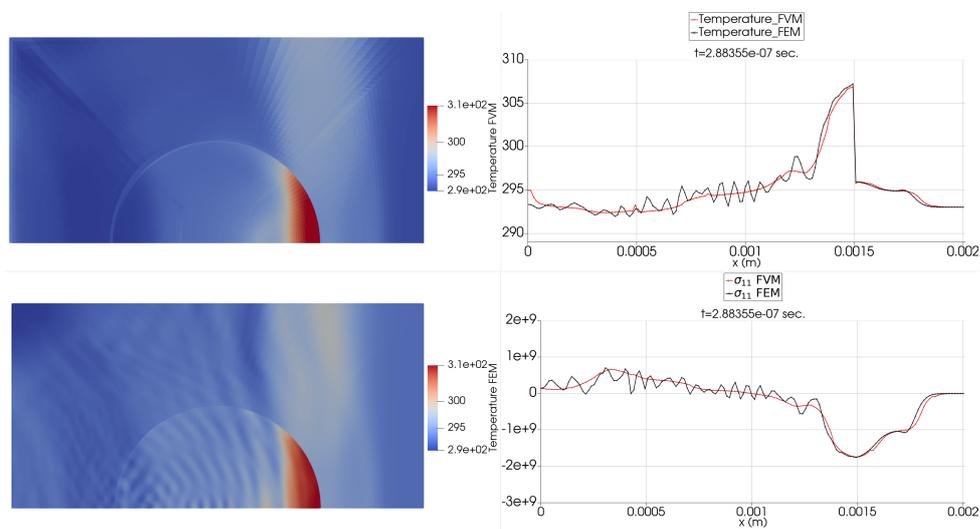


FIGURE 3 – Isovaleurs des températures, et tracés le long de la ligne du bas des température et contrainte longitudinale  $\sigma_{11}$  à l’instant  $t = 2.88355 \times 10^7$  secondes, calculées avec les solutions volumes finis (FVM) et éléments finis (FEM).

en déplacements-pression) couplé avec un intégrateur temporel explicite de type différences centrées et avec un intégrateur constitutif variationnel piloté en température et déformation [6].

La figure 3 montre les isovaleurs de la température à l’instant  $t = 2.88355 \times 10^7$  secondes, calculées avec les deux solveurs numériques, et les tracés des température et contrainte longitudinale  $\sigma_{11}$  le long de la ligne du bas. Les solutions numériques sont très proches, à ceci près que celle obtenue par éléments finis est oscillante, oscillations parasites qui sont supprimées par les limiteurs utilisés dans la solution volumes finis. La figure 2 montre les déformations viscoplastiques cumulées calculées dans l’inclusion. Les solutions numériques obtenues sont proches aussi, même si les éléments finis surestiment un peu les déformations viscoplastiques à cause des oscillations numériques.

## 6 Conclusion

On a proposé dans ce travail un cadre variationnel pour l’intégration de modèles de comportement thermomécaniques pilotés par les taux d’une mesure de déformation et de la densité d’énergie interne. Ces quantités sont issues de lois de conservation hyperboliques. L’utilisation de ces dernières permet de

satisfaire aux conditions de saut au travers des chocs, et de calculer les bonnes vitesses de choc numériquement. Contrairement à d'autres formulations thermomécaniques, la température n'est pas une donnée d'entrée de l'intégrateur de la loi de comportement, même si elle apparaît comme une des inconnues sur lesquelles la résolution est effectuée. Des formulations variationnelles continue et discrète (précise à l'ordre un) ont été présentées, et une illustration a été faite sur un milieu thermo-élasto-viscoplastique.

## Références

- [1] J.C. Simo, C. Miehe. *Associative coupled thermoplasticity at finite strains : Formulation, numerical analysis and implementation*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Elsevier, 98(1), 41-104, 1992.
- [2] R.J. Leveque. *Finite volume methods for hyperbolic problems*, Cambridge University Press, 2002.
- [3] Q. Yang, L. Stainier, M. Ortiz. *A variational formulation of the coupled thermo-mechanical boundary-value problem for general dissipative solids*, Journal of the Mechanics and Physics of Solids, Elsevier, 54(2), 401-424, 2006.
- [4] M. Canadija, J. Mosler. *On the thermomechanical coupling in finite strain plasticity theory with non-linear kinematic hardening by means of incremental energy minimization*, International Journal of Solids and Structures, Elsevier, 48(7-8), 1120-1129, 2011.
- [5] H. Ziegler. *An introduction to thermomechanics*, Elsevier, 2012.
- [6] L. Stainier. *A Variational Approach to Modeling Coupled Thermo-Mechanical Nonlinear Dissipative Behaviors*, Advances in Applied Mechanics, Elsevier, 46, 69-126, 2013.
- [7] T. Heuzé, L. Stainier. *A variational formulation of thermomechanical constitutive update for hyperbolic conservation laws*, preprint hal-03388179, 2021.
- [8] T. Heuzé. *Simulation of impacts on elastic-viscoplastic solids with the flux-difference splitting finite volume method applied to non-uniform quadrilateral meshes*, Advanced Modeling and Simulation in Engineering Sciences, 5(1), 9, 2018.