gdr-week 2011 GDR-3371 MIC Saint-Étienne, France

INTRODUCTION

Couplages Multiphysiques dans ABAQUS

Couplage THERMIQUE-MECANIQUE

Couplage THERMIQUE-ELECTRIQUE

Couplage DIFFUSION-MECANIQUE
- **Indirect : (module TH-M)**
- **Milieux Poreux**

Couplage ELECTRIQUE-MECANIQUE
- **Piézoélectrique**

gdr-week 2011 GDR-3371 MIC Saint-Étienne, France

PREMIER VOLET

COUPLAGE THERMIQUE MECANIQUE

gdr-week 2011 GDR-3371 MIC Saint-Étienne, France

INSTITUT P'

COUPLAGE THERMIQUE MECANIQUE

Phénomènes de couplage

Thermique → Mécanique : Dilatation volumique
Mécanique → Thermique : Dilatation volumique

Thermique → Mécanique : Rigidité variable
Mécanique → Thermique : Effets variables

Mécanique → Thermique : Irréversibilités (plast. endo)
Thermique → Mécanique : Accélération irréversibilités

gdr-week 2011 GDR-3371 MIC Saint-Étienne, France

INSTITUT P'

PAPON P., LEBLOND J., *Thermodynamique des états de la matière*, Hermann, Paris, 1990
SKOCZYLAS F., SHAHROUR I., HENRY J.P., *Etude numérique du couplage thermohydromécanique dans les roches. Influence des termes de couplage non-linéaires pour un matériau isotrope linéaire*, Revue de l'Institut Français du Pétrole, vol. 47, n°1, p. 45-55, 1992
SALENCON J., *Mécanique des milieux continus - II. Elasticité - Milieux curvilignes*, Ellipses, 1988
VIDAL C., DEWEL G., BORCKMANS P., *Au delà de l'équilibre*, Hermann, Paris, 1994
MUNSTER A., *Thermodynamique des processus irréversibles*, Bibliothèque des Sciences et Techniques Nucléaires, 1966
GERMAIN P., NGUYEN Q.S., SUQUET P., *Continuum thermodynamics*, Journal of Applied Mechanics, vol. 50, p. 1010-1020, 1953
BESSON J., CAILLETAUD G. CHABOCHE J.L., FOREST S., *Mécanique non-linéaire des matériaux*, Hermès Science Publications, 2001
BATAILLE J. et KESTIN J., L'interprétation physique de la thermodynamique rationnelle, Journal de Mécanique, vol. 14, n° 2, pp. 365-384 (1975).
BOWEN R. M., Mixtures and EM Field theories, In continuum physics vol. III, A. C. Eringen Ed., Academic Press, New-York (1976).
COLEMAN, B.D., GURTIN, M.E., 1967. Thermodynamics with internal state variables. J. Chem. Phys., 47, 2, 597-613.
PRIGOGINE, I. and KONDEPUDI D. , *Thermodynamique: des moteurs thermiques aux structures dissipatives.* Editions Odile Jacob ed. 1999.
LARCHE F., CAHN J.W. , A Nonlinear Theory of Thermochemical Equilibrium of Solids Under Stress. Acta Metallurgica, 26 (1978) 53–60.
GIBBS J.W. , On the Equilibrium of Heterogeneous Substances. The Scientific Papers of W.J. Gibbs, 1 (1906) 55–349.
TRUESDELL C. , Rational Thermodynamics. Springer, New York, 1984.
LUSTIG S.R., CARUTHERS J.M. , PEPPAS N.A., Continuum Thermodynamics and Transport Properties for Polymer-Fluid Mixtures. Chemical Engineering Science, 47 (1992) 3037–3057.
WEITSMAN Y. , Stress Assisted Diffusion in Elastic and Viscoelastic Materials. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 35 (1987) 73-93.
De GROOT S.R. , Thermodynamics of Irreversible Processes. Interscience, New York, 1951.
CASIMIR H.B.G. , On Onsager's Principle of Microscopic Reversibility. Rev. Mod. Phys, 17 (1945) 343-350.
MAUGIN G.A., The Thermomechanics of Nonlinear Irreversible Behaviors. World Scientific, 1999.
STRUTTJ.W. (Lord Rayleigh), Theory of Sound, Dover, New York, 1945.
LEBON G. , JOU D. , CASAS-VASQUEZ J., Understanding Non-Equilibrium Thermodynamics. Springer-Verlag, Berlin, 2008.
GIGLIOTTI M., GRANDIDIER J-C, Chemo-Mechanics Couplings in Polymer Matrix Materials Exposed to Thermo-Oxidative Environments", Comptes Rendus Mécanique, Volume 338, Issue 3, March 2010, Pages 164-175,. Auteurs :

COUPLAGE THERMIQUE MECANIQUE

Equations de bilans

- Le bilan mécanique - l'équation du mouvement

Euler : $\vec{\mathrm{div}}\,\underline{\underline{\sigma}} + \rho\,\vec{f} = \rho\,\vec{\gamma}$

Lagrange : $\vec{\mathrm{Div}}\,(\underline{\underline{F}}\,\underline{\underline{S}}) + \rho_o\,\vec{f} = \rho_o\,\vec{\gamma}$

$\underline{\underline{\sigma}}$ ($\underline{\underline{S}}$) tenseur des contraintes d'Euler (de Piola-Kirchhoff), $\vec{f}$ densité massique de force, $\vec{\gamma}$ accélération moyenne, $\underline{\underline{F}}$ gradient de la transformation.

- Le Premier Principe - la conservation de l'énergie totale

Euler : $\rho\frac{du}{dt} = \underline{\underline{D}} : \underline{\underline{\sigma}} - \mathrm{div}\,\vec{J_q} + r$

Lagrange : $\rho_o\frac{dU}{dt} = \underline{\underline{S}} : \frac{d\underline{\underline{E}}}{dt} - \mathrm{Div}\,\vec{Q} + R$

Energie interne évolue par apport/retrait de :
- Mécanique
- Flux de chaleur
- Rayonnement

u (U) énergie interne spécifique, $\underline{\underline{D}}$ ($\frac{d\underline{\underline{E}}}{dt}$) taux de déformation, $\vec{J_q}$ ($\vec{Q}$) courant de chaleur, r (R) source thermique dans la configuration actuelle (ramenés à la configuration initiale).

gdr-week 2011 GDR-3371 MIC Saint-Étienne, France
INSTITUT P'

COUPLAGE THERMIQUE MECANIQUE

Energie interne et Entropie

$U(s, E^e, \xi)$: l'état interne
- Organisation interne
- Déformation élastique
- Variables internes

Euler : $\frac{du}{dt} = T\frac{ds}{dt} + \frac{1}{\rho}\underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{D}}^e - \sum_{j=1}^{n} A_j \frac{d\xi_j}{dt}$

Lagrange : $\frac{dU}{dt} = T\frac{dS}{dt} + \frac{1}{\rho_o}\underline{\underline{S}} : \frac{d\underline{\underline{E}}^e}{dt} - \sum_{j=1}^{n} A_j \frac{d\xi_j}{dt}$

Energie élastique que l'on peut stocker et restituer

s (S) entropie spécifique, $\underline{\underline{D}}^e$ ($\frac{d\underline{\underline{E}}^e}{dt}$) taux de déformation élastique,

ξ_j (Ξ_j) variable interne,

A_j affinité associée dans la configuration actuelle (initiale).

gdr-week 2011

COUPLAGE THERMIQUE MECANIQUE

Variables internes

- ξ_j ($\underline{\xi}_j$) variable interne

Variables locales > description de l'état du système

Physiquement : c'est compliqué

Mécanicien : schématiser au mieux les phénomènes physiques

Endommagement

Plasticité

Viscosité …………

A_j affinité : la Force interne qui fait évoluer ces variables internes

Structures mathématique : scalaire / vecteurs / tenseurs….

gdr-week 2011

COUPLAGE THERMIQUE MECANIQUE

Energie libre ψ

Euler :

$$\frac{du}{dt} = T\frac{ds}{dt} + \frac{1}{\rho}\underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{D}}^e - \sum_{j=1}^{n} A_j \frac{d\xi_j}{dt}$$

$$\frac{du}{dt} - T\frac{ds}{dt} = \frac{1}{\rho}\underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{D}}^e - \sum_{j=1}^{n} A_j \frac{d\xi_j}{dt}$$

$$\frac{du}{dt} - T\frac{ds}{dt} - s\frac{dT}{dt} = - s\frac{dT}{dt} + \frac{1}{\rho}\underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{D}}^e - \sum_{j=1}^{n} A_j \frac{d\xi_j}{dt}$$

$$\frac{d\psi}{dt} = - s\frac{dT}{dt} + \frac{1}{\rho}\underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{D}}^e - \sum_{j=1}^{n} A_j \frac{d\xi_j}{dt}$$ avec $\psi = u - T s$

gdr-week 2011 GDR-3371 MIC Saint-Étienne, France — INSTITUT P'

COUPLAGE THERMIQUE MECANIQUE

Lois d'état

Lagrange :

$$\underline{\underline{S}} = \rho_o \left(\frac{\partial \Psi}{\partial \underline{\underline{E}}^e}\right)_{T,\xi_j} \quad , \quad S = -\left(\frac{\partial \Psi}{\partial T}\right)_{\underline{\underline{E}}^e,\xi_j} \quad , \quad A_j = -\left(\frac{\partial \Psi}{\partial \xi_j}\right)_{T,\underline{\underline{E}}^e,\xi_{k\neq j}}$$

En petites transformations :

$$\underline{\underline{\sigma}} = \rho \left(\frac{\partial \psi}{\partial \underline{\underline{\varepsilon}}^e}\right)_{T,\xi_j} \quad , \quad s = -\left(\frac{\partial \psi}{\partial T}\right)_{\underline{\underline{\varepsilon}}^e,\xi_j} \quad , \quad A_j = -\left(\frac{\partial \psi}{\partial \xi_j}\right)_{T,\underline{\underline{\varepsilon}}^e,\xi_{k\neq j}}$$

ψ (Ψ) énergie libre spécifique, $\underline{\underline{\varepsilon}}^e$ tenseur des déformations linéarisées.

gdr-week 2011 GDR-3371 MIC Saint-Étienne, France — INSTITUT P'

COUPLAGE THERMIQUE MECANIQUE

Dissipation – Second Principe

Lagrange : $\Phi = \Phi_1 + \Phi_2 \geq 0$

$$\Phi_1 = \underline{\underline{S}} : \frac{d\underline{\underline{E}}^p}{dt} + \rho_o \sum_{j=1}^{n} A_j \frac{d\xi_j}{dt}$$

$$\Phi_2 = -\vec{J}_S \,.\, \overrightarrow{\mathrm{Grad}}\, T$$

L'origine des dissipations :
- Mécanique
- Variables internes
- Gradient thermique

Euler : $\varphi = \varphi_1 + \varphi_2 \geq 0$

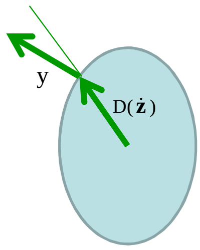
$$\varphi_1 = \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{D}}^p + \rho \sum_{j=1}^{n} A_j \frac{d\xi_j}{dt} \;, \quad \varphi_2 = -\vec{J}_s \,.\, \overrightarrow{\mathrm{grad}}\, T$$

φ (Φ) dissipation volumique, φ_1 (Φ_1) part intrinsèque

φ_2 (Φ_2) contribution liée au gradient thermique. $\vec{J}_S = \frac{1}{T}\vec{Q}$ *avec* $\vec{Q}$ *le flux de chaleur*

COUPLAGE THERMIQUE MECANIQUE

Lois complémentaires d'évolution



$$\Phi_1 = \underline{\underline{S}} : \frac{d\underline{\underline{E}}^p}{dt} + \rho_o \sum_{j=1}^{n} A_j \frac{d\xi_j}{dt}, \qquad \Phi_2 = -\vec{J}_S \,.\, \overrightarrow{\text{Grad}}\, T$$

Générique : produit de forces thermodynamique généralise avec des flux:

$$\Phi = \mathbf{y} \cdot \dot{\mathbf{z}} \geq 0$$

Lord Rayleigh, suppose l'existence d'une Fonctionnelle de dissipation,

D ($\dot{\mathbf{z}}$) dépendant des flux généralisés et par transformation de Legendre-Frenchel,

D^* (**y**), une fonction de forces généralisées. Alors les lois reliant force et flux sont déduites :

$$\mathbf{y} = \frac{\partial D}{\partial \dot{\mathbf{z}}} \qquad \text{ou} \qquad \dot{\mathbf{z}} = \frac{\partial D^*}{\partial \mathbf{y}}$$

D doit être Convexe+ non négatif (origine contenue) > Loi de normalité > second principe

COUPLAGE THERMIQUE MECANIQUE

Lois complémentaires d'évolution

Dans la TIP (Thermodynamique des Processus Irréversibles)

on suppose que le matériau est *proche de l'équilibre* – alors il est raisonnable de supposer que les forces et les flux sont reliées par une relation affine homogène comme suit :

$$\dot{\mathbf{z}} = \mathbf{L} \cdot \mathbf{y}$$

où **L** est un tenseur non singulier symétrique

Dans plusieurs domaines de la physique on a une justification expérimentale (Casimir, 1945).

Alors finalement l'expression de la dissipation **Φ** dans ce cadre se présente sous la forme :

$$\Phi = \mathbf{y} \cdot \mathbf{L} \cdot \mathbf{y} \geq 0$$

H.B.G. Casimir, On Onsager's Principle of Microscopic Reversibility. Rev. Mod. Phys, 17 (1945) 343-350

COUPLAGE THERMIQUE MECANIQUE

Lois complémentaires d'évolution

- Couplage entre les trois phénomènes dissipatifs :

Lagrange :

$$\frac{d\underline{\underline{E}}^p}{dt} = \left(\frac{\partial \mathbf{D}^*}{\partial \underline{\underline{S}}}\right)_{\rho_o A_j,\, -\overrightarrow{\text{Grad}}T} \qquad \frac{d\xi_j}{dt} = \left(\frac{\partial \mathbf{D}^*}{\partial [\rho_o A_j]}\right)_{\underline{\underline{S}},\, \rho_o A_{k\neq j},\, -\overrightarrow{\text{Grad}}T} \qquad \vec{J}_S = \left(\frac{\partial \mathbf{D}^*}{\partial [-\overrightarrow{\text{Grad}}\,T]}\right)_{\underline{\underline{S}},\, \rho_o A_j}$$

Euler :

$$\underline{\underline{D}}^p = \left(\frac{\partial d^*}{\partial \underline{\underline{\sigma}}}\right)_{\rho A_j,\, -\overrightarrow{\text{grad}}T} \qquad \frac{d\xi_j}{dt} = \left(\frac{\partial d^*}{\partial [\rho A_j]}\right)_{\underline{\underline{\sigma}},\, \rho A_{k\neq j}} \qquad \vec{J}_s = \left(\frac{\partial d^*}{\partial [-\overrightarrow{\text{grad}}\,T]}\right)_{\underline{\underline{\sigma}},\, \rho A_j}$$

Potentiel dual de dissipation :

- Rappel avec ce potentiel qui possède les bonnes propriétés on vérifie le second principe

COUPLAGE THERMIQUE MECANIQUE

Lois complémentaires d'évolution

- Découplage total :

Lagrange :

$$\frac{d\underline{\underline{E}}^p}{dt} = \left(\frac{\partial \mathbf{D}_1^*}{\partial \underline{\underline{S}}}\right)_{\rho_o A_j} \qquad \frac{d\xi_j}{dt} = \left(\frac{\partial \mathbf{D}_1^*}{\partial [\rho_o A_j]}\right)_{\underline{\underline{S}},\, \rho_o A_{k\neq j}} \qquad \vec{J}_S = \left(\frac{\partial \mathbf{D}_2^*}{\partial [-\overrightarrow{\text{Grad}}\,T]}\right)$$

Euler :

$$\underline{\underline{D}}^p = \left(\frac{\partial d_1^*}{\partial \underline{\underline{\sigma}}}\right)_{\rho A_j} \qquad \frac{d\xi_j}{dt} = \left(\frac{\partial d_1^*}{\partial [\rho A_j]}\right)_{\underline{\underline{\sigma}},\, \rho A_{k\neq j}} \qquad \vec{J}_s = \left(\frac{\partial d_2^*}{\partial [-\overrightarrow{\text{grad}}\,T]}\right)$$

d^*, d_i^* ($\mathbf{D}^*$, $\mathbf{D}_i^*$) autant de potentiel de dissipation que de phénomène.

COUPLAGE THERMIQUE MECANIQUE

Lois complémentaires d'évolution

- Les lois complémentaires générales d'évolution
  - Couplage entre les trois phénomènes dissipatifs :

Lagrange :

$$\frac{d\underline{\underline{E}}^p}{dt} = \left(\frac{\partial \mathbf{D}^*}{\partial \underline{\underline{S}}}\right)_{\rho_o A_j,\, -\overrightarrow{\text{Grad}}T} \qquad \frac{d\xi_j}{dt} = \left(\frac{\partial \mathbf{D}^*}{\partial [\rho_o A_j]}\right)_{\underline{\underline{S}},\, \rho_o A_{k\neq j},\, -\overrightarrow{\text{Grad}}T} \qquad \vec{J}_S = \left(\frac{\partial \mathbf{D}^*}{\partial [-\overrightarrow{\text{Grad}}\,T]}\right)_{\underline{\underline{S}},\, \rho_o A_j}$$

Euler

$$\underline{\underline{D}}^p = \left(\frac{\partial d^*}{\partial \underline{\underline{\sigma}}}\right)_{\rho A_j,\, -\overrightarrow{\text{grad}}T} \qquad \frac{d\xi_j}{dt} = \left(\frac{\partial d^*}{\partial [\rho A_j]}\right)_{\underline{\underline{\sigma}},\, \rho A_{k\neq j}} \qquad \vec{J}_s = \left(\frac{\partial d^*}{\partial [-\overrightarrow{\text{grad}}\,T]}\right)_{\underline{\underline{\sigma}},\, \rho A_j}$$

Un seul potentiel qui dépend des trois quantités

COUPLAGE THERMIQUE MECANIQUE

Equation de la chaleur

- Le Premier Principe - la conservation de l'énergie totale

Par exemple Lagrange : $\rho_o \frac{dU}{dt} = \underline{\underline{S}} : \frac{d\underline{\underline{E}}}{dt} - \text{Div}\vec{Q} + R$

- L'énergie libre spécifique et énergie interne

Par exemple Lagrange : $\frac{d\psi}{dt} = \frac{dU}{dt} - T\frac{dS}{dt} - S\frac{dT}{dt} = \frac{dU}{dt} = -S\frac{dT}{dt} + \frac{1}{\rho_o}\underline{\underline{S}} : \frac{d\underline{\underline{E}}^e}{dt} - \sum_{j=1}^{n} A_j \frac{d\xi_j}{dt}$

Et on a $\frac{dU}{dt} = \frac{d\psi}{dt} + T\frac{dS}{dt} + S\frac{dT}{dt} = T\frac{dS}{dt} + \frac{1}{\rho_o}\underline{\underline{S}} : \frac{d\underline{\underline{E}}^e}{dt} - \sum_{j=1}^{n} A_j \frac{d\xi_j}{dt}$

- L'équation de bilan de la chaleur

Par exemple Lagrange : $\rho_o\left(T\frac{dS}{dt} + \frac{1}{\rho_o}\underline{\underline{S}} : \frac{d\underline{\underline{E}}^e}{dt} - \sum_{j=1}^{n} A_j \frac{d\xi_j}{dt}\right) = \underline{\underline{S}} : \frac{d\underline{\underline{E}}}{dt} - \text{Div}\vec{Q} + R$

Ou encore : $\rho_o T\frac{dS}{dt} = \underline{\underline{S}} : \frac{d\underline{\underline{E}}^p}{dt} - \text{Div}\vec{Q} + R + \rho_o \sum_{j=1}^{n} A_j \frac{d\xi_j}{dt}$

gdr-week 2011 GDR-3371 MIC Saint-Étienne, France — INSTITUT P'

COUPLAGE THERMIQUE MECANIQUE

Equation de la chaleur

- Le Premier Principe - la conservation de l'énergie totale

Par exemple Lagrange : $\rho_o \frac{dU}{dt} = \underline{\underline{S}} : \frac{d\underline{\underline{E}}}{dt} - Div\vec{Q} + R$

- L'énergie libre spécifique et énergie interne

Par exemple Lagrange : $\frac{d\psi}{dt} = \frac{dU}{dt} - T\frac{dS}{dt} - S\frac{dT}{dt} = \frac{dU}{dt} = - S\frac{dT}{dt} + \frac{1}{\rho_o}\underline{\underline{S}} : \frac{d\underline{\underline{E}}^e}{dt} - \sum_{j=1}^{n} A_j \frac{d\xi_j}{dt}$

Et on a $\frac{dU}{dt} = \frac{d\psi}{dt} + T\frac{dS}{dt} + S\frac{dT}{dt} = T\frac{dS}{dt} + \frac{1}{\rho_o}\underline{\underline{S}} : \frac{d\underline{\underline{E}}^e}{dt} - \sum_{j=1}^{n} A_j \frac{d\xi_j}{dt}$

- L'équation de bilan de la chaleur

Par exemple Lagrange : $\rho_o \left(T\frac{dS}{dt} + \frac{1}{\rho_o}\underline{\underline{S}} : \frac{d\underline{\underline{E}}^e}{dt} - \sum_{j=1}^{n} A_j \frac{d\xi_j}{dt}\right) = \underline{\underline{S}} : \frac{d\underline{\underline{E}}}{dt} - Div\vec{Q} + R$

Ou encore : $\rho_o T\frac{dS}{dt} = \underline{\underline{S}} : \frac{d\underline{\underline{E}}^p}{dt} - Div\vec{Q} + R + \rho_o \sum_{j=1}^{n} A_j \frac{d\xi_j}{dt}$

gdr-week 2011 GDR-3371 MIC Saint-Étienne, France — INSTITUT P'

COUPLAGE THERMIQUE MECANIQUE

Equation de la chaleur

- L'équation de bilan de la chaleur

Par exemple Lagrange : $\rho_o T\frac{dS}{dt} = \underline{\underline{S}} : \frac{d\underline{\underline{E}}^p}{dt} - Div\vec{Q} + R + \rho_o \sum_{j=1}^{n} A_j \frac{d\xi_j}{dt}$

- Loi d'état

Par exemple Lagrange : $S = -\left(\frac{\partial \Psi}{\partial T}\right)_{\underline{\underline{E}}^e, \xi_j}$

Donc : $\frac{dS}{dt} = -\left(\frac{\partial}{\partial T}\left(\frac{\partial \Psi}{\partial T}\right)_{\underline{\underline{E}}^e, \xi_j}\right)_{\underline{\underline{E}}^e, \xi_j} dT - \left(\frac{\partial}{\partial \underline{\underline{E}}^e}\left(\frac{\partial \Psi}{\partial T}\right)_{\underline{\underline{E}}^e, \xi_j}\right)_{T, \xi_j} : \frac{d\underline{\underline{E}}^e}{dt} - \left(\frac{\partial}{\partial \xi_j}\left(\frac{\partial \Psi}{\partial T}\right)_{\underline{\underline{E}}^e, \xi_j}\right)_{\underline{\underline{E}}^e, T} \frac{d\xi_j}{dt}$

Que l'on peut réécrire comme suit en utilisant la propriété des dérivées partielles :

$$\frac{dS}{dt} = -\left(\frac{\partial}{\partial T}\left(\frac{\partial \Psi}{\partial T}\right)_{\underline{\underline{E}}^e, \xi_j}\right)_{\underline{\underline{E}}^e, \xi_j} dT - \frac{1}{\rho_o}\left(\frac{\partial \underline{\underline{S}}}{\partial T}\right) : \frac{d\underline{\underline{E}}^e}{dt} + \left(\frac{\partial A_j}{\partial T}\right)\frac{d\xi_j}{dt}$$

COUPLAGE THERMIQUE MECANIQUE

Equation de la chaleur

- Loi d'état

$$\frac{dS}{dt} = -\left(\frac{\partial}{\partial T}\left(\frac{\partial \Psi}{\partial T}\right)_{\underline{\underline{E}}^e,\xi_j}\right)_{\underline{\underline{E}}^e,\xi_j} dT - \frac{1}{\rho_o}\left(\frac{\partial \underline{\underline{S}}}{\partial T}\right) : \frac{d\underline{\underline{E}}^e}{dt} + \left(\frac{\partial A_j}{\partial T}\right)\frac{d\xi_j}{dt}$$

- L'équation de bilan de la chaleur

Par exemple Lagrange :
$$-\rho_o T\left(\frac{\partial}{\partial T}\left(\frac{\partial \Psi}{\partial T}\right)_{\underline{\underline{E}}^e,\xi_j}\right)_{\underline{\underline{E}}^e,\xi_j} dT - T\left(\frac{\partial \underline{\underline{S}}}{\partial T}\right) : \frac{d\underline{\underline{E}}^e}{dt} + \rho_o T\left(\frac{\partial A_j}{\partial T}\right)\frac{d\xi_j}{dt}$$

$$= \underline{\underline{S}} : \frac{d\underline{\underline{E}}^p}{dt} - \mathrm{Div}\vec{Q} + R + \rho_o \sum_{j=1}^{n} A_j \frac{d\xi_j}{dt}$$

Chaleur spécifique

$$-\rho_o \boxed{T\left(\frac{\partial}{\partial T}\left(\frac{\partial \Psi}{\partial T}\right)_{\underline{\underline{E}}^e,\xi_j}\right)_{\underline{\underline{E}}^e,\xi_j}} dT$$

$$= -\mathrm{Div}\vec{Q} + R + T\left(\frac{\partial \underline{\underline{S}}}{\partial T}\right) : \frac{d\underline{\underline{E}}^e}{dt} + \underline{\underline{S}} : \frac{d\underline{\underline{E}}^p}{dt} + \rho_o \sum_{j=1}^{n} A_j \frac{d\xi_j}{dt} - \rho_o T\left(\frac{\partial A_j}{\partial T}\right)\frac{d\xi_j}{dt}$$

COUPLAGE THERMIQUE MECANIQUE

Equations de couplage (Equation de la chaleur)

L'équation de la chaleur

Lagrange :

Couplage avec la mécanique
Partie élastique

Couplage avec la mécanique
Partie irréversibilité

$$\rho_o \mathbf{C}_{\underline{\underline{E}}^e,\xi_j}\frac{dT}{dt} = \boxed{-\mathrm{Div}\vec{Q} + R} + \boxed{T\left(\frac{\partial \underline{\underline{S}}}{\partial T}\right)_{\underline{\underline{E}}^e,\xi_j} : \frac{d\underline{\underline{E}}^e}{dt}} + \boxed{\underline{\underline{S}} : \frac{d\underline{\underline{E}}^p}{dt} - \sum_{j=1}^{n}\rho_o\left\{T\left(\frac{\partial A_j}{\partial T}\right)_{\underline{\underline{E}}^e,\xi_j} - A_j\right\}\frac{d\xi_j}{dt}}$$

Partie thermique classique

Petites transformations :

$$\rho\, C_{\underline{\underline{\varepsilon}}^e,\xi_j}\frac{dT}{dt} = -\mathrm{div}\,\vec{J}_q + r + T\left\{\left(\frac{\partial \underline{\underline{\sigma}}}{\partial T}\right)_{\underline{\underline{\varepsilon}}^e,\xi_j} - \frac{\underline{\underline{\sigma}}}{\rho}\left(\frac{\partial \rho}{\partial T}\right)_{\underline{\underline{\varepsilon}}^e,\xi_j}\right\} : \frac{d\underline{\underline{\varepsilon}}^e}{dt} + \frac{d\underline{\underline{\varepsilon}}^p}{dt} : \underline{\underline{\sigma}} - \sum_{j=1}^{n}\rho\left\{T\left(\frac{\partial A_j}{\partial T}\right)_{\underline{\underline{\varepsilon}}^e,\xi_j} - A_j\right\}\frac{d\xi_j}{dt}$$

$\mathbf{C}_{\underline{\underline{E}}^e,\xi_j}$ ($C_{\underline{\underline{\varepsilon}}^e,\xi_j}$) chaleur spécifique à déformation élastique
et variables internes constantes, $\underline{\underline{E}}^p$ ($\underline{\underline{\varepsilon}}^p$) déformations inélastiques (linéarisées).

gdr-week 2011 GDR-3371 MIC Saint-Étienne, France

COUPLAGE THERMIQUE MECANIQUE

Equation de la chaleur

L'équation de la chaleur

Lagrange :

Couplage avec la mécanique
Partie élastique

Couplage avec la mécanique
Partie irréversibilité

$$\rho_o \, \mathbf{C}_{\underline{\underline{E}}^e,\xi_j} \frac{dT}{dt} = \boxed{-\mathrm{Div}\vec{Q} + R} + \boxed{T\left(\frac{\partial \underline{\underline{S}}}{\partial T}\right)_{\underline{\underline{E}}^e,\xi_j} : \frac{d\underline{\underline{E}}^e}{dt}} + \eta \left\{ \boxed{\underline{\underline{S}} : \frac{d\underline{\underline{E}}^p}{dt} - \sum_{j=1}^{n} \rho_o \left\{ T\left(\frac{\partial A_j}{\partial T}\right)_{\underline{\underline{E}}^e,\xi_j} - A_j \right\} \frac{d\xi_j}{dt}} \right\}$$

Partie thermique classique

Petites transformations :

$$\rho \, C_{\underline{\underline{\varepsilon}}^e,\xi_j} \frac{dT}{dt} = -\mathrm{div}\,\vec{J}_q + r + T\left\{ \left(\frac{\partial \underline{\underline{\sigma}}}{\partial T}\right)_{\underline{\underline{\varepsilon}}^e,\xi_j} - \frac{\underline{\underline{\sigma}}}{\rho} \ldots \right.$$

ABAQUS :
Introduction d'un 'coefficient d'abattement' ≤ 1 (INELASTIC HEAT FRACTION)

$C_{\underline{\underline{\varepsilon}}^e,\xi_j}$ ($\mathbf{C}_{\underline{\underline{E}}^e,\xi_j}$) chaleur spécifique à déformation élastique et variables internes constantes, $\underline{\underline{E}}^p$ ($\underline{\underline{\varepsilon}}^p$) déformations inélastiques (linéarisées).

gdr-week 2011 GDR-3371 MIC Saint-Étienne, France

COUPLAGE THERMIQUE MECANIQUE

Equations de couplage (Lois d'état) – Application THERMO-ELASTICITE en petites perturbations

Selon l'hypothèse d'élasticité, on écrit le potentiel thermodynamique sous la forme : $\psi = \psi(T, \underline{\underline{E}}^e)$.

· L'hypothèse de petites perturbations, des déformations infinitésimales par rapport à C_o
et des petites variations thermiques $(T - T_o)$, T_o température initiale,alors l'expression de ψ se simplifie :

$$\rho_o \psi(T, \underline{\underline{E}}^e) = \underline{\underline{S}}_o : \underline{\underline{E}}^e - \rho_o S_o (T - T_o) + \frac{1}{2} \underline{\underline{E}}^e : \underline{\underline{\underline{\underline{C}}}} : \underline{\underline{E}}^e - \boxed{\underline{\underline{K}} : \underline{\underline{E}}^e (T - T_o)} - \frac{1}{2}\frac{\rho_o}{T_o} \mathbf{C}_{\underline{\underline{E}}^e} (T - T_o)^2,$$

où :

- $\underline{\underline{S}}_o$ désigne les contraintes initiales à déformation et écart thermique nuls par rapport à C_o
- S_o représente l'entropie initiale à déformation et écart thermique nuls par rapport à C_o
- $\underline{\underline{\underline{\underline{C}}}}$ correspond au tenseur des modules d'élasticité liant à température constante les contraintes aux déformations
- $\mathbf{C}_{\underline{\underline{E}}^e}$ chaleur spécifique à déformation constante
  (identifiée à partir de l'expression de la variation d'entropie issue de la seconde loi d'état)
- $\underline{\underline{K}}$ est le tenseur des coefficients thermiques.

Les lois d'état s'expriment alors sous la forme :

Termes de couplages

$$\underline{\underline{S}} = \rho_o \left(\frac{\partial \psi}{\partial \underline{\underline{E}}^e}\right)_T = \underline{\underline{S}}_o + \underline{\underline{\underline{\underline{C}}}} : \underline{\underline{E}}^e - \boxed{\underline{\underline{K}}(T - T_o)} \quad \text{et} \quad S = -\left(\frac{\partial \psi}{\partial T}\right)_{\underline{\underline{E}}^e} = S_o + \boxed{\frac{1}{\rho_o}\underline{\underline{K}} : \underline{\underline{E}}^e} + \frac{1}{T_o}\mathbf{C}_{\underline{\underline{E}}^e}(T - T_o)$$

COUPLAGE THERMIQUE MECANIQUE

Equations de couplage (Lois d'état) – Application

THERMO-ELASTICITE *isotrope* petites perturbations

L'hypothèse d'isotropie du matériau : ψ s'exprime une forme linéaire des deux premiers invariants du tenseur des déformations élastiques et de l'écart thermique :

$$\rho_o \psi = S_o \, \mathrm{tr}\, \underline{\underline{E}}^e - \rho_o S_o (T - T_o) + \frac{\lambda}{2} (\mathrm{tr}\, \underline{\underline{E}}^e)^2 + \mu \, \mathrm{tr}\, (\underline{\underline{E}}^e)^2 - k \, \mathrm{tr}\, \underline{\underline{E}}^e \, (T - T_o) - \frac{1}{2} \frac{\rho_o}{T_o} \mathbf{C}_{\underline{\underline{E}}^e} (T - T_o)^2 .$$

L'isotropie implique en effet également que :

$$\underline{\underline{S}}_o = S_o \, \underline{\underline{I}} \quad \text{et} \quad \underline{\underline{K}} = k \, \underline{\underline{I}} = (3\lambda + 2\mu) \, \alpha_T \, \underline{\underline{I}},$$

α_T étant le coefficient de dilatation thermique isotrope.

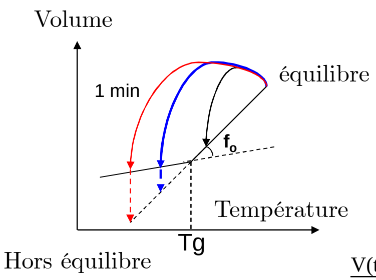
Les lois d'état se réécrivent par conséquent sous la forme : Termes de couplages

$$\bullet \; \underline{\underline{S}} = \rho_o \left(\frac{\partial \psi}{\partial \underline{\underline{E}}^e} \right)_T = S_o \, \underline{\underline{I}} + \lambda \, (\mathrm{tr}\, \underline{\underline{E}}^e) \, \underline{\underline{I}} + 2 \mu \, \underline{\underline{E}}^e - (3\lambda + 2\mu) \, \alpha_T \, (T - T_o) \, \underline{\underline{I}}$$

$$\bullet \; S = - \left(\frac{\partial \psi}{\partial T} \right)_{\underline{\underline{E}}^e} = S_o + \frac{1}{\rho_o} (3\lambda + 2\mu) \, \alpha_T \, (\mathrm{tr}\, \underline{\underline{E}}^e) + \frac{1}{T_o} \mathbf{C}_{\underline{\underline{E}}^e} (T - T_o)$$

COUPLAGE THERMIQUE MECANIQUE

- Dilatation thermique pas TOUJOURS SIMPLE
- Résultats typiques de relaxation structurale pour un échantillon de PVA trempé à partir de 40°C. *[Kovacs, 1963]*

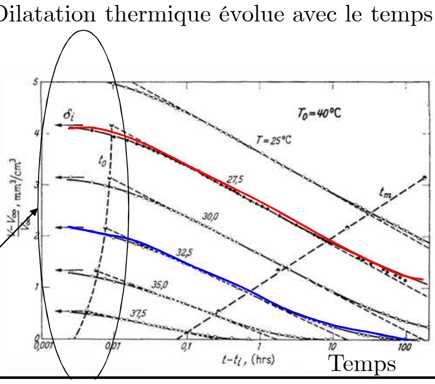


Couplage thermo – mécanique

Dilatation thermique évolue avec le temps

$$\frac{V(t) - V_\infty}{V_\infty}$$

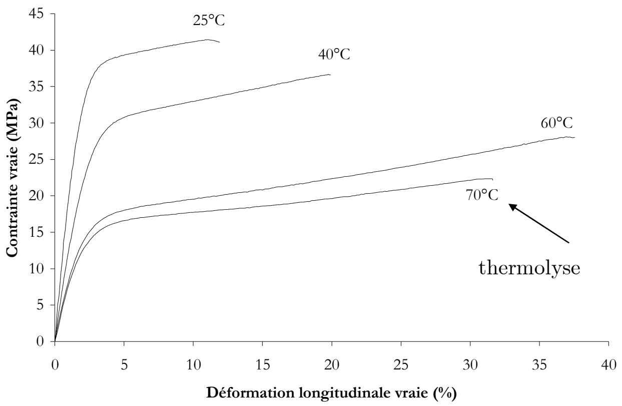
Définition d'un écart à l'équilibre δ :

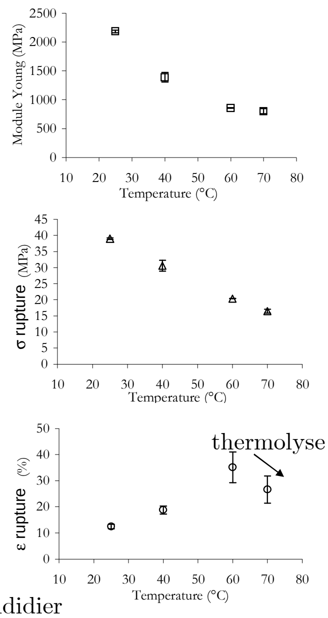


COUPLAGE THERMIQUE MECANIQUE COMPORTEMENT DEPEND DE LA TEMPERATURE

Essais de traction (10mm/min) colle industrielle

Comportement fonction de la **température**





Thèse Romain Léger – 2010

CRITT Matériaux & Institut P' – Annette Roy J-C Grandidier

COUPLAGE THERMIQUE MECANIQUE

Equations de couplage (Lois d'état) – Applicat° THERMO-ELASTICITE isotrope petites perturbations à coefficients variables

Façon 'brutale' : Paramètres fonction de T ou de la déformation

Du point de vue de la thermo > NON CONSISTANT

Il FAUT REPRENDRE LES EQUATIONS

Pourquoi ? >> IL EN MANQUE

gdr-week 2011 GDR-3371 MIC Saint-Étienne, France

COUPLAGE THERMIQUE MECANIQUE

Equations de couplage (Lois d'état) – Applicat° THERMO-ELASTICITE isotrope petites perturbations à coefficients variables

L'hypothèses : Isotropie du matériau et $\lambda = \lambda_o - \lambda_p T$: ψ s'exprime sous la forme suivante :

$$\rho_o \psi = S_o \operatorname{tr} \underline{\underline{E}}^e - \rho_o S_o (T - T_o) + \frac{\lambda(T)}{2} (\operatorname{tr} \underline{\underline{E}}^e)^2 + \mu \operatorname{tr} (\underline{\underline{E}}^e)^2 - k \operatorname{tr} \underline{\underline{E}}^e (T - T_o) - \frac{1}{2} \frac{\rho_o}{T_o} C_{\underline{\underline{E}}^e} (T - T_o)^2 .$$

L'isotropie implique en effet également que :

$$\underline{\underline{S}}_o = S_o \underline{\underline{I}} \quad \text{et} \quad \underline{\underline{K}} = k \underline{\underline{I}} = (3\lambda(T) + 2\mu) \alpha_T \underline{\underline{I}},$$

α_T étant le coefficient de dilatation thermique isotrope.

Les lois d'état se réécrivent par conséquent sous la forme :

Termes de couplages supplémentaires

$$\bullet \underline{\underline{S}} = \rho_o \left(\frac{\partial \psi}{\partial \underline{\underline{E}}^e}\right)_T = S_o \underline{\underline{I}} + \lambda(T) (\operatorname{tr} \underline{\underline{E}}^e) \underline{\underline{I}} + 2 \mu \underline{\underline{E}}^e - (3\lambda(T) + 2\mu) \alpha_T (T - T_o) \underline{\underline{I}}$$

$$\bullet S = -\left(\frac{\partial \psi}{\partial T}\right)_{\underline{\underline{E}}^e} = S_o + \frac{1}{\rho_o} (3\lambda + 2\mu) \alpha_T (\operatorname{tr} \underline{\underline{E}}^e) + \frac{1}{T_o} C_{\underline{\underline{E}}^e} (T - T_o) - \frac{\lambda_p}{2} (\operatorname{tr} \underline{\underline{E}}^e)^2 + 3\lambda_p \alpha_T \operatorname{tr} \underline{\underline{E}}^e (T - T_o)$$

gdr-week 2011 GDR-3371 MIC Saint-Étienne, France

COUPLAGE THERMIQUE MECANIQUE

Equations de couplage (Lois d'état) – Applicat° THERMO-PLASTICITE

Critère de Von Mises

La fonction de charge de type Von Mises correspondant à l'écrouissage envisagé est définie dans le cas d'un couplage partiel entre phénomènes dissipatifs comme :

$$f(\underline{\underline{\sigma}}, \rho A, \rho \underline{\underline{X}}) = J(\underline{\underline{\sigma}} - \rho \underline{\underline{X}}) - (\rho A + R_o).$$

On obtient ainsi dans le cas d'un matériau isotrope les lois complémentaires d'évolution :

$$\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}^p = \Lambda \, \underline{\underline{n}} , \quad \dot{p} = -\Lambda , \quad \dot{\underline{\underline{\alpha}}} = -\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}^p ,$$

$$\vec{J}_s = -k_T \, \overrightarrow{\operatorname{grad}} \, T$$

gdr-week 2011 GDR-3371 MIC Saint-Étienne, France

COUPLAGE THERMIQUE MECANIQUE

Equations de couplage (Lois d'état) – Applicat° THERMO-PLASTICITE

La loi de comportement associée se résume quant à elle sous la forme :

$$\dot{\underline{\underline{\sigma}}} = [\lambda(\mathrm{tr}\,\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}) - (3\lambda+2\mu)\,\alpha_T\,\dot{T}]\,\underline{\underline{I}} + 2\mu\,[\,\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}} - \Lambda\,\underline{\underline{n}}\,]$$

avec :

- $\underline{\underline{n}} = \frac{3}{2}\frac{\underline{\underline{s}} - \rho\,\underline{\underline{X}}}{J(\underline{\underline{s}} - \rho\,\underline{\underline{X}})}$
- $F_T = -\rho\,[\left(\frac{\partial^2 R}{\partial T\,\partial p}\right) + \left(\frac{\partial Z}{\partial T}\right)\underline{\underline{n}} : \underline{\underline{\alpha}}\,]$

▸ 1[er] cas : $f = 0$ et $2\mu\,\underline{\underline{n}} : \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}} - F_T\,\dot{T} \geq 0$

$$\Rightarrow \Lambda = \frac{2\mu\,\underline{\underline{n}} : \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}} - F_T\,\dot{T} - F_Y\,\dot{Y}_g}{H + 3\mu} \quad \text{avec} \quad H = \rho\,[\left(\frac{\partial^2 R}{\partial p^2}\right)_T + \frac{3}{2}Z(T)\,]$$

▸ 2[ème] cas : $f < 0$ ou $f = 0$ et $2\mu\,\underline{\underline{n}} : \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}} - F_T\,\dot{T} < 0$

$$\Rightarrow \Lambda = 0$$

gdr-week 2011 GDR-3371 MIC Saint-Étienne, France

COUPLAGE THERMIQUE MECANIQUE

Equations de couplage (Eq de la chaleur) – Application THERMO-PLASTICITE

Equation de la chaleur :

$$\rho\,C_{\underline{\underline{\varepsilon}}^e, Y_i, p, \underline{\underline{\alpha}}}\,\frac{dT}{dt} = -\,\mathrm{div}\,\vec{J}_q + r$$

$$+\,T\left\{\left(\frac{\partial \underline{\underline{\sigma}}}{\partial T}\right)_{\underline{\underline{\varepsilon}}^e, p, \underline{\underline{\alpha}}} - \frac{\underline{\underline{\sigma}}}{\rho}\left(\frac{\partial \rho}{\partial T}\right)_{\underline{\underline{\varepsilon}}^e, p, \underline{\underline{\alpha}}}\right\} : \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}^e$$

Termes de couplages dus à la plasticité

$$+\,\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}^p : \underline{\underline{\sigma}}$$

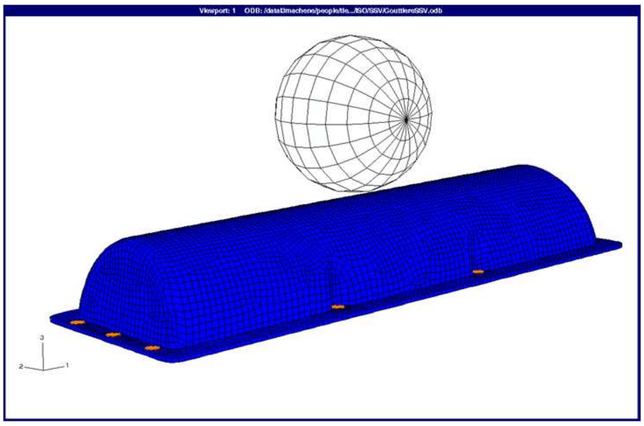
$$-\,\rho\left\{T\left(\frac{\partial A}{\partial T}\right)_{\underline{\underline{\varepsilon}}^e, p, \underline{\underline{\alpha}}} - A\right\}\dot{p} - \rho\left\{T\left(\frac{\partial \underline{\underline{X}}}{\partial T}\right)_{\underline{\underline{\varepsilon}}^e, p, \underline{\underline{\alpha}}} - \underline{\underline{X}}\right\} : \dot{\underline{\underline{\alpha}}}$$

gdr-week 2011 GDR-3371 MIC Saint-Étienne, France

INSTITUT P'

COUPLAGE THERMIQUE MECANIQUE

Un exemple un impact (sphère gouttière)
Auto échauffement

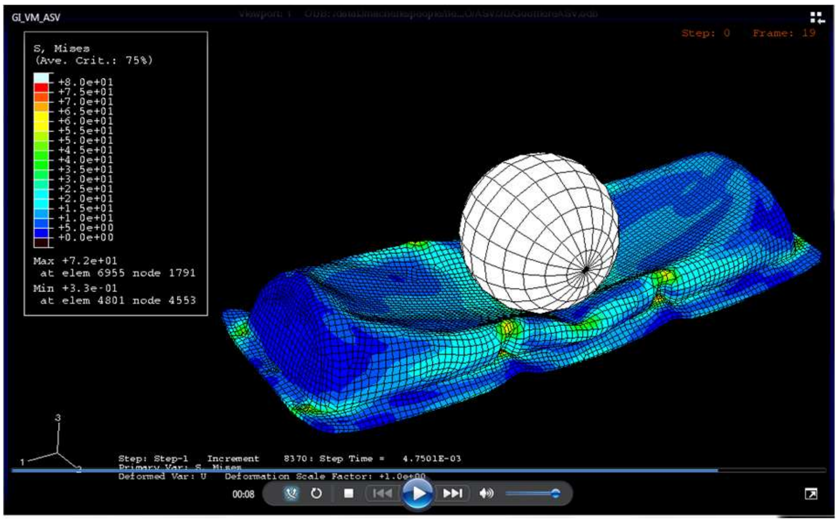


gdr-week 2011 GDR-3371 MIC Saint-Étienne, France

INSTITUT P'

COUPLAGE THERMIQUE MECANIQUE

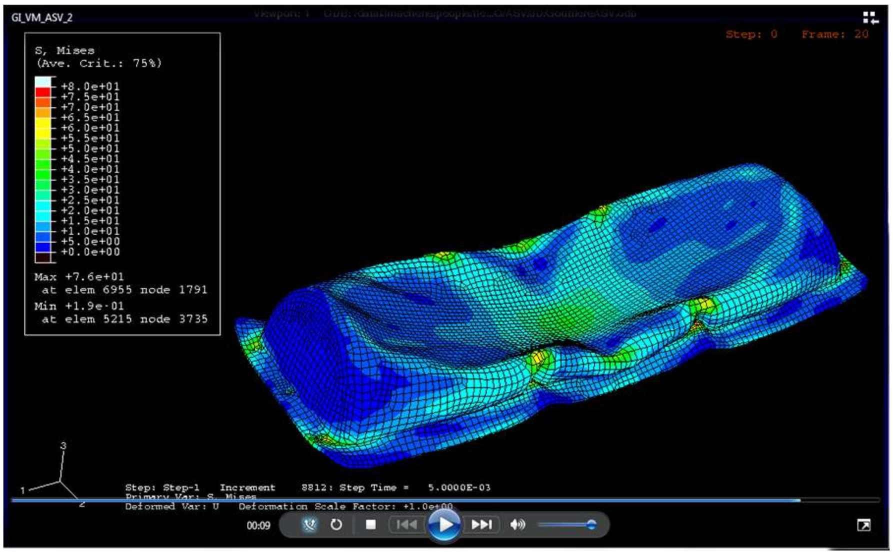
Un exemple



gdr-week 2011 GDR-3371 MIC Saint-Étienne, France

INSTITUT P'

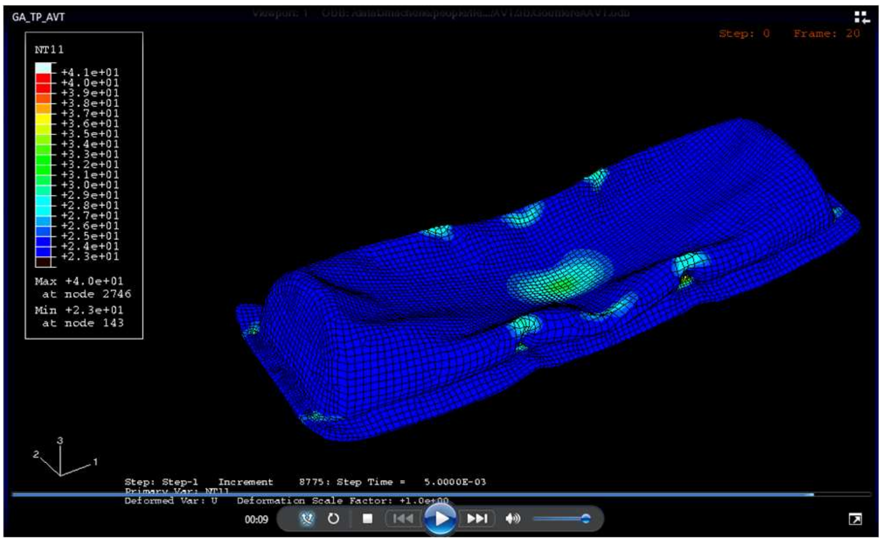
COUPLAGE THERMIQUE MECANIQUE



gdr-week 2011 GDR-3371 MIC Saint-Étienne, France

INSTITUT P'

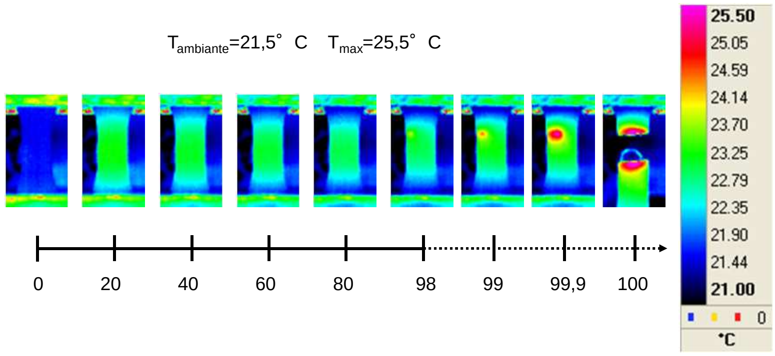
COUPLAGE THERMIQUE MECANIQUE



gdr-week 2011

COUPLAGE THERMIQUE MECANIQUE

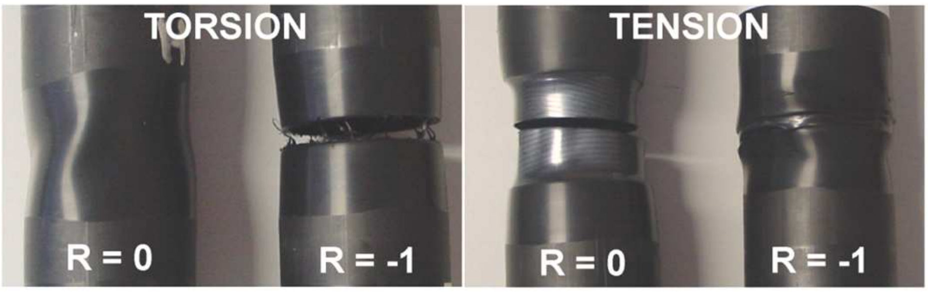
Un exemple Fatigue polymère fibres courtes (endommagement)



Thèse Bert Klimkeit - 2009 Institut P' – S Castagnet - Y Nadot

gdr-week 2011

Un exemple Fatigue polymères semi-cristallin
Instabilité thermo mécanique



Rapport de charge
(machine hydraulique de traction-torsion)

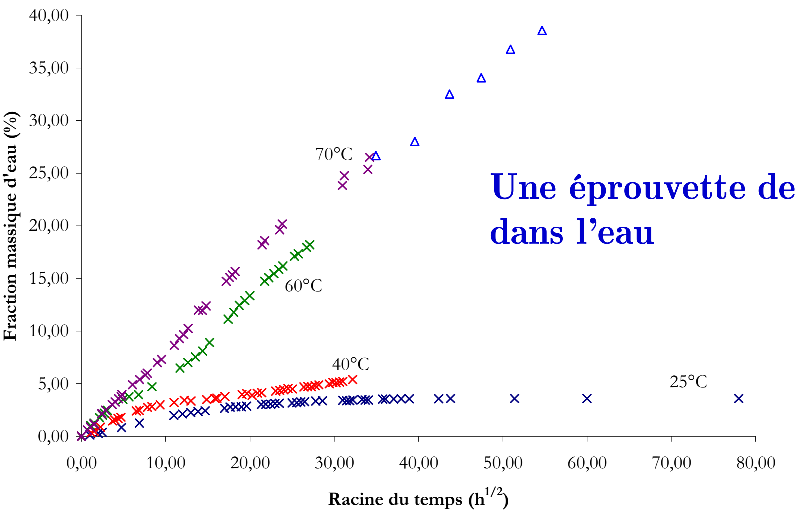
Dépendance des propriétés matériaux
à la température phénomène adoucissant

Thèse A. Berrehili - 2010 Institut P' – S Castagnet - Y Nadot

DEUXIEME VOLET

COUPLAGE THERMO DIFFUSO MECANIQUE

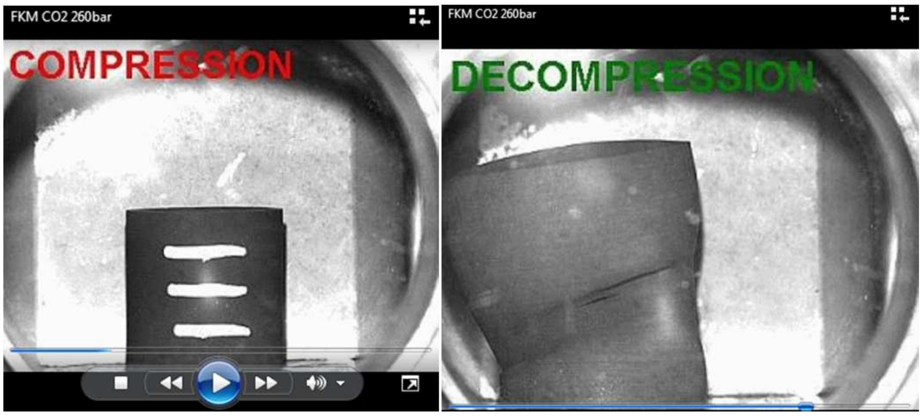
COUPLAGE THERMO DIFFUSO MECANIQUE



Une éprouvette de colle dans l'eau

Thèse Romain Léger – 2010 CRITT Matériaux & Institut P' – Annette Roy J-C Grandidier

Elastomère sous CO2 (vient de la biblio)

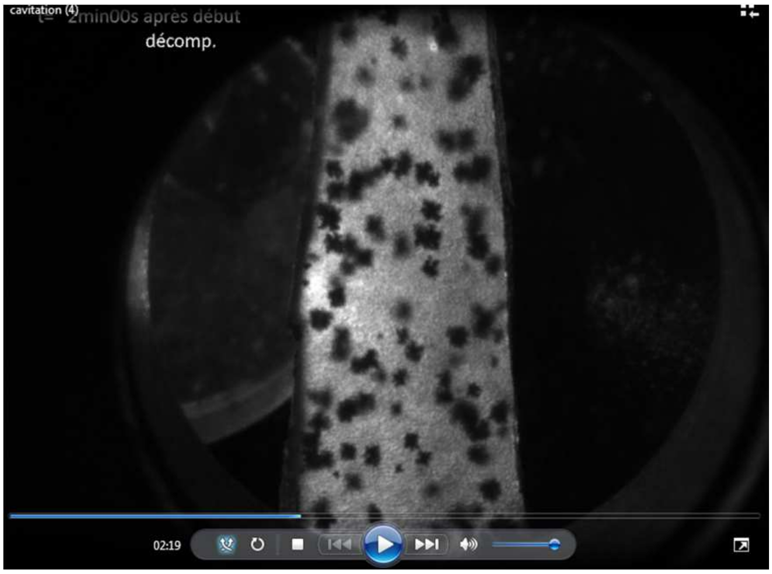


Banc Hycomat (Institut P')

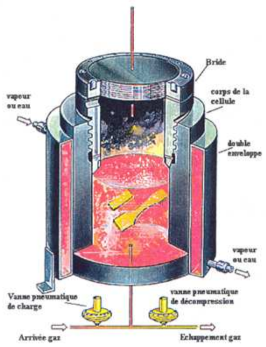
Machine de fatigue hydraulique
Enceinte
Ambiante à 150°C
quelques bars à 400bars
dH2 ou de CO2 ou de N2

gdr-week 2011

Elastomère sous CO_2 (Thèse J. Jaravel S. Castagnet & J-C Grandidier)



gdr-week 2011



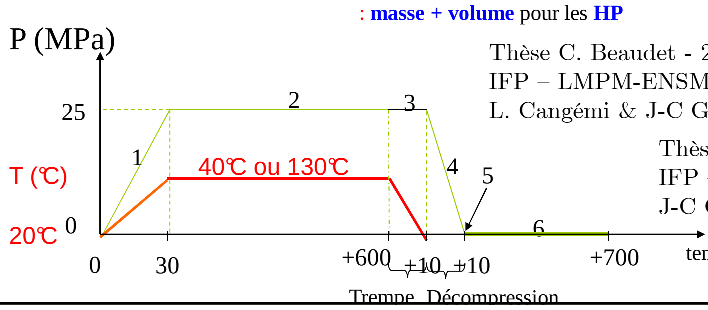
Géométrie des Éprouvettes en PVDF, (gaz=CO_2):

- pavé rectangulaire pour les basses P: 0.5, 1.5, 4 MPa
- anneau pour les hautes P: 25, 50, 100 MPa

1. Montée en P et T(40°C **BP**, 130°C **HP**) de l 'enceinte
2. Saturation en gaz de l 'échantillon à P consigne
3. Trempe de l 'enceinte : chute de T ⟶ 20°C à P consigne
4. Décompression rapide du réacteur en 10 min
5. Ouverture du réacteur
6. Mesures au cours du temps à P_{atm} et $T_{ambiante}$

: **masse** pour les **BP**

: **masse + volume** pour les **HP**

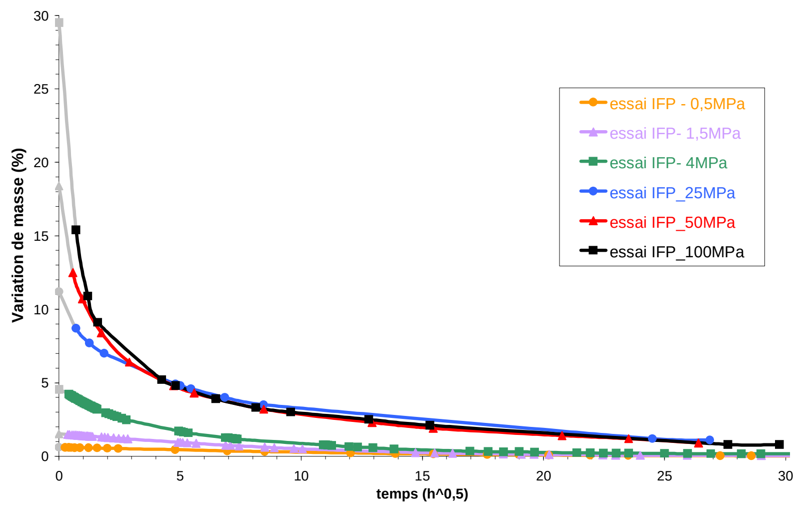


Thèse C. Beaudet - 2006
IFP – LMPM-ENSMA
L. Cangémi & J-C Grandidier

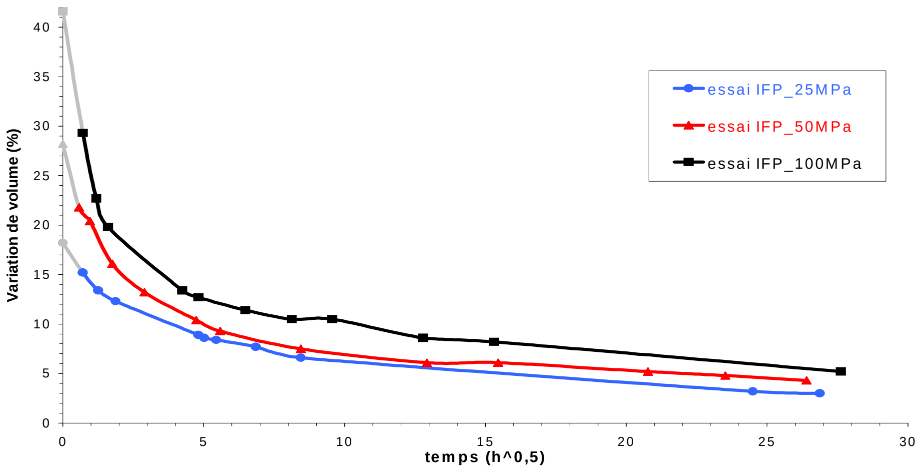
Thèse G. Rambert - 2002
IFP – LMPM-ENSMA
J-C Grandidier

DEWIMILLE B., MARTIN J., JARRIN J., *Behaviour of thermoplastic polymers during explosive decompression in a petroleum environment*, Journal de Physique IV, vol. 3, no. 7, p. 1559-1564, 1993
FLACONNECHE B., MARTIN J., KLOPFFER M.H., *Permeability, diffusion and solubility of gases in polyethylene, polyamide 11 and poly(vinylidene fluoride)*, Oil & Gas Science and Technology – Rev. IFP, vol. 56, n°3, p. 261-278, 2001
JARRIN J., DEWIMILLE B., DEVAUX E., MARTIN J., PIQUES R., *Blistering of thermoplastic materials used in the petroleum industry*, Society of Petroleum Engineers, SPE 28482, p. 203-214, 1994
KLOPFFER M.H., FLACONNECHE B., *Transport Properties of gases in polymers : Bibliographic review*, Oil & Gas Science and Technology - Rev. IFP, vol. 56, n°. 3, p. 223-244, 2001
LIATSIS D., *Gas induced rupture of elastomers*, thèse, Imperial College, 1989
LORGE O., BRISCOE B.J., DANG P., *Gas induced damage in poly(vinylidene fluoride) exposed to decompression*, Polymer, vol. 40, p. 2981-2991, 1999

gdr-week 2011 GDR-3371 MIC Saint-Étienne, France INSTITUT P'



gdr-week 2011



gdr-week 2011

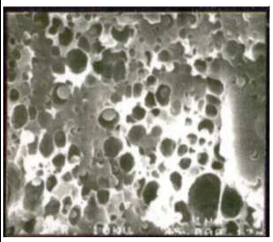
- Vitesse de décompression

Taux décompression faible (18 min): **Cloques** (mm)

Taux décompression élevé (1 min): **Fissures** (mm)

Système : PE /CH_4-10 MPa, 100°C

- Système gaz-polymère



Bilan : ENDOMMAGEMENT résulte de COUPLAGES multiphysiques

Système: PVDF/CO_2-100 MPa, 140°C

Fortes vitesses de décompressions (< 1min): **Cavités** (mm)

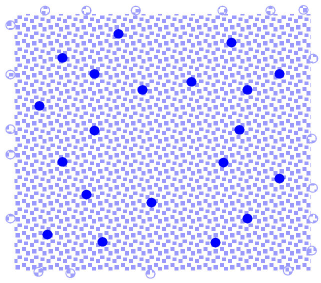
BRISCOE B.J., SAVVAS T., KELLY C.T., *'Explosive decompression failure' of rubbers : a review of the origins of pneumatic stress induced rupture in elastomers*, Rubber Chemistry and Technology, vol. 67, 384-416, 1994

gdr-week 2011 GDR-3371 MIC Saint-Étienne, France

COUPLAGE THERMO - DIFFUSO MECANIQUE

Mélange homogène : milieu à deux constituants

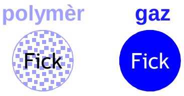
- V.E.R. : mélange de polymère et de gaz
  - continu
  - homogène
  - ouvert
  - chimiquement inerte



- diffusion moléculaire (type Fick)
  i.e. pilotée par des gradients de concentration

- endommagement appréhendé par :
  - variables internes

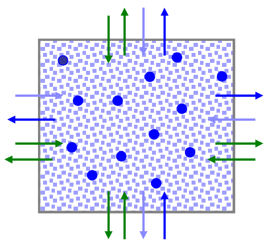
- adapté aux amorphes



gdr-week 2011 GDR-3371 MIC Saint-Étienne, France

COUPLAGE THERMO - DIFFUSO MECANIQUE

Caractérisation du V.E.R.



- gaz -'g'
- polymère -'p'
- chaleur

- V.E.R. :
  - continu
  - homogène
  - ouvert
  - 2 constituants chimiquement inertes

- Diffusion moléculaire (loi de Fick)

gdr-week 2011 GDR-3371 MIC Saint-Étienne, France — INSTITUT P'

COUPLAGE THERMO - DIFFUSO MECANIQUE

Equation de bilan de masse – équation de diffusion.

Relatif au gaz :

solubilité du gaz — concentration normalisée de gaz

densité du mélange — flux relatif de masse gazeuse

$$\rho \; s_g \frac{d\, c_g}{dt} = - \operatorname{div} \vec{J}_{m_g}$$

variation temporelle intrinsèque — variation due au mouvement relatif du gaz

Par définition, localement :

$$\vec{J}_{m_p} = - \vec{J}_{m_g} \quad , \quad s_p \frac{d c_p}{dt} = - s_g \frac{d c_g}{dt}$$

… équations de diffusion liées

gdr-week 2011 GDR-3371 MIC Saint-Étienne, France — INSTITUT P'

COUPLAGE THERMO - DIFFUSO MECANIQUE

- Cadre des petites perturbations (déformations macroscopiques faibles $< 10\%$)
- Les deux 1ers principes avec :
  - partition des déformations

$$\underline{\underline{\varepsilon}} = \underline{\underline{\varepsilon}}^{e} + \underline{\underline{\varepsilon}}^{in}$$

part élastique — part inélastique

Etat du système dépend des concentrations des espèces

  - énergie libre spécifique
  - (potentiel thermodynamique)

$$\psi = \psi(T , \underline{\underline{\varepsilon}}^{e} , c_g , c_p , \xi_1 \ldots \xi_n)$$

variables internes de type endommagement, plasticité …

  - hypothèse d'un paramétrage normal (milieux standard)

gdr-week 2011 GDR-3371 MIC Saint-Étienne, France — INSTITUT P'

COUPLAGE THERMO - DIFFUSO MECANIQUE

Lois d'état

- **tenseur des contraintes totales de Cauchy :**

$$\underline{\underline{\sigma}} = \rho \left(\frac{\partial \psi}{\partial \underline{\underline{\varepsilon}}^e}\right)_{T,\, c_i,\, \xi_j}$$

- affinité associée à la $j^{\text{ième}}$ variable interne :

$$A_j = -\left(\frac{\partial \psi}{\partial \xi_j}\right)_{T,\, \underline{\underline{\varepsilon}}^e,\, c_i,\, \xi_{k \neq j}}$$

- entropie spécifique :

$$S = -\left(\frac{\partial \psi}{\partial T}\right)_{\underline{\underline{\varepsilon}}^e,\, c_i,\, \xi_j}$$

- potentiel chimique du $i^{\text{ème}}$ constituant :

$$\mu_i = \frac{1}{s_i}\left(\frac{\partial \psi}{\partial c_i}\right)_{T,\, \underline{\underline{\varepsilon}}^e,\, c_{k \neq i},\, \xi_j}$$

gdr-week 2011 GDR-3371 MIC Saint-Étienne, France — INSTITUT P'

COUPLAGE THERMO - DIFFUSO MECANIQUE

Equation de la chaleur

variation locale de la température

$$\rho\, C_{\underline{\underline{\varepsilon}}^e,\, c_i,\, \xi_j} \frac{dT}{dt} = -\operatorname{div} \vec{J}_q + r$$

effet classique du flux et de la source thermique

$$+\ \underline{\underline{\sigma}} : \frac{d\underline{\underline{\varepsilon}}^{in}}{dt} + T\left(\frac{\partial \underline{\underline{\sigma}}}{\partial T}\right)_{\underline{\underline{\varepsilon}}^e,\, c_i,\, \xi_j} : \frac{d\underline{\underline{\varepsilon}}^e}{dt}$$

effet de la mécanique

$$+\ \rho\, \left[T\left(\frac{\partial(\mu_g - \mu_p)}{\partial T}\right)_{\underline{\underline{\varepsilon}}^e,\, c_i,\, \xi_j} - (\mu_g - \mu_p)\right] s_g \frac{dc_g}{dt}$$

effet de la diffusion

$$-\ \sum_{j=1}^{n} \rho\, \left[T\left(\frac{\partial A_j}{\partial T}\right)_{\underline{\underline{\varepsilon}}^e,\, c_i,\, \xi_j} - A_j\right] \frac{d\xi_j}{dt}$$

effet des phénomènes dissipatifs de type endommagement…

COUPLAGE THERMO - DIFFUSO MECANIQUE

Dissipation

mécanique — **liée au gradient thermique** — **liée au gradient de potentiel chimique**

$$\underline{\underline{\sigma}} : \frac{d\underline{\underline{\varepsilon}}^{in}}{dt} + \sum_{j=1}^{n} \rho A_j \frac{d\xi_j}{dt} - \frac{1}{T}\left\{\vec{J}_q - [\mu_g - \mu_p]\,\vec{J}_{m_g}\right\} . \overrightarrow{\text{grad}}\,T - \vec{J}_{m_g} . \overrightarrow{\text{grad}}[\mu_g - \mu_p] \geq 0$$

flux d'entropie

- **potentiel dual de dissipation avec hypothèse de couplage plus ou moins forte**

couplage fort - anisotropie $d^* = d^*\left(\underline{\underline{\sigma}}\ ,\ \rho A_j\ ,\ -\overrightarrow{\text{grad}}\,T\ ,\ -\overrightarrow{\text{grad}}[\mu_g - \mu_p]\right)$

couplage partiel principe de Curie - isotropie $d^* = d_1^*\left(\underline{\underline{\sigma}}\ ,\ \rho A_j\right) + d_{2+3}^*\left(-\overrightarrow{\text{grad}}\,T\ ,\ -\overrightarrow{\text{grad}}[\mu_g - \mu_p]\right)$

' Un milieu isotrope ne peut être le siège de couplage entre flux et forces dont les ordres tensoriels différent d'une unité '

COUPLAGE THERMO - DIFFUSO MECANIQUE

Dissipation

mécanique — liée au gradient thermique — liée au gradient de potentiel chimique

$$\underline{\underline{\sigma}} : \frac{d\underline{\underline{\varepsilon}}^{in}}{dt} + \sum_{j=1}^{n} \rho A_j \frac{d\xi_j}{dt} - \frac{1}{T}\left\{\vec{J}_q - [\mu_g - \mu_p]\,\vec{J}_{m_g}\right\} . \overrightarrow{\text{grad}}\,T - \vec{J}_{m_g} . \overrightarrow{\text{grad}}[\mu_g - \mu_p] \geq 0$$

- potentiel dual de dissipation avec hypothèse de couplage plus ou moins forte

couplage fort - anisotropie $d^* = d^*\left(\underline{\underline{\sigma}}\ ,\ \rho A_j\ ,\ -\overrightarrow{\text{grad}}\,T\ ,\ -\overrightarrow{\text{grad}}[\mu_g - \mu_p]\right)$

couplage partiel principe de Curie - isotropie $d^* = d_1^*\left(\underline{\underline{\sigma}}\ ,\ \rho A_j\right) + d_{2+3}^*\left(-\overrightarrow{\text{grad}}\,T\ ,\ -\overrightarrow{\text{grad}}[\mu_g - \mu_p]\right)$

découplage $d^* = d_1^*\left(\underline{\underline{\sigma}}\ ,\ \rho A_j\right) + d_2^*\left(-\overrightarrow{\text{grad}}\,T\right) + d_3^*\left(-\overrightarrow{\text{grad}}[\mu_g - \mu_p]\right)$

Lois d'évolution couplées

- évolution de la déformation inélastique :

$$\frac{d\underline{\underline{\varepsilon}}^{in}}{dt} = \left(\frac{\partial d^*}{\partial \underline{\underline{\sigma}}}\right)_{\rho A_j\ ,\ -\overrightarrow{grad}T\ ,\ -\overrightarrow{grad}[\mu_g - \mu_p]}$$

- évolution des variables internes

$$\frac{d\xi_j}{dt} = \left(\frac{\partial d^*}{\partial [\rho A_j]}\right)_{\underline{\underline{\sigma}}\ ,\ \rho A_{k \neq j}\ ,\ -\overrightarrow{grad}T\ ,\ -\overrightarrow{grad}[\mu_g - \mu_p]}$$

- flux thermique :

$$\vec{J}_q = T\left(\frac{\partial d^*}{\partial [-\overrightarrow{grad}\,T]}\right)_{\underline{\underline{\sigma}}\ ,\ \rho A_j\ ,\ -\overrightarrow{grad}[\mu_g - \mu_p]} + [\mu_g - \mu_p]\,\vec{J}_{m_g}$$

- flux relatif de masse gazeuse :

$$\vec{J}_{m_g} = \left(\frac{\partial d^*}{\partial [-\overrightarrow{grad}(\mu_g - \mu_p)]}\right)_{\underline{\underline{\sigma}}\ ,\ \rho A_j\ ,\ -\overrightarrow{grad}\,T}$$

Lois d'évolution découplées

- évolution de la déformation inélastique :

$$\frac{d\underline{\underline{\varepsilon}}^{in}}{dt} = \left(\frac{\partial d_1^*}{\partial \underline{\underline{\sigma}}}\right)_{\rho A_j}$$

Découplage total

$$d^* = d_1^*(\underline{\underline{\sigma}}, \rho A_j) + d_2^*(-\overrightarrow{grad}\,T) + d_3^*(-\overrightarrow{grad}\,[\mu_g - \mu_p])$$

- évolution des variables internes

$$\frac{d\xi_j}{dt} = \left(\frac{\partial d_1^*}{\partial [\rho A_j]}\right)_{\underline{\underline{\sigma}}\ ,\ \rho A_{k \neq j}}$$

- flux thermique :

$$\vec{J}_q = T\left(\frac{\partial d_2^*}{\partial [-\overrightarrow{grad}\,T]}\right) + [\mu_g - \mu_p]\,\vec{J}_{m_g}$$

- flux relatif de masse gazeuse :

$$\vec{J}_{m_g} = \left(\frac{\partial d_3^*}{\partial [-\overrightarrow{grad}(\mu_g - \mu_p)]}\right)$$

Lois d'évolution découplées

- **évolution de la déformation inélastique :**

$$\frac{d\underline{\underline{\varepsilon}}^{in}}{dt} = \left(\frac{\partial d_1^*}{\partial \underline{\underline{\sigma}}}\right)_{\rho A_j}$$

Découplage total

- **évolution des variables internes**

$$\frac{d\xi_j}{dt} = \left(\frac{\partial d_1^*}{\partial[\rho A_j]}\right)_{\underline{\underline{\sigma}},\, \rho A_{k\neq j}}$$

- **flux thermique :** Forme quadratique + isotropie + transfert thermique seul

$$\vec{J}_q = T\, k_T\, [-\overrightarrow{\text{grad}}\, T] = \lambda\, [-\overrightarrow{\text{grad}}\, T]$$

Fourier

- **flux relatif de masse gazeuse :** Forme quadratique + isotropie + diffusion seule

$$\vec{J}_{m_g} = k_\mu\, [-\overrightarrow{\text{grad}}(\mu_g - \mu_p)] = \mathcal{D}\, [-s_g\, \overrightarrow{\text{grad}}\, c_g]$$

Fick

Etude qualitative des couplages en thermo-diffuso-élasticité

Modèle

➢ **Mécanique**

$$\overrightarrow{\text{div}}\,\underline{\underline{\sigma}} + \rho\,\vec{f} = \vec{0} \quad , \quad \underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{\sigma}}_o + \lambda\,(\text{tr}\,\underline{\underline{\varepsilon}}^m)\,\underline{\underline{I}} + 2\mu\,\underline{\underline{\varepsilon}}^m$$

$$\underline{\underline{\varepsilon}} = \underline{\underline{\varepsilon}}_o + \frac{1+\nu}{E}\,\underline{\underline{\sigma}} - \frac{\nu}{E}\,(\text{tr}\,\underline{\underline{\sigma}})\,\underline{\underline{I}} + \alpha_T\,(T - T_o)\,\underline{\underline{I}} + \alpha_c\, s_g\,(c - c_o)\,\underline{\underline{I}}$$

➢ **Diffusion**

$$\rho\, s_g \frac{dc}{dt} = \mathcal{D}\,\rho\, s_g\, \text{div}(\overrightarrow{\text{grad}}\, c) - k_\mu \frac{K\,\alpha_c}{\rho}\, \text{div}(\overrightarrow{\text{grad}}\,[\text{tr}\,\underline{\underline{\varepsilon}}]) + (c_{T\mu} - k_\mu\, \mathbf{d})\, \text{div}(\overrightarrow{\text{grad}}\, T)$$

notation : $c_g \equiv c$

- **Thermique**

$$\rho\, C_{\varepsilon,c}\,\frac{dT}{dt} = [\,\lambda + (k_\mu\, \mathbf{d} - 2\, c_{T\mu})\,\mathbf{d}\,T\,]\,\mathrm{div}(\overrightarrow{\mathrm{grad}}\,T) + r - K\,\alpha_T\,T\,\mathrm{tr}\,\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}$$

$$- [\,k_\mu\,\mathbf{d} - c_{T\mu}\,]\,\frac{1}{k_\mu}\,D\,\rho\,s_g\,T\,\mathrm{div}(\overrightarrow{\mathrm{grad}}\,c) + [\,k_\mu\,\mathbf{d} - c_{T\mu}\,]\,\frac{K\,\alpha_c}{\rho}\,T\,\mathrm{div}(\overrightarrow{\mathrm{grad}}\,[\mathrm{tr}\,\underline{\underline{\varepsilon}}\,])$$

$$+ (k_\mu\,\mathbf{d} - 2c_{T\mu})\,\mathbf{d}\,(\overrightarrow{\mathrm{grad}}\,T)^2 + \frac{1}{k_\mu}(D\,\rho\,s_g)^2(\overrightarrow{\mathrm{grad}}\,c)^2 + k_\mu\,[\,\frac{K\,\alpha_c}{\rho}\,]^2\,(\overrightarrow{\mathrm{grad}}\,[\mathrm{tr}\,\underline{\underline{\varepsilon}}\,])^2$$

$$- 2\,(k_\mu\,\mathbf{d} - c_{T\mu})\,\frac{1}{k_\mu}\,D\,\rho\,s_g\,\overrightarrow{\mathrm{grad}}c\,.\,\overrightarrow{\mathrm{grad}}\,T + 2\,[\,k_\mu\,\mathbf{d} - c_{T\mu}\,]\,\frac{K\,\alpha_c}{\rho}\,\overrightarrow{\mathrm{grad}}\,[\mathrm{tr}\,\underline{\underline{\varepsilon}}\,]\,.\,\overrightarrow{\mathrm{grad}}\,T$$

$$- 2\,\frac{K\,\alpha_c}{\rho}\,D\,\rho\,s_g\,\overrightarrow{\mathrm{grad}}c\,.\,\overrightarrow{\mathrm{grad}}\,[\mathrm{tr}\,\underline{\underline{\varepsilon}}\,]$$

gdr-week 2011 GDR-3371 MIC Saint-Étienne, France
INSTITUT P'

12 coefficients dont 5 de couplage

$$\rho\ ,\ \underbrace{E\ ,\ \nu}\ ,\ \lambda\ ,\ C_{\varepsilon,c}\ ,\ \boxed{\alpha_T}\ ,\ D\ ,\ s_g\ ,\ \boxed{\alpha_c}\ ,\ \boxed{k_\mu\ ,\ \mathbf{d}\ ,\ c_{T\mu}}$$

$\lambda\ ,\ \mu\ ,\ K = 3\lambda + 2\mu$

Stratégie

Programmation d'UEL

Etude d'une structure test : tuyau

- cas découplé
- prise en compte d'1 premier couplage
- prise en compte d'1 second couplage
- …

comparaison (cas découplé ↔ premier couplage)

comparaison (premier couplage ↔ second couplage)

gdr-week 2011

- définition du cas découplé : 1 coefficient ne peut PAS être annulé $k_\mu \rightarrow \infty$
- prise en compte du couplage ‘diffusion-thermique’ : k_μ
- prise en compte des couplages classiques : α_T , α_c
- prise en compte des couplages non classiques : $\mathbf{d}$, $c_{T\mu}$

<u>physiquement acceptable</u>

- conservation des effets ‘classiques’
- limitation de la contribution des couplages (par choix <50%)

gdr-week 2011

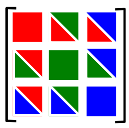
Implémentation dans Abaqus

- Problème transitoire : schéma d’intégration en temps géré par ABAQUS
- UEL : construction du vecteur résidu et de la matrice tangente élémentaires

formulation faible $\Rightarrow$ discrétisation spatiale sur 1 élément avec 5 d.d.l.

$$\{q_n\}=\{ u_1 , v_1 , w_1 , u_2 , v_2 , w_2 \ldots u_n , v_n , w_n , T_1 , T_2 \ldots T_n , c_1 , c_2 \ldots c_n \}$$

$$\Rightarrow \{F\}(\{\dot{q}_n\},\{q_n\}) = \{0\} \quad \text{et} \quad [K] = -\frac{\partial\{F\}}{\partial\{q_n\}} - \frac{1}{\Delta t}\frac{\partial\{F\}}{\partial\{\dot{q}_n\}} =$$

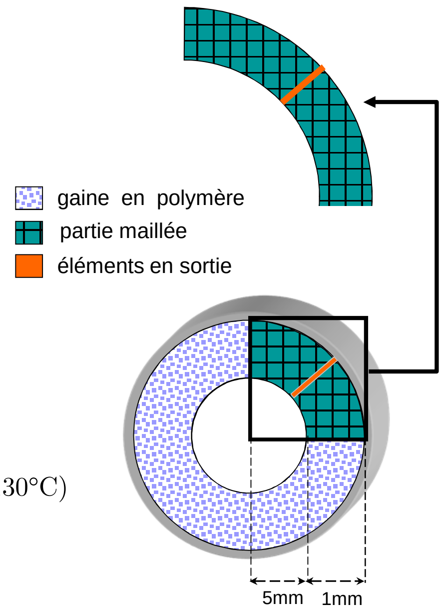


- Programmation d’éléments 2D et 3D
- Validation dans le cas :
  - découplé
  - couplé thermique-mécanique

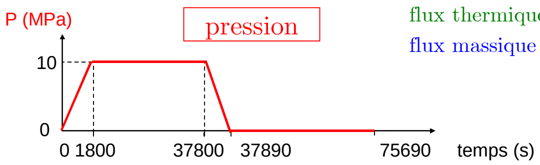
Etude du cas test

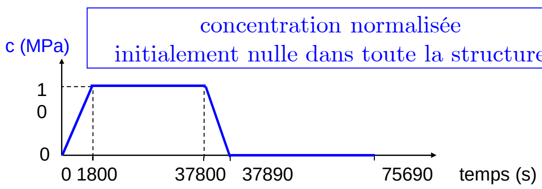
ρ	1745 kg/m^3
E	1743 MPa
ν	0,38
C	1045 J/kg°K
λ	0,26 W/m.°K
α_T	10^{-5} °K^{-1}
s_g	5,539.10^3 Pa^{-1}
$\mathcal{D}$	9,8.10^{-12} m^2/s
α_c	2,2.10^{-13}

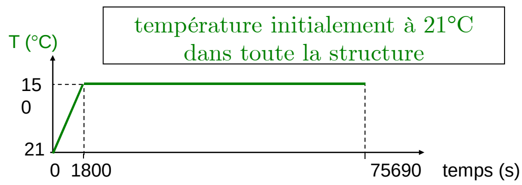
PVDF avec CO_2 vers 21°C (sauf α_c à 130°C)

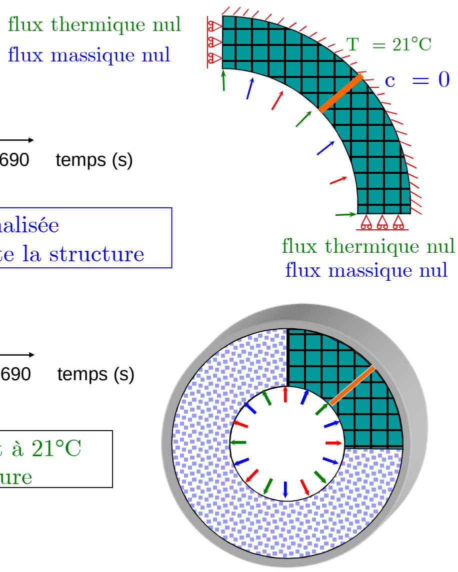


Etude du cas test









k_μ : effet de la diffusion sur la thermique

- Mécanique

$$\underline{\underline{\varepsilon}} = \underline{\underline{\varepsilon}}_o + \frac{1+\nu}{E}\,\underline{\underline{\sigma}} - \frac{\nu}{E}\,(\mathrm{tr}\,\underline{\underline{\sigma}})\,\underline{\underline{I}}$$

- Diffusion

$$\rho\, s_g \frac{dc}{dt} = D\, \rho\, s_g\, \mathrm{div}(\overrightarrow{\mathrm{grad}}\, c)$$

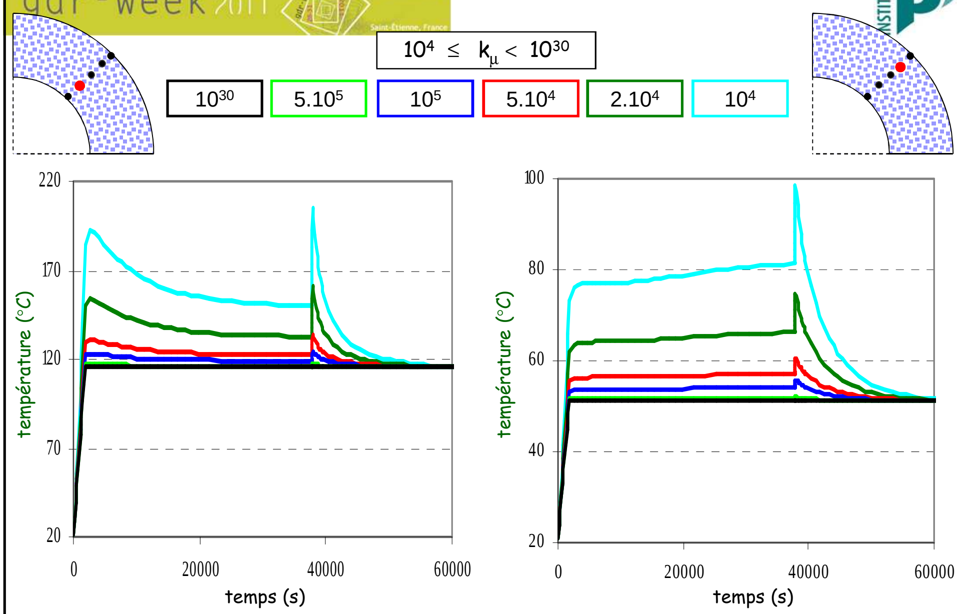
- Thermique

$$\rho\, C_{\varepsilon,c} \frac{dT}{dt} = \lambda\, \mathrm{div}(\overrightarrow{\mathrm{grad}}\, T) + r + \frac{1}{k_\mu}(D\, \rho\, s_g)^2 (\overrightarrow{\mathrm{grad}}\, c)^2$$

→ 0 : cas découplé

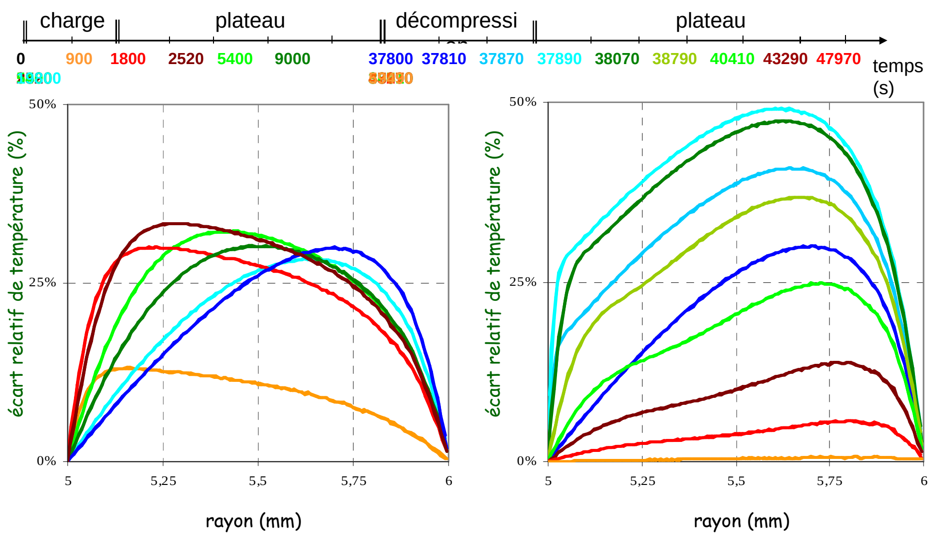
$k_\mu = 10^{30}$ kg.s/m³

Par définition : $k_\mu > 0$ ⇒ augmentation locale de température du fait de la diffusion



$k_\mu < 10^4$: effet disproportionné // $10^6 \le k_\mu < 10^{30}$: effet négligeable

$k_\mu = 2.10^4\ kg.s/m^3$



$k_\mu + \alpha_T$: prise en compte de la dilatation thermique

- Mécanique

$$\underline{\underline{\varepsilon}} = \underline{\underline{\varepsilon}}_o + \frac{1+\nu}{E}\,\underline{\underline{\sigma}} - \frac{\nu}{E}\,(\mathrm{tr}\,\underline{\underline{\sigma}})\,\underline{\underline{I}} + \alpha_T\,(T - T_o)\,\underline{\underline{I}}$$

- Diffusion

$$\rho\, s_g \frac{dc}{dt} = D\, \rho\, s_g\, \mathrm{div}(\overrightarrow{\mathrm{grad}}\, c)$$

- Thermique

$$\rho\, C_{\varepsilon,c} \frac{dT}{dt} = \lambda\, \mathrm{div}(\overrightarrow{\mathrm{grad}}\, T) + r + \frac{1}{k_\mu}(D\, \rho\, s_g)^2 (\overrightarrow{\mathrm{grad}}\, c)^2 - K\, \alpha_T\, T\, \mathrm{tr}\, \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}$$

effet négligeable pour le cas test simulé (chargement lent)

$k_\mu + \alpha_T$: prise en compte de la dilatation thermique

- Mécanique

$$\underline{\underline{\varepsilon}} = \underline{\underline{\varepsilon}}_o + \frac{1+\nu}{E}\,\underline{\underline{\sigma}} - \frac{\nu}{E}\,(tr\,\underline{\underline{\sigma}})\,\underline{\underline{I}} + \alpha_T\,(T - T_o)\,\underline{\underline{I}} + \alpha_c\, S_g\,(c - c_o)\,\underline{\underline{I}}$$

- Diffusion

$$\rho\, s_g \frac{dc}{dt} = D\,\rho\, s_g\, div(\overrightarrow{grad}\, c) - k_\mu \frac{K\,\alpha_c}{\rho}\, div(\overrightarrow{grad}\,[tr\,\underline{\underline{\varepsilon}}])$$

effet négligeable pour le cas test simulé

- Thermique

$$\rho\, C_{\varepsilon,c} \frac{dT}{dt} = \lambda\, div(\overrightarrow{grad}\, T) + r + \frac{1}{k_\mu}(D\,\rho\, s_g)^2 (\overrightarrow{grad}\, c)^2 - K\,\alpha_T\, T\, tr\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}$$

$$- 2\,\frac{K\,\alpha_c}{\rho}\, D\,\rho\, s_g\, \overrightarrow{grad}c \cdot \overrightarrow{grad}\,[tr\,\underline{\underline{\varepsilon}}] + k_\mu \left[\frac{K\,\alpha_c}{\rho}\right]^2 (\overrightarrow{grad}\,[tr\,\underline{\underline{\varepsilon}}])^2$$

gdr-week 2011 GDR-3371 MIC Saint-Étienne, France

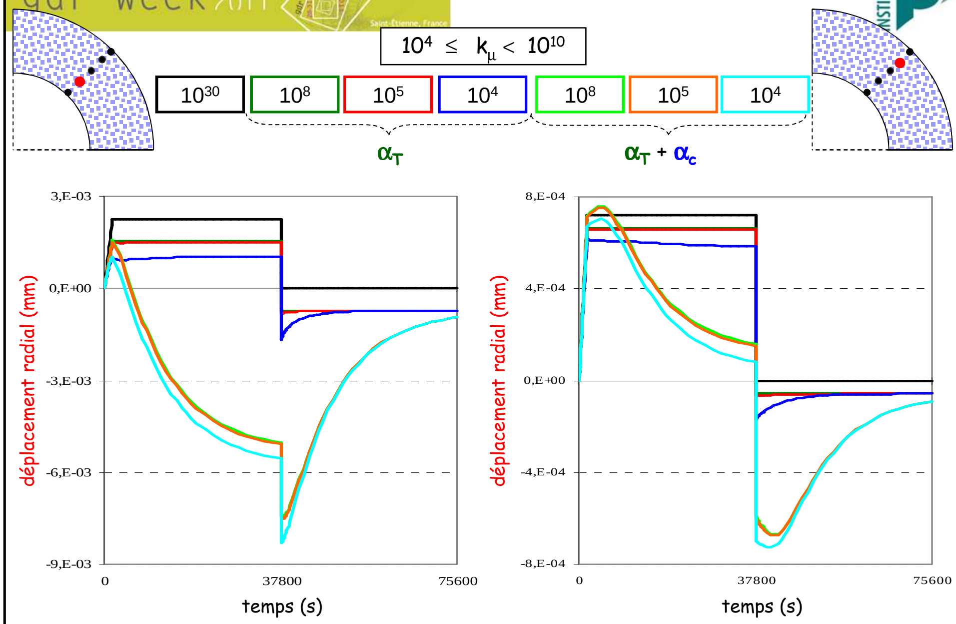
cas axisymétrique :

$$\overrightarrow{grad}\,[tr\,\underline{\underline{\varepsilon}}] = \overrightarrow{grad}\,[tr\,\underline{\underline{\varepsilon}}^T] + \overrightarrow{grad}\,[tr\,\underline{\underline{\varepsilon}}^g] = 3\,\alpha_T\, \overrightarrow{grad}T + 3\,\alpha_c\, s_g\, \overrightarrow{grad}c$$

- Diffusion

$$\rho\, s_g \frac{dc}{dt} = \left[D\,\rho - 3\,k_\mu\,\alpha_c \frac{K\,\alpha_c}{\rho}\right] s_g\, div(\overrightarrow{grad}\, c) + \dots$$

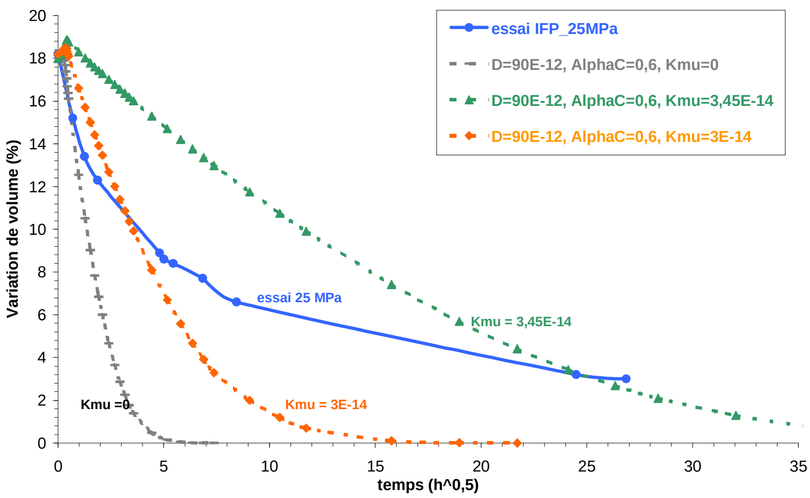
$$D\,\rho - 3\,k_\mu\,\alpha_c \frac{K\,\alpha_c}{\rho} > 0 \quad \text{et} \quad 3\,k_\mu\,\alpha_c \frac{K\,\alpha_c}{\rho} < \frac{1}{2} D\,\rho \quad \Rightarrow \quad \boxed{10^4 < k_\mu < \mathbf{10^{10}}}$$



Ce couplage diffuso**-élastique / test de solubilité ??**

Cinétique de désorption | Déformation volumique

kµ = 1/Kmu

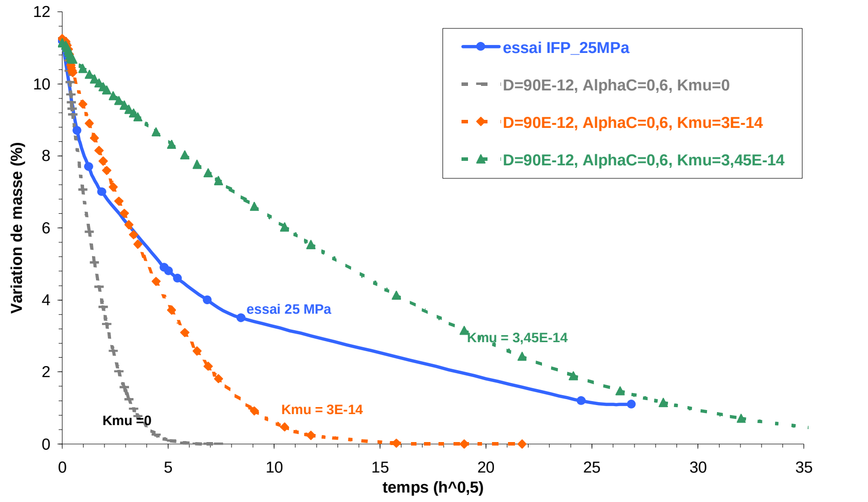


gdr-week 2011

Ce couplage diffuso-élastique / test de solubilité ??

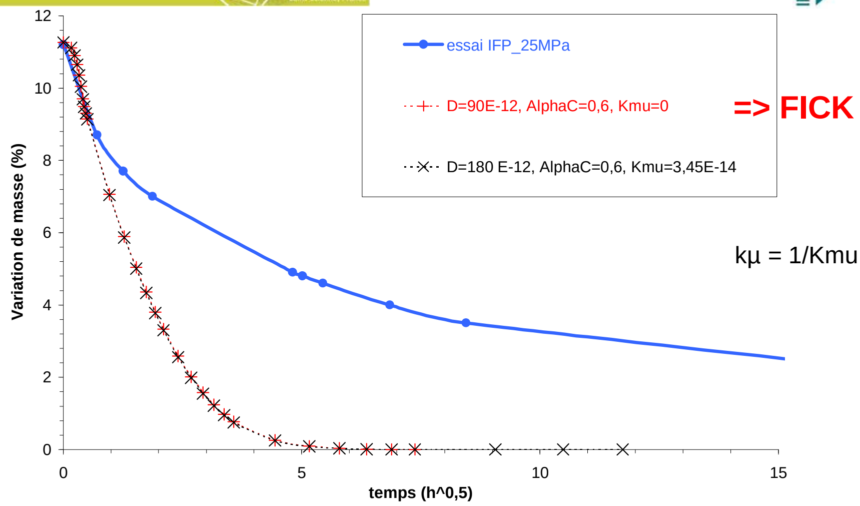
Cinétique de désorption | Variation de masse

kµ = 1/Kmu



Couplage direct via α_c et k_μ pas prédictif / test de solubilité

gdr-week 2011



=> FICK

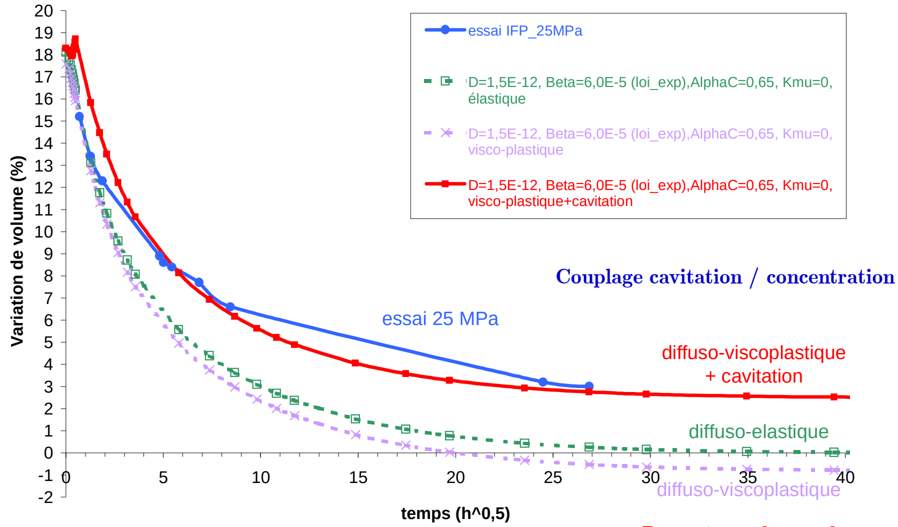
kµ = 1/Kmu

Couplage avec le **gradient** de la **déf. Vol. élastique**

Non unicité *D* (loi Fick) <> *D* du couplage avec K_μ

SOULEVE la QUESTION de l 'IDENTIFICATION du coefficient de DIFFUSION *D*

gdr-week 2011



Paramètres de couplage

$\alpha_s = 3$	$\alpha_s = 3$
$\alpha_s^{l} = 0$	$\alpha_s^{l} = 3$

Cavitation commence pendant la décompression
-> atteint un maximum après ≅ 6,7h de désorption

gdr-week 2011

TROISIEME VOLET

COUPLAGE CHIMICO DIFFUSO THERMO MECANIQUE

gdr-week 2011

COMPOSITES TIEDES

Amélioration des structures aéronautiques

↓

Matériaux composites
(plus de 50% en masse dans A350XWB, A380 et B787)

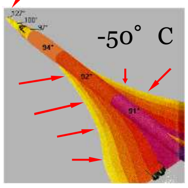
↓

Conditions d'utilisation « extrêmes »

Chargement mécanique, impact…

Environnement agressif:
T° + O_2

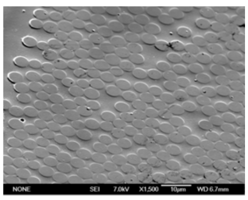
Zones « chaudes »



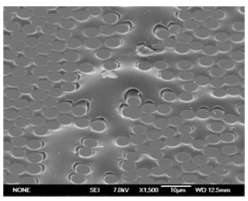
gdr-week 2011

Cyclage thermique -50°C/180°C

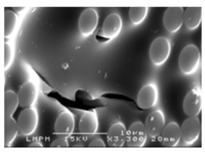
1000 cycles N_2



1000 cycles O_2



Lafarie-Frenot, Intern. Journal of Fatigue, vol. 28, 2006
Rouquie et al., Comp. Sci. and Tech., vol. 65, 2005



- Vieillissement prématuré sous environnement oxydant
- Fort couplage entre état d'oxydation et chargement local

Retrait matriciel
Fragilisation interface
Ablation…

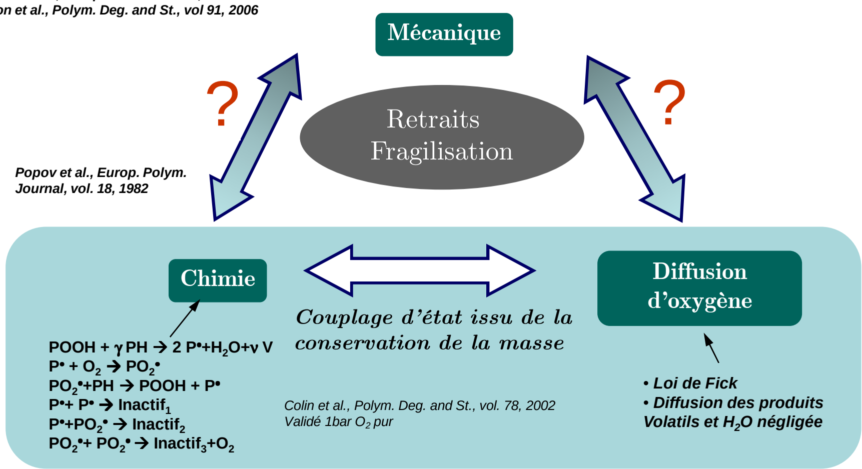
?⇨ **Amorçage endommagement**

Thèse L. Olivier - 2008
P'-ENSMA
M-C Lafarie & J-C Grandidier

Quels sont les mécanismes et les interactions?

Viscoélasticité
Endommagement
Schieffer, thèse UTT, 2003

Schieffer et al., Comp. Sci. and Tech., vol. 62, 2002
Olivier et al., Polym. Deg. and St., vol 93, 2008
Lubineau et al., Comp. Sci. and Tech., 2007
Tandon et al., Polym. Deg. and St., vol 91, 2006



Modélisation de la réaction chimique: le schéma mécanistique

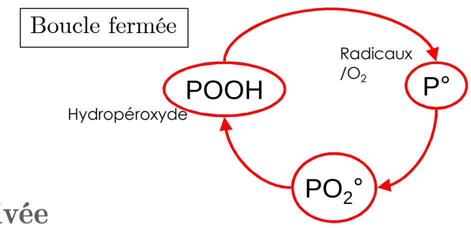
(I)	$POOH + \gamma\, PH \rightarrow 2\, P° + H_2O + \nu V$	(k_1) *Amorçage*
(II)	$P° + O_2 \rightarrow PO_2°$	(k_2) *Propagation*
(III)	$PO_2° + PH \rightarrow POOH + P°$	(k_3) *Propagation*
(IV)	$P° + P° \rightarrow$ produits inactifs	(k_4) *Terminaison*
(V)	$P° + PO_2° \rightarrow$ produits inactifs	(k_5) *Terminaison*
(VI)	$PO_2° + PO_2° \rightarrow$ produits inactifs $+O_2$	(k_6) *Terminaison*

Colin, X. - Verdu, J.,

Équations de

Diffusion – Oxydation

Chimie thermiquement activée



gdr-week 2011 GDR-3371 MIC Saint-Étienne, France

COUPLAGE CHIMICO DIFFUSO THERMO MECANIQUE

Comment Faire ???

Remarque

Oxydation - équivalent – Cuisson

Evolution chimique du matériau

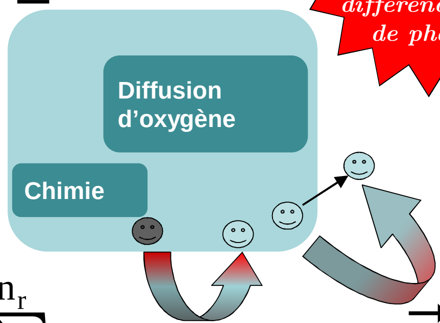
gdr-week 2011 GDR-3371 MIC Saint-Étienne, France

EQUATIONS DE BILAN

Cinématique
Mélange
-
Pas de différenciation de phases

Mécanique $$\mathrm{div}\, \underline{\underline{\sigma}} + \vec{f} = \rho\, \vec{\gamma}$$

Bilan de Masse



$$\rho \frac{\partial Y_i}{\partial t} = \sum_{r=1}^{n_r} \nu_{ir} M_i w_r - \mathrm{div}\cdot \vec{J}_{mi}$$

Chimie

CONTRAINTE / PARTITION des DEFORMATION

$$\underline{\underline{\mathbf{S}}}^s = \frac{1}{3}\, tr\underline{\underline{\mathbf{S}}}\ \mathbf{I} \qquad \underline{\underline{\mathbf{S}}}^d = \underline{\underline{\mathbf{S}}} - \underline{\underline{\mathbf{S}}}^s$$

$$\underline{\underline{\mathbf{E}}}^s = \frac{1}{3}\, tr\underline{\underline{\mathbf{E}}}\ \underline{\underline{\mathbf{I}}} \qquad \underline{\underline{\mathbf{E}}}^d = \underline{\underline{\mathbf{E}}} - \underline{\underline{\mathbf{E}}}^s$$

Sphérique **Déviatorique**

$$\underline{\underline{\mathbf{E}}} = \underline{\underline{\mathbf{E}}}^{élas} + \underline{\underline{\mathbf{E}}}^{anelastique} + \underline{\underline{\mathbf{E}}}^{T} + \underline{\underline{\mathbf{E}}}^{H} + \underline{\underline{\mathbf{E}}}^{SH}$$

Thermique Hydrique Chimie …

ENTROPIE

$$\rho \frac{ds}{dt} = \frac{1}{T}\Big(\underline{\underline{\mathbf{S}}} : \frac{d\underline{\underline{\mathbf{E}}}^{an}}{dt} - \mathbf{Div}\vec{Q} + r - \sum_{i=1}^{n_s} \mu_i \Big(\sum_{r=1}^{n_r} \nu_{ir} M_i w_r - \mathbf{Div}\, \vec{J}_{mi}\Big) + \rho \sum_{j=1}^{n_{iv}} \mathbf{A}_j \frac{d\xi_j}{dt}\Big)$$

Mécanique — **Thermique** — **Chimie** — **Processus internes dissipatifs**

$$\rho \frac{d_e s}{dt} = -\mathbf{Div}\Big(\frac{1}{T}\Big(\vec{Q} - \sum_{i=1}^{n_s} \mu_i \vec{J}_{mi}\Big)\Big) + \frac{1}{T}\, r$$

Echange / extérieur

$$\rho \frac{d_i s}{dt} = \underline{\underline{\mathbf{S}}} : \frac{d\underline{\underline{\mathbf{E}}}^{an}}{dt} + \vec{Q}\cdot \vec{Grad}\,\frac{1}{T} + \Big(\frac{1}{T}\Big) \sum_{r=1}^{n_r} A_r w_r - \sum_{i=1}^{n_s} \vec{J}_{mi} \cdot \vec{Grad}\,\frac{\mu_i}{T} + \rho \sum_{j=1}^{n_{iv}} \mathbf{A}_j \frac{d\xi_j}{dt}$$

P. Germain, Q.S. Nguyen, P. Suquet, Continuum Thermdynamics. Journal of Applied Mechanics. 50 (1983) 1010-20.

$$A_r = -\sum_{k=1}^{n_s} \nu_{kr} M_k \mu_k = -\sum_{k=1}^{n_s} \nu_{kr} \mu^*_k$$

Entropie crée

I. Prigogine, D. Kondepudi, Thermodynamique. Editions Odile Jacobs. 1999

LOIS D'EVOLUTION MULTIPHYSIQUE

Cas simplifié Elasto – Chimie

On laisse la température de coté

$$\vec{J}_s = \frac{1}{T}\left(\vec{Q} - \sum_{i=1}^{n_s} \mu_i \vec{J}_{mi}\right)$$

$$dissipation: \ \Phi = - \vec{J}_s \cdot \vec{Grad}\, T + \sum_{r=1}^{n_r} A_r w_r - \sum_{i=1}^{n_s} \vec{J}_{mi} \cdot \vec{Grad}\, \mu_i$$

Thermique — Chimie

$$\Phi = \mathbf{y} \cdot \dot{\mathbf{z}} \geq 0 \qquad \mathbf{y} = \frac{\partial D}{\partial \dot{\mathbf{z}}} \qquad \dot{\mathbf{z}} = \frac{\partial D^*}{\partial \mathbf{y}}$$

Force — Flux

$$D = D(\vec{J}_s, w_r, \vec{J}_{mi})$$

Potentiel + conditions
> Second principe

$$D^* = D^*(-\vec{Grad}T, A_r, -\vec{Grad}\,\mu_i)$$

Un EXEMPLE COUPLE - Proche de l'EQUILIBRE -

$$D^* = \frac{1}{2}(-\vec{Grad}T) \cdot \mathbf{B}_T(tr\underline{\underline{\mathbf{E}}}, E^*) \cdot (-\vec{Grad}T) + \frac{1}{2}\sum_{r=1}^{n_r} B_r(tr\underline{\underline{\mathbf{E}}}, E^*) A_r^2 +$$

$$+ \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n_s} (-\vec{Grad}\mu_i) \mathbf{B}_{\mu\, i}(tr\underline{\underline{\mathbf{E}}}, E^*) \cdot (-\vec{Grad}\mu_i) + \sum_{i=1}^{n_s-1}\sum_{j=1}^{n_s} (-\vec{Grad}\mu_i) \mathbf{C}_{\mu\, ij}(tr\underline{\underline{\mathbf{E}}}, E^*)(-\vec{Grad}\mu_j)$$

$$E^* = \underline{\underline{\mathbf{E}}}^d : \underline{\underline{\mathbf{E}}}^d$$

Potentiel dual de dissipation couplé quadratique

$$w_r = \frac{\partial D^*}{\partial A_r} = B_r(tr\underline{\underline{\mathbf{E}}}, E^*) A_r = - B_r(tr\mathbf{E}, E^*) \sum_{k=1}^{n_s} \nu_{kr} M_k \mu_k = - B_r(tr\underline{\underline{\mathbf{E}}}, E^*) \sum_{k=1}^{n_s} \nu_{kr} \mu^*_k$$

Vitesse de réaction

Mécanique

$$\vec{J}_{mi} = \frac{\partial D^*}{\partial(-\nabla \mu_i)} = - \mathbf{B}_{\mu i}(tr\underline{\underline{\mathbf{E}}}, E^*) \cdot \vec{Grad}\, \mu_i - \mathbf{C}_{\mu ij}(tr\underline{\underline{\mathbf{E}}}, E^*) \cdot (-\vec{Grad}\, \mu_j)$$

Diffusion — Inter - Diffusion

86

gdr-week 2011

EQUATION DIFFUSION-REACTION MULTI COMPOSANTS en MELANGE PARFAIT

$$\frac{\partial Y^*_i}{dt} = \sum_{r=1}^{n_r} \nu_{ir} (B_r(\mathrm{tr}\underline{\underline{E}}, E^*) A_r) - \frac{1}{M_i} \mathbf{Div} (-\frac{\mathbf{B}_{\mu\,i} (\mathrm{tr}\underline{\underline{E}}, E^*)}{M_i} \overrightarrow{\mathrm{Grad}}\, \mu^*_i) - \frac{1}{M_i} \mathbf{Div} (-\frac{\mathbf{C}_{\mu\,ij} (\mathrm{tr}\underline{\underline{E}}, E^*)}{M_i} \overrightarrow{\mathrm{Grad}}\, \mu^*_j)$$

Création
Destruction
De l'Espèce

Diffusion
de l'espèce

Intéraction diffusif
de l'espèce avec
les autres constituants du
mélange

$$\frac{\partial Y^*_i}{dt} = \sum_{r=1}^{n_r} \nu_{ir} [-B_r(\mathrm{tr}\underline{\underline{E}}, E^*) \sum_{k=1}^{n_s} \nu_{kr}\, \mu^*_k] - \frac{1}{M_i} \mathbf{Div}(-\frac{\mathbf{B}_{\mu\,i} (\mathrm{tr}\underline{\underline{E}}, E^*)}{M_i} \overrightarrow{\mathrm{Grad}}\mu^*_i) - \frac{1}{M_i} \mathbf{Div} (-\frac{\mathbf{C}_{\mu\,ij} (\mathrm{tr}\underline{\underline{E}}, E^*)}{M_i} \overrightarrow{\mathrm{Grad}}\, \mu^*_j)$$

Expression uniquement Fonction des potentiels chimique

gdr-week 2011

LOIS D'ETAT (cas simplifié elasto chimie)

$$\psi\ (\mathrm{tr}\underline{\underline{E}}, \underline{\underline{E}}^d, Y^*_i) = \frac{1}{\rho} (\frac{3}{2} K\ (\mathrm{tr}\underline{\underline{E}})^2 + G(Q(Y^*_i))\ E^*) +$$

Mécanique

$$\sum_{i=1}^{n_s} \frac{1}{\rho} (C_i\ \mathrm{tr}\underline{\underline{E}}\ Y^*_i)$$

Couplage /changement de vol.

Potentiel chimique

$$\sum_{i=1}^{n_s} \frac{1}{\rho} (\alpha_i (\mathrm{tr}\underline{\underline{E}}, E^*)\ RT\ (Y^*_i\ (\ln (Y^*_i / Y^{*0}_i) - 1)) + \mu^{0*}_i\ Y^*_i)$$

⇩

Diffusion

LOIS D'ETAT COUPLEES UN EXEMPLE

Changement de volume avec Changement du mélange

$$tr\underline{\underline{S}} = \frac{\partial \rho\psi}{\partial tr\underline{\underline{E}}} = 3K\, tr\underline{\underline{E}} + \sum_{i=1}^{n_s} \left(\frac{\partial \alpha_i (tr\underline{\underline{E}}, E^*)}{\partial tr\underline{\underline{E}}} RT \left(Y^*_i \left(\ln (Y^*_i) - 1\right)\right) + C_i Y^*_i \right)$$

$$\underline{\underline{S}}^d = \frac{\partial \rho\psi}{\partial \underline{\underline{E}}^d} = 2G\left(Q(Y^*_i)\right) \underline{\underline{E}}^d + \sum_{i=1}^{n_s} \left(\frac{\partial \alpha_i (tr\underline{\underline{E}}, E^*)}{\partial E^*} RT \left(Y^*_i \left(\ln (Y^*_i) - 1\right)\right)\right) \underline{\underline{E}}^d$$

Dépendances des paramètres d'un mélange changeant

LOIS D'ETAT COUPLEES UN EXEMPLE

$$\mu^*_i = \frac{\partial \rho\psi}{\partial Y^*_i} = \frac{\partial G\left(Q(Y^*_i)\right)}{\partial Y^*_i} E^* + C_i\, tr\underline{\underline{E}} + \alpha_i (tr\underline{\underline{E}}, E^*)\, RT \ln Y^*_i + \mu^{0*}_i$$

Dépendances des paramètres d'un mélange changeant
Vient du couplage avec la méca

Partie classique
- **Fick (par dév. limité)**
- **Henry au bord**

Force de réaction

Dépendance de la méca ?

$$A_r = - \sum_{k=1}^{n_s} \nu_{kr}\, \mu^*_k = - \sum_{k=1}^{n_s} \nu_{kr} \left(\frac{\partial G\left(Q(Y^*_k)\right)}{\partial Y^*_k} E^* + C_k\, tr\underline{\underline{E}} + \alpha_k (tr\underline{\underline{E}}, E^*)\, RT \ln Y^*_k + \mu^{0*}_k \right)$$

gdr-week 2011 GDR-3371 MIC Saint-Étienne, France

INSTITUT P'

EQUATION DE DIFFUSION-REACTION couplée

$$\frac{\partial Y^*_i}{\partial t} = \sum_{r=1}^{n_r} \nu_{ir} \left[- B_r (tr\underline{\underline{E}}, E^*) \sum_{k=1}^{n_s} \nu_{kr}\left(\frac{\partial G (Q(Y^*_k))}{\partial Y^*_k} E^* + C_k\, tr\underline{\underline{E}} + \alpha_k (tr\underline{\underline{E}}, E^*)\, RT \ln Y^*_k + \mu^{0*}_k\right)\right]$$

PARTIE REACTION

$$- \frac{1}{M_i} \mathbf{Div}\left\{- \frac{\mathbf{B}_{\mu i}\alpha_i (tr\underline{\underline{E}}, E^*)}{M_i} \cdot \vec{Grad} \left[\frac{\partial G (Q(Y^*_i))}{\partial Y^*_i} E^* + C_i\, tr\underline{\underline{E}} + \alpha_i (tr\underline{\underline{E}}, E^*)\, RT \ln Y^*_i + \mu^{0*}_i\right]\right\}$$

PARTIE DIFFUSION

$$- \frac{1}{M_i} \mathbf{Div} \left\{- \frac{\mathbf{C}_{\mu ij}\alpha_i (tr\underline{\underline{E}}, E^*)}{M_i} \vec{Grad} \left[\frac{\partial G (Q(Y^*_j))}{\partial Y^*_j} E^* + C_j\, tr\underline{\underline{E}} + \alpha_j (tr\underline{\underline{E}}, E^*)\, RT \ln Y^*_j + \mu^{0*}_i)\right]\right\}$$

PARTIE INTER DIFFUSION

gdr-week 2011 GDR-3371 MIC Saint-Étienne, France

INSTITUT P'

CONDITIONS AUX LIMITES
Un exemple

Une espèce à l'extérieur sous forme de gaz à une pression p

$$\mu^*_g = \mu^{0*}_g + RT \ln (p/p^0)$$

EGALITE A L'INTERFACE (Equilibre local)

Une espèce à l'intérieur sous quelle forme ???

$$\mu^*_{is} = \frac{\partial G (Q(Y^*_{is}))}{\partial Y^*_{is}} E^* + C_{is}\, tr\underline{\underline{E}} + \alpha_{is} (tr\underline{\underline{E}}, E^*)\, RT \ln (Y^*_{is}/Y^{*0}_{is}) + \mu^{0*}_{is}$$

Sans couplage LOI d'HENRY (Solubilité)

gdr-week 2011

COUPLAGE CHIMICO DIFFUSO THERMO MECANIQUE

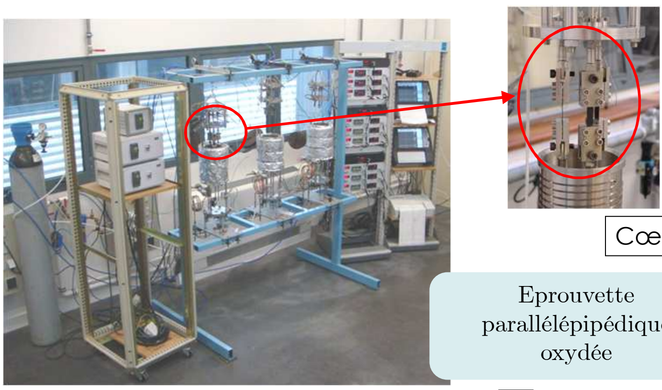
On a vu comment élaborer un modèle

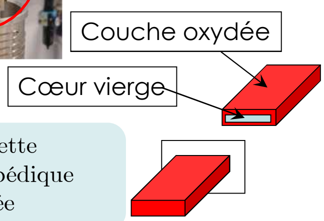
Comment l'identifier ???

gdr-week 2011

EXPERIMENTATION COUPLEE

- **Matériau:** résine époxy 977-2 polymérisée selon le cycle de fabrication des échantillons composites

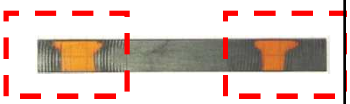




Eprouvette parallélépipédique oxydée

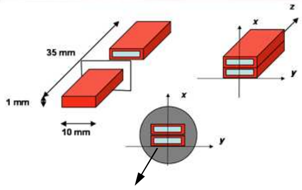
Caractéristiques Techniques
- Température → 200° C
- Pression → 10 bars
- Elongation max → 20 mm *(constant)*
- Chargement → 5 kN
- Environnement: N_2, O_2, Air atmo…

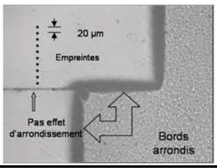
Mesures
UMI,DMA…



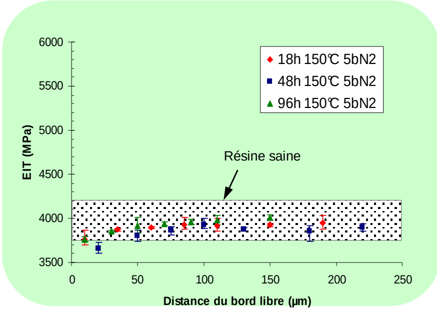
Oxydation – Gradient de propriétés

Etude locale: Ultra Micro Indentation
Technique Résonante Dynamique

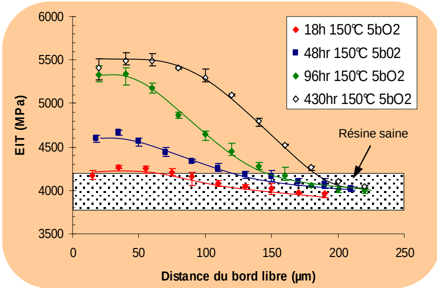




5 bars N_2



5 bars O_2



Modélisation numérique du GRADIENT

Modèle de Base : Chimie (travaux ENSAM de Colin et Verdu) Diffusion de Fick

$$\frac{d[O_2]}{dt} = -k_2[P^\bullet][O_2] + k_6[PO_2^\bullet]^2 + D_{O_2} div\, grad[O_2]$$

$$\frac{d[POOH]}{dt} = k_3[PH][PO_2^\bullet] - k_1[POOH]$$

$$\frac{d[PH]}{dt} = -k_3[PH][PO_2^\bullet] - \gamma k_1[POOH]$$

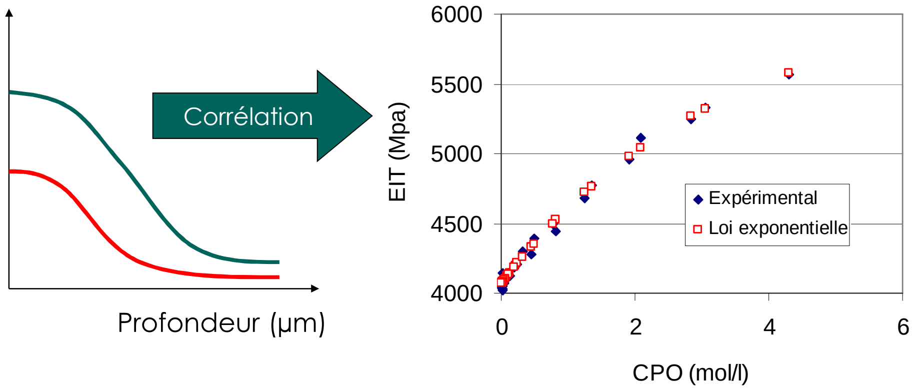
$$\frac{d[PO_2^\bullet]}{dt} = k_2[P^\bullet][O_2] - k_3[PH][PO_2^\bullet] - k_5[PO_2^\bullet][P^\bullet] - 2k_6[PO_2^\bullet]^2$$

$$\frac{d[P^\bullet]}{dt} = 2k_1[POOH] - k_2[O_2][P^\bullet] + k_3[PH][PO_2^\bullet] - 2k_4[P^\bullet]^2 - k_5[P^\bullet][PO_2^\bullet]$$

Lois d'Henry au bord (loi linéaire)

gdr-week 2011

EIT (MPa) Module d'indentation
→ expérimental (ultra-µ-indentation)
Concentration en Produits d'Oxydation (Mol/L) CPO
→ Numérique (modèle ENSAM)



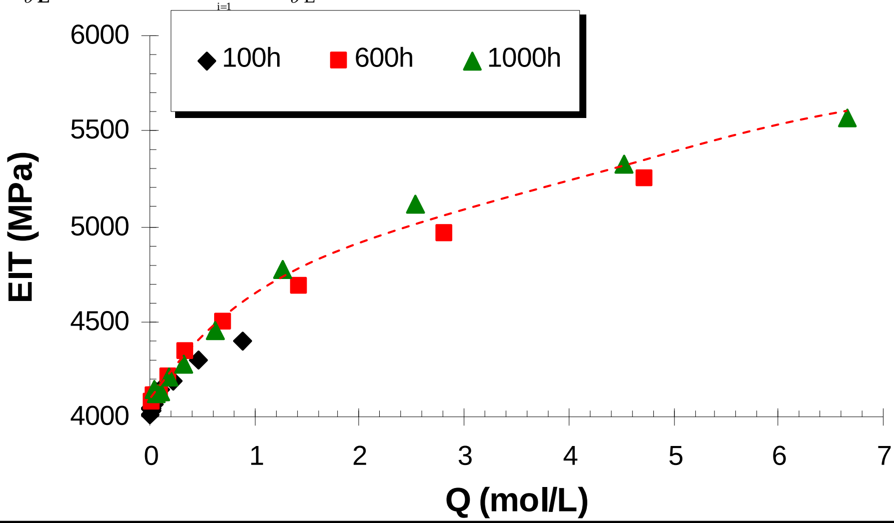
gdr-week 2011

Loi de comportement couplée

$$trS = \frac{\partial \rho\psi}{\partial trE} = 3K\,trE + \sum_{i=1}^{n_s} \left(\frac{\partial \alpha_i (trE, E^*)}{\partial trE}\right) RT\,(Y^*_i\,(\ln (Y^*_i) - 1)) + C_i\,Y^*_i)$$

→ ***Dépendance de Q***

$$S^d = \frac{\partial \rho\psi}{\partial E^d} = 2G\,(Q(Y^*_i))\,E^d + \sum_{i=1}^{n_s} \left(\frac{\partial \alpha_i (trE, E^*)}{\partial E^*}\right) RT\,(Y^*_i\,(\ln (Y^*_i) - 1))\,E^d$$



EIT module d'indentation
Q produits d'oxydation

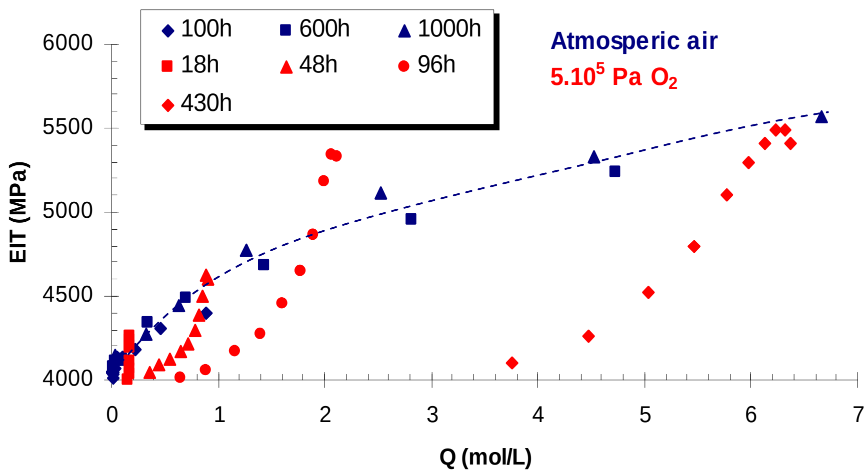
$$EIT = 5510 - 1469\, e^{-0.48Q}$$

→ Loi sur G_v
K_v constant

⚠ **La LOI vient d'UNE Corrélation**

- **ESSAIS**
- **MODELE !!!**

Si on change de pression ????



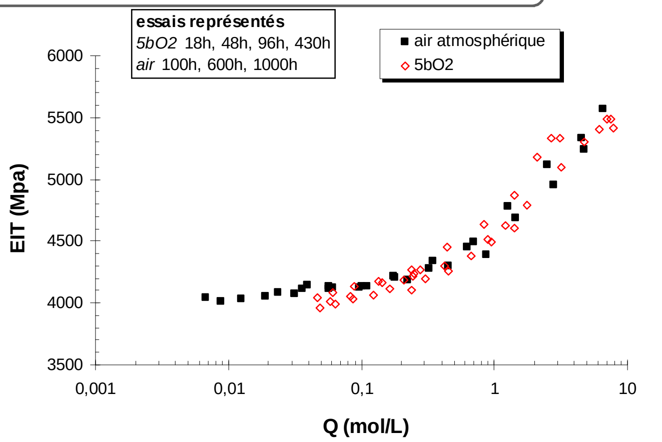
Le modèle couplé n'est correct ????

gdr-week 2011

Définition du potentiel chimique de l'oxygène :

$$\begin{cases} \mu_{O_2}^{gas} = \mu^0\left(P^0,T\right) + RT\ln\frac{P_{O_2}}{P^0}, \ \textit{unchanged} \\ \mu_{O_2}^{dis} = \mu^0\left(P^0,T\right) + \alpha\cdot\left(\left[O_2\right]-\left[O_2\right]^0\right), \ \textit{linearized} \end{cases}$$

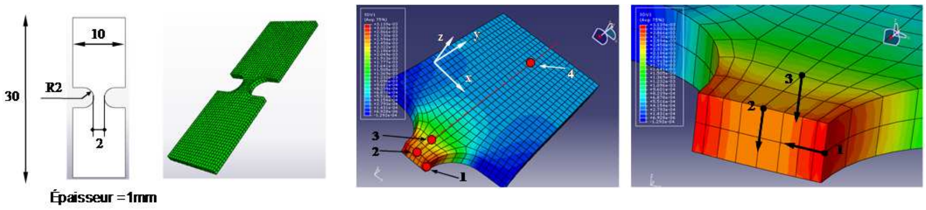
Nouvelle loi de SORPTION : $\left[O_2\right] = \left[O_2\right]^0 + \frac{RT}{\alpha}\ln\frac{P_{O_2}}{P^0}$



gdr-week 2011

Etude du couplage (direct) mécanique→diffusion

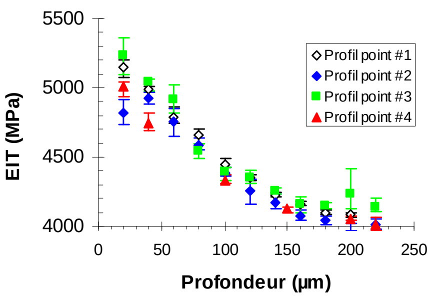
Champ de trε



Caractérisation du profil d'oxydation

48h, 5bO2, relaxation à 70% $\sigma_{rupture}$

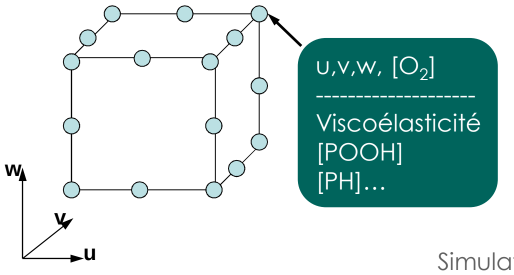
Influence négligeable du couplage



gdr-week 2011 GDR-3371 MIC Saint-Étienne, France

Implantation dans ABAQUS

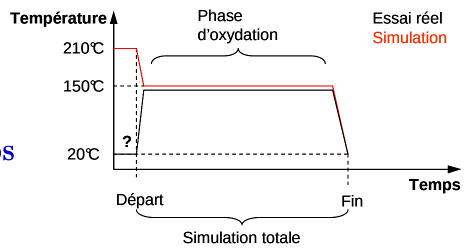
INSTITUT P'



Quadratique déplacement
Linéaire diffusion

Diffusion
+ chimie
+ viscoélasticité

Simulation de la thermo-oxydation



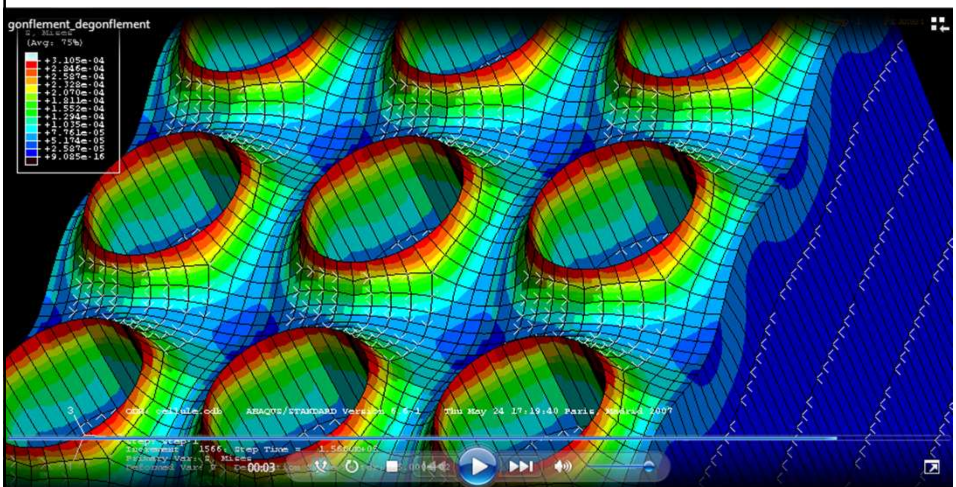
Deux échelles de temps

DIFFUSION ⇒ Pas de tps ABAQUS

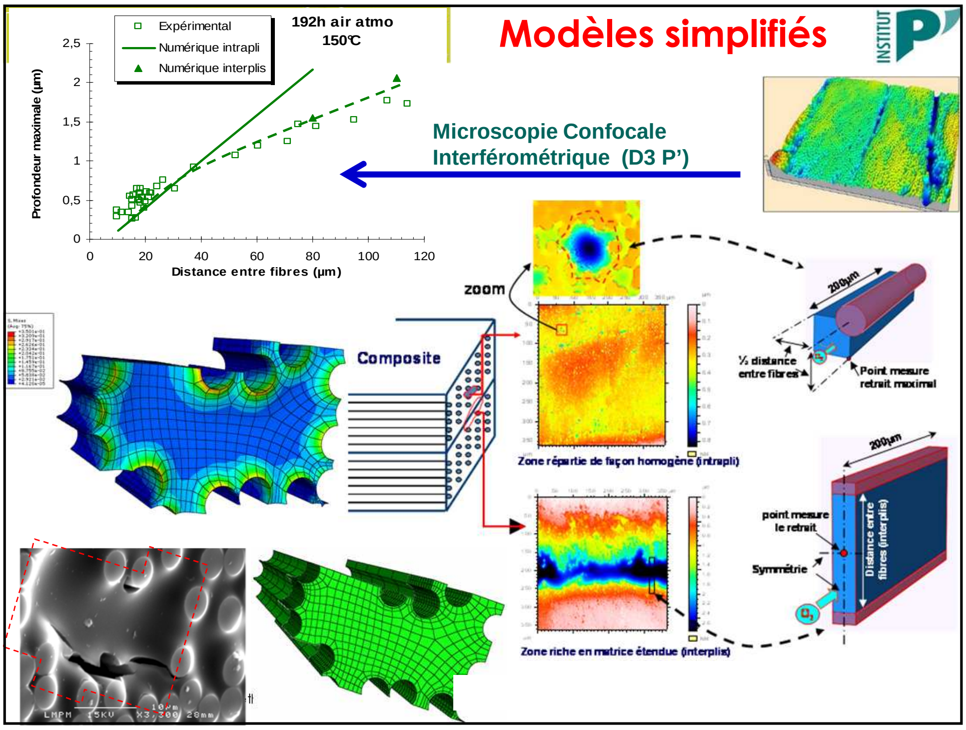
Équations chimie 2nd Pas de tps

gdr-week 2011 GDR-3371 MIC Saint-Étienne, France

INSTITUT P'



Modèles simplifiés



gdr-week 2011

CONCLUSION

- Outils pour construire les lois sont CLASSIQUES
  - Choisir sa cinématique (ce n'est pas anodin)
  - / chimie > il nous faut les chimistes ……
  - On envisage les couplages / à la cinématique
  - On teste les hypothèses expérimentalement ……
- **Caractérisations / Identifications**
  - **Sous gradient et transitoire**
  - **Boucle essais –modèle simulation est Extrêmement INTIME**
- **Essais spécifiques**
  - **Mesures locales pour appréhender les gradients**

gdr-week 2011 GDR-3371 MIC Saint-Étienne, France

INSTITUT P'

Merci à

- Christian Jochum
- Laurent Cangémi – Yves Meimon (IFP)
- Marie Hélène Klopffer (IFP)
- Sylvie Castagnet – Annette Roy – J-Louis Gacougnole
- Marie Christine Lafarie - Marco Gigliotti
- Marianne Beringhier - Laurence Chocinski
- Equipe IT Mikaël Gueguen

- Les Doctorants qui ont souffert
- Gaëlle Rambert – Guilhem Jugla – Claudine Valançon - Cédric Baudet – Nhat-Quang Ho – Loïc Olivier – Romain Léger – Njaramalala Rabearison – Tuan_Linh_Nguyen – Benoit Gentilleau – Julien Jaravel
- HO Minh Trung

Quelques thèmes abordés à Pprime

- **Cuisson des composite / défauts Cont Int**
  - Chimie thermo mécanique (ENSIETA)
- **Décompression explosive** (IFP – CETIM - AL)
  - Diffuso thermo méca semi cristallin
  - Diffuso thermo méca elastomère
- **Vieillissement thermo hydrique des polymères et des assemblages collés** (Critt MPC)
- **Composites tièdes** (EADS)
  - Oxydation diffuso mécanique (endo.)
- **Fuselage composite** (AIRBUS)
  - Electro thermo mécanique (fatigue)
- **Réservoirs bobinés** (CEA Le Ripault – AL)
  - Thermo mécanique en fatigue
  - Diffuso mécanique
- **Pile à Hydrogène PEMFC**
  - Electro thermo hydro mécanique