



ELSEVIER

Available online at www.sciencedirect.com



C. R. Mecanique 332 (2004) 907–913



<http://france.elsevier.com/direct/CRAS2B/>

Formulation DNLR intégrale des lois de comportement : généralisation du principe de superposition de Boltzmann

Boris Martin ^{a,*}, Zoubir Ayadi ^a, Michel Nivoit ^a, André Galtier ^b, Christian Cunat ^c

^a LSGS-INPL, EEIGM, 6, rue Bastien Lepage, 54010 Nancy cedex, France

^b ARCELOR R&D-IRSID, voie Romaine, 57283 Maizières les Metz, cedex, France

^c LEMTA-INPL, ENSEM, 2, avenue de la forêt de Haye, 54500 Vandoeuvre lès Nancy, France

Reçu le 2 juillet 2004 ; accepté après révision le 12 juillet 2004

Disponible sur Internet le 1^{er} octobre 2004

Présenté par André Zaoui

Résumé

Une approche thermodynamique des phénomènes de relaxation baptisée DNLR (Distribution of Non Linear Relaxations) est proposée depuis une quinzaine d'années pour décrire le comportement des matériaux. Dans cette Note, nous montrons que les équations constitutives de cette approche, exprimées initialement en termes de vitesse, peuvent être intégrées pour conduire à une formulation intégrale généralisant le principe de superposition aux domaines fortement non linéaires tels que la viscoplasticité ou encore les comportements endommageables. *Pour citer cet article : B. Martin et al., C. R. Mecanique 332 (2004).* © 2004 Académie des sciences. Publié par Elsevier SAS. Tous droits réservés.

Abstract

DNLR integral formulation of behaviour laws: generalisation of Boltzmann's superposition principle. A thermodynamic approach of relaxation phenomena called DNLR (Distribution of Non Linear Relaxations) has been employed for about fifteen years to describe the behaviour of materials. In this Note, we show that different DNLR constitutive equations, initially written in a rate formulation, can be put in a time-integrated (hereditary) form which generalises the superposition principle to non linear fields like viscoplasticity or damage behaviours. *To cite this article: B. Martin et al., C. R. Mecanique 332 (2004).* © 2004 Académie des sciences. Publié par Elsevier SAS. Tous droits réservés.

Mots-clés : Milieux continus ; Lois de comportement ; Thermodynamique de la relaxation ; Principe de superposition ; Formulation intégrale

Keywords: Continuum mechanics; Constitutive laws; Thermodynamics of relaxation; Superposition principle; Integral formulation

* Auteur correspondant.

Adresse e-mail : Boris.Martin@eeigm.inpl-nancy.fr (B. Martin).

Abridged English version

For some years, we have developed a non-equilibrium thermodynamic approach to model mechanical constitutive laws. This approach is called DNLN (Distribution of Non Linear Relaxations) and it is based on the study of internal rearrangements such as relaxation processes from a thermodynamic point of view [1]. We assume the existence of a non-equilibrium thermodynamic potential $\Psi(\underline{\gamma}; \bar{z})$ which completely describes the state of the material. This potential depends on the command state variables $\underline{\gamma}$ and on the internal variables \bar{z} .

Using the Onsager's relation, we define the kinetics associated with internal variables. Then, we make a base change in dissipation space in order to obtain uncoupled relaxation modes at a microscopic level. With these considerations, the general constitutive equation of the DNLN approach is given by relation (1). The relaxed state β^r is defined by (2) and the weight P_0^j of mode j is described by relation (5) using the Prigogine's theory of fluctuations [3]. The relaxation times are modelled within the activated transient state theory which leads to relation (6). Far from equilibrium, the relaxation times are given by the product of their equilibrium state value $\tau^{j,r}$ by the shift factor f_g , which is the same for all the modes and depends on the actual state of the system.

In this Note we show that the initial incremental constitutive equations of the DNLN formalism can be time-integrated to lead to the integral formulation represented by relation (13). This expression remains valid even if the relaxation times and the stability matrices are time-dependent and it generalises the superposition principle of Boltzmann to nonlinear fields.

For the uniaxial mechanical test with imposed strain, this integral formulation is represented by (14), where E^u is the instantaneous modulus (elastic modulus) and E^r is the relaxed modulus. If we define $E(t, t')$ as the 'viscoelastic modulus' in Eq. (15), (14) leads to (16), which is completely equivalent to the Boltzmann's formulation. However, Eq. (1) is also able to model viscoplasticity and ductile damage and (14) is completely equivalent to it. So the integral formulation can be used to describe the viscoplastic behaviour or the ductile damage. As a conclusion, the thermodynamic formalism of the DNLN approach is a suitable thermodynamic framework to generalise the superposition principle to nonlinear behaviour.

1. Introduction

Différentes voies d'étude peuvent être envisagées pour élaborer les lois de comportement des matériaux structuraux. On distingue classiquement : (i) les approches analogiques, qui ont un caractère fortement empirique et qui résultent souvent d'un assemblage d'unités rhéologiques de type ressort, amortisseur et patin ; (ii) les modélisations physiques, attachées à la problématique des transitions d'échelle et qui partent par exemple, pour les solides cristallins, du niveau descriptif des dislocations et de leurs systèmes de glissement pour accéder, via les méthodes d'homogénéisation, au comportement du VER (Volume Élémentaire Représentatif) ; et enfin, (iii) les approches phénoménologiques dont la justification physique repose principalement sur des considérations thermodynamiques couplées avec l'expérience. Pour ce dernier type d'approche plusieurs écoles de pensée thermodynamique existent, citons par exemple la méthode de l'état d'accompagnement ou encore la thermodynamique rationnelle.

L'approche phénoménologique DNLN prend appui sur une voie thermodynamique alternative [1] qui puise ses fondements dans l'analyse de la réaction chimique de De Donder et généralise ainsi la relation de Gibbs aux situations hors équilibre. En effet, les réorganisations internes sont considérées dans ce formalisme comme des réactions chimiques mal définies puisque leur stœchiométrie est a priori inconnue. Conformément au vocabulaire utilisé par De Groot et Mazur [2], le concept thermodynamique de relaxation contenu dans l'acronyme DNLN fait référence à ces « réactions chimiques ».

Ce formalisme conduit à des lois constitutives incrémentales qui ont été testées sur une large gamme d'essais mécaniques. Pour l'heure, tant au niveau des temps de calcul, qu'au niveau des paramètres phénoménologiques ajustables, l'approche DNLN représente une solution alternative raisonnable par exemple aux modèles standards généralisés.

L'objectif de cette note est d'établir la formulation intégrale de l'approche DNLR et de montrer que cette écriture héréditaire généralise à l'élasto(visco)plasticité le principe de superposition de Boltzmann si utile dans le domaine de la viscoélasticité linéaire.

2. Survol des bases thermodynamiques l'approche DNLR

Nous avons déjà souligné dans l'introduction que l'approche DNLR « regarde » les évolutions microstructurales du matériau comme des « réactions chimiques ». Leur traitement thermodynamique s'inspire alors largement de la méthode de De Donder : Nous postulons l'existence d'un potentiel extensif hors équilibre $\Psi(\underline{\gamma}; \bar{z})$ contenant à lui seul toute l'information sur l'évolution locale du VER. Il dépend à la fois des variables d'état de commande $\underline{\gamma}$, nécessaires et suffisantes pour décrire le système à l'équilibre, et des variables internes \bar{z} qui représentent « l'avancement des réactions » et sont nécessaires à la description du système hors équilibre. A titre d'illustration, si nous considérons le potentiel énergie interne, le vecteur de commande est $\underline{\gamma} = \{s, V_o \underline{\varepsilon}, n_k\}$ où s représente l'entropie, $V_o \underline{\varepsilon}$ la mesure de la déformation et n_k les nombres de moles des espèces chimiques k . Le vecteur réponse, dual de $\underline{\gamma}$, est alors $\underline{\beta} = \{T, \underline{\sigma}, \mu_k\}$, soit respectivement la température, la contrainte de Cauchy et les potentiels chimiques des espèces constitutives. Les réponses incrémentales $\dot{\underline{\beta}}$ dérivent naturellement du potentiel [1] par application de la méthode matricielle de Tisza. Les affinités $\bar{A} = \{A^\rho = \sum_k v_k^\rho \mu_k\}$ sont définies par application des idées de De Donder au terme source du bilan des espèces chimiques. Elles sont duales de $\bar{z} = \{z^\rho$ tels que $dn_k = \sum_\rho v_k^\rho dz^\rho\}$ et dérivent du potentiel généralisé. Le symbole v_k^ρ représentant le coefficient stœchiométrique de l'espèce k dans la réaction ρ .

L'utilisation de la relation de Onsager étendue aux cinétiques non linéaires permet de lier simplement les cinétiques des variables internes à leurs affinités et conduit à la définition thermodynamique des temps de relaxation. Nous effectuons alors une analyse modale de la dissipation nous permettant, par le biais d'un changement de base sur l'espace dissipatif, de découpler ces cinétiques. Dès lors, les variables internes représentent des modes normaux de relaxation à l'échelle atomique. A partir de ces considérations, l'expression générale de base de l'approche DNLR [1] est la suivante :

$$\dot{\underline{\beta}} = \sum_{j=1}^n \dot{\underline{\beta}}^j = \sum_{j=1}^n P^{j,u} \underline{a}^u \dot{\underline{\gamma}} - \frac{\underline{\beta}^j - \underline{\beta}^{j,r}}{\tau^j} \quad (1)$$

où \underline{a}^u est la matrice de stabilité généralisée instantanée, n le nombre de modes de relaxation et $P^{j,u}$ leurs poids modaux pour la réponse instantanée. Le terme $\underline{\beta}^{j,r}$ représente la réponse relaxée du mode j , c'est-à-dire la réponse modale vers laquelle le système évoluerait si l'expérience était suffisamment lente pour que son affinité reste constante (évolution isoaffine). Cet état relaxé est défini par le biais de la matrice de stabilité généralisée relaxée \underline{a}^r suivant la relation :

$$\underline{\beta}^r = \sum_{j=1}^n \underline{\beta}^{j,r} = \sum_{j=1}^n P^{j,r} \underline{a}^r \dot{\underline{\gamma}} \quad (2)$$

où $P^{j,r}$ correspond aux poids modaux pour la réponse relaxée.

Les relations (1) et (2) sont très générales et s'appliquent a priori quelles que soient les variables d'état contrôlées composant le vecteur $\underline{\gamma}$. A titre d'exemple, pour un essai mécanique uniaxial contrôlé en déformation nous posons $\underline{\gamma} = \varepsilon$, $\underline{\beta} = \sigma$ et obtenons :

$$\dot{\sigma} = \sum_{j=1}^n \dot{\sigma}^j = \sum_{j=1}^n \left(P^{j,u} E^u \dot{\varepsilon} - \frac{\sigma^j - \sigma^{j,r}}{\tau^j} \right) \quad (3)$$

$$\dot{\sigma}^r = \sum_{j=1}^n \dot{\sigma}^{j,r} = \sum_{j=1}^n P^{j,r} E^r \dot{\varepsilon} \quad (4)$$

Sur la base de la théorie des fluctuations de Prigogine, qui conduit à l'équipartition de l'entropie créée, Cunat a montré [3] que les poids P_0^j des modes dissipatifs sont liés aux temps de relaxation par la relation :

$$P_0^j = \frac{\sqrt{\tau^j}}{\sum_{j=1}^n \sqrt{\tau^j}} \quad (5)$$

De nombreuses simulations montrent que le choix simplificateur $P^{j,u} = P^{j,r} = P_0^j$ permet de reproduire un grand nombre de comportements expérimentaux sans affecter de manière notable la qualité du résultat ; en première approximation, nous retiendrons cette hypothèse.

Enfin, les temps de relaxation sont généralement modélisés par le biais de la théorie de l'état transitoire activé [1,4] :

$$\tau^j = \frac{h}{kT} a_\nu \exp\left(\frac{\Delta F^{+,j}}{RT}\right) = \frac{h}{kT} a_\nu \exp\left(\frac{\Delta F^{+,j,r}}{RT}\right) \exp\left(\frac{\Delta(\Delta F^+)}{RT}\right) = \tau^{j,r} f_g \quad (6)$$

où h , k et R sont respectivement les constantes de Planck, Boltzmann et des gaz parfaits ; a_ν représente le facteur qui situe la fréquence de saut caractéristique moyenne par rapport à la fréquence atomique définie par $\nu = kT/h$. L'énergie d'activation du j ème mode $\Delta F^{+,j}$ est décomposée en une valeur caractéristique de l'état relaxé $\Delta F^{+,j,r}$ et l'écart à cette dernière $\Delta(\Delta F^+)$. L'évolution des temps de relaxation par rapport à leurs valeurs relaxées $\tau^{j,r}$ se fait de manière coopérative par le biais d'un facteur de glissement f_g commun à tous les modes.

3. Formulation intégrale de l'approche

Pour chaque mode, en combinant (1) et (2) le formalisme DNLR conduit à l'expression suivante :

$$\dot{\beta}^j(t) = P_0^j \underline{a}^u(t) \dot{\underline{\gamma}}(t) - \frac{\beta^j(t) - P_0^j \int_{-\infty}^t \underline{a}^r(t') \dot{\underline{\gamma}}(t') dt'}{\tau^j(t)} \quad (7)$$

Cette équation peut s'intégrer en utilisant la méthode des facteurs d'intégration. Pour ce faire, arrangeons les termes de (7) de manière différente (arrangement qui n'est pas sans rappeler la forme obtenue par transformation de la base temps dans l'espace de Laplace) et multiplions les deux membres par la fonction régulière $\exp(\int_{-\infty}^t \frac{dt'}{\tau^j})$. Nous obtenons la relation suivante :

$$\left(\dot{\beta}^j + \frac{\beta^j}{\tau^j}\right) \exp\left(\int_{-\infty}^t \frac{dt'}{\tau^j}\right) = \left(P_0^j \underline{a}^u \dot{\underline{\gamma}} + \frac{1}{\tau^j} \int_{-\infty}^t P_0^j \underline{a}^r \dot{\underline{\gamma}} dt\right) \exp\left(\int_{-\infty}^t \frac{dt'}{\tau^j}\right) \quad (8)$$

En remarquant que $(\dot{\beta}^j + \frac{\beta^j}{\tau^j}) \exp(\int_{-\infty}^t \frac{dt'}{\tau^j}) = \frac{d}{dt}(\beta^j \exp(\int_{-\infty}^t \frac{dt'}{\tau^j}))$, l'intégration de la relation (8) pour une histoire de chargement donnée est aisée et conduit à l'expression suivante :

$$\beta^j \exp\left(\int_{-\infty}^t \frac{dt'}{\tau^j}\right) = \int_{-\infty}^t \left(P_0^j \underline{a}^u \dot{\underline{\gamma}} + \frac{1}{\tau^j} \int_{-\infty}^{t''} P_0^j \underline{a}^r \dot{\underline{\gamma}} dt'\right) \exp\left(\int_{-\infty}^{t''} \frac{dt'}{\tau^j}\right) dt'' \quad (9)$$

Pour simplifier cette écriture, il est intéressant d'intégrer par parties le deuxième terme de l'intégrale du membre de droite :

$$\int_{-\infty}^t \left(\frac{1}{\tau^j} \int_{-\infty}^{t''} P_0^j \underline{a}^r \dot{\underline{\gamma}} dt' \right) \exp \left(\int_{-\infty}^{t''} \frac{dt'}{\tau^j} \right) dt''$$

$$= \exp \left(\int_{-\infty}^t \frac{dt'}{\tau^j} \right) \int_{-\infty}^t P_0^j \underline{a}^r \dot{\underline{\gamma}} dt' - \int_{-\infty}^t P_0^j \underline{a}^r \dot{\underline{\gamma}} \exp \left(\int_{-\infty}^{t''} \frac{dt'}{\tau^j} \right) dt'' \tag{10}$$

Remplaçons alors la relation (10) dans l'Éq. (9) et effectuons le produit des exponentielles. Nous déduisons facilement l'expression suivante pour chacune des réponses modales :

$$\underline{\beta}^j = \int_{-\infty}^t (P_0^j (\underline{a}^u - \underline{a}^r) \dot{\underline{\gamma}}) \exp \left(- \int_{t''}^t \frac{dt'}{\tau^j} \right) dt'' + \int_{-\infty}^t P_0^j \underline{a}^r \dot{\underline{\gamma}} dt' \tag{11}$$

Si les temps de relaxation sont constants, le terme $\int_{t''}^t \frac{dt'}{\tau^j}$ dans la relation (11) vaut $\frac{t-t''}{\tau^j}$ et fait apparaître le temps écoulé entre l'instant d'application du chargement et celui d'observation. Lorsque les temps de relaxation ne sont pas des constantes, d'après la relation (6) nous pouvons écrire :

$$\int_{t''}^t \frac{dt'}{\tau^j} = \int_{t''}^t \frac{dt'}{\tau^{j,r} f_g} = \frac{1}{\tau^{j,r}} \int_{t''}^t \frac{dt'}{f_g} = \frac{t_R(t, t'')}{\tau^{j,r}} \tag{12}$$

où $t_R(t, t'') = \int_{t''}^t \frac{dt'}{f_g}$ est le temps réduit écoulé, c'est à dire le temps réduit correspondant à l'intervalle $t - t''$ conformément aux idées anciennes (dans les années 1930) de ce qu'il est convenu d'appeler parmi les spécialistes de la thermodynamique de la transition vitreuse l'école de Tool [5], idées largement reprises et popularisées par Schapery [6] dans le domaine des applications à la mécanique. Avec cette notation et en sommant la relation (11) sur l'ensemble des modes de relaxation nous obtenons la relation (13) qui constitue la formulation intégrale de l'approche DNLR.

$$\underline{\beta}(t) = \sum_{j=1}^n \underline{\beta}^j(t) = \int_{-\infty}^t \left[\underline{a}^r(t') + \left\{ \sum_{j=1}^n P_0^j (\underline{a}^u(t') - \underline{a}^r(t')) \exp \left(\frac{-t_R(t, t')}{\tau^{j,r}} \right) \right\} \right] \dot{\underline{\gamma}}(t') dt' \tag{13}$$

On peut observer ici que la fonction noyau DNLR se présente sous une forme très proche de celle utilisée par Valanis dans son modèle endochronique (voir par exemple [7]).

4. Généralisation du principe de superposition

Soulignons que la relation (13) à la même forme que la relation établie par Boltzmann pour les matériaux visco-élastiques linéaires. En effet, pour un essai mécanique uniaxial à déformation imposée, elle conduit à :

$$\sigma(t) = \int_{-\infty}^t \left[E^r + \sum_{j=1}^n P_0^j (E^u - E^r) \exp \left(\frac{-t_R(t, t')}{\tau^{j,r}} \right) \right] \dot{\epsilon}(t') dt' \tag{14}$$

où E^u et E^r sont respectivement les modules de Young instantané et relaxé. Si nous définissons le module « visco-élastique » par :

$$E(t, t') = E^r + \sum_{j=1}^n P_0^j (E^u - E^r) \exp \left(\frac{-t_R(t, t')}{\tau^{j,r}} \right) \tag{15}$$

où t et t' représentent respectivement les instants d'observation de la réponse et d'application de la charge, alors l'écriture intégrale de l'approche DNLR prend exactement la forme du principe de superposition de Boltzmann, à savoir :

$$\sigma(t) = \int_{-\infty}^t E(t, t') \dot{\varepsilon}(t') dt' \quad (16)$$

Mais la relation (13) ne se limite pas à la description du comportement visco-élastique linéaire. En effet, lors de l'intégration nous n'avons émis aucune restriction concernant les temps de relaxation et les matrices de stabilité instantanée et relaxée. Ainsi, l'Éq. (13) permet de traduire les différents comportements des matériaux exactement de la même manière que la relation (1). Précisons que lors d'applications particulières (en fluage par exemple [8]), le formalisme DNLR peut conduire à des lois différentielles ayant une structure différente de l'équation de base DNLR (1). La formulation intégrale proposée ne pourra évidemment pas s'appliquer à ces modèles spécifiques. Pour l'heure, nous avons pu vérifier numériquement que l'expression intégrale de l'approche DNLR conduit à des résultats totalement équivalents à ceux obtenus avec l'écriture incrémentale lors des simulations d'essais de recouvrance volumique du PVAc [9], d'essais de traction cyclique d'un acier inoxydable [10] ou encore lors d'un endommagement ductile [11]. A titre d'illustration, nous avons représenté sur la Fig. 1 les résultats obtenus, avec la formulation intégrale du modèle proposé dans [10], pour un essai de traction monotone et le dixième cycle d'un essai à déformation imposée entre 0.6 % et -0.6 %. Ces courbes sont comparées aux données expérimentales (représentées par les points) relatives à un acier inoxydable à 20 °C.

Notons que la formulation intégrale exprimée par la relation (13) ne se prête pas bien au calcul numérique puisque pour chaque nouvel incrément de temps il est nécessaire d'intégrer à nouveau cette expression entre $-\infty$ et l'instant considéré. En pratique nous avons recours à une écriture strictement équivalente à (13) mais plus adaptée numériquement.

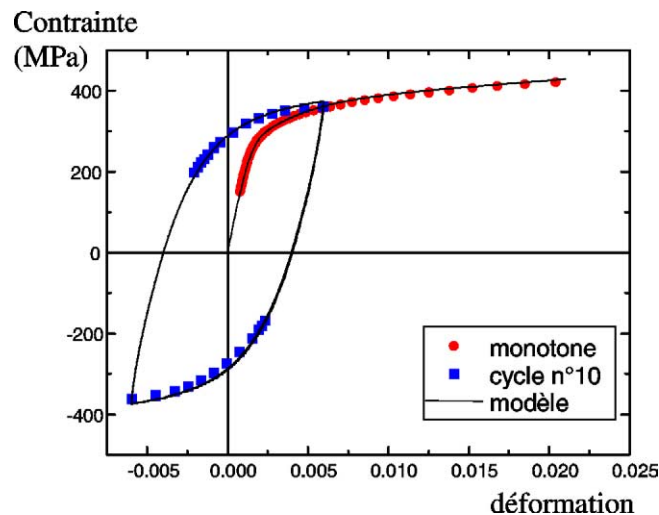


Fig. 1. Simulation avec la formulation intégrale de l'approche DNLR d'un essai de traction monotone et du dixième cycle d'un essai à déformation imposée. Comparaison avec les données expérimentales d'un acier inoxydable.

Fig. 1. Simulation of a monotonous and a cyclic strain controlled tensile test by means of the integral formulation of the DNLR approach. Comparison with stainless steel experimental data.

5. Conclusion

L'approche DNLR est basée sur une thermodynamique hors équilibre des phénomènes de relaxation. Elle permet d'aborder les divers comportements des matériaux à partir d'un même formalisme et ne nécessite pas d'introduire la notion de surface de charge pour traduire le comportement plastique. C'est finalement l'énergie d'activation des modes dissipatifs qui assure les couplages implicites correspondants entre les différentes directions de chargement.

Dans cette note nous avons montré que cette approche admet une formulation intégrale qui, moyennant l'utilisation du concept de temps réduit, introduit une généralisation du principe de superposition de Boltzmann. Ainsi, le cadre thermodynamique DNLR apparaît comme approprié pour généraliser ce principe aux domaines fortement non linéaires. Ces non-linéarités peuvent inclure aussi bien des cinétiques non linéaires que des évolutions des matrices de stabilité en fonction de l'histoire du matériau, comme c'est le cas lors d'un endommagement plastique par exemple.

Outre son intérêt fondamental, ce résultat nous permet d'étendre le champ de comparaison de notre approche avec les autres modèles héréditaires de la littérature.

Références

- [1] C. Cunat, The DNLR approach and relaxation phenomena. Part I – Historical account and DNLR formalism, *Mech. Time Depend. Mater.* 5 (2001) 39–65.
- [2] S.R. De Groot, P. Mazur, *Nonequilibrium Thermodynamics*, North Holland, Amsterdam, 1962.
- [3] C. Cunat, Lois constitutives de matériaux complexes stables ou vieillissants. Apports de la thermodynamique de la relaxation, *Rev. Gén. Therm.* 35 (1996) 680–685.
- [4] Z. Ayadi, P. Pilvin, C. Cunat, Modélisation du comportement d'un alliage base nickel par une approche thermodynamique de la relaxation des milieux continus, *C. R. Acad. Sci. Paris, Sér. II-b* 326 (1998) 815–820.
- [5] A. Tool, C.G. Eichlin, Variations caused in the heating curves of glass by heat treatment, *J. Am. Ceram. Soc.* 14 (1931) 276–308.
- [6] R.A. Schapery, An engineering theory of nonlinear viscoelasticity with applications, *Int. J. Solids Struct.* 2 (1966) 407–425.
- [7] K.C. Valanis, A theory of viscoplasticity without a yield surface. Part I general theory, *Arch. Mech.* 23 (1971) 517–533.
- [8] Z. Ayadi, P. Marceron, J.-F. Schmitt, C. Cunat, Thermodynamic modeling of creep mechanical behaviour by nonlinear relaxations, *Eur. Phys. J. AP* 6 (1999) 229–235.
- [9] A. Aharoune, P. Marceron-Balland, C. Cunat, The DNLR approach and relaxation phenomena. Part II – Application: Volume recovery of PVAc., *Mech. Time Depend. Mater.* 5 (2001) 345–377.
- [10] Z. Ayadi, B. Martin, S. Leclercq, M. Nivoit, C. Cunat, Modelling of cyclic mechanical behaviour of 316sph steel by a nonlinear relaxations approach, *Meccanica* 39 (2004) 81–85.
- [11] B. Martin, Z. Ayadi, M. Nivoit, C. Cunat, Méthode thermodynamique de DE DONDER et endommagement, in : XVème Congrès Français de Mécanique, Nancy, 2001.