

Comportement macroscopique d'un élastomère renforcé : modélisations micro-macro et validation

Vanessa Bouchart, Mathias Brieu, Djimedo Kondo, Moussa Naït Abdelaziz

Laboratoire de Mécanique de Lille Boulevard Paul Langevin 59655 Villeneuve d'Ascq
vanessa.bouchart@ed.univ-lille1.fr

Résumé :

Dans cette étude, nous proposons l'évaluation d'un modèle d'homogénéisation non linéaire appliqué aux composites hyperélastiques à microstructure aléatoire. Cette modélisation repose sur une mise en oeuvre, dans un contexte 3D, de la méthode du second ordre introduite par Ponte Castañeda & Tiberio (2000). Nous rappelons d'abord les principes de base de la méthode. Puis, nous étudions le cas d'un composite biphasé, constitué d'une matrice hyperélastique renforcée par des particules sphériques déformables. L'implémentation numérique du modèle micromécanique est discutée et les résultats obtenus sont présentés afin de démontrer l'effet de renforcement des particules. Afin de fournir une évaluation rigoureuse du modèle proposé, des calculs par éléments finis sur une cellule de base sont réalisés pour être comparés aux prédictions du modèle d'homogénéisation. Enfin, une confrontation aux données expérimentales montre la nécessité d'une prise en compte de phénomènes d'endommagement dans les modélisations ultérieures.

Abstract :

In this study, we propose an evaluation of a nonlinear homogenization model applied to the behavior of hyperelastic composites with random microstructure. This modelling approach consists in 3D implementation of the second order method introduced by Ponte Castañeda & Tiberio (2000). We first recall the basic principles of the method. Then, we investigate the case of a two-phase composite made up of an hyperelastic matrix reinforced by spherical deformable particles. Computational issues of the micromechanical model are discussed and some results are presented in order to show the reinforcement effect of the particles. In order to provide a rigorous evaluation of the proposed model, finite elements computations, on a unit cell, are performed and compared to the predictions of the homogenization model. Then, a confrontation with the experimental data shows the need to incorporate in future works damage phenomena which occurs in the composite.

Mots-clefs :

Homogénéisation non linéaire ; hyperélasticité ; second order method

1 Introduction

Grâce à leurs propriétés remarquables de souplesse, de déformabilité et de résistance aux forts niveaux de déformations, les matériaux hyperélastiques tels que les élastomères, le caoutchouc..., sont de plus en plus utilisés dans divers secteurs d'application dont principalement l'industrie des pneumatiques. En raison de la présence des renforts, un des enjeux principaux est de caractériser et modéliser le comportement mécanique macroscopique de ces matériaux. Dans la présente étude, il s'agit en particulier de comprendre et de rendre compte du pouvoir renforçant des particules en mettant en oeuvre un modèle micromécanique prédictif et des solutions numériques de référence par calculs éléments finis.

2 Homogénéisation de composites hyperélastiques

La microstructure hétérogène aléatoire ainsi que le comportement hyperélastique des matériaux étudiés nous a incité à mettre en oeuvre pour cette étude une méthode d'homogénéisation

non linéaire dite du second ordre développée par (Ponte Castañeda & Tiberio (2000)). Cette méthode a été par la suite appliquées à des composites périodiques par Lahellec *et al.* (2004).

2.1 Densité d'énergie macroscopique de déformation

Le composite est soumis à des conditions de déformation homogène (macroscopique) au bord : $\bar{\mathbf{F}} = \langle \mathbf{F} \rangle$, le tenseur \mathbf{F} étant le gradient de déformation et $\langle \cdot \rangle$ représentant la moyenne volumique sur V_0 . Considérons un volume élémentaire représentatif, occupant un volume V_0 dans la configuration de référence Ω_0 , d'un matériau hyperélastique renforcé. Ce composite est constitué de particules distribuées aléatoirement dans une matrice caoutchoutique. Les conditions classiques de séparation d'échelle sont supposées vérifiées. Le comportement hyperélastique de la matrice et des particules est a priori donné et modélisé par des densités d'énergie $W^{(r)}(\mathbf{F})$.

Le comportement global du composite est obtenu à partir de la densité d'énergie macroscopique de déformation \widetilde{W} . Un résultat classique, dû à Hill (1972), est que la loi de comportement macroscopique est une relation entre les contraintes macroscopiques de Piola-Kirchhoff 1 $\bar{\mathbf{T}} = \langle \mathbf{T} \rangle$ et le gradient de déformation macroscopique $\bar{\mathbf{F}} = \langle \mathbf{F} \rangle$ est donnée par $\bar{\mathbf{T}}(\bar{\mathbf{F}}) = \frac{\partial \widetilde{W}(\bar{\mathbf{F}})}{\partial \bar{\mathbf{F}}}$.

2.2 Brève description de la méthode du second ordre

La méthode d'homogénéisation du second ordre permet d'estimer la densité d'énergie du matériau homogénéisé. Elle repose sur un développement de Taylor au second ordre de la densité locale d'énergie de déformation autour de gradients de déformation de référence qui sont supposés uniformes par phase et trouvés égaux à $\bar{\mathbf{F}}^{(r)}$ (les moyennes de \mathbf{F} sur la phase (r) dans le composite linéaire de comparaison introduit dans Ponte Castañeda (1996)).

Le résultat final issu de cette linéarisation est (cf Ponte Castañeda & Tiberio (2000)) :

$$\widetilde{W}(\bar{\mathbf{F}}) = \sum_{r=1}^N c_r \left[W^{(r)}(\bar{\mathbf{F}}^{(r)}) + \frac{1}{2} \mathbf{T}^{(r)}(\bar{\mathbf{F}}^{(r)}) : (\bar{\mathbf{F}} - \bar{\mathbf{F}}^{(r)}) \right] \text{ avec } \mathbf{T}^{(r)}(\bar{\mathbf{F}}^{(r)}) = \frac{\partial W^{(r)}}{\partial \mathbf{F}}(\bar{\mathbf{F}}^{(r)}).$$

D'où l'on déduit les contraintes macroscopiques :

$$\bar{\mathbf{T}}(\bar{\mathbf{F}}) = \sum_{r=1}^N \frac{c_r}{2} \left[\mathbf{T}^{(r)}(\bar{\mathbf{F}}^{(r)}) + [\mathbf{T}^{(r)}(\bar{\mathbf{F}}^{(r)}) + \mathbb{L}^{(r)}(\bar{\mathbf{F}}^{(r)}) : (\bar{\mathbf{F}} - \bar{\mathbf{F}}^{(r)})] : \frac{\partial \bar{\mathbf{F}}^{(r)}}{\partial \bar{\mathbf{F}}} \right] \quad (1)$$

$$\text{où } \mathbb{L}^{(r)}(\bar{\mathbf{F}}^{(r)}) = \mathbb{L}_t^{(r)}(\bar{\mathbf{F}}^{(r)}) = \frac{\partial^2 W^{(r)}}{\partial \mathbf{F}^2}(\bar{\mathbf{F}}^{(r)}) \quad (2)$$

Dans (1), les seules inconnues sont les moyennes des gradients de déformation $\bar{\mathbf{F}}^{(r)}$ dans chaque phase ; il est montré que ces inconnues peuvent être déterminées par la résolution d'un problème de thermoélasticité lié au composite linéaire de comparaison explicité dans la section 3.1.

3 Application à une matrice hyperélastique renforcée par des particules sphériques

3.1 Problème de thermoélasticité à résoudre

Pour un composite biphasé, la résolution du problème de thermoélasticité associé à la méthode du second ordre et nécessaire à la détermination des $\bar{\mathbf{F}}^{(1)}$ et $\bar{\mathbf{F}}^{(2)}$, est faite grâce au théorème de Levin (1967) :

$$\bar{\mathbf{F}}^{(r)} = \mathbb{A}^{(r)}(\bar{\mathbf{F}}^{(r)}) : \bar{\mathbf{F}} + (\mathbb{A}^{(r)}(\bar{\mathbf{F}}^{(r)}) - \mathbb{I}) : (\Delta \mathbb{L})^{-1} : (\Delta \boldsymbol{\tau}) ; \quad r = 1, 2. \quad (3)$$

où $\mathbb{A}^{(r)}$ est le tenseur de localisation associé à la phase (r) dans le problème d'élasticité linéaire. Les tenseurs $\Delta\mathbb{L} = \mathbb{L}^{(1)}(\bar{\mathbf{F}}^{(1)}) - \mathbb{L}^{(2)}(\bar{\mathbf{F}}^{(2)})$, $\Delta\tau = \tau^{(1)}(\bar{\mathbf{F}}^{(1)}) - \tau^{(2)}(\bar{\mathbf{F}}^{(2)})$. La polarisation τ^r vaut $\tau^r = \mathbf{T}^{(r)}(\bar{\mathbf{F}}^{(r)}) - \mathbb{L}^r : \bar{\mathbf{F}}^{(r)}$. Pour les biphasés $\tilde{\mathbb{L}} = c^{(1)}\mathbb{L}^{(1)}\mathbb{A}^{(1)} + c^{(2)}\mathbb{L}^{(2)}\mathbb{A}^{(2)}$ pour un schéma d'homogénéisation linéaire donné et dont dépend $\mathbb{A}^{(r)}$, ce qui permet de générer les estimations correspondantes pour $\tilde{\mathbb{W}}$.

Un schéma de type Reuss pour le composite linéaire de comparaison conduit à $\tilde{\mathbb{L}}^{-1} = c^{(1)}(\mathbb{L}^{(1)})^{-1} + c^{(2)}(\mathbb{L}^{(2)})^{-1}$ tandis que le schéma d'Hashin-Shtrikman dans lequel $\mathbb{L}^{(1)}$ est pris comme tenseur des modules tangent de référence conduit à :

$$\mathbb{A}^{(1)} = [c^{(1)}\mathbb{I} + c^{(2)}[\mathbb{I} - \mathbb{P} : \Delta\mathbb{L}]^{-1}]^{-1}; \quad \mathbb{A}^{(2)} = [\mathbb{I} - c^{(1)}\mathbb{P} : \Delta\mathbb{L}]^{-1} \text{ où } \mathbb{P} \text{ est le tenseur de Hill.}$$

Le calcul du tenseur \mathbb{P} requiert la détermination de $\mathbb{L}^{(1)}$. Ce dernier tenseur peut être obtenu analytiquement à partir de (2) tandis que \mathbb{P} est déterminé à l'aide d'une intégration numérique sur la sphère unité, les particules sphériques étant supposées dispersées aléatoirement.

3.2 Détermination des gradients de déformation $\bar{\mathbf{F}}^{(1)}$ et $\bar{\mathbf{F}}^{(2)}$

D'un point de vue pratique pour le calcul de $\bar{\mathbf{T}}(\bar{\mathbf{F}})$ (cf équation 3), il est uniquement nécessaire de déterminer $\bar{\mathbf{F}}^{(1)}$, le tenseur $\bar{\mathbf{F}}^{(2)}$ pouvant être déterminé à partir de la relation de moyenne : $\bar{\mathbf{F}} = c^{(1)}\bar{\mathbf{F}}^{(1)} + c^{(2)}\bar{\mathbf{F}}^{(2)}$. Le système d'équation (3) devant être résolu pour déterminer $\bar{\mathbf{F}}^{(1)}$ est un système de 9 équations non linéaires avec pour inconnues les 9 composantes de $\bar{\mathbf{F}}^{(1)}$. Ainsi, une méthode de Newton-Raphson (cf Press & al. (1992)) adaptée aux systèmes d'équations non linéaires a été utilisée. La matrice Jacobienne \mathbf{J} introduite par cette méthode est dans ce cas une matrice 9x9. L'absence d'expression analytique pour \mathbb{P} , nous oblige à réaliser une dérivation numérique par différence finie pour le calcul de \mathbf{J} . Pour avoir une bonne précision à ce niveau, une méthode de Ridders-Richardson a été implémentée (cf Press & al. (1992)).

4 Prédiction pour un essai de traction uniaxiale

Le gradient de la transformation macroscopique associé à la traction uniaxiale compressible s'écrit sous la forme : $\bar{\mathbf{F}} = \text{Diag}(\lambda(t), \alpha(t), \alpha(t))$, λ croissant à partir de 1.0. Le pilotage en déformation du test de traction uniaxiale sur le composite implique, pour un λ donné, la détermination de α de sorte à satisfaire la condition : $\bar{\mathbf{T}} = \text{Diag}(T_{11}(t), 0, 0)$. En pratique, en raison de la compressibilité de la matrice et du composite, de telles conditions ne peuvent être obtenues qu'à l'aide d'un processus itératif. Un algorithme de dichotomie a été utilisé afin de trouver la valeur appropriée de α pour λ donné.

Dans cette application, la matrice "1" et les particules "2" étant isotropes, leur densité d'énergie $W^{(1)}$ et $W^{(2)}$ peuvent classiquement s'exprimer en fonction des 3 invariants, i_1 , i_2 and i_3 du tenseur des dilatations $\mathbf{C} = \mathbf{F}^t\mathbf{F}$ Ogden (1984) : $W(\underline{\mathbf{X}}, \mathbf{F}) = W(\underline{\mathbf{X}}, i_1, i_2, i_3)$.

Nous considérons pour la matrice, la densité d'énergie associées aux matériaux hyperélastiques de type Mooney-Rivlin : $W^{(1)}(\mathbf{F}) = C_{10}(\bar{i}_1 - 3) + C_{01}(\bar{i}_2 - 3) + \frac{1}{D_1}(J - 1)^2$ où $J = \det(\mathbf{F}) = \sqrt{i_3}$, $\bar{i}_1 = J^{-2/3}i_1$, $\bar{i}_2 = J^{-4/3}i_2$. Pour les particules, nous adoptons un modèle Néo hookeen : $W^{(2)}(\mathbf{F}) = C_{10}(\bar{i}_1 - 3) + \frac{1}{D_1}(J - 1)^2$. Les paramètres utilisés lors des simulations sont pour la matrice $C_{10} = C_{01} = 1$, $D_1 = 2/3$ et pour la particules $C'_{10} = 5$, $D'_1 = 0.8$.

La figure 1 montre les réponses macroscopiques en traction uniaxiale prédites par la méthode d'homogénéisation du second ordre (contrainte nominale T_{11} en fonction de $\bar{\mathbf{F}}_{11}$) pour 2 frac-

tions volumiques de particules (10% and 25%). On reporte également la réponse du matériau non renforcé sur la figure.

De ces résultats, on note que la présence des particules déformables a un effet significatif sur le comportement global du matériau. Une différence notable est observée entre les prédictions des 2 schémas d'homogénéisation considérés. En effet, le modèle d'Hashin-Shtrikman prédit, pour un niveau de contrainte donné, une déformation moins importante que celle obtenue avec le modèle de Reuss.

5 Validation du modèle par comparaison avec des simulations éléments finis

Afin de valider les modèles basés sur la méthode du second ordre, on présente dans cette section des comparaisons de ses prédictions à des solutions dites de référence obtenues par calculs éléments finis (EF). Pour cela, les mêmes hypothèses sur les constituants et l'adhérence particules-matrice sont considérées dans les 2 calculs (homogénéisation et éléments finis).

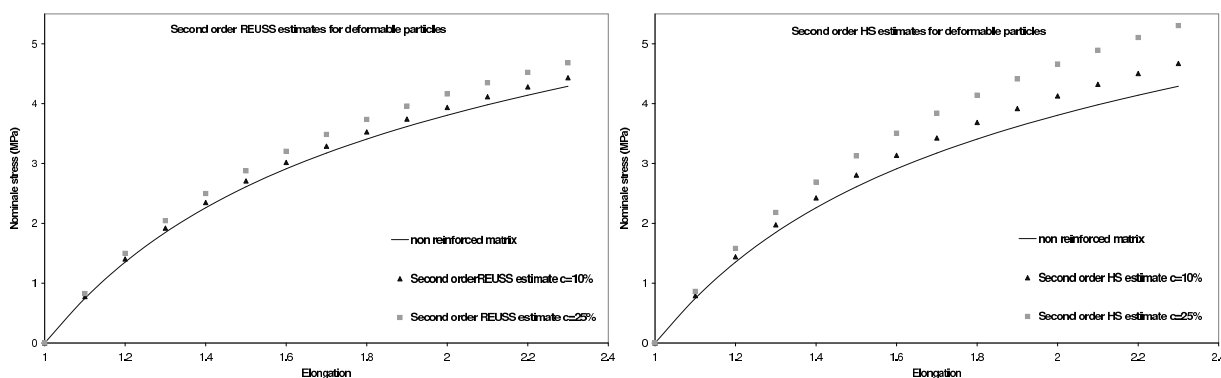


FIG. 1 – a- modèle de Reuss b- modèle d'Hashin-Shtrikman
Prédictions des modèle de Reuss et d'Hashin-Shtrikman pour une matrice renforcée par des particules déformables

5.1 Description du calcul par éléments finis

La solution de référence EF est obtenue en considérant une cellule de base (voir figure 2). Cette cellule est celle utilisé par Doghri and Ouair (2003) afin de valider les résultats de leur code d'homogénéisation DIGIMAT.

Le plan (\vec{e}_1, \vec{e}_2) étant un plan de symétrie du problème, on considère uniquement un quart de section (voir figure 2). Les simulations EF ont été réalisées grâce au logiciel commercial Abaqus. Les conditions aux frontières considérées pour simuler un essai de traction uniaxiale sont indiquées sur la figure 2. Le calcul EF Abaqus permet d'évaluer les moyennes volumiques des champs mécaniques sur la cellule.

5.2 Comparaison entre les prédictions du modèle et les calculs EF

Dans les calculs EF, nous considérons pour modéliser la matrice et les particules les mêmes densités d'énergie de déformation que précédemment avec les mêmes paramètres matériaux. On compare les prédictions de la méthode d'homogénéisation aux résultats EF macroscopiques correspondants (figure 3) pour 2 fractions volumiques de particules, 10% et 25%. Pour chaque fraction volumique, on observe que le modèle de Reuss surestime la déformation

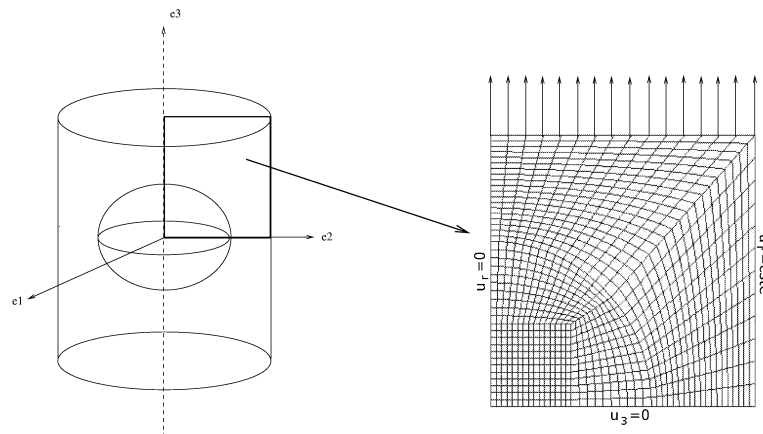


FIG. 2 – Cellule pour les simulations éléments finis

macroscopique par rapport aux résultats EF. Ceci est sans doute dû à la simplicité des hypothèses de ce schéma. On note en revanche un très bon accord entre le modèle d'Hashin-Strikman (HS) et la solution numérique de référence. Cet accord illustre la capacité du modèle basé sur le schéma HS à prendre en compte l'effet du renforcement et la non linéarité du composite à travers la méthode du second ordre.

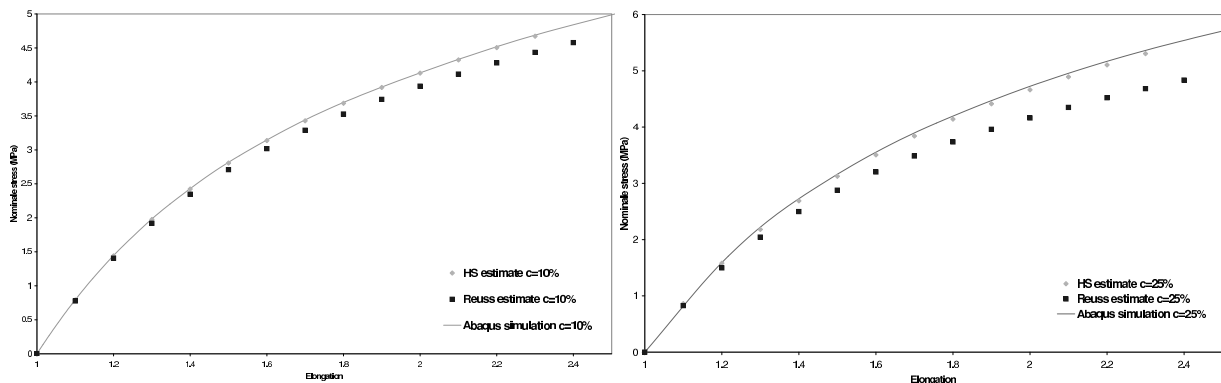


FIG. 3 – Prédictions des modèle de Reuss et d'Hashin-Shtrikman comparées aux solutions éléments finis pour une matrice renforcée par 10% et 25% particules déformables

6 Comparaison entre les prédictions de l'homogénéisation et les données expérimentales

L'approche d'homogénéisation étant validée grâce à des solutions EF, nous proposons maintenant de comparer ses prédictions (seul le modèle HS est considéré) à des résultats expérimentaux pour un élastomère (EPDM) renforcé par des particules de PolyPropylène (PP). La densité d'énergie adoptée pour modéliser la matrice de ce matériau est celle proposée par Lambert-Diani et Rey (1999) et les particules sont considérées rigides vis à vis de la matrice. On compare les prédictions du schéma d'homogénéisation d'Hashin-Shtrikman aux résultats expérimentaux (figure 4) pour 2 fractions volumiques de particules 5% et 10%. Malgré une bonne allure qualitative des prédictions, on remarque que le modèle d'homogénéisation surestime les contraintes.

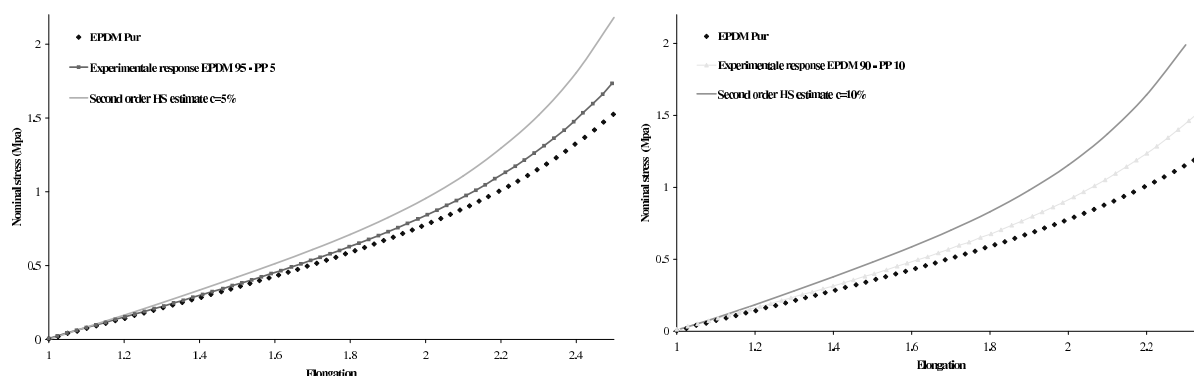


FIG. 4 – Prédications du modèle d’Hashin-Shtrikman comparées aux résultats expérimentaux pour un EPDM renforcée avec 10% et 25% de particules

7 Conclusions

Le travail présenté dans cette étude concerne la modélisation (micromécanique et Eléments Finis (EF)) du comportement mécanique des matériaux hyperélastiques renforcés par des particules sphériques. La modélisation micromécanique combine la méthode du second ordre et une borne d’Hashin-Shtrikman ; elle donne des résultats en bon accord avec la solution de référence obtenue par un calcul EF.

La comparaison des prédictions du schéma d’homogénéisation avec des données expérimentales révèle un écart qui peut être dû à l’insuffisance du modèle actuel à rendre compte des phénomènes d’endommagement dont l’apparition dans les matériaux étudiés n’est pas à exclure.

Références

- Hill, R. 1972 Convexity conditions and existence theorems in nonlinear elasticity. *Arch. Rat. Mech. Anal.* **63** 337-403
- Lahellec, N., Mazerolle, F., Michel, J.C. 2004 Second order estimate of the macroscopic behavior of periodic hyperelastic composites : theory and experimental validation. *J. Mech. Phys. Solids* **52** 27-49
- Lambert-Diani, J., Rey, C. 1999 New phenomenological behavior laws for rubbers and thermoplastics elastomers. *Eur. J. Mech., A, Solids* **18** 1027-1043
- Levin, V.M. 1967 Thermek expansion coefficients of heterogeneous materials. *Mekh. Tverd. Tela* **2** 83-94
- Ogden, R. W. 1984 Non linear elastic deformations. *Dover Publications Inc, New York*
- Ponte Castañeda, P. 1996 Exact second order estimates for the effective mechanical properties of non linear composite materials. *J. Mech. Phys. Solids* **44** 827-862
- Ponte Castañeda, P., Tiberio, E. 2000 A second order homogenization method in finite elasticity and applications to black-filled elastomers. *J. Mech. Phys. Solids* **48** 1389-1411
- Press, W. H. & al. 1992 Numerical recipes in Fortran, The art of scientific computing. *2nd Edition, Cambridge University Press*
- Doghri, I., Ouair, A. 2003 homogenization of two-phase elasto-plastic composite materials and structures study of tangent operators, cyclic plasticity and numerical algorithms. *International Journal of Solids and Structures* **40** 1681-1712