

Commentaires sur le fichier

Flexion3points.mph

Jean Garrigues

(version du 30 avril 2018)

1 Introduction

Ce texte contient des informations à propos de l'organisation et de l'utilisation du fichier `Flexion3points.mph` que je mets à la disposition des utilisateurs du logiciel COMSOL®. Ce fichier a été créé sous la version 5.3a.

Les utilisateurs avertis pourront aisément modifier la géométrie et les conditions aux limites. Toutefois, il est important de comprendre le contenu de certaines définitions données dans le modèle qui ne devraient être modifiées que prudemment et en connaissance de cause. Cette compréhension passe par une connaissance suffisante (définitions et notations) des cours de mécanique des milieux continus de mon site :

<http://jean.garrigues.perso.centrale-marseille.fr/index.html>

Dans ce fichier, la modélisation porte sur 3 physiques : la mécanique, la thermique et la plasticité, *non déclarées comme telles dans COMSOL®*. Dans ce fichier, on n'utilise donc pas les « boîtes à outils » proposées par le logiciel pour les utilisateurs ordinaires. Ce choix délibéré permet d'être certain de ne pas utiliser certains pseudo-concepts de « mécanique numérique » couramment présents dans les publications portant sur la mécanique en « grandes déformations » et dans des logiciels concurrents spécialisés dans la mécanique, comme des « dérivées objectives », des « lois tangentés » ou autres « repères mobiles » introduits sans justification autre que calculatoire, ainsi que d'éviter l'emploi de lois de comportement non thermodynamiquement admissibles ou encore calées sur le seul essai de traction isotherme, qui auraient peut-être pu être introduites dans les « boîtes à outils » par d'éventuels experts mécaniciens intervenant au côté des numériciens et des développeurs dans la construction de ces « boîtes à outils ».

En n'utilisant que le noyau de COMSOL®, c'est-à-dire la résolution d'un système d'EDP avec conditions initiales et aux limites *sans préciser leur signification physique*, je suis ainsi assuré d'utiliser exactement le modèle de thermoélastoviscoplasticité qui est construit dans les parties de cours de mon site où sont présentés des résultats de simulation numérique.

Les deux physiques mécanique et thermique, sont traitées classiquement en utilisant le mode « forme faible » de COMSOL®. En revanche, la plasticité est traitée en mode « équation ».

Cette option d'utilisation du logiciel sans physique déclarée implique évidemment un travail de préparation plus important qu'en utilisant les « boîtes à outils » standard, ce qui justifie l'existence de ce texte de commentaires.

2 La thermomécanique

Les tenseurs de déformation introduits dans les publications traitant de « grandes déformations » sont bien souvent des tenseurs de déformations non objectifs (dits aussi « lagrangiens ») qui conduisent leurs auteurs à introduire dans les lois de comportement des pseudo « tenseurs des contraintes » non objectifs, le plus couramment rencontré étant le second « tenseur des contraintes » de Piola-Kirchhoff (parfois noté PK_2), non objectif et dont la signification physique est obscure. Dans le modèle utilisé dans cette simulation, le seul tenseur des contraintes envisagé est le tenseur des contraintes de Cauchy symétrique et objectif.

Le modèle implémenté dans le fichier `Flexion3points.mph` pour COMSOL® (version 5.3a), est le modèle de thermoélastoviscoplasticité isotrope idéalisé construit dans le chapitre 5 du cours

Comportements inélastiques⁽¹⁾ dont la description complète (fonctions d'état, idéalizations) est donnée dans l'annexe D. La compréhension de la construction de ce modèle est indispensable à la compréhension de la suite.

Les inconnues principales du modèles sont le champ des déplacements $\{u_1, u_2, u_3\}$, le champ de températures absolues T et le champ de plastification p (variable d'état mnésique).

2.1 Nœud Modèle1/Définitions/Déformation

Ces définitions sont des grandeurs cinématiques utiles pour tous les modèles de comportement utilisant des tenseurs de déformation objectifs. Ces grandeurs sont définies dans le cours *Cinématique des milieux continus*⁽²⁾. Sauf erreur de transcription de l'auteur, ces définitions cinématiques n'ont pas à être modifiées.

- Les variables $F_{\bullet\bullet}$ sont les composantes du gradient de la transformation : $\mathbf{F} = \mathbf{G} + \text{grad}_L \mathbf{u}$.
- Les variables $K_v \text{Inv} F_{\bullet\bullet}$ sont les composantes du tenseur $(\det \mathbf{F}) \mathbf{F}^{-1}$. Ces termes sont utilisés dans les intégrales de volume sur le domaine de référence de la formulation intégrale des équations de la mécanique et de l'équation de la chaleur.
- Les variables $B_{\bullet\bullet}$ sont les composantes du tenseur de déformation $\mathbf{B} = \mathbf{F} \cdot \mathbf{F}^\top$.
- La variable δ est la distorsion stérique maximale en une particule.
- Les variables B_{\bullet} sont les invariants fondamentaux du tenseur de déformation \mathbf{B} (notés B_I , B_{II} et B_{III} dans le cours).
- Les variables J_B , $\cos \Phi$ et Φ sont trois autres invariants du tenseur de déformation \mathbf{B} définis dans l'annexe A du cours *Algèbre et analyse tensorielles*⁽³⁾ utiles pour déterminer les dilatations linéiques principales ordonnées de la déformation.
- Les variables $\lambda_{a\bullet}$ sont les dilatations linéiques principales ordonnées (elles sont les racines des valeurs propres classées du tenseur de déformation \mathbf{B}).
- Les variables $B2_{\bullet\bullet}$ sont les composantes du tenseur \mathbf{B}^2 (ce tenseur peut intervenir dans certaines lois de comportement mécanique).
- Les variables $U1_{\bullet\bullet}$ sont les composantes du tenseur uniaxial unitaire représentant la direction propre associée à la première valeur propre de \mathbf{B} ⁽⁴⁾.
- Les variables $U2_{\bullet\bullet}$ sont les composantes du tenseur uniaxial unitaire représentant la direction propre associée à la seconde valeur propre de \mathbf{B} .
- Les variables $U3_{\bullet\bullet}$ sont les composantes du tenseur uniaxial unitaire représentant la direction propre associée à la troisième valeur propre de \mathbf{B} .
- Les variables $V_{\bullet\bullet}$ sont les composantes du tenseur de déformation $\mathbf{V} = \mathbf{B}^{1/2} = \sum_{i=1}^3 \lambda_i \mathbf{U}_i$.
- Les variables $M_{\bullet\bullet}$ sont les composantes du tenseur de déformation $\mathbf{M} = \ln \mathbf{V} = \sum_{i=1}^3 \ln \lambda_i \mathbf{U}_i$.
- La variable FactIntSurf est un facteur utile dans la formulation intégrale pour les intégrales de surface sur le domaine de référence.
- La variable γ est une variable représentant d'une autre manière la distorsion stérique maximale en une particule : $\gamma = (\delta^{2/3} - 1)^{1/2}$. Elle est utilisée comme variable d'état cinématique dans le modèle.
- La variable K_v est la dilatation volumique en une particule : $K_v = (B_{III})^{1/2}$. Elle est utilisée comme variable d'état cinématique dans le modèle.

⁽¹⁾ <http://jean.garrigues.perso.centrale-marseille.fr/inelas.html>

⁽²⁾ <http://jean.garrigues.perso.centrale-marseille.fr/cinematique.html>

⁽³⁾ <http://jean.garrigues.perso.centrale-marseille.fr/tenseurs.html>

⁽⁴⁾ On montre en cinématique que tous les tenseurs de déformation objectifs ont les mêmes directions propres.

2.2 Nœud Modèle1/Définitions/Comportement

Ces définitions décrivent la loi de comportement mécanique du modèle utilisé. Contrairement aux définitions du nœud précédent, ces définitions doivent être modifiées si l'on change de loi de comportement mécanique (par exemple en cas d'anisotropie) ou pour changer les caractéristiques (coefficients) du matériau.

- Les variables $S_{\bullet\bullet}$ sont les composantes du tenseur des contraintes (de Cauchy) objectif, noté $\boldsymbol{\sigma}$ dans le cours. La définition de ces variables est à remanier si l'on veut changer la loi de comportement mécanique.
- La variable rho est la masse volumique actuelle de la particule : $\rho = \rho_0/K_v$.
- La variable e est l'énergie interne massique actuelle de la particule.
- La variable rho0 est la masse volumique initiale du matériau à la température T_0 .
- La variable alpha est le coefficient de conductivité thermique dans la loi de Fourier.
- La variable Cp0 est la capacité thermique à contrainte nulle (dilatation libre).
- La variable psi est l'énergie libre massique de Helmholtz actuelle.
- La variable s est l'entropie massique actuelle.
- Les variables q_{\bullet} sont les composantes du courant de chaleur actuel : $\mathbf{q} = -\alpha \mathbf{grad}_E T$.
- La variable mu0 est la pente de la droite (idéalisée) $\tau/K_v = f(\gamma)$ dans une expérience de cisaillement isovolume *élastique*.
- La variable gammaLim est la limite élastique de plastification du matériau.
- La variable beta0 est le coefficient de dilatation thermique volumique ($m^3.m^{-3}.K^{-1}$) du matériau.
- La variable visc est la viscosité μ_v du matériau. Dans le modèle implanté ici, la définition de la contrainte dissipative est très simple : $\boldsymbol{\sigma}_d = \mu_v \mathbf{D}$; elle peut être aisément modifiée avec quelques corrections dans les variables $S_{\bullet\bullet}$.
- La variable k0 est la pente de la droite (idéalisée) $\tau/K_v = f(\gamma)$ dans une expérience de cisaillement isovolume *plastifiante*.
- La variable xi0 est le coefficient utilisé dans le comportement mécanique lors d'une expérience de déformation sphérique (au voisinage de $K_v = 1$, c'est le module de compressibilité habituellement trouvé dans les catalogues).

2.3 Nœud Modèle1/Définitions/Vitesse de déformation

Comme dans le nœud Modèle1/Définitions/Déformation, les définitions de ce nœud ne devraient pas être modifiées.

- Les variables $D_{\bullet\bullet}$ sont les composantes du tenseur des taux de déformation : $\mathbf{D} = \mathbf{sym}(\dot{\mathbf{F}} \cdot \mathbf{F}^{-1})$.
- La variable SD est le produit scalaire $\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D}$.
- La variable BD est le produit scalaire $\mathbf{B} : \mathbf{D}$.

2.4 Nœud Modèle1/Définitions/Dérivées particulières

Ces définitions changent si le modèle de comportement change.

- La variable ep_T est la dérivée partielle $\partial_T e^m$.
- La variable ep_Kv est la dérivée partielle $\partial_{K_v} e^m$.
- La variable ep_gamma est la dérivée partielle $\partial_\gamma e^m$.

- La variable e_p est la dérivée particulière de l'énergie interne massique :

$$\dot{e}^m = \partial_T e^m \dot{T} + \partial_{K_v} e^m \dot{K}_v + \partial_\gamma e^m \dot{\gamma}$$
. Cette expression intervient dans l'équation de la chaleur quand la thermique est activée dans une simulation temporelle.

2.5 Nœud Modèle1/Définitions/Formulations intégrales

Comme dans le nœud Modèle1/Définitions/Déformation, les définitions de ce nœud ne devraient pas être modifiées. Dans un calcul mécanique ou thermomécanique on peut mettre tout ou partie de ces contributions selon le problème traité (voir des exemples dans les nœuds MecaStatique/EDP, forme faible 1 et Thermique/EDP, forme faible 1).

- La variable $W1MecStat$ est la première partie de la formulation intégrale de l'équation de la mécanique.
- La variable $W2MecStat$ est la seconde partie de la formulation intégrale de l'équation de la mécanique.
- La variable $W3MecStat$ est la troisième partie de la formulation intégrale de l'équation de la mécanique.
- La variable $WMecStat$ est la somme des trois précédentes
- La variable Wfm est la contribution à ajouter si un champ de forces massiques est présent.
- La variable $WMecEvol$ est la contribution à ajouter si les forces d'inertie $\rho \ddot{\mathbf{u}}$ sont prises en compte.
- La variable $WThStat$ est la partie statique de la formulation intégrale de l'équation de la chaleur.
- La variable $WThRay$ est la contribution à ajouter si une source de puissance calorifique massique à distance (rayonnement) est prise en compte (rare).
- La variable $WThEvol$ est la contribution à ajouter dans un calcul thermique temporel.

3 La plasticité

Contrairement aux deux physiques précédentes, le champ de plastification p (variable d'état mnésique) ne comporte pas de conditions aux limites, il est régi par une loi d'évolution de la forme $\dot{p} = \dots$. Cette physique est introduite sous la forme d'une équation et non sous une forme faible. Un calcul avec comportement plastique ne peut se faire qu'en calcul temporel, en temps fictif si la viscosité est nulle (modèle non dissipatif), ou en temps réel si la viscosité est prise en compte, car la valeur actuelle de cette variable dépend de l'histoire de l'évolution depuis l'état de référence.

Le détail de l'implémentation de la plasticité est dans le nœud Plasticité/loi d'évolution dans les onglets Equation et Terme source.

4 Conseils d'utilisation

Le fichier Flexion3points.mph est libre de tous droits et peut donc être utilisé et modifié librement.

- En thermoélasticité (déformations quelconques) sans plasticité il suffit de désactiver le nœud Plasticité et de poser $p = 0$ dans le nœud Définitions globales/Paramètres.

- En élasticité isotherme (déformations quelconques) avec ou sans plasticité, il suffit de désactiver le nœud Thermique et de poser $T = T_0$ dans le nœud Défin. globales/Paramètres.

La géométrie et les conditions aux limites sont à adapter à chaque problème selon les procédés habituels dans COMSOL®. Le système à résoudre étant non linéaire, il conviendra aussi d'adapter les valeurs initiales des déplacements dans le nœud MecaStatique/Valeurs initiales pour aider la convergence vers la solution désirée en cas de solutions multiples dans un calcul statique, ou aider le démarrage de l'algorithme dans un calcul temporel (temps fictif ou non).

Si l'utilisateur veut implanter son propre modèle de comportement mécanique, thermique ou plastique, il ne devrait pas avoir à modifier les nœuds Définition/Déformation, Définition/Vitesse de déformation et Définition/Formulations intégrales qui sont *a priori* valables pour tous les modèles. Tous les autres nœuds sont à modifier selon les besoins.

L'organisation du fichier Flexion3points.mph est sans aucun doute améliorable en divers endroits, ne serait-ce que dans les réglages des solveurs. Dans un premier temps, il peut servir de modèle, mais n'hésitez pas à le modifier voire à le réorganiser pour isoler les définitions valables pour tous les modèles des autres définitions particulières à chaque modèle de comportement. En particulier, la définition des contraintes dissipatives pourrait être mieux isolée.

J'espère vous avoir été utile.