AVERTISSEMENT

Ce document est le fruit d'un long travail approuvé par le jury de soutenance et mis à disposition de l'ensemble de la communauté universitaire élargie.

Il est soumis à la propriété intellectuelle de l'auteur. Ceci implique une obligation de citation et de référencement lors de l'utilisation de ce document.

D'autre part, toute contrefaçon, plagiat, reproduction illicite encourt une poursuite pénale.

Contact : ddoc-theses-contact@univ-lorraine.fr

LIENS

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 122. 4
Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 335.2- L 335.10
http://www.cfcopies.com/V2/leg/leg_droi.php
http://www.culture.gouv.fr/culture/infos-pratiques/droits/protection.htm

Nancy-Université
Université Henri Poincaré

U.F.R. ESSTIN
École doctorale EMMA
D.F.D. Mécanique et Énergétique

Université Henri Poincaré – Nancy 1
Laboratoire d'Énergétique et de Mécanique Théorique et Appliquée

Thèse

présentée en première version en vue d'obtenir le titre de

Docteur de l'Université Henri Poincaré – Nancy 1
(**Spécialité Mécanique et Énergétique**)

par

Wajdi ZOUARI

Développement d'Éléments Finis Ferroélectriques et Ferroélastiques de type Solide et Coque Curvilignes

Composition du jury :

Pr. Olivier POLIT	Université Paris Ouest – Nanterre	Rapporteur
D.R. Joël POUGET	Université Paris 6	Rapporteur
Pr. Michel POTIER-FERRY	Université Paul Verlaine – Metz	Examinateur
Pr. Rezak AYAD	Université de Reims Champagne-Ardenne	Examinateur
Pr. Ayech BENJEDDOU	Institut Supérieur de Mécanique de Paris	Co-encadrant
Pr. Tarak BEN ZINEB	Université Henri Poincaré – Nancy 1	Directeur

Remerciements

Cette thèse est le fruit de quatre années de recherche sous la direction du Professeur Tarak BEN ZINEB de l'Université Henri Poincaré Nancy 1. Aussi, je voudrais lui exprimer ma profonde gratitude pour le soutien et l'aide qu'il m'a prodigués tout le long de ces quatre années de thèse surtout après le retrait inexplicable du co-encadreur Docteur Mourad ELHADROUZ, ancien Maître de Conférences de l'Ecole Nationale d'Arts et Métiers de Metz.

Je voudrais aussi exprimer ma gratitude aux Professeurs Ayech BENJEDDOU de l'Institut Supérieur de Mécanique de Paris et Rezak AYAD de l'Université de Reims Champagne-Ardenne pour leurs conseils et leur implication, de près ou de loin, dans ce travail surtout pendant ma troisième année de thèse.

Mes remerciements vont aussi aux Professeurs Olivier POLIT de l'Université Paris Ouest et Joël POUGET Directeur de Recherche à l'Université Paris 6 pour avoir accepté de faire partie de mon jury de thèse et de critiquer ce travail.

Je voudrais également remercier toute l'équipe de Mécanique du Solide de l'ESSTIN (Boris, Arnauld, Loïc, Walid, Valérie, Céline, Patrice, Alain et Frédéric) avec qui j'ai eu du plaisir à interagir pendant ces quelques années de recherche. Ainsi, je leur souhaite les plus heureuses des continuations dans leurs travaux de recherche.

Pour tout ce qu'ils ont fait pour moi, je voudrais exprimer ma profonde gratitude à ma chère mère Nedra et mon cher père Ahmed, mes frères Wassim et Amine et ma soeur Mariam. A ma chère épouse Awatef et à mon fils Mahmoud, je présente un grand merci pour les parenthèses de bonheur familial simple, serein et sincère, moments de répit nécessaires pour la réalisation et l'aboutissement de ce travail.

A toute la famille ZOUARI
A la Tunisie, mon pays que j'aime tant.

Table des matières

Introduction générale

Chapitre 1
Matériaux piézoélectriques et ferroélectriques

1.1 Introduction . . . 6
1.2 Histoire de la piézoélectricité . . . 7
1.3 Les classes cristallines . . . 8
1.4 Applications . . . 10
1.4.1 Capteurs . . . 10
1.4.2 Actionneurs . . . 11
1.5 Les céramiques ferroélectriques . . . 14
1.5.1 Propriétés physiques des céramiques ferroélectriques . . . 14
1.5.2 Polarisation des céramiques ferroélectriques . . . 19
1.5.3 Comportements ferroélectrique et ferroélastique . . . 20
1.6 Modélisation du comportement piézoélectrique linéaire . . . 25
1.6.1 Relations piézoélectriques linéaires . . . 25
1.6.2 Formulation énergétique . . . 28
1.7 Modélisation du comportement non linéaire des céramiques ferroélectriques . . . 35
1.7.1 Investigations expérimentales . . . 35
1.7.2 Modélisation des comportements ferroélectrique et ferroélastique . . . 37
1.8 Éléments finis électromécaniques . . . 40
1.9 Conclusion . . . 40

Chapitre 2
Modélisation phénoménologique du comportement non linéaire des céramiques ferroélectriques

2.1 Introduction . . . 44
2.2 Présentation du modèle phénoménologique . . . 44
2.2.1 Les variables d'état . . . 44

2.2.2 Fonction critère ferroélastique 48
2.2.3 Fonction critère ferroélectrique 51
2.3 Méthode de résolution adoptée 52
2.4 Module tangent électromécanique cohérent 53
2.5 Intégration de la loi ferroélectrique et ferroélastique 54
2.5.1 Comportement piézoélectrique réversible 55
2.5.2 Comportement ferroélectrique 55
2.5.3 Comportement ferroélastique 56
2.5.4 Comportement ferroélectrique et ferroélastique 57
2.5.5 Résultats 58
2.6 Adaptation 2D du modèle phénoménologique 63
2.6.1 Intégration de la loi ferroélectrique bidimensionnelle 65
2.6.2 Résultats 68
2.7 Conclusion 70

Chapitre 3
Développement d'un élément coque ferroélectrique

3.1 Introduction 72
3.2 Formulation variationnelle du problème électromécanique 72
3.3 Les champs gradients 73
3.3.1 Matrice de transformation géométrique 73
3.3.2 Déplacement mécanique et déformations curvilignes 75
3.3.3 Le potentiel et champ électriques 76
3.4 Approximation par éléments finis 77
3.4.1 Correction de type MITC des déformations γ_{xz} et γ_{yz} 78
3.4.2 Le potentiel électrique 81
3.4.3 Le vecteur des degrés de liberté 81
3.4.4 Procédure incrémentale 83
3.5 Cas tests de validation 85
3.5.1 Cas tests mécaniques 85
3.5.2 Cas tests piézoélectriques de type actionneur 95
3.5.3 Cas tests piézoélectriques de type capteur 103
3.5.4 Cas test ferroélectrique 106
3.6 Conclusion 108

Chapitre 4
Développement d'un élément fini solide ferroélectrique

4.1 Introduction . . . 112
4.2 Les champs gradients . . . 112
4.2.1 Tenseur des déformations curvilignes . . . 113
4.2.2 Champ électrique curviligne . . . 114
4.3 Approximations par éléments finis . . . 115
4.3.1 Formulation de H8F . . . 115
4.3.2 Formulation de SFR8P . . . 117
4.3.3 Méthode de dilatation volumique constante : la $\bar{B}$-méthode . . . 120
4.4 Cas tests de validation . . . 123
4.4.1 Cas test mécanique : Flexion plane d'une poutre encastrée . . . 123
4.4.2 Cas tests piézoélectriques . . . 124
4.4.3 Cas tests ferroélectriques . . . 130
4.5 Conclusion . . . 140

Conclusion générale

Annexes

Annexe A
Comportement ferroélectrique

A.1 Calcul de J_X . . . 147
A.2 Calcul de J_Y . . . 150

Annexe B
Comportement ferroélastique

B.1 Calcul de J_X . . . 153
B.2 Calcul de J_Y . . . 157

Annexe C
Comportement ferroélectrique et ferroélastique

C.1 Calcul de J_X . . . 159
C.2 Calcul de J_Y . . . 164

Annexe D
La méthode des déformations postulées améliorées

Annexe E
Détermination du potentiel électrique quadratique

Annexe F
Déformations curvilignes du SFR8P

Bibliographie **179**

Table des figures

1.1 Effet piézoélectrique direct : apparition d'une polarisation électrique en réponse à une contrainte mécanique de compression. 6

1.2 Effet piézoélectrique inverse : déformation d'un cube piézoélectrique soumis à un champ électrique 6

1.3 Les classes cristallines. 9

1.4 Maille cubique centrosymétrique du $BaTiO_3$ pour une température supérieure à la température de Curie. 9

1.5 Disque piézoélectrique utilisé comme un microphone de contact sur une guitare classique. 10

1.6 (a) Poutre mince avec des patches piézoélectriques collés sur ses faces supérieure et inférieure. (b) Moment de flexion généré par l'application de deux tensions électriques opposés sur les patches. (c) Identification d'un dommage éventuel de la structure grâce au rôle dual de capteur/actionneur des transducteurs en PZT (d'après [78]). 11

1.7 (a) Actionneur de forme spirale (b) Réponse fréquentielle du déplacement tangentiel de l'actionneur spirale montrant un déplacement maximal de $700\mu m$ autour de la fréquence de résonance (d'après [71]). 12

1.8 Actionneur hélicoïdal (d'après [23]). 12

1.9 Actionneur bimorphe. 13

1.10 Actionneur multicouche. 13

1.11 Actionneur CRESCENT (d'après [17]). 13

1.12 Formes cubique, tétragonale, orthorhombique et rhombohédrale des composants pérovskites et températures de transition pour le $BaTiO_3$. 15

1.13 La structure cristalline pérovskite du Titanate de baryum. (a) Maille cubique paraélectrique pour $T > T_c$. (b) Maille tétragonale ferroélectrique pour $T < T_c$. . 15

1.14 Les six positions possibles du cation B^{4+} pour une maille tétragonale créant six variantes de polarisation spontanée. 16

1.15 Structure en domaines de $BaTiO_3$. 17

1.16 (a) Surface de charge associée à la polarisation spontanée et apparition d'un champ électrique dépolarisant E_0. (b) Domaines à 180° formés pour minimiser l'énergie électrostatique [78]. 17

1.17 (a) Forme tétragonale d'une maille élémentaire de $BaTiO_3$ et l'apparition de la polarisation spontanée P_0. (b) Effet piézoélectrique inverse $\varepsilon = d_{33}E$. (c) Effets piézoélectriques directs $\triangle P = d_{33}\sigma_3$, et (d) $\triangle P = d_{31}\sigma_1$. 18

1.18 (a) Diagramme de phase du PZT illustrant la dépendance du point de Curie T_c vis à vis de la fraction molaire x du Zirconium et la limite de phase morphotropique séparant les structures tétragonale et rhombohédrale. (b) Dépendance des coefficients de couplage piézoélectriques vis à vis de la fraction molaire x, [46]. . . 19

1.19 Microstructure en domaines dans une céramique polycristalline : cas du $BaTiO_3$ [27]. 19

1.20 Processus de polarisation d'une céramique ferroélectrique. (a) Polycristal ferroélectrique formé par des grains contenant des domaines ferroélectriques. (b) Polarisation de la céramique en appliquant un champ électrique dont l'amplitude est supérieure au champ coercitif E_c. (d) Apparition d'une polarisation et une déformation rémanentes macroscopiques après suppression du champ électrique. . 20

1.21 Réorientations ferroélectriques des domaines de 180° et 90° induites par un champ électrique supérieur au champ coercitif. 21

1.22 (a) Hystérésis diélectrique et approximation linéaire (segment centré en C). (b) Hystérésis en ailes de papillon et approximation linéaire (segment centré en C et F). 21

1.23 Réorientation ferroélastique des domaines de 90° induite par un chargement mécanique de compression d'amplitude supérieure à σ_c 23

1.24 Hystérésis (a) $\sigma - \varepsilon$ et (b) $\sigma - P$ d'une céramique ferroélectrique polarisée ($P = P^r$ et $\varepsilon = \varepsilon^r$) soumise à une contrainte mécanique de compression 24

1.25 Interaction entre les processus électrique, mécanique et thermique avec les variables intensives : champ électrique E, contrainte mécanique σ, température T et les variables extensives : la polarisation P, la déformation ε et l'entropie S [78] . 28

2.1 (a) Céramique ferroélectrique initialement polarisée suivant 3 soumise à une contrainte de compression de forte intensité. (b) Dépolarisation mécanique de la céramique et persistance d'une polarisation rémanente de faible intensité suivant 3 47

2.2 La fonction $(1 + tanh(kx))/2$ 48

2.3 Ecrouissage isotrope de la surface de charge ferroélastique lors d'un essai de compression sur une céramique initialement polarisée. 49

2.4 Courbe de la fonction de pénalisation utilisée pour contrôler les saturations de la déformation et polarisation rémanentes. c=0.1 et P_0=1000. 50

2.5 Hystérésis diélectrique : évolution du déplacement électrique en fonction du champ électrique. 59

2.6 Hystérésis en ailes de papillon (*butterfly* ferroélectrique) : évolution de la déformation totale en fonction du champ électrique. 60
2.7 Évolution de la polarisation ferroélectrique en fonction du champ électrique. . . . 60
2.8 Hystérésis ferroélastique : évolution de la contrainte en fonction de la déformation. 61
2.9 Évolution du déplacement électrique en fonction du champ électrique lors d'un processus de polarisation. 61
2.10 Évolution de la contrainte en fonction de la déformation lors d'un essai de compression sur une céramique polarisée. 62
2.11 Evolution de la polarisation électrique en fonction de la contrainte lors d'un essai de compression sur une céramique polarisée : dépolarisation mécanique ($\tau = 0.45$). 62
2.12 Evolution de la polarisation électrique en fonction de la contrainte lors d'un essai de compression sur une céramique polarisée pour différentes valeurs de τ. 63
2.13 Evolution de la contrainte en fonction de la déformation lors d'un essai de compression en présence d'un champ électrique (écrouissage isotrope). 63
2.14 Surface de référence d'une structure coque et définition des bases covariante et tangente. 64
2.15 L'hystérésis diélectrique (écrouissage linéaire pour $\alpha = 0$ et écrouissage non linéaire pour $\alpha = 0.005$.) 69
2.16 L'hystérésis en ailes de papillon (écrouissage linéaire pour $\alpha = 0$ et écrouissage non linéaire pour $\alpha = 0.005$.) 69

3.1 Équilibre du domaine piézoélectrique B_0 : notations. 72
3.2 Vecteur position d'une structure coque. 74
3.3 Élément coque quadrilatéral à quatre noeuds et représentation de la base covariante de la surface moyenne. 77
3.4 Les points d'interpolation utilisés pour déterminer $\gamma_{\xi z}^{AS}$ et $\gamma_{\eta z}^{AS}$. 79
3.5 Résolution du problème électromécanique bidimensionnel dans Abaqus® via la routine UEL. 84
3.6 Flexion plane et transversale d'une plaque : effet de la distorsion du maillage. . . 85
3.7 Effet de la distorsion du maillage sur la convergence des éléments : flexion plane . 87
3.8 Effet de la distorsion du maillage sur la convergence des éléments : flexion transversale 87
3.9 Cylindre pincé avec diaphragme. 88
3.10 Cylindre pincé : convergence de V_C/V_C^{ref}. 89
3.11 La plaque asymétrique de Cook : gémoétrie, propriétés du matériau, conditions aux limites et chargement. 89
3.12 Plaque asymétrique de Cook. Convergence de V_A/V_A^{ref}. 90
3.13 Hémisphère pincé avec trou. Géométrie, propriétés matérielles et conditions aux limites. 91
3.14 Hémisphère pincé sans trou. 91

3.15 Hémisphère pincé avec trou : convergence des éléments coques. 92
3.16 Hémisphère pincé sans trou : convergence des éléments coques. 93
3.17 Poutre vrillée maillée avec 2×12 éléments. Données et chargements. 93
3.18 Poutre vrillée mince. (a) Chargement dans le plan, (b) Chargement hors plan . . 95
3.19 Poutre vrillée épaisse. (a) Chargement dans le plan, (b) Chargement hors plan . . 96
3.20 Un tube piézoélectrique formé par quatre parties égales ou quadrants. 96
3.21 Déflection d'un tube piézoélectrique dans un arrangement unipolaire. (a) Un voltage positif est appliqué uniquement sur le quadrant $+x$ et tous les autres quadrants sont liés à la masse. (b) La déflection du tube dans la direction $+x$. 98
3.22 L'actionneur piézoélectrique de forme spirale 100
3.23 Déformée de l'actionneur spiral à $\triangle V = 100\,V$: la réponse de C3D8E. 101
3.24 Déformée de l'actionneur spiral à $\triangle V = 100\,V$: la réponse de Q4TSF. 102
3.25 Définition des fibres centrées en A, B et C. 103
3.26 Flexion d'une poutre piézoélectrique 104
3.27 Flexion d'un demi cylindre 105
3.28 Les variations du champ électrique dans le temps. 107
3.29 (a) Hystérésis diélectrique correspondant au premier chargement électrique. (b) Déplacement transversal du point A en réponse à la première variation du champ électrique. 107
3.30 (a) Hystérésis diélectrique correspondant au deuxième chargement électrique. (b) Déplacement transversal du point A en réponse à la deuxième variation du champ électrique. 108
3.31 (a) Hystérésis diélectrique correspondant au troisième chargement électrique. (b) Déplacement transversal du point A en réponse à la troisième variation du champ électrique. 108

4.1 Définition des vecteurs covariants et tangents en un point de la structure tridimensionnelle. 113
4.2 Elément hexaédrique à huit noeuds. 117
4.3 Elément SFR8. (a) Variables nodales de SFR8. (b) Rotation fictive de la fibre ip induisant un déplacement additionnel. 120
4.4 Poutre en flexion plane. 124
4.5 Maillages tridimensionnels utilisés. 124
4.6 Bimorphe piézoélectrique : effet de la distorsion du maillage. 125
4.7 Déformée du bimorphe piézoélectrique. 125
4.8 Déformée du bimorphe piézoélectrique simulée par l'élément C3D8E ($e = 3\,mm$). 126
4.9 Demi cylindre piézoélectrique. 127
4.10 Déformée du demi cylindre piézoélectrique soumis à une différence de potentiel de 100 V. 128

4.11 (a) Huitième du tube ferroélectrique soumis à une différence de potentiel de forte intensité. (b) L'histoire de chargement. 130
4.12 Potentiel électrique en fonction de la position radiale à la tension maximale ($t = 0.5\,s$) et quand le tube est déchargé ($t = 1\,s$). 131
4.13 Champ électrique radial en fonction de la position suivant l'épaisseur à la tension maximale ($t = 0.5\,s$) et quand le tube est déchargé ($t = 1\,s$). 131
4.14 Distribution du potentiel électrique à l'intérieur du tube à la fin du chargement ($t = 1\,s$). 132
4.15 Distribution du champ électrique radial à l'intérieur du tube à la fin du chargement ($t = 1\,s$). 132
4.16 Variation du déplacement longitudinal en fonction de la position radiale de l'extrémité libre du tube. 133
4.17 Distribution du déplacement longitudinal (suivant Z) à $t = 0.5\,s$. 133
4.18 Variation de la contrainte équivalente en fonction de la position radiale. 134
4.19 Distribution de la contrainte équivalente à $t = 0.5\,s$. 134
4.20 Variation de la polarisation ferroélectrique radiale en fonction de la position suivant l'épaisseur. 135
4.21 Distribution de la polarisation ferroélectrique radiale à $t = 1\,s$. 135
4.22 Plaque ferroélectrique trouée soumise à une différence de potentiel de forte intensité. 136
4.23 Histoire du chargement de la plaque trouée. 136
4.24 Distribution du champ électrique équivalent à $t = 0.5\,s$. 137
4.25 Distribution du champ électrique équivalent à $t = 1\,s$. 137
4.26 Distribution de la contrainte mécanique équivalente à $t = 1\,s$. 138
4.27 Distribution du potentiel électrique à la fin du chargment ($t = 1\,s$). 139
4.28 Distribution de la polarisation électrique à la fin du chargment ($t = 1\,s$). 139
4.29 Distribution de la déformation mécanique équivalente à la fin du chargment ($t = 1\,s$). 140

Introduction générale

Les dernières avancées dans la science des matériaux ont permis de produire une classe de systèmes qualifiés d'intelligents ou adaptatifs. Ils ont généralement un comportement dynamique dont il est possible de contrôler ou modifier par un ensemble de capteurs et d'actionneurs en conformité avec une loi de commande intégrée. Des choix spécifiques des actionneurs et des capteurs sont dictés par les exigences de conception des systèmes intelligents. Pour les applications aéronautiques et aérospatiales, par exemple, les transducteurs de contrôle doivent être légers pour qu'ils aient un effet minimal sur la dynamique du système. De plus, les actionneurs doivent fournir l'effort nécessaire en utilisant la source d'alimentation disponible. Les restrictions sur la taille et le poids exigent également que les transducteurs puissent être capables de jouer plusieurs rôles dans la structure. Par exemple, les transducteurs qui surveillent et contrôlent les vibrations dans un fuselage d'avion peuvent être utilisés aussi comme actionneurs et capteurs pour surveiller l'état global de la structure (tests non destructifs) en temps réel.

La nouveauté apportée par les matériaux intelligents réside dans leurs capacités intrinsèques et extrinsèques qui leurs permettent dans un premier temps de répondre à des stimuli intérieurs ou extérieurs, puis d'activer en conséquence leurs fonctions correspondantes. La science des matériaux a donc évolué de l'usage des matériaux structurels inertes (comme l'acier et le béton) à celui de matériaux actifs ou adaptatifs qui ont des capacités de reconnaissance et/ou de réaction. Les matériaux actifs d'actionnement sont ceux qui permettent de convertir l'énergie électrique, magnétique ou thermique en énergie mécanique tandis que les effets de détection sont fournis par la conversion inverse de l'énergie. Les alliages à mémoire de forme (AMF) et les matériaux piézoélectriques font partie de ces matériaux intelligents.

Les alliages à mémoire de forme sont de plus en plus considérés dans les applications de génie civil, aérospatiales et industrielles qui exigent un amortissement passif important. Déformés à froid, ces matériaux peuvent retrouver leurs formes initiales s'ils sont chauffés à une certaine température par suite d'une transformation de phase. Ces matériaux trouvent de nombreuses applications dans des secteurs variés comme l'utilisation des stents à base d'AMF dans le secteur biomédical pour réparer les artères endommagés.

Les matériaux piézoélectriques produisent une tension électrique quand ils sont soumis à une contrainte mécanique et, inversement, se déforment sous l'effet d'un champ électrique. Ce type de matériaux est largement considéré dans la conception des structures intelligentes grâce au fait qu'ils sont légers et compacts, relativement bon marché, et présentent un comportement

électromécanique linéaire lorsuq'ils sont soumis à un chargement de faible intensité. Cette classe de matériaux comprend principalement des céramiques comme le titanate de barium et récemment des polymères. Dans le secteur automobile, de grands équipementiers comme Bosch® et Siemens® ont développé des injecteurs de carburant utilisant des actionneurs piézoélectriques. Par rapport aux électrovannes classiques, les améliorations résident dans les fréquences d'injection plus élevées et la précision accrue de la quantité de carburant injectée. Les matériaux piézoélectriques sont généralement considérés pour l'amortissement des vibrations, la réduction du bruit et le contrôle non destructif des structures. L'ensemble de ces applications exploite le comportement linéaire de ces matériaux piézoélectriques.

Les effets piézoélectriques direct et inverse favorisent l'utilisation de ces matériaux dans les applications de type capteur et actionneur. Par conséquent, le besoin de modélisation des matériaux piézoélectriques (comme pour les autres classes de matériaux intelligents) est important. La spécificité tient ici dans le couplage électromécanique, mais également dans les phénomènes non linéaires qui apparaissent à cause de la nature noncentrosymétrique de ce type de matériaux. Cette non linéarité du comportement est parfois utile dans quelques applications telles que les mémoires FRAM (Ferroelectric Random Access Memory) qui utilisent les propriétés non linéaires des céramiques piézoélectriques pour stocker les données informatiques. La direction de polarisation de la céramique piézoélectrique (PZT en général) peut être inversée par un fort champ électrique : il s'agit du comportement ferroélectrique. Dans d'autres cas, ces effets non linéaires ne sont pas désirés car ils limitent ou dégradent les performances des composants piézoélectriques. Le comportement ferroélastique, qui se caractérise par la réorientation de la polarisation électrique sous l'effet d'une contrainte mécanique (de compression en général), peut dégrader les performances des actionneurs piézoélectriques et induit des fissures.

D'autre part, des travaux de recherche sont actuellement en cours afin d'aboutir à des applications miniaturisées utilisant les céramiques piézoélectriques (micro-actionneurs et micro-capteurs). Ces micro-composants sont généralement taillés dans des films céramiques très minces (quelques microns d'épaisseur). Afin de dimensionner ces micro-composants et avoir des informations fiables concernant l'état des champs électroélastiques, il est nécessaire de disposer d'un outil numérique adapté et par conséquent intégrant les comportements ferroélectrique et ferroélastique non linéaires, d'une part, et la faible dimension des pièces suivant l'épaisseur, d'autre part. C'est dans cet esprit que ce travail s'oriente, plus particulièrement autour du développement d'outils de dimensionnement numériques adaptés aux structures piézoélectriques minces et quelconques et qui prennent en compte les phénomènes non linéaires liés à la réorientation de la polarisation électrique.

Le premier chapitre s'efforce de définir les effets piézoélectriques direct et inverse et l'origine de la piézoélectricité dans les céramiques ferroélectriques largement utilisées dans les applications actuelles. Ensuite, le modèle piézoélectrique linéaire, communément adopté pour étudier les applications piézoélectriques soumises à de faibles chargements électromécaniques, est rappelé. Les comportements ferroélectrique et ferroélastique, qui induisent des réponses fortement

hystérétiques, sont définis. Puis, une synthèse bibliographique des modèles phénoménologiques et micromécaniques jusque là développés est proposée. Enfin, nous présentons une synthèse bibliographique des éléments finis piézoélectriques proposés.

Le second chapitre propose une modélisation phénoménologique des comportements ferroélectrique et ferroélastique. Une adaptation bidimensionnelle de ce modèle est développée pour étudier la réponse non linéaire des structures piézoélectriques minces. Deux fonctions de pénalisation ferroélectrique et ferroélastique sont proposées pour contrôler les saturations de la polarisation et la déformation rémanentes. L'intégration implicite, basée sur la méthode de retour radial, des versions 2D et 3D du modèle phénoménologique proposé est présentée.

Le troisième chapitre s'intéresse au développement d'un élément fini coque couplé avec la loi ferroélectrique bidimensionnelle. Des tests de validation linéaires et non linéaires sont proposés.

Le dernier chapitre est consacré au développement de deux éléments hexaédriques électromécaniques. Le premier élément est couplé avec la loi de comportement ferroélectrique et ferroélastique tridimensionnelle. Le deuxième, basé sur le concept SFR ou rotation d'une fibre spatiale, est proposé, dans un premier temps, pour améliorer la réponse piézoélectrique linéaire du premier. Pour tenir compte de l'anisotropie du comportement piézoélectrique, le tenseur des déformations mécaniques et le vecteur champ électrique sont exprimés dans un système de coordonnées curvilignes. A titre d'exemple, les processus de polarisation d'un tube ferroélectrique et d'une plaque trouée sont étudiés.

Chapitre 1

Matériaux piézoélectriques et ferroélectriques

Sommaire

1.1 Introduction 6
1.2 Histoire de la piézoélectricité 7
1.3 Les classes cristallines 8
1.4 Applications 10
1.4.1 Capteurs 10
1.4.2 Actionneurs 11
1.5 Les céramiques ferroélectriques 14
1.5.1 Propriétés physiques des céramiques ferroélectriques 14
1.5.2 Polarisation des céramiques ferroélectriques 19
1.5.3 Comportements ferroélectrique et ferroélastique 20
1.6 Modélisation du comportement piézoélectrique linéaire 25
1.6.1 Relations piézoélectriques linéaires 25
1.6.2 Formulation énergétique 28
1.7 Modélisation du comportement non linéaire des céramiques ferroélectriques 35
1.7.1 Investigations expérimentales 35
1.7.2 Modélisation des comportements ferroélectrique et ferroélastique 37
1.8 Éléments finis électromécaniques 40
1.9 Conclusion 40

1.1 Introduction

La piézoélectricité (du grec piézein : presser, appuyer) est la propriété que possèdent certains matériaux de se polariser électriquement sous l'action d'une contrainte mécanique. Si le matériau n'est pas court-circuité, la charge mécanique appliquée induit une différence de potentiel à travers le matériau (Figure 1.1). Cet effet est appelé l'*effet piézoélectrique direct*. D'autre part, cette famille de matériaux présente également l'*effet piézoélectrique inverse* : ils se déforment quant ils sont soumis à un champ électrique (Figure 1.2). Cette propriété trouve un très grand nombre d'applications dans l'industrie et la vie quotidienne. Une application parmi les plus familières est l'allume-gaz. Dans un allume-gaz, la pression exercée produit une tension électrique qui se décharge brutalement sous forme d'étincelles : c'est une application de l'effet piézoélectrique direct. De manière plus générale, l'effet direct peut être mis à profit dans la réalisation des capteurs (capteur de pression, microbalance, etc..) tandis que l'effet inverse permet de réaliser des actionneurs (injecteurs à commande piézoélectrique en automobile, nanomanipulateur, etc..).

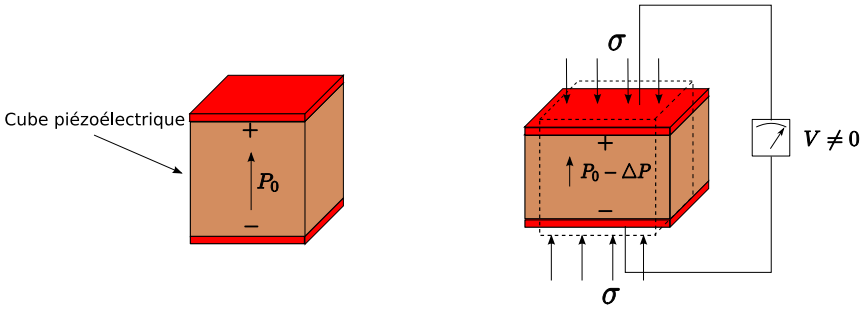


Fig. 1.1 : *Effet piézoélectrique direct : apparition d'une polarisation électrique en réponse à une contrainte mécanique de compression.*

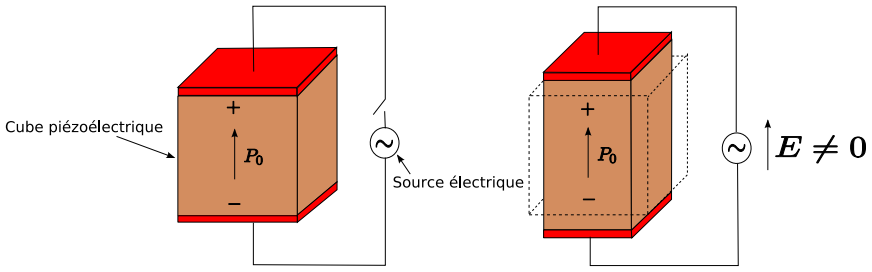


Fig. 1.2 : *Effet piézoélectrique inverse : déformation d'un cube piézoélectrique soumis à un champ électrique*

Le matériau piézoélectrique le plus connu est sans doute le quartz, toujours utilisé aujourd'hui dans les montres pour générer des impulsions d'horloge. Mais ce sont des céramiques synthétiques, appelées céramiques ferroélectriques (comme le titanate de baryum de formule $BaTiO_3$ et le titanate de plomb de formule $PbTiO_3$), qui sont largement utilisées actuellement dans l'industrie grâce à leur coût de fabrication raisonnable et leurs constantes diélectriques et piézoélectriques

intéressantes.
Il existe aussi des polymères qui présentent des propriétés piézoélectriques. Les plus couramment utilisés sont des polymères de synthèse, notamment le polyvinylidine difluoride (PVDF) et ses dérivés. Dans la pratique, les polymères sont utilisés en couche mince de 6 à 25 microns pour la réalisation de transducteurs ou d'hydrophones.

1.2 Histoire de la piézoélectricité

La piézoélectricité a été découverte en 1880 par Pierre et Jacques Curie quant ils ont voulu examiner la relation entre la pyroélectricité[1] et certaines symétries cristallines [78]. Dans des études initialement focalisées sur des cristaux de tourmaline et après étendues au quartz, sucre de canne et le sel de Rochelle, les frères Curie ont montré la génération de charges électriques en réponse aux pressions et contraintes appliquées. Ceci est l'effet piézoélectrique direct qui, pour ce type de cristaux, peut produire des tensions électriques pouvant atteindre des milliers de volts. L'effet piézoélectrique inverse a été découvert par la suite sur la base de calculs thermodynamiques, et immédiatement vérifié par les frères Curie.
Une première caractérisation *linéaire* des propriétés électromécaniques des matériaux piézoélectriques a été publiée en 1910 par Woldemar Voigt dans *Lehrbuch der Kristallphysik* (manuel sur la physique des cristaux) [84] et a établi la notation toujours utilisée dans les modèles piézoélectriques linéaires. En 1916, Paul Langenin a développé un transducteur piézoélectrique, constitué par un cristal de quartz pris en sandwich entre deux plaques de métal, qui fonctionne comme un détecteur sous-marin ultrasonique [67]. Les ondes sonores ont été produites par oscillation des deux plaques quand le cristal de quartz est soumis à une différence de potentiel (effet piézoélectrique inverse). Un capteur de quartz a été utilisé, cette fois, pour recevoir les échos des ondes sonores. Le temps écoulé entre l'émission d'une onde acoustique et la réception de son écho permet de calculer la distance qui sépare la source d'émission et l'objet de réflexion. Ce transducteur ultrasonique représente le précurseur des sonars modernes et illustre l'utilisation duale des matériaux piézoélectriques comme actionneurs et capteurs dans le même système.
De 1916 à 1950, la recherche a été focalisée sur le développement de nouveaux matériaux piézoélectriques et leur utilisation dans des nouvelles technologies avec des contributions intéressantes de Walter Cady qui a mis au point le premier oscillateur à quartz au début des années 1920 ouvrant ainsi la voie au contrôle de fréquence [78]. Durant cette période, la famille du KDP (phosphate monopotassique) a été découverte en 1940 et le premier matériau piézoélectrique à base de la céramique ferroélectrique $BaTiO_3$ (titanate de baryum) a été produit [78]. $BaTiO_3$ a été la première céramique ferroélectrique à être utilisée dans les applications piézoélectriques à la place des premiers matériaux naturels et a servi de précurseur au au titano-zirconate de plomb (PZT) et magnésium niobate de plomb (PMN) découverts dans les années 50 et qui sont actuellement parmi les composés ferroélectriques les plus utilisés grâce à leurs hautes constantes

[1] La pyroélectricité est le phénomène par lequel un changement de température entraîne une variation de la polarisation électrique d'un matériau

diélectriques et piézoélectriques, coût de fabrication relativement modéré et large gamme de température de fonctionnement [78].
Durant les années 60 et 70, la recherche a été focalisée sur le développement de nouvelles technologies utilisant les céramiques ferroélectriques $BaTiO_3$, PZT et PMN, et le développement de nouveaux composés piézoélectriques qui peuvent éliminer les limitations liées à la nature rigide des piézocéramiques. Ce dernier but a été atteint en 1969 lorsque Kawai a découvert que le polyfluorure de vinylidène (PVDF) présente des coefficients piézoélectriques presque 10 fois plus importants que ceux des polymères découverts auparavant [51]. Depuis sa découverte, le PVDF est largement utilisé dans les applications de type capteur et actionneur et il est jusqu'à présent le polymère piézoélectrique le plus utilisé [78].
Depuis les années 80, la recherche a concerné le développement de nouveaux matériaux et le développement des applications industrielles, biomédicales, aéronautiques et aérospatiales de haute performance à base de composés piézoélectriques et ferroélectriques. La recherche sur les matériaux a été focalisée sur le développement de matériaux monocristallins qui présentent des déformations de l'ordre de 1% tandis que la recherche extensive sur les polymères a conduit à la production des polyimides [69], polymères élastomériques [80], et les polymères biologiques [36]. Les applications utilisant l'effet piézoélectrique direct comprennent les allumeurs de gaz, les accéléromètres utilisant des disques de PZT qui jouent un rôle central dans les systèmes d'airbag, et les capteurs basés sur des films minces de PVDF. Les applications commerciales de type actionneur comprennent les têtes d'imprimantes matricielles, les mécanismes de fermeture des caméras, et la suspension à commande électrique de Toyota (TEMS : Toyota Electronic Modulated Suspension) produite en 1989 à base de céramiques de PZT pour augmenter l'absorption des chocs [78]. Les actionneurs piézoélectriques ont joué aussi un rôle important en nanotechnologie à commencer par leur utilisation comme éléments de positionnement dans les microscopes à effet tunnel (STM : Scanning Tunnelling Microscopes) en 1982 et les microscopes à force atomique (AFM : Atomic Force Microscopes) en 1985 et leur emploi jusqu'à présent essentiellement dans toutes les applications de nanopositionnement [78].

1.3 Les classes cristallines

L'existence de la piézoélectricité dans un cristal est liée aux symétries de la maille cristalline. En particulier, un cristal ne peut pas être piézoélectrique si sa maille possède un centre de symétrie (maille dite centrosymétrique : les centres de gravité des charges positives et négatives coïncident avec le centre de la maille élémentaire, Figure 1.4). De manière générale, nous pouvons classer les cristaux suivant leurs symétries en 230 groupes d'espace regroupés en *32 classes cristallines* [45]. Il existe 21 classes non centrosymétriques, dont 20 sont piézoélectriques. Parmi ces classes piézoélectriques, 10 possèdent une polarisation électrique spontanée et sont dites polaires. Ces derniers cristaux sont pyroélectriques car leur polarisation spontanée varie avec la température. Parmi ces cristaux pyroélectriques, certains sont dits ferroélectriques si leur

polarisation spontanée peut être inversée par un champ électrique extérieur.

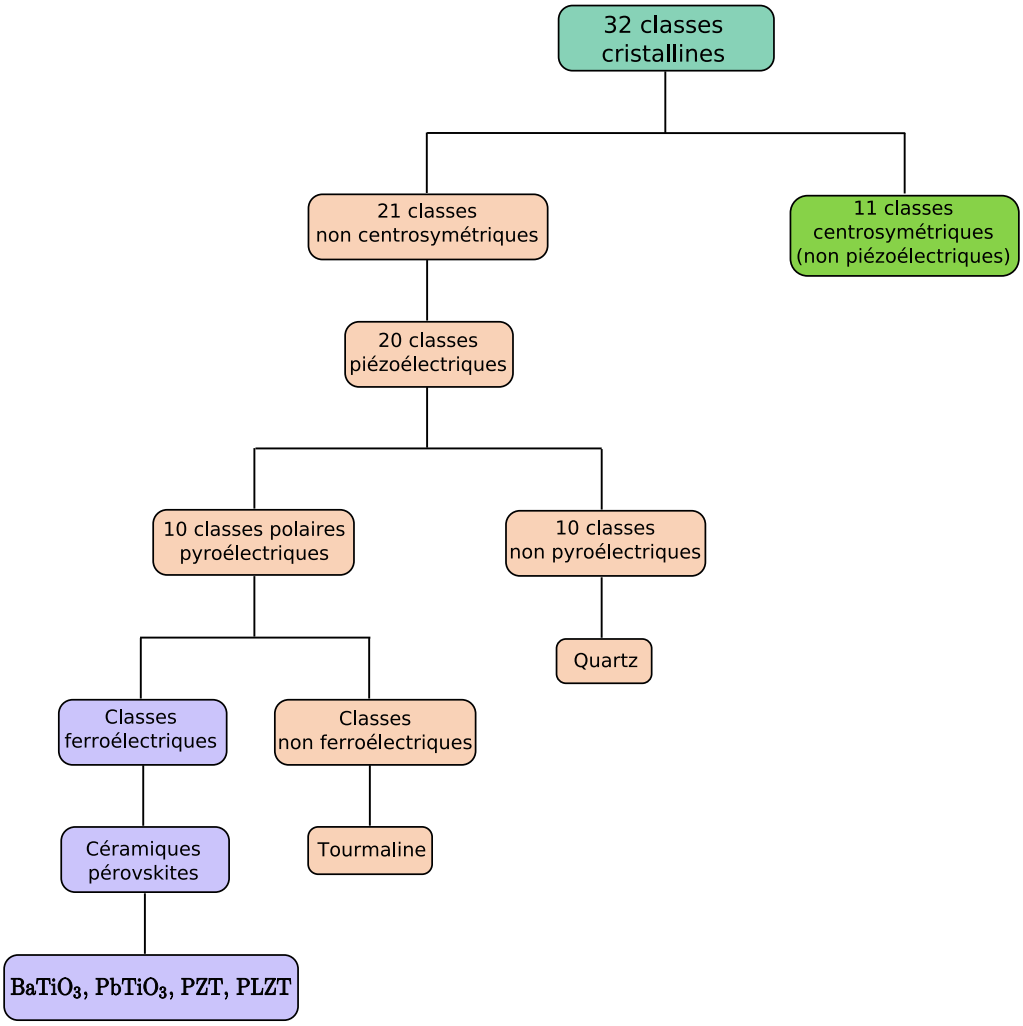


Fig. 1.3 : *Les classes cristallines.*

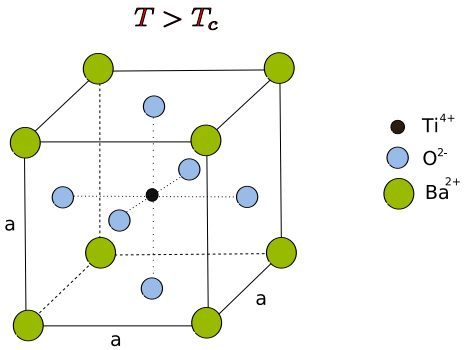


Fig. 1.4 : *Maille cubique centrosymétrique du $BaTiO_3$ pour une température supérieure à la température de Curie.*

Pour les cristaux polaires, qui sont caractérisés par une polarisation spontanée initiale, les effets piézoélectriques se manifestent quand le module de la polarisation électrique change. Pour les cristaux piézoélectriques non polaires, une polarisation électrique différente de zéro apparaît seulement en appliquant une charge mécanique. Dans ce cas, nous pouvons imaginer que la contrainte mécanique transforme ces cristaux d'une classe cristalline non polaire ($P = 0$) à une classe cristalline polaire ($P \neq 0$).

1.4 Applications

Les matériaux piézoélectriques sont largement considérés dans plusieurs applications en raison du fait qu'ils sont légers et compacts, peu coûteux, et présentent un comportement électromécanique relativement linéaire pour des chargements de faible amplitude. Grâce aux effets piézoélectriques direct et inverse, ces matériaux peuvent être utilisés dans les applications de type capteur et actionneur. Cependant, les actionneurs piézoélectriques sont parfois délaissés à cause des faibles déplacements qu'ils génèrent. Cette limitation est une conséquence directe du caractère rigide des céramiques ferroélectriques.
Dans cette section, nous présentons quelques applications à base de matériaux piézoélectriques.

1.4.1 Capteurs

Une force ou une pression exercées sur un matériau piézoélectrique génère des champs électriques et donc une tension électrique mesurable. Ceci constitue le principe de fonctionnement des capteurs piézoélectriques.

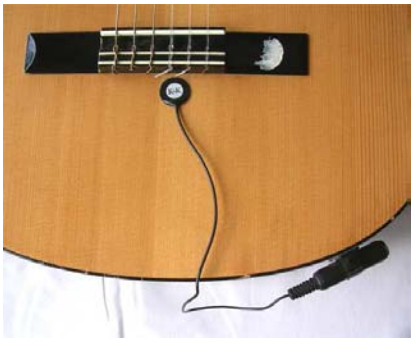


Fig. 1.5 : *Disque piézoélectrique utilisé comme un microphone de contact sur une guitare classique.*

Les matériaux piézoélectriques permettent de convertir des ondes acoustiques en signaux électriques comme dans le cas des microphones piézoélectriques où les ondes sonores fléchissent le matériau piézoélectrique créant un changement de la tension électrique (Figure 1.5).
Dans plusieurs techniques de détection, le capteur piézoélectrique peut avoir la fonction duale capteur/actionneur. Dans ce cas, il est préférable d'utiliser le terme *transducteur* piézoélectrique. Les transducteurs ultrasoniques piézoélectriques peuvent émettre des ondes ultrasonores dans le

corps, reçoivent les ondes fléchies, et les convertissent en signaux électriques. Ces transducteurs sont utilisés principalement dans l'imagerie médicale et les essais industriels non destructifs (NDT).

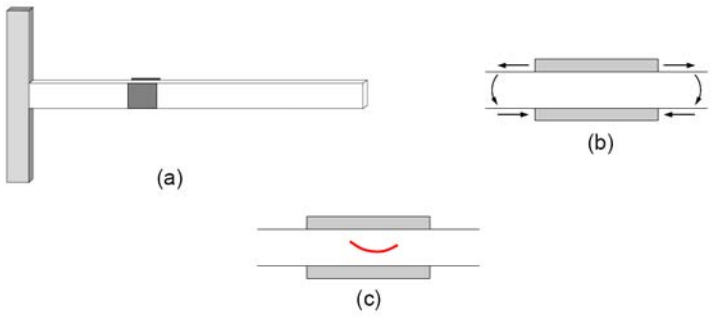


Fig. 1.6 : *(a) Poutre mince avec des patches piézoélectriques collés sur ses faces supérieure et inférieure. (b) Moment de flexion généré par l'application de deux tensions électriques opposés sur les patches. (c) Identification d'un dommage éventuel de la structure grâce au rôle dual de capteur/actionneur des transducteurs en PZT (d'après [78]).*

D'autres applications de type capteur comprennent aussi :

- le contrôle des structures (Figure 1.6(c)) ;
- les sonars utilisés dans la marine ;
- les microbalances piézoélectriques ;
- les capteurs de pression utilisés notamment dans l'automobile (pression des pneus), l'aéronautique (pression dans les tuyères) et les machines d'essai mécaniques (cellule de force), etc..

1.4.2 Actionneurs

Les actionneurs piézoélectriques directs, généralement constitués d'une seule couche piézoélectrique, sont caractérisés par un déplacement mécanique faible inférieur à 100 micromètres. Ceci est dû essentiellement à la nature rigide des céramiques ferroélectriques.
Pour amplifier le déplacement mécanique généré par les actionneurs piézoélectriques directs, des solutions de forme complexe ont été proposées ces dernières années. Parmi lesquelles des actionneurs de forme spirale (Figure 1.7) ayant une géométrie compacte proposées dans [71]. L'application d'un champ électrique radial permet d'avoir un déplacement tangentiel pouvant atteindre des valeurs de l'ordre de $700\mu\,m$ autour de la fréquence de résonance (Figure 1.7(b)). Des actionneurs de forme hélicoïdale (Figure 1.8) ont été proposés également dans [23]. La géométrie de l'actionneur hélicoïdal permet d'obtenir un déplacement rotationnel $\triangle l$ dans la direction de la circonférence et aussi un déplacement radial $\triangle R$ dans la direction radiale quand l'actionneur est soumis à un champ électrique radial. En utilisant un actionneur hélicoïdal de longueur totale $L = 45,76$ mm, de diamètre extérieur $D_{ext} = 4.09$ mm, d'épaisseur totale $h = 0.55$ mm, formé

de quatre tours et soumis à une différence de potentiel de 100 volts, il est montré dans [23] que les déplacements rotationnel et radial sont de 43 et 9 μ m, respectivement.

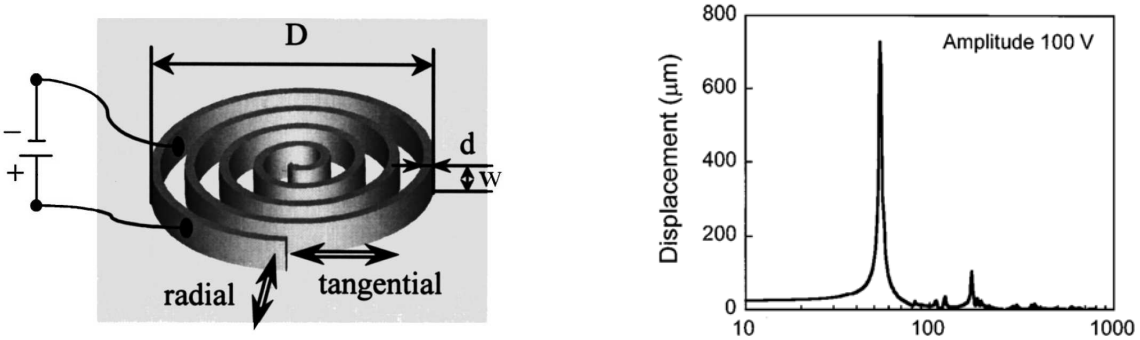


Fig. 1.7 : *(a) Actionneur de forme spirale (b) Réponse fréquentielle du déplacement tangentiel de l'actionneur spirale montrant un déplacement maximal de 700μm autour de la fréquence de résonance (d'après [71]).*

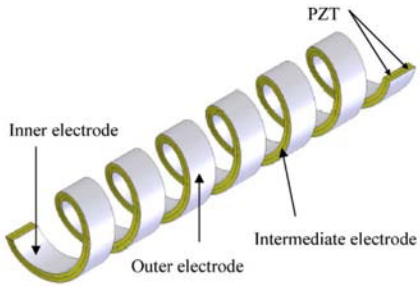


Fig. 1.8 : *Actionneur hélicoïdal (d'après [23]).*

Des actionneurs amplifiés, généralement constitués de plusieurs couches, ont été également proposés. L'actionneur bimorphe (Figure 1.9) est constitué par deux couches piézoélectriques dont l'une travaille en traction et l'autre en compression pour obtenir un déplacement transversal amplifié. L'actionneur multicouche (Figure 1.10) est utilisé aussi pour obtenir un déplacement mécanique proportionnel au nombre de couches utilisées. Il existe également des actionneurs piézoélectriques précontraints comme l'actionneur CRESCENT (Figure 1.11) introduit en 1997 par Chandran et al. dans [17]. La céramique piézoélectrique et les plaques métalliques sont collées ensemble, par un agent polymérique, à une haute température voisine de la température de Curie de la céramique piézoélectrique. La technologie de cet actionneur consiste à l'utilisation de la différence de contraction thermique entre la piézocéramique et les plaques métalliques quand l'ensemble est refroidi jusqu'à la température ambiante. Cette différence de propriétés thermiques induit des précontraintes et une structure courbée [17] ce qui permet d'augmenter considérablement le déplacement mécanique et la force de blocage de l'actionneur.
Aujourd'hui, les actionneurs piézoélectriques sont utilisés dans plusieurs domaines :

- dans les microscopes à sonde locale. Le microscope à force atomique et le microscope à effet tunnel emploient la piézoélectricité pour réaliser les petits déplacements nécessaires

au balayage de la surface sondée ;

- le contrôle de vibrations (la Figure 1.6 montre deux patches piézoélectriques collés sur une poutre mince et qui peuvent être utilisés pour contrôler la vibration de cette poutre) ;
- la commande de certains injecteurs en automobile est réalisée grâce à des actionneurs piézoélectriques. Cette technologie permet notamment de gagner en rapidité d'injection et en consommation. De même, certaines imprimantes à jet d'encre utilisent des actionneurs piézoélectriques pour produire les fines gouttelettes qui sont propulsées sur le papier ;
- dans les applications opto-acoustique : par micro-positionnement piézoélectrique de miroir, l'ajustement de la longueur de la cavité laser peut être piloté pour optimiser la longueur d'onde du faisceau ;
- etc..

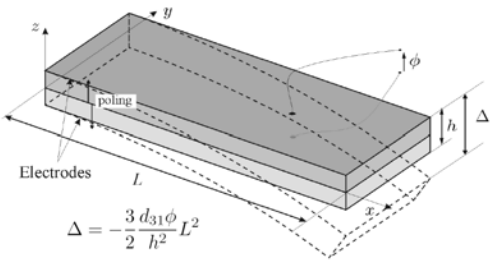


Fig. 1.9 : *Actionneur bimorphe.*

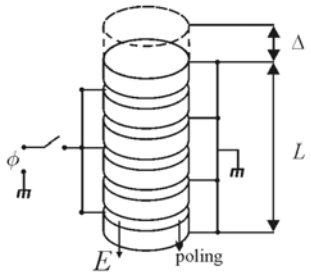


Fig. 1.10 : *Actionneur multicouche.*

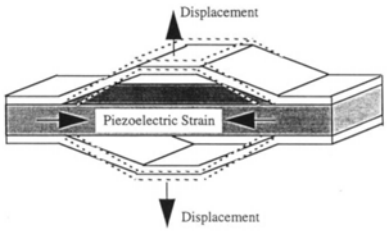


Fig. 1.11 : *Actionneur CRESCENT (d'après [17]).*

1.5 Les céramiques ferroélectriques

Les céramiques ferroélectriques constituent une sous-classe des matériaux piézoélectriques qui présentent, pour des températures inférieures à la température de Curie T_c, une *structure en domaines* et une *polarisation spontanée* qui peut être réorientée par un champ électrique. Comme détaillé dans la section 1.5.1, l'apparition de ces domaines ferroélectriques résulte de l'alignement des dipôles électriques pour minimiser les énergies électrostatique et élastique [78]. Les céramiques ferroélectriques polycristallines sont les plus utilisées actuellement dans les applications de type capteurs et actionneurs. En effet, leur technique de fabrication est bien maîtrisée et relativement plus facile que celle des monocristaux ferroélectriques. De plus, elles présentent des propriétés piézoélectriques et diélectriques intéressantes ce qui justifie leur large utilisation dans les applications actuelles.
Le Titanate de baryum ou le $BaTiO_3$ était la première céramique ferroélectrique à être commercialisée et à être utilisée dans les composants piézoélectriques. A cause de la simplicité de sa structure cristalline de type pérovskite, il représente un exemple idéal pour décrire l'apparition des domaines ferroélectriques et la réorientation ferroélectrique (par un champ électrique) et ferroélastique (par une contrainte mécanique) de ces domaines induisant des réponses fortement non linéaires. Dans les applications actuelles, le $BaTiO_3$ est largement dépassé par le Titano-Zirconate de Plomb (PZT) qui présente des propriétés piézoélectriques et diélectriques beaucoup plus intéressantes que le premier.
Pour présenter les effets piézoélectriques direct et inverse, les céramiques ferroélectriques doivent être polarisées par un champ électrique de forte intensité légèrement en dessous de T_c. Les effets piézoélectriques apparaissent si ces céramiques sont soumises à un chargement électromécanique de faible intensité autour de l'état polarisé. Ceci induit des réponses approximativement linéaires ce qui a motivé l'analyse linéaire de Voigt et les relations constitutives linéaires développées dans la section 1.6. Ces relations sont souvent connues par les *relations piézoélectriques* et les matériaux opérant dans les régimes linéaires réversibles sont fréquemment désignés par les matériaux piézoélectriques. Le terme *piézoélectrique* utilisé dans ce contexte a une connotation *linéaire* et fait référence aux effets piézoélectriques direct et inverse que présentent les matériaux ferroélectriques. En effet, comme expliqué dans [78], il existe bien des matériaux piézoélectriques comme le quartz qui ne sont pas ferroélectriques.

1.5.1 Propriétés physiques des céramiques ferroélectriques

Structure cristalline et transition de phase

Le Titanate de baryum ($BaTiO_3$) et le Titanate de Plomb ($PbTiO_3$) présentent la même structure pérovskite, de formule ABO_3, caractérisée par une forme cubique pour des températures supérieures à la température de Curie T_c, et une forme tétragonale, orthorhombique et rhombohédrale pour $T < T_c$ comme illustrée par la Figure 1.12 (cas du $BaTiO_3$). Bien que les températures de transition et la hiérarchie des formes soient différentes pour le $BaTiO_3$ et le

$PbTiO_3$, les mécanismes fondamentaux sont les mêmes et nous considérons les deux matériaux simultanément quand nous parlons des propriétés des composants pérovskites.

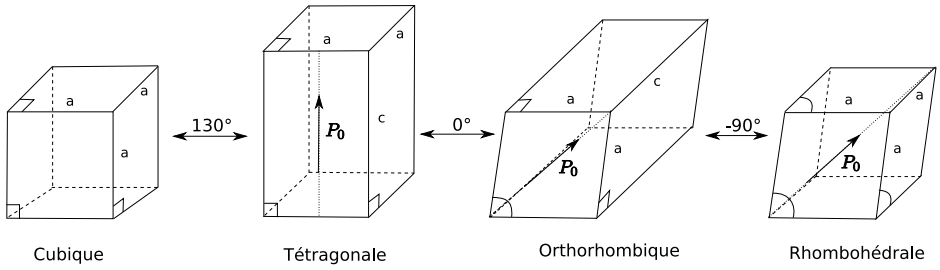


Fig. 1.12 : *Formes cubique, tétragonale, orthorhombique et rhombohédrale des composants pérovskites et températures de transition pour le $BaTiO_3$.*

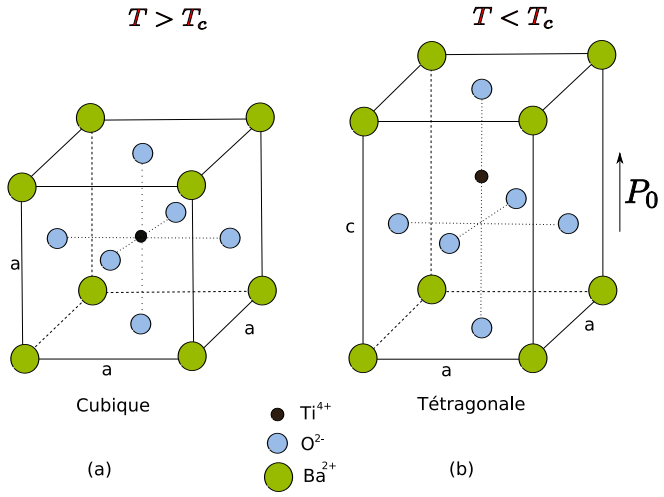


Fig. 1.13 : *La structure cristalline pérovskite du Titanate de baryum. (a) Maille cubique paraélectrique pour $T > T_c$. (b) Maille tétragonale ferroélectrique pour $T < T_c$.*

Une maille élémentaire de $BaTiO_3$ est montrée sur la Figure 1.13. Au dessus de la température de Curie (notée T_c), la structure cristalline est cubique centrosymétrique : les cations Ba^{2+} occupent les 8 coins de la maille élémentaire cubique, les anions O^{2-} sont localisés aux centres des faces de la maille et le cation Ti^{4+} se trouve au centre de la maille (Figure 1.13(a)). Cet état cubique qui ne présente pas de polarisation spontanée, puisque les charges positives et négatives ont le même centre de gravité, s'appelle la phase *paraélectrique*. La transition de phase se produit quand la température devient inférieure à la température de Curie (Figure 1.13(b)). En dessous de T_c, la maille élementaire est légèrement déformée avec un dépalcement relatif des cations Ba^{2+} et Ti^{4+} par rapport à l'anion O^{2-}. Par conséquent, la symétrie diminue et la maille élémentaire devient tétragonale. Le changement de forme de la maille élémentaire conduit à une déformation spontannée (ε_0) relative à la phase cubique paraélectrique ($\varepsilon_0 = \frac{c-a}{a} \approx 1\%$ pour le $BaTiO_3$ [78]) et l'apparition d'une polarisation spontanée (P_0) puisque les centres de gravité des charges

positives et négatives ne coincident plus avec le centre de la maille élementaire. La nouvelle phase correspondant à la forme tétragonale de la structure cristalline s'appelle la phase *ferroélectrique*. Au cours du refroidissement ($T < T_c$), le centre de chaque maille élémentaire pérovskite (cation B^{4+}) peut se déplacer aléatoirement suivant les trois directions de l'espace ce qui conduit à l'apparition de six variantes de polarisation dans la céramique polycristalline comme illustré par la Figure 1.14.

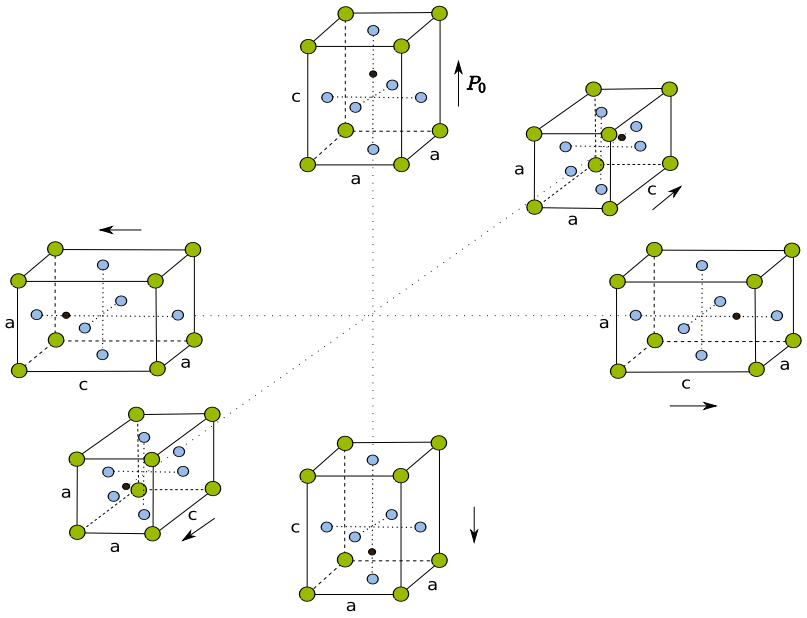


Fig. 1.14 : *Les six positions possibles du cation B^{4+} pour une maille tétragonale créant six variantes de polarisation spontanée.*

Les domaines ferroélectriques

Dans une céramique ferroélectrique, les mailles élémentaires qui ont la même polarisation spontanée forment un *domaine ferroélectrique*. Ces domaines sont délimités par des frontières appelées les *murs de domaines*. Pour une structure tétragonale (Figure 1.15), les murs de domaines à 90° séparent les domaines ayant des polarisations spontanées perpendiculaires alors que les murs de domaines à 180° limitent des domaines adjacents qui ont des polarisations spontanées opposées. Les domaines ferroélectriques à 180° et 90°, qui apparaissent dans une structure tétragonale, sont généralement formés pour minimiser l'énergie électrostatique des champs électriques dépolarisants qui résultent de la polarisation spontanée [78, 25] (Figure 1.16). De plus, la formation des murs de domaines à 90° peut être liée aussi à la minimisation de l'énérgie élastique associée à l'apparition des déformations spontanées dans les mailles élémentaires quand la céramique est refroidie en dessous de la température de Curie [25].
Il existe d'autres types de domaines qui peuvent apparaître dans une céramique ferroélectrique suivant les formes des phases paraélectrique et ferroélectrique qui dépendent directement de la

température. Pour une phase ferroélectrique avec une structure rhombohédrale (Figure 1.12), la polarisation spontanée apparaît suivant les diagonales de la maille élémentaire (direction [111]). Ceci entraîne l'apparition de huit variantes de polarisation spontanée avec des murs de domaines à 180°, 71° and 109° comme expliqué dans [38].

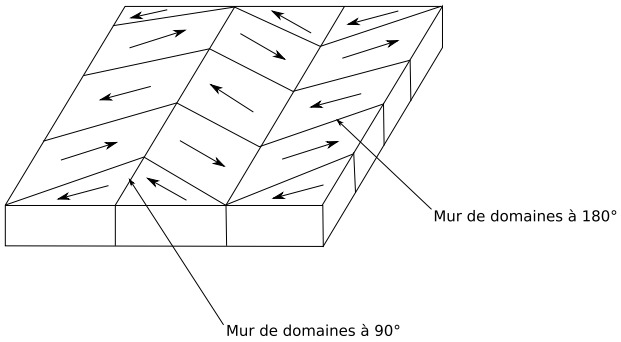


Fig. 1.15 : *Structure en domaines de $BaTiO_3$.*

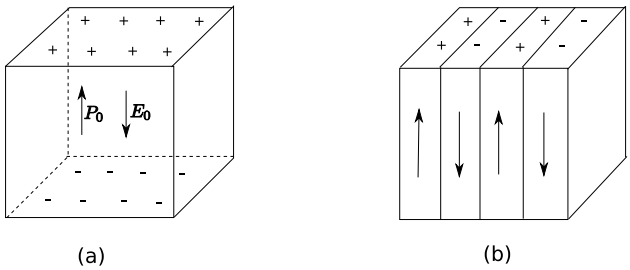


Fig. 1.16 : *(a) Surface de charge associée à la polarisation spontanée et apparition d'un champ électrique dépolarisant E_0. (b) Domaines à 180° formés pour minimiser l'énergie électrostatique [78].*

Les effets piézoélectriques direct et inverse

L'effet piézoélectrique *inverse* constitue le domaine de déformations linéaires et réversibles générés dans les matériaux ferroélectriques en réponse à un chargement électrique de faible amplitude. Comme illustrée sur une maille élémentaire de $BaTiO_3$ par la Figure 1.17(b), ces déformations sont dues aux changements au niveau de la structure ionique qui par conséquent, déforment le matériau [78]. L'effet piézoélectrique *direct* désigne, quant à lui, le phénomène inverse pour lequel une contrainte mécanique de faible intensité produit des changements au niveau de la polarisation. Les changements de polarisation produits par deux contraintes de traction sont montrés sur les Figures 1.17(c) et (d). Ces deux effets piézoélectriques constituent les mécanismes électromécaniques *linéaires* et *réversibles* qui se passent bien avant les réorientations ferroélectrique et ferroélastique.

Comme détaillé dans la section 1.6, où le modèle linéaire quantifiant ces deux effets réversibles est développé, les coefficients d_{nij} quantifient le couplage électromécanique entre la contrainte

mécanique ou le champ électrique et les changements générés dans la structure cristallographique. En général, d est un tenseur d'ordre 3 ($\underline{\underline{d}}$), mais pour la géométrie spécifique de la Figure 1.17, il peut être réduit à la forme d_{nm} où n et m désignent la direction de la polarisation et la direction du chargement, respectivement. L'application d'une contrainte de traction σ_3 parallèle à la direction de polarisation entraîne une augmentation de la polarisation spontanée tandis que, l'application d'une contrainte perpendiculaire à la direction de polarisation diminue P_0.

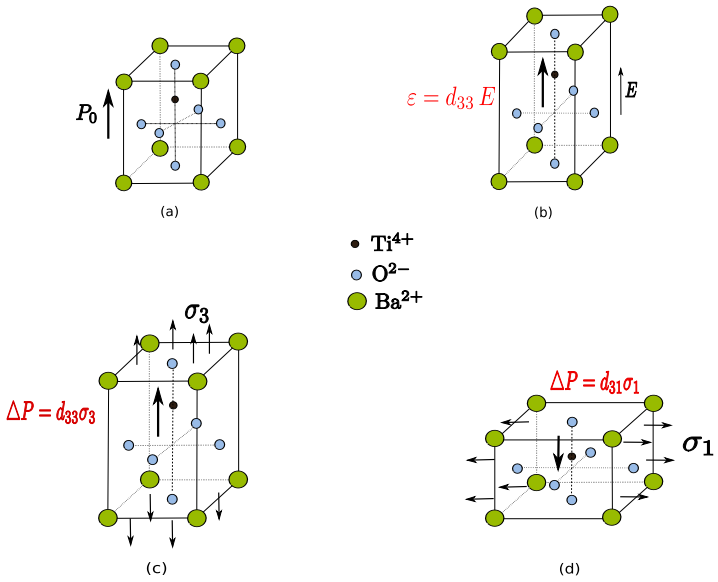


Fig. 1.17 : *(a) Forme tétragonale d'une maille élémentaire de $BaTiO_3$ et l'apparition de la polarisation spontanée P_0. (b) Effet piézoélectrique inverse $\varepsilon = d_{33}E$. (c) Effets piézoélectriques directs $\triangle P = d_{33}\sigma_3$, et (d) $\triangle P = d_{31}\sigma_1$.*

Le Titano-Zirconate de Plomb

Le Titano-Zirconate de Plomb de formule Pb(Zr,Ti)O_3 est la classe de piézocéramiques la plus utilisée actuellement. Ces composants sont formés par le $PbTi_{(1-x)}O_3$ et le $PbZr_{(x)}O_3$ où la fraction molaire x du Zirconium est choisie pour optimiser les propriétés matérielles et surtout le couplage électromécanique. Le cas limite du $PbTiO_3$ possède une structure tétragonale similaire au $BaTiO_3$ pour $T < T_c$ alors que le $PbZrO_3$ est orthorhombique en dessous de la température de Curie.

Un diagramme de phase typique, illustrant le lieu des points de Curie qui délimite la transition de phase paraélectrique-ferroélectrique et la limite de phase morphotropique entre les structures tétragonale et rhombohédrale, est montré sur la Figure 1.18(a). Comme détaillé dans [26] et illustré par la Figure 1.18(b), un couplage électromécanique important est obtenu près de la limite de la phase morphotropique ($x \approx 0.5$). Cette constatation a motivé l'utilisation du PZT à la place du $PbTiO_3$ dans les applications utilisant des transducteurs de haute performance [78]. D'autre part, suivant la valeur prise par la fraction molaire x, le point de Curie peut passer de

240°C à 480°C augmentant ainsi les températures de fonctionnement des céramiques PZT par rapport au $BaTiO_3$.

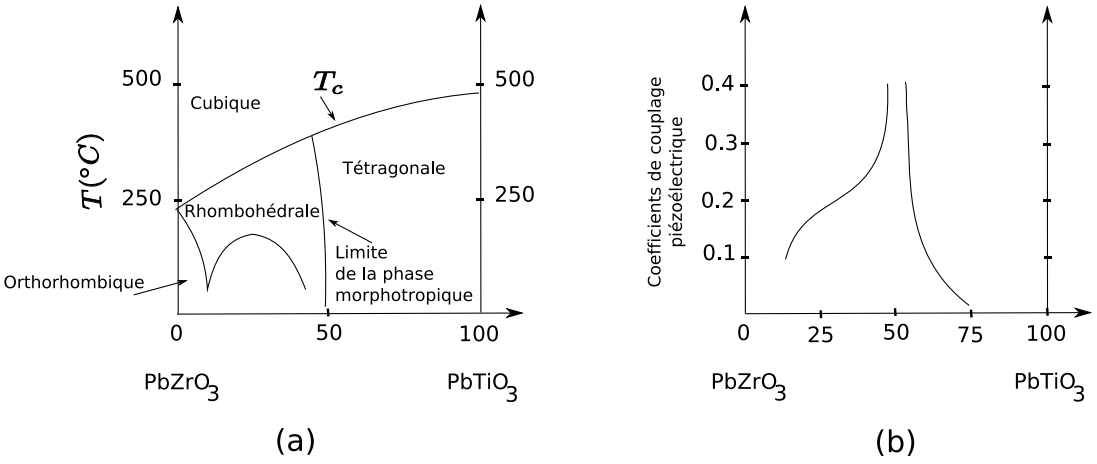


Fig. 1.18 : *(a) Diagramme de phase du PZT illustrant la dépendance du point de Curie T_c vis à vis de la fraction molaire x du Zirconium et la limite de phase morphotropique séparant les structures tétragonale et rhombohédrale. (b) Dépendance des coefficients de couplage piézoélectriques vis à vis de la fraction molaire x, [46].*

1.5.2 Polarisation des céramiques ferroélectriques

Les céramiques ferroélectriques sont généralement polycristallines constituées par des grains et des joints de grain (Figure 1.19). Chaque grain peut être considéré comme un monocristal divisé en plusieurs domaines ferroélectriques possèdant chacun une polarisation et une déformation spontanées (Figure 1.20(a)). Cette céramique polycristalline non polarisée présente une polarisation macroscopique nulle à cause de l'orientation aléatoire des grains et des domaines et donc elle ne présente pas des propriétés piézoélectriques. Par contre, elle peut être polarisée en appliquant un champ électrique de forte amplitude supérieure au champ électrique coercitif E_c pour des températures élevées légèrement inférieures à la température de Curie [78] (Figure 1.20(b)).

Fig. 1.19 : *Microstructure en domaines dans une céramique polycristalline : cas du $BaTiO_3$ [27].*

Ce processus de polarisation ne modifie pas l'orientation cristallographique des grains de la céramique et réoriente uniquement les domaines ferroélectriques à l'intérieur des grains dans la direction du champ électrique appliqué. Durant le processus de polarisation, la céramique s'allonge suivant la direction du champ électrique et se rétrécit suivant les directions perpendiculaires au champ électrique (conservation du volume). La polarisation et la déformation macroscopiques observées après la suppression du champ électrique sont appelées la polarisation rémanente (P^r) et la déformation rémanente (ε^r), respectivement (Figure 1.20(c)). La polarisation rémanente d'une céramique ferroélectrique est toujours inférieure à la polarisation spontanée d'un seul domaine ferroélectrique. Ceci est dû au fait que les domaines ne peuvent être orientés que suivant quelques directions cristallographiques et que quelques domaines ferroélectriques vont revenir à leur état initial après la suppression du champ électrique à cause des contraintes mécaniques internes [25].

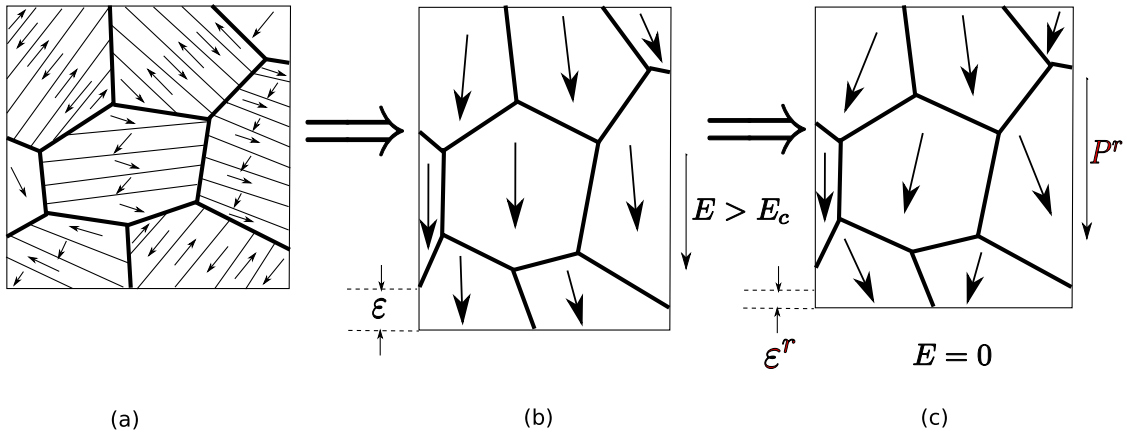


Fig. 1.20 : *Processus de polarisation d'une céramique ferroélectrique. (a) Polycristal ferroélectrique formé par des grains contenant des domaines ferroélectriques. (b) Polarisation de la céramique en appliquant un champ électrique dont l'amplitude est supérieure au champ coercitif E_c. (d) Apparition d'une polarisation et une déformation rémanentes macroscopiques après suppression du champ électrique.*

Le processus de polarisation d'une céramique ferroélectrique polycristalline produit une céramique qui agit comme un monocristal à un seul domaine ferroélectrique possédant des propriétés ferroélectriques et piézoélectriques. Cette méthode de polarisation a été découverte pour la première fois en 1945 par Gray [38], et a été considérée comme l'une des découvertes surprenantes de l'histoire de la piézoélectricité car ce processus permet d'obtenir un matériau présentant un couplage électromécanique actif à partir d'une céramique inerte.

1.5.3 Comportements ferroélectrique et ferroélastique

Les domaines qui apparaissent dans une céramique ferroélectrique polycristalline peuvent être réorientés par un champ électrique (comportement ferroélectrique) ou bien par un chargement mécanique (comportement ferroélastique) d'amplitudes suffisantes. La conséquence directe

de cette réorientation des domaines (*domain switching*) dans les matériaux ferroélectriques est l'apparition des hystérésis et des réponses non linéaires entre les variables d'entrée, qui sont le champ électrique E et la contrainte mécanique σ, et les variables de sortie, qui sont la polarisation électrique P et la déformation mécanique ε. Pourtant influencées par un grand nombre de mécanismes [78], les réponses hystérétiques sont directement associées à la structure non centrosymétrique des céramiques ferroélectriques et elles sont observées, en général, *à tous les niveaux de chargement* [78] ce qui nécessite la modélisation des comportements non linéaires de ces céramiques.

Réorientation ferroélectrique des domaines

La réorientation des domaines induite par un champ électrique de forte intensité est appelée : réorientation *ferroélectrique* des domaines. Comme illustré par la Figure 1.21, des réorientations de 180° et 90° d'un domaine ferroélectrique ayant une structure tétragonale peuvent être induites par un champ électrique d'intensité supérieure à E_c [47].

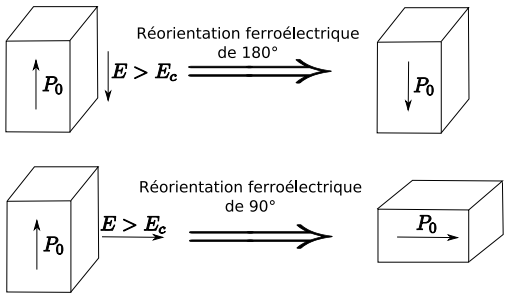


Fig. 1.21 : *Réorientations ferroélectriques des domaines de* 180° *et* 90° *induites par un champ électrique supérieur au champ coercitif.*

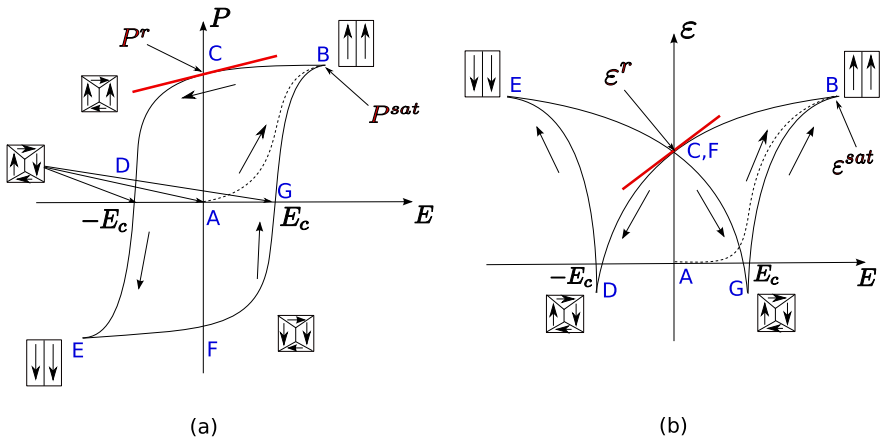


Fig. 1.22 : *(a) Hystérésis diélectrique et approximation linéaire (segment centré en C). (b) Hystérésis en ailes de papillon et approximation linéaire (segment centré en C et F).*

La réorientation ferroélectrique de la polarisation électrique donne lieu à une boucle d'hystérésis entre la polarisation et le champ électrique. Une boucle $P-E$ typique d'une céramique de PLZT (Titano-Zirconate de Plomb modifié au Lanthane) est montrée sur la Figure 1.22(a) [41]. En plus de l'hystérésis diélectrique $P-E$, la réorientation ferroélectrique des domaines entraîne une relation non linéaire entre la déformation mécanique et le champ électrique. Une réponse $\varepsilon - E$ typique (celle du PLZT) est montrée sur la Figure 1.22(b). Sa forme ressemble beaucoup à deux ailes de papillon et par conséquent, cette hystérésis est souvent connue sous le nom de *"butterfly" ferroélectrique* ou bien *hystérésis en ailles de papillon.*

Les points A, B, C, D, E, F et G qui apparaissent sur les deux hystérésis de la Figure 1.22 représentent les états des domaines ferroélectriques au sein, par exemple, d'un grain d'une céramique ferroélectrique soumise à un cycle de chargement électrique.

A l'état initial (point A), les domaines ferroélectriques sont distribués aléatoirement dans la céramique entraînant ainsi une polarisation et une déformation macroscopiques nulles. En appliquant un champ électrique positif de faible amplitude, la céramique présente un comportement diélectrique linéaire réversible au voisinage du point A (Figure 1.22(a)).

Une augmentation importante du champ électrique permet de réorienter les domaines ferroélectriques suivant les directions crystallographiquement proches de la direction du champ électrique. Par conséquent, la polarisation macroscopique augmente rapidement, à cause de l'alignement graduel des domaines avec la direction du chargement électrique, et la déformation macroscopique augmente à cause du couplage électromécanique inverse. Ainsi, les courbes $P - E$ et $\varepsilon - E$ deviennent fortement non linéaires. Une fois que tous les domaines ferroélectriques sont alignés avec la direction du champ électrique, la polarisation et la déformation macroscopiques atteignent deux valeurs maximales appelées : la polarisation de saturation P^{sat} et la déformation de saturation ε^{sat}, respectivement (point B). Au delà de ce point, les changements de polarisation et de déformation se font d'une manière linéaire réversible. En effet, nous avons de nouveau une réponse $P - E$ diélectrique linéaire et un comportement piézoélectrique linéaire inverse entre E et ε.

Quand l'amplitude du champ électrique diminue, quelques domaines ferroélectriques reviendront à leurs états de polarisation initiaux entraînant une diminution de la polarisation et la déformation macroscopiques. Quand le champ électrique s'annule ($E = 0$), la structure polarisée de la céramique est conservée (point C) et le matériau possède une polarisation rémanente P^r et une déformation rémanente ε^r. L'application d'un champ électrique de faible intensité au voisinage du point C produit des changements réversibles et approximativement linéaires de la polarisation et de la déformation. Par conséquent, les équations piézoélectriques linéaires que nous développerons dans la section suivante sont applicables pour ce type de chargement.

Pour atteindre une polarisation macroscopique nulle, le champ électrique doit être inversé (point D). Cet état correspond de nouveau à une distribution aléatoire de la polarisation spontanée d'où une polarisation macroscopique nulle. De plus, la déformation macroscopique atteint son minimum au point D car l'effet piézoélectrique inverse global est supprimé à cause de l'orienta-

tion aléatoire des domaines ferroélectriques.
Une augmentation supplémentaire du champ électrique dans le sens négatif entraîne un nouvel alignement des dipôles électriques dans le sens et la direction du chargement. Par conséquent, une polarisation macroscopique apparaît de nouveau et la céramique s'allonge macroscopiquement suivant la direction du chargement à cause du couplage électromécanique inverse.
Quand tous les domaines sont alignés suivant la direction du champ électrique, la polarisation et la déformation macroscopiques atteignent de nouveau les valeurs caractéristiques de saturation au point E ($P = -P^{sat}$ et $\varepsilon = \varepsilon^{sat}$). Si nous augmentons le champ électrique (dans le sens négatif), les réponses $P - E$ et $\varepsilon - E$ redeviennent linéaires réversibles.
Enfin, le champ électrique est mis à zéro (point F) et son sens est inversé pour compléter le cycle d'hystérésis.
Le champ électrique nécessaire pour annuler la polarisation macroscopique est appelé le champ électrique coercitif et noté E_c (points D et G de la Figure 1.22(a)). Pour la plupart des céramiques et des monocristaux ferroélectriques, E_c est de l'ordre de 0.1 à 10 MV/m [25]. Un hystérésis ferroélectrique idéal est symétrique : les champs électriques coercitifs positif et négatif et les polarisations rémanentes positive et négative sont égaux (en module). D'autre part, le champ électrique coercitif, la polarisation rémanente et la forme de l'hystérésis peuvent être affectés par plusieurs facteurs comme l'épaisseur de l'échantillon, la présence des contraintes mécaniques, les conditions de préparation des céramiques et le traitement thermique [25].

Réorientation ferroélastique des domaines

La réorientation des domaines ferroélectriques peut être induite aussi par un chargement mécanique. Il s'agit de la réorientation *ferroélastique*. Pour un domaine ferroélectrique ayant une structure tétragonale, l'application d'une contrainte mécanique de compression, d'amplitude supérieure à une limite appelée la contrainte coercitive et notée σ_c, change la direction de la polarisation spontanée P_0 de 90° (Figure 1.23). Par conséquent, la ferroélasticité ne fait intervenir qu'une réorientation des domaines d'un angle différent de 180° (90° pour une structure tétragonale).

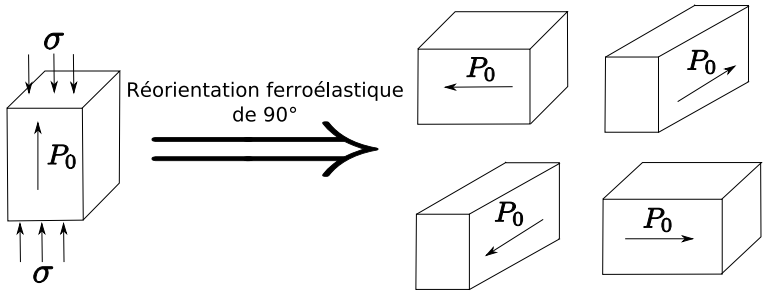


Fig. 1.23 : *Réorientation ferroélastique des domaines de* 90° *induite par un chargement mécanique de compression d'amplitude supérieure à* σ_c

La réorientation ferroélastique des domaines entraîne une relation non linéaire entre la contrainte et la déformation mécaniques et une hystérésis typique $\sigma - \varepsilon$ d'une céramique polarisée (cas du PLZT [78, 41]) soumise à un chargement de compression est montrée sur la Figure 1.24(a). La ferroélasticité induit aussi, pour les céramiques polarisées, une diminution de la polarisation rémanente et une réponse $\sigma - P$ fortement non linéaire à cause du couplage électromécanique direct. Une hystérésis typique $\sigma - P$ (cas du PLZT) est montrée sur la Figure 1.24(b).
Les points A, B et C (Figure 1.24) représentent les états des domaines ferroélectriques au sein d'un grain de la céramique. Au point A, la céramique est initialement polarisée en appliquant auparavant un champ électrique de forte intensité qui aligne tous les domaines ferroélectriques suivant la direction du chargement électrique. Par conséquent, la céramique possède une polarisation (P^r) et une déformation (ε^r) rémanentes macroscopiques après la suppression du champ électrique.

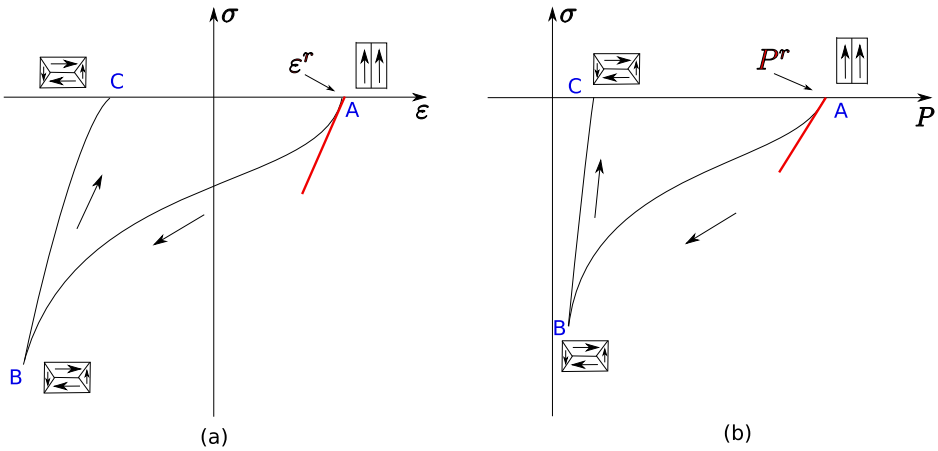


Fig. 1.24 : *Hystérésis (a) $\sigma - \varepsilon$ et (b) $\sigma - P$ d'une céramique ferroélectrique polarisée ($P = P^r$ et $\varepsilon = \varepsilon^r$) soumise à une contrainte mécanique de compression*

L'application d'une contrainte de compression de faible intensité cause un changement linéaire réversible de la polarisation (effet piézoélectrique direct) et la relation $\sigma - \varepsilon$ est approximativement linéaire élastique. Quand le chargement mécanique atteint une limite, appelée la *contrainte coercitive* et notée σ_c, la réorientation ferroélastique des domaines commence. La distribution de la polarisation spontanée devient graduellement aléatoire suivant un plan perpendiculaire à la direction de chargement mécanique (réorientation de 90° dans ce cas). Les diminutions de la polarisation et de la déformation macroscopiques se font d'une manière fortement non linéaire. Ce processus est souvent appelé la *dépolarisation mécanique* [47] puisque la contrainte mécanique de compression diminue la polarisation rémanente de la céramique. Au point B, la réorientation ferroélastique des domaines est terminée. La déformation rémanente atteint la valeur maximale de saturation $-\varepsilon^{sat}$ et la polarisation rémanente dans la direction initiale est pratiquement nulle puisque la plupart des domaines ferroélectriques sont orientés perpendiculairement à la direction de compression d'une façon aléatoire. Au delà du point B, la relation $\sigma - \varepsilon$ redevient approxi-

mativement linéaire élastique et la polarisation électrique devient indépendante de la contrainte mécanique ($\triangle\sigma \neq 0$ et $\triangle P = 0$) puisque la polarisation rémanente est nulle.
En déchargeant la céramique (point C), une déformation rémanente négative et une polarisation rémanente pratiquement nulle persistent. La pente de retour de la courbe $\sigma - P$ est pratiquement verticale car, macroscopiquement, la céramique ne présente plus d'effet piézoélectrique direct.

1.6 Modélisation du comportement piézoélectrique linéaire

Considérons une céramique ferroélectrique polarisée ($P = P^r$ et $\varepsilon = \varepsilon^r$). Si cette céramique est soumise à un chargement électromécanique de faible intensité, son état peut être décrit par des lois constitutives *piézoélectriques* linéaires (segments de droite centrés en C, Figure 1.22, et centrés en A, Figure 1.24). Un modèle piézoélectrique linéaire reliant la polarisation électrique et la déformation mécanique au champ électrique et à la contrainte mécanique a été développé par Voigt en 1910 [84]. Ce modèle linéaire est jusqu'à présent largement utilisé pour dimensionner les applications utilisant les matériaux piézoélectriques soumises à des chargements électromécaniques de faible intensité (au voisinage de la déformation et de la polarisation rémanentes).

1.6.1 Relations piézoélectriques linéaires

Un matériau piézoélectrique est un diélectrique qui présente un couplage électromécanique. En l'absence d'un champ électrique, la polarisation électrique induite par une contrainte mécanique σ est :

$$P = d^E \, \sigma \tag{1.1}$$

où d^E est un coefficient de charge piézoélectrique mesuré sous un champ électrique constant. Dans le cas général, P est un vecteur lié au tenseur des contraintes mécaniques $\underline{\underline{\sigma}}$ via un tenseur piézoélectrique d'ordre 3 :

$$P_n = d^E_{nij} \sigma_{ij} \tag{1.2}$$

où la convention de sommation d'Einstein, qui consiste à sommer automatiquement les termes avec des indices répétés, a été adoptée. $\underline{\underline{\underline{d}}}^E$ est un tenseur d'ordre 3 et comporte ainsi 27 coefficients de couplage.
L'application d'un champ électrique $\underline{E}$ (V/m) sur un diélectrique le polarise en séparant les charges positives des charges négatives. Une manifestation macroscopique de la séparation des charges est l'apparition d'une polarisation électrique $\underline{P}$ (C/m^2). Pour des chargements de faible amplitude, $\underline{P}$ est liée à $\underline{E}$ par la relation de polarisabilité linéaire suivante :

$$P_i = \chi^\sigma_{ij} E_j \tag{1.3}$$

où χ^σ_{ij}(F/m) sont les composantes du tenseur de susceptibilité électrique d'ordre 2 [45] mesurées sous une contrainte mécanique constante. Dans le modèle linéaire de Voigt, il est considéré le

vecteur déplacement électrique (appelée aussi induction électrique) $\underline{D}$ (C/m^2) à la place de la polarisation électrique $\underline{P}$. Comme montré dans [45, 25], l'induction électrique est liée au champ électrique par la relation linéaire suivante :

$$D_i = \epsilon_0 E_i + P_i = \underbrace{\left(\epsilon_0 \delta_{ij} + \chi_{ij}^{\sigma}\right)}_{\epsilon_{ij}^{\sigma}} E_j = \epsilon_{ij}^{\sigma} E_j \tag{1.4}$$

où ϵ_0 est la permittivité diélectrique du vide ($\epsilon_0 = 8.854 \times 10^{-12}$ F/m) et $\underline{\underline{\epsilon}}^{\sigma}$ est le tenseur de permittivité diélectrique du matériau mesuré sous une contrainte mécanique constante. Pour la plupart des céramiques ferroélectriques, le terme $\epsilon_0 \underline{\underline{\delta}}$ est négligeable devant $\underline{\underline{\chi}}$ [25] et par conséquent, $\underline{D} \approx \underline{P}$ et $\underline{\underline{\epsilon}} \approx \underline{\underline{\chi}}$. Ainsi, nous ne faisons pas la distinction entre la polarisation et l'induction électriques lors de l'étude des céramiques ferroélectriques. De plus, le tenseur de permittivité diélectrique $\underline{\underline{\epsilon}}$ est souvent considéré dans la bibliographie [50, 48, 32, 30], donc nous le considérons dans la suite pour décrire le comportement diélectrique.
La combinaison des Équations (1.2) et (1.3) donne la relation linéaire suivante (en considérant le vecteur déplacement électrique) pour décrire l'effet piézoélectrique direct :

$$D_n = d_{nij}^{E} \sigma_{ij} + \epsilon_{nm}^{\sigma} E_m \tag{1.5}$$

En l'absence d'un champ électrique, la relation entre le tenseur des déformations et le tenseur des contraintes mécaniques, pour des chargements de faible amplitude, est donnée par la loi de Hooke (ou bien dans ce cas sa réciproque) :

$$\varepsilon_{ij} = S_{ijkl}^{E} \sigma_{kl} \tag{1.6}$$

où $\underline{\underline{\underline{S}}}^{E}$ est le tenseur de souplesse d'ordre 4 mesuré sous un champ électrique constant.
Les matériaux piézoélectriques se déforment quand ils sont soumis à un champ électrique. En l'absence d'une contrainte mécanique, la relation entre $\underline{\underline{\varepsilon}}$ et $\underline{E}$ est donnée par :

$$\varepsilon_{ij} = d_{nij}^{\sigma} E_n \tag{1.7}$$

La combinaison des Équations (1.6) et (1.7) permet d'écrire l'équation linéaire qui décrit l'effet piézoélectrique inverse :

$$\varepsilon_{ij} = S_{ijkl}^{E} \sigma_{kl} + d_{nij}^{\sigma} E_n \tag{1.8}$$

L'équivalence des coefficients piézoélectriques d_{ijk} : $d_{ijk}^{E} \equiv d_{ijk}^{\sigma}$ dans les effets piézoélectriques direct et inverse est une conséquence directe de l'analyse thermodynamique que nous développerons dans la section 1.6.2.

Notation matricielle

Le nombre de coefficients indépendants des tenseurs $\underline{\underline{\underline{S^E}}}$, $\underline{\underline{\underline{d}}}$ et $\underline{\underline{\epsilon^\sigma}}$ peut être réduit significativement en considérant les symétries élastiques et électriques (qui apparaissent en fonction de la polarisation électrique). Pour les matériaux élastiques linéaires, les tenseurs des contraintes et des déformations mécaniques sont symétriques : $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$ et $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji}$. La symétrie de la contrainte et de la déformation implique que d_{kij} est symétrique en i et j ce qui réduit le nombre de coefficients indépendants de $\underline{\underline{\underline{d}}}$ à 18.
Pour formuler le système en notation matricielle, la convention dite de Voigt, pour laquelle les indices ij sont remplacés par un seul indice m, est considérée :

$$\begin{array}{cccccccc} ij & 11 & 22 & 33 & 12,21 & 13,31 & 23,32 & \text{Tenseur} \\ m & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & \text{Matrice} \end{array} \tag{1.9}$$

Nous considérons le vecteur des contraintes mécaniques $\underline{\sigma}$ défini à partir du tenseur des contraintes $\underline{\underline{\sigma}}$ par :

$$\{\sigma\} = \{\sigma_1 = \sigma_{11} \vdots \sigma_2 = \sigma_{22} \vdots \sigma_3 = \sigma_{33} \vdots \sigma_4 = \sigma_{12} \vdots \sigma_5 = \sigma_{13} \vdots \sigma_6 = \sigma_{23}\}^T \tag{1.10}$$

et le vecteur des déformations mécaniques $\underline{\varepsilon}$ défini à partir du tenseur des déformations $\underline{\underline{\varepsilon}}$ par :

$$\{\varepsilon\} = \{\varepsilon_1 = \varepsilon_{11} \vdots \varepsilon_2 = \varepsilon_{22} \vdots \varepsilon_3 = \varepsilon_{33} \vdots \varepsilon_4 = 2\,\varepsilon_{12} \vdots \varepsilon_5 = 2\,\varepsilon_{13} \vdots \varepsilon_6 = 2\,\varepsilon_{23}\}^T \tag{1.11}$$

En utilisant la convention de Voigt, les coefficients piézoélectriques d_{nij} peuvent être écrits sous cette forme [78] :

$$d_{nii} = d_{ni} \quad ; \quad d_{n12} = \frac{1}{2} d_{n4} \quad ; \quad d_{n13} = \frac{1}{2} d_{n5} \quad ; \quad d_{n23} = \frac{1}{2} d_{n6} \tag{1.12}$$

où le facteur $1/2$ est utilisé pour accommoder la symétrie de $\underline{\underline{\underline{d}}}$ en i et j. En considérant un système de coordonnées orthogonales (x_1, x_2, x_3) et un matériau piézoélectrique polarisé suivant la direction x_3, il est montré dans [62] que tous les coefficients piézoélectriques sont nuls sauf $d_{31} = d_{32}$, d_{33} et $d_{15} = d_{26}$. Dans ce cas, les relations de comportement (1.5) et (1.8) peuvent être réécrites sous cette forme matricielle :

$$\left\{\begin{array}{c} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \varepsilon_4 \\ \varepsilon_5 \\ \varepsilon_6 \\ \hline D_1 \\ D_2 \\ D_3 \end{array}\right\} = \left[\begin{array}{cccccc|ccc} S_{11}^E & S_{12}^E & S_{13}^E & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & d_{31} \\ S_{12}^E & S_{11}^E & S_{13}^E & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & d_{31} \\ S_{31}^E & S_{31}^E & S_{33}^E & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & d_{33} \\ 0 & 0^E & 0 & S_{44}^E & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & S_{66}^E & 0 & d_{15} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & S_{66}^E & 0 & d_{15} & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 & d_{15} & 0 & \epsilon_{11}^\sigma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & d_{15} & 0 & \epsilon_{11}^\sigma & 0 \\ d_{31} & d_{31} & d_{33} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \epsilon_{33}^\sigma \end{array}\right] \left\{\begin{array}{c} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \\ \hline E_1 \\ E_2 \\ E_3 \end{array}\right\} \tag{1.13}$$

où

$$S_{44}^{E} = 4\,S_{1212}^{E} \quad ; \quad S_{66}^{E} = 4\,S_{1313}^{E} = 4\,S_{2323}^{E} \tag{1.14}$$

1.6.2 Formulation énergétique

Les équations piézoélectriques linéaires (1.5) et (1.8) peuvent être posées dans un cadre thermodynamique à travers la définition de fonctionnelles qui quantifient les énergies élastique, thermique, électrostatique et électromécanique.

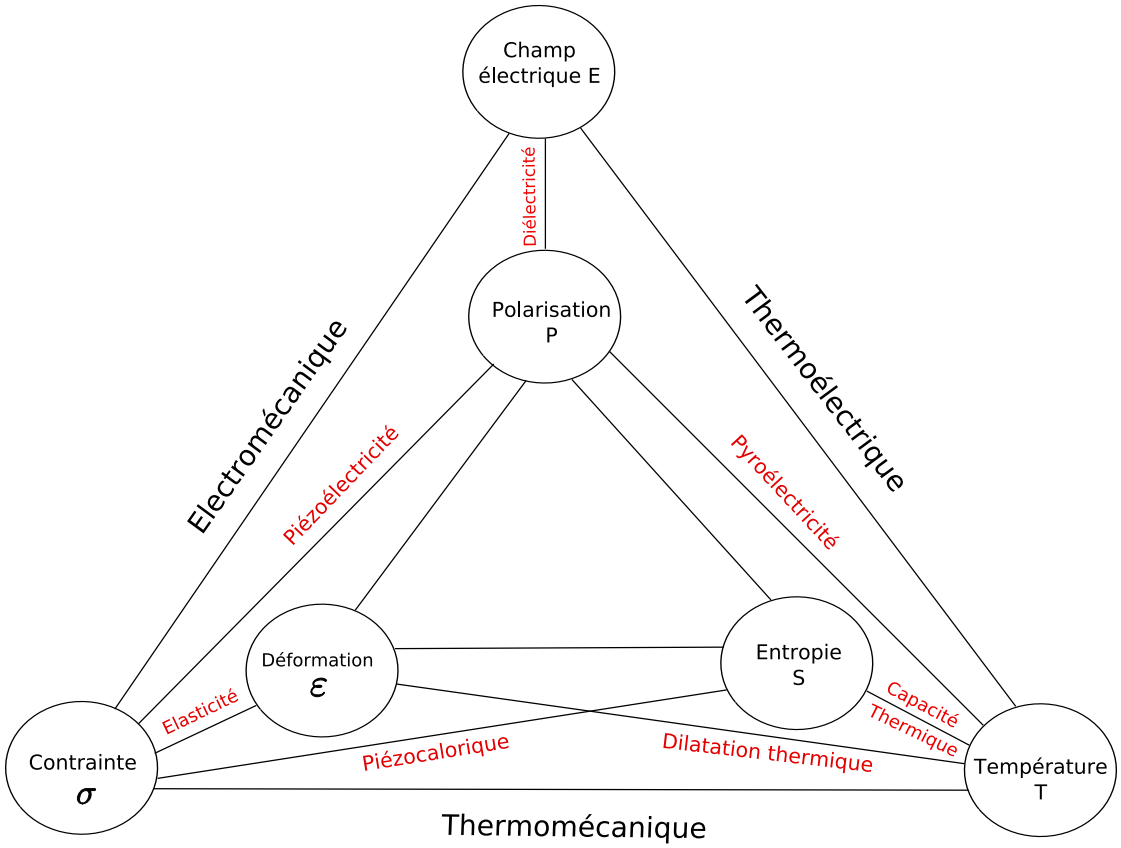


Fig. 1.25 : *Interaction entre les processus électrique, mécanique et thermique avec les variables intensives : champ électrique E, contrainte mécanique σ, température T et les variables extensives : la polarisation P, la déformation ε et l'entropie S [78]*

Cadre thermodynamique

Nous considérons dans cette partie l'ensemble général des processus électrique, mécanique et thermique qui peuvent interagir dans un matériau piézoélectrique (Figure 1.25). La piézoélectricité constitue l'ensemble des interactions entre les processus électrique et mécanique alors que la pyroélectricité est due au couplage thermique-électrique. Les variables intensives (appelées aussi forces généralisées) qui sont le champ électrique $\underline{E}$, la contrainte mécanique $\underline{\underline{\sigma}}$, et la température

T sont représentées sur les sommets du triangle alors que les variables extensives qui sont, la polarisation électrique $\underline{P}$, la déformation $\underline{\underline{\varepsilon}}$ et l'entropie S sont représentées à l'intérieur du triangle [78]. Pour quantifier les relations entre ces variables, nous considérons l'énergie du système.

Conservation du mouvement

Considérons un domaine piézoélectrique Ω de frontière $\partial\Omega$. La conservation de la quantité de mouvement s'exprime localement par :

$$\sigma_{ij,j} + f_i = \rho\,\ddot{u}_i \qquad \text{dans } \Omega \tag{1.15}$$

où ρ, $\underline{u}$, $\underline{f}$ et $\underline{\underline{\sigma}}$ désignent, respectivement, la masse volumique, le vecteur de déplacement mécanique, la densité des forces volumiques appliquées sur le domaine Ω et le tenseur des contraintes mécaniques. Les signes $(\dot{})$ et $(_{,j})$ désignent la dérivation par rapport au temps et celle par rapport à la coordonnée x_j. Considérons un champ de déplacement virtuel $\delta\underline{u}$. En multipliant la relation d'équilibre local 1.15 par $\delta\underline{u}$ et en intégrant sur Ω, nous obtenons :

$$\int_\Omega \rho\ddot{u}_i\delta u_i d\Omega = \int_\Omega f_i\delta u_i d\Omega + \int_\Omega \sigma_{ij,j}\delta u_i d\Omega \tag{1.16}$$

En définissant le tenseur des déformations virtuelles $\delta\underline{\underline{\varepsilon}}$ qui dérive du champ $\delta\underline{u}$:

$$\delta\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}(\delta u_{i,j} + \delta u_{j,i}) \tag{1.17}$$

et en utilisant la propriété de symétrie de $\underline{\underline{\sigma}}$, la relation (1.16) devient, en utilisant le théorème de la divergence (théorème de Green-Ostrogradski) :

$$\int_\Omega \rho\ddot{u}_i\delta u_i d\Omega = \int_\Omega f_i\delta u_i d\Omega + \int_{\partial\Omega} T_i\delta u_i dS - \int_\Omega \sigma_{ij}\delta\varepsilon_{ij} d\Omega \tag{1.18}$$

avec T_i une composante du vecteur contrainte appliqué sur la frontière $\partial\Omega$ de normale $\underline{n}$ telle que :

$$\sigma_{ij}n_j = T_i \tag{1.19}$$

Une relation similaire à (1.18) peut être obtenue si nous considérons un champ de vitesse virtuel $\delta\underline{v} = \delta\dot{\underline{u}}$. Le Principe des Puissances Virtuelles (PPV) peut être ainsi obtenu :

$$\underbrace{\int_\Omega \rho\dot{v}_i\delta v_i d\Omega}_{P^m_{acc}} = \underbrace{\int_\Omega f_i\delta v_i d\Omega + \int_{\partial\Omega} T_i\delta v_i dS}_{P^m_{ext}} \underbrace{- \int_\Omega \sigma_{ij}\delta\dot{\varepsilon}_{ij} d\Omega}_{P^m_{int}} \tag{1.20}$$

Différentes puissances interviennent dans l'Equation (1.20) : le premier terme de gauche est la puissance virtuelle des quantités d'accélération P^m_{acc} ; les deux termes du centre forment la puissance virtuelle des efforts extérieurs P^m_{ext} et le terme de droite est la puissance virtuelle des

efforts intérieurs P_{int}^{m}.

Conservation du flux électrique

La conservation du flux électrique s'exprime par l'équation locale de Maxwell-Gauss dans le domaine diélectrique qui lie le vecteur déplacement électrique $\underline{D}$ à la densité volumique des charges libres ρ_a :

$$\mathrm{div}(\underline{D}) = \rho_a \quad ou \quad D_{i,i} = \rho_a \tag{1.21}$$

En multipliant l'Equation (1.21) par le potentiel électrique virtuel $\delta\varphi$ et en intégrant sur tout le volume Ω, nous obtenons :

$$\int_{\Omega} D_{i,i}\delta\varphi d\Omega = \int_{\Omega} \rho_a \delta\varphi d\Omega \tag{1.22}$$

En définissant le champ électrique virtuel $\delta\underline{E}$

$$\delta E_i = -\delta\varphi_{,i} \tag{1.23}$$

et en tenant compte de la relation suivante

$$(D_i\delta\varphi)_{,i} = D_{i,i}\delta\varphi + D_i\delta\varphi_{,i} \tag{1.24}$$

L'Equation (1.22) peut être réécrite sous cette forme en utilisant le théorème de la divergence :

$$\int_{\Omega} D_i\delta E_i d\Omega = \int_{\partial\Omega} Q^S\delta\varphi dS + \int_{\Omega} \rho_a\delta\varphi d\Omega \tag{1.25}$$

où Q^S est la densité de charges surfaciques appliquées sur la surface $\partial\Omega$ et liée au vecteur déplacement électrique par la relation suivante :

$$D_i n_i = -Q^S \tag{1.26}$$

Nous pouvons réécrire la relation (1.25) en faisant apparaître la dérivée par rapport au temps du potentiel électrique virtuel :

$$\underbrace{\int_{\Omega} D_i\delta\dot{E}_i d\Omega}_{P_{int}^{e}} = \underbrace{\int_{\partial\Omega} Q^S\delta\dot{\varphi} dS + \int_{\Omega} \rho_a\delta\dot{\varphi} d\Omega}_{P_{ext}^{e}} \tag{1.27}$$

Nous retrouvons à gauche un terme de puissance virtuelle de la polarisation interne P_{int}^{e} et à droite la puissance virtuelle liée aux charges électriques extérieures P_{ext}^{e}.
Il est possible de définir une puissance virtuelle des actions extérieures de nature électromécanique :

$$P_{ext} = P_{ext}^{m} + P_{ext}^{e} = \int_{\Omega} f_i^v\delta v_i d\Omega + \int_{\partial\Omega} T_i\delta v_i dS + \int_{\Omega} \rho_a\delta\dot{\varphi} d\Omega + \int_{\partial\Omega} Q^S\delta\dot{\varphi} dS \tag{1.28}$$

et une puissance virtuelle des efforts intérieurs de nature électromécanique :

$$P_{int} = P_{int}^{m} + P_{int}^{e} = \int_{\Omega} \sigma_{ij} \delta\dot{\varepsilon}_{ij} d\Omega + \int_{\Omega} D_i \delta\dot{E}_i d\Omega \tag{1.29}$$

Finalement, en combinant les Équations (1.20) et (1.27), l'égalité suivante peut être obtenue :

$$P_{acc}^{m} = P_{ext} - P_{int} \tag{1.30}$$

Premier principe de la thermodynamique

A présent, nous définissons l'énergie interne de ce domaine piézoélectrique, notée U, définie à partir de l'énergie interne *massique* e et de la masse volumique ρ tel que :

$$U = \int_{\Omega} \underbrace{\rho e}_{u} d\Omega \tag{1.31}$$

$u = \rho e$ est l'énergie interne par unité de volume. Ce domaine piézoélectrique possède aussi une énergie cinétique, notée K, définie à partir du vecteur vitesse $\underline{v}$:

$$K = \int_{\Omega} \frac{1}{2} \rho v_i v_i d\Omega \tag{1.32}$$

Le premier principe de la thermodynamique affirme que la dérivée particulaire de $U+K$ est égale à la somme de la puissance des efforts extérieurs P_{ext} exercés sur le domaine et de la puissance calorifique P_{cal} reçue par le domaine piézoélectrique :

$$\frac{d}{dt}(U + K) = P_{ext} + P_{cal} \tag{1.33}$$

Pour un domaine piézoélectrique, la puissance réelle des efforts extérieurs est donnée par (Équation (1.28)) :

$$P_{ext} = \int_{\Omega} f_i^v v_i d\Omega + \int_{\partial\Omega} T_i v_i dS + \int_{\Omega} \rho_a \dot{\varphi} d\Omega + \int_{\partial\Omega} Q^S \dot{\varphi} dS \tag{1.34}$$

La puissance calorifique reçue par le domaine piézoélectrique est donnée par :

$$P_{cal} = \frac{\delta Q_{th}}{dt} = -\int_{\partial\Omega} q_i n_i dS + \int_{\Omega} r d\Omega \tag{1.35}$$

où $-q_i\, n_i$ est la densité surfacique du taux de chaleur reçue par conduction thermique à travers $\partial\Omega$, r est la densité volumique du taux de chaleur fourni à Ω par des sources extérieures (rayonnement, réactions chimiques) et $Q_{th} = \int_{\Omega} q_{th} d\Omega$ est la quantité de chaleur instantanée reçue par le domaine piézoélectrique (q_{th} est la quantité de chaleur reçue par unité de volume). Le premier principe de la thermodynamique Equation (1.33) peut être réécrit sous cette forme :

$$\int_{\Omega} \dot{u} d\Omega + \int_{\Omega} \rho \dot{v}_i v_i d\Omega = P_{ext} + \int_{\Omega} (r - q_{i,i}) d\Omega \tag{1.36}$$

En utilisant la relation (1.30) pour un champ de vitesses réel, nous obtenons

$$\int_\Omega \dot{u} d\Omega = \int_\Omega \sigma_{ij}\dot{\varepsilon}_{ij} d\Omega + \int_\Omega D_i \dot{E}_i d\Omega + \int_\Omega (r - q_{i,i}) d\Omega \tag{1.37}$$

Cette dernière équation est valable quelque soit le domaine Ω considéré, donc nous en déduisons cette forme locale :

$$\dot{u} = \sigma_{ij}\dot{\varepsilon}_{ij} + D_i \dot{E}_i + \underbrace{r - q_{i,i}}_{\dot{q}_{th}} \tag{1.38}$$

avec $\dot{q}_{th} = \delta q_{th}/dt$ est le taux de chaleur reçu par un volume élémentaire de Ω.

Second principe de la thermodynamique

Le deuxième principe de la thermodynamique postule deux affirmations :

- Il existe une variable d'état scalaire positive T appelée *température absolue* et une fonction d'état scalaire s appelée *entropie massique* telles que l'entropie S de Ω s'écrive :

$$S = \int_\Omega s\, dm = \int_\Omega \underbrace{\rho s}_{s^v} d\Omega \tag{1.39}$$

  où s^v est l'entropie par unité de volume.
- La variation d'entropie S du domaine Ω dans une évolution infinitésimale doit respecter l'inégalité suivante :

$$dS \geq \frac{\delta Q_{th}}{T} \tag{1.40}$$

  soit, localement, en considérant s^v l'entropie d'un volume élémentaire du domaine piézoélectrique et q_{th} la quantité de chaleur qu'il reçoit :

$$ds^v \geq \frac{\delta q_{th}}{T} \tag{1.41}$$

Transformation réversible

Dans le cas d'une transformation réversible du domaine Ω, la variation d'entropie se réduit uniquement au terme d'échange. Donc, localement, nous avons cette égalité :

$$ds^v = \frac{\delta q_{th}}{T} \tag{1.42}$$

La forme locale du premier principe de la thermodynamique (Équation (1.38)) devient alors :

$$du = \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij} + D_i dE_i + T ds^v \tag{1.43}$$

L'énergie interne par unité de volume (Équation (1.43)) est une fonction des variables indépendantes ε_{ij}, E_i et s^v. Il est donc intéressant de travailler avec une énergie libre de Gibbs G adaptée

aux conditions expérimentales sous lesquelles les caractéristiques des matériaux piézoélectriques sont souvent déterminés, à savoir des conditions isothermes où les variables indépendantes sont la contrainte mécanique σ_{ij} et le champ électrique E_i. Pour changer les variables indépendantes, nous effectuons une transformation de Legendre telle que :

$$G = u - \sigma_{ij}\varepsilon_{ij} - Ts^v \tag{1.44}$$

Avec le résultat de l'Equation (1.43), l'énergie libre de Gibbs admet la différentielle suivante :

$$dG = -\varepsilon_{ij}d\sigma_{ij} - D_i dE_i - s^v dT \tag{1.45}$$

Par conséquent, G est une fonction des variables indépendantes σ_{ij}, E_i et T. Nous pouvons déduire de l'Équation (1.45) les relations suivantes :

$$\varepsilon_{ij} = -\Big[\frac{\partial G}{\partial \sigma_{ij}}\Big]_{E,T} \quad ; \quad D_i = -\Big[\frac{\partial G}{\partial E_i}\Big]_{\sigma,T} \quad ; \quad s^v = -\Big[\frac{\partial G}{\partial T}\Big]_{\sigma,E} \tag{1.46}$$

où les quantités en indices sont prises constantes. Les différentielles totales de s^v, ε_{ij} et D_i sont données par :

$$\begin{cases} d\varepsilon_{ij} = \overbrace{\Big[\frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial \sigma_{kl}}\Big]_{E,T} d\sigma_{kl}}^{\text{élasticité}} + \overbrace{\Big[\frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial E_n}\Big]_{\sigma,T} dE_n}^{\text{piézoélectricité inverse}} + \overbrace{\Big[\frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial T}\Big]_{\sigma,E} dT}^{\text{dilatation thermique}} \\ dD_i = \overbrace{\Big[\frac{\partial D_i}{\partial \sigma_{kl}}\Big]_{E,T} d\sigma_{kl}}^{\text{piézoélectricité directe}} + \overbrace{\Big[\frac{\partial D_i}{\partial E_n}\Big]_{\sigma,T} dE_n}^{\text{permittivité}} + \overbrace{\Big[\frac{\partial D_i}{\partial T}\Big]_{\sigma,E} dT}^{\text{pyroélectricité}} \\ ds^v = \overbrace{\Big[\frac{\partial s^v}{\partial \sigma_{kl}}\Big]_{E,T} d\sigma_{kl}}^{\text{Effet piézocalorique}} + \overbrace{\Big[\frac{\partial s^v}{\partial E_n}\Big]_{\sigma,T} dE_n}^{\text{Effet électrocalorique}} + \overbrace{\Big[\frac{\partial s^v}{\partial T}\Big]_{\sigma,E} dT}^{\text{capacité thermique}} \end{cases} \tag{1.47}$$

Comme indiqué par le système d'équations (1.47), chaque dérivée partielle identifie un effet physique. En effectuant des différentiations supplémentaires du système (1.47), nous pouvons déduire les relations suivantes :

$$\begin{aligned} -\Big[\frac{\partial^2 G}{\partial \sigma_{ij}\partial E_k}\Big]_T &= \Big[\frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial E_k}\Big]_{\sigma,T} = \Big[\frac{\partial D_k}{\partial \sigma_{ij}}\Big]_{E,T} \equiv d^T_{kij} \\ -\Big[\frac{\partial^2 G}{\partial \sigma_{ij}\partial T}\Big]_E &= \Big[\frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial T}\Big]_{\sigma,E} = \Big[\frac{\partial s^v}{\partial \sigma_{ij}}\Big]_{E,T} \equiv \alpha^E_{ij} \\ -\Big[\frac{\partial^2 G}{\partial E_k \partial T}\Big] &= \Big[\frac{\partial D_k}{\partial T}\Big]_{\sigma,E} = \Big[\frac{\partial s^v}{\partial E_k}\Big]_{\sigma,T} \equiv p^\sigma_k \end{aligned} \tag{1.48}$$

où α_{ij} sont les coefficients du tenseur de dilatation thermique et p_i sont les coefficients pyroélectriques. Les relations (1.48) établissent un des principes fondamentaux résultant de l'analyse thermodynamique qui est l'équivalence des coefficients du système (1.47). Cette équivalence peut être résumée comme suit :

1. Les coefficients des effets piézoélectrique direct et inverse sont équivalents ;
2. Les coefficients de l'effet piézocalorique sont le mêmes que ceux de la dilatation thermique ;
3. Les coefficients des effets pyroélectrique et électrocalorique sont équivalents.

Exploitant ces équivalences, les Équations (1.47) peuvent être intégrées pour obtenir les équations du comportement *linéaires* suivantes :

$$\begin{cases} \varepsilon_{ij} &= S^{E,T}_{ijkl}\sigma_{kl} + d^{T}_{kij}E_k + \alpha^{E}_{ij}\triangle T \\ D_k &= d^{T}_{kij}\sigma_{ij} + \epsilon^{\sigma,T}_{ki}E_i + p^{\sigma}_{k}\triangle T \\ \triangle s^{v} &= \alpha^{E}_{ij}\sigma_{ij} + p^{\sigma}_{i}E_i + \dfrac{C^{\sigma,E}}{T}\triangle T \end{cases} \tag{1.49}$$

où C est la capacité thermique. Le système (1.49) est approprié pour quantifier les effets de premier ordre (effets linéaires).
L'ensemble des variables indépendantes (σ_{ij}, E_i, T) choisi pour la détermination des équations linéaires du comportement (1.49) est arbitraire. Ainsi, pour une transformation isotherme ($\triangle T = 0$), d'autres potentiels thermodynamiques et d'autres combinaisons des variables indépendantes peuvent être considérés et il est donc possible de définir six autres lois constitutives linéaires [25, 78] :

$$\begin{cases} \sigma_{ij} &= C^{E}_{ijkl}\varepsilon_{kl} - e^{\varepsilon}_{kij}E_k \\ D_i &= e^{E}_{ijk}\varepsilon_{jk} + \epsilon^{\varepsilon}_{ij}E_j \end{cases} \tag{1.50}$$

$$\begin{cases} \sigma_{ij} &= C^{D}_{ijkl}\varepsilon_{kl} - h^{\varepsilon}_{kij}D_k \\ E_i &= -h^{D}_{ijk}\varepsilon_{jk} + \beta^{\varepsilon}_{ij}D_j \end{cases} \tag{1.51}$$

$$\begin{cases} \varepsilon_{ij} &= S^{D}_{ijkl}\sigma_{kl} + g^{\sigma}_{kij}D_k \\ E_i &= -g^{D}_{ijk}\sigma_{jk} + \beta^{\sigma}_{ij}D_j \end{cases} \tag{1.52}$$

$\underline{\underline{\underline{e}}}$, $\underline{\underline{\underline{g}}}$ et $\underline{\underline{\underline{h}}}$ sont des tenseurs piézoélectriques d'ordre 3 et $\underline{\underline{\beta}}$ est l'inverse du tenseur de susceptibilité diélectrique ($\underline{\underline{\beta}} = \underline{\underline{\chi}}^{-1}$) [25]. Comme nous l'avons expliqué pour le tenseur piézoélectrique direct $\underline{\underline{\underline{d}}}$, nous pouvons montrer aussi les équivalences suivantes :

$$g^{D}_{ijk} = g^{\sigma}_{ijk} \quad ; \quad e^{\varepsilon}_{ijk} = e^{E}_{ijk} \quad ; \quad h^{D}_{ijk} = h^{\varepsilon}_{ijk} \tag{1.53}$$

qui nous permettent d'omettre les exposants quand nous travaillons avec ces tenseurs de couplage. Les coefficients des tenseurs piézoélectriques sont mutuellement liés par les relations suivantes :

$$d_{kij} = s^E_{ijmn} e_{kmn} = \epsilon^\sigma_{km} g_{mij} \qquad (\text{m/V ou C/N}) \tag{1.54}$$

$$e_{kij} = c^E_{ijmn} d_{kmn} = \epsilon^\varepsilon_{km} h_{mij} \qquad (\text{C/m}^2 \text{ ou Vm/N}) \tag{1.55}$$

$$g_{kij} = s^D_{ijmn} h_{kmn} = \beta^\sigma_{km} d_{mij} \qquad (\text{m}^2\text{/C ou N/(Vm)}) \tag{1.56}$$

$$h_{kij} = c^D_{ijmn} g_{kmn} = \beta^\varepsilon_{km} e_{mij} \qquad (\text{N/C ou V/m}) \tag{1.57}$$

Dans la suite, nous adopterons le système d'équations (1.50) pour décrire le comportement linéaire des composants piézoélectriques. En effet, cette notation est adaptée à un calcul par éléments finis en considérant le déplacement mécanique et le potentiel électrique comme degrés de liberté.

1.7 Modélisation du comportement non linéaire des céramiques ferroélectriques

Considérons une céramique ferroélectrique initialement polarisée et soumise à des chargements électromécaniques de faible intensité. Les équations piézoélectriques linéaires qui ont été développées dans la section 1.6 peuvent être utilisées pour décrire le couplage électromécanique inhérent à ce type de matériau. Par contre, si cette céramique est soumise à un chargement de forte intensité, elle présente un comportement fortement non linéaire à cause des phénomènes de réorientation ferroélectrique et ferroélastique. Ces phénomènes doivent donc être intégrés dans les modèles pour mieux dimensionner les applications utilisant les céramiques ferroélectriques et pour l'évaluation fiable de la durée de vie des composants piézoélectriques.

1.7.1 Investigations expérimentales

Les investigations sur le comportement non linéaire des céramiques ferroélectriques ont commencé depuis les années 60 du siècle dernier. Krueger a étudié dans [56] la sensibilité de quelques céramiques piézoélectriques de type PZT à un chargement de compression parallèle à l'axe polaire. Il a trouvé que les céramiques "dures" (PZT-4 et PZT-8), qui sont généralement utilisées dans les applications de puissance exigeant de faibles pertes énergétiques, étaient moins sensibles au chargement mécanique que les céramiques "douces" (PZT-5H et PZT-5A). Ces dernières montraient une dégradation sérieuse de leurs propriétés matérielles après quelques cycles de chargement successifs. Schnell a étudié dans [74] la dépolarisation mécanique non linéaire des céramiques piézoélectriques soumises à une pression mécanique uniaxiale.
Depuis l'expansion rapide de l'utilisation des céramiques ferroélectriques dans les applications civiles et militaires, les travaux de recherche sur les comportements ferroélectrique et ferroélastique non linéaires redeviennent animés ces deux dernières décennies. Une direction de ces efforts

porte sur l'investigation expériementale et l'autre porte sur la modélisation du comportement non linéaire observé.

Le comportement ferroélastique des céramiques piézoélectriques a été toujours mis en évidence par l'application d'une contrainte de compression uniaxiale à cause de la fragilité des céramiques en traction. Fett a étudié aussi dans [35, 34] le comportement des céramiques PZT de type doux soumises à un chargement de traction et a montré dans [33] une dissymétrie de la déformation en compression et en traction.

Cao et Evans [15] ont attribué le comportement non linéaire des céramiques piézoélectriques induit par un chargement mécanique à la réorientation ferroélastique des domaines. Ils ont comparé la déformation et la dépolarisation mécaniques des céramiques PZT "douces" et "dures" soumises à des cycles de charge-décharge mécaniques. Comme a été rapporté dans [56], ils ont remarqué que les céramiques PZT "douces" étaient plus sensibles aux contraintes de compression que les céramiques "dures".

Les réponses non linéaires liées à la réorientation des domaines dans les céramiques PLZT ont été analysées par Lynch dans [63]. Il a aussi étudié les réponses hystérétiques $P-E$ et $\varepsilon-E$ sous différentes contraintes de compression initiales et il a montré que le champ coercitif, la polarisation et la déformation rémanentes diminuent graduellement avec l'augmentation de la contrainte de compression.

Schäufele et Härdlt ont étudié dans [73] la déformation de compression ainsi que la dépolarisation mécanique des céramiques PZT "douces" et "dures" de différentes compositions de Zirconium et de Titanate. La déformation rémanente et la dépolarisation mécanique ont eu leurs valeurs maximales pour une fraction x de Zirconium proche de 50% alors que la contrainte coercitive σ_c était minimale pour cette composition. Ils ont montré aussi que la superposition d'un champ électrique parallèlement à la direction de polarisation augmente linéairement la valeur de la contrainte coercitive en fonction de l'incrément du champ électrique.

Chaplya et Carman [18] ont effectué des tests de compression sur des céramiques de type PZT-5H initialement polarisées en superposant un champ électrique constant dans la même direction que l'axe polaire. Ils ont trouvé que l'application d'un champ électrique positif (dans le même sens que l'axe polaire) entraîne une augmentation de la contrainte coercitive σ_c. D'autre part, la contrainte coercitive a été trouvée proche de zéro quand ils ont appliqué un champ électrique négatif (dans le sens opposé à l'axe polaire) d'amplitude voisine du champ coercitif E_c.

Pour caractériser le comportement des céramiques ferroélectriques sous des chargements électromécaniques multiaxiaux, Huber et Fleck [39] ont effectué un test dans lequel des céramiques ferroélectriques ont été soumises à un champ électrique monotone dont la direction faisait un angle quelconque avec l'axe polaire initial.

Dans le travail de Chen et Lynch [22], le comportement multiaxial de quelques échantillons tubulaires en PLZT (initialement polarisés et non polarisés), soumis simultanément à un chargement axial de compression et à une pression interne et externe, a été mesuré. Les résultats ont été utilisés pour déterminer la surface de charge indiquant le début de l'*écoulement* ferroélastique.

En plus des investigations expérimentales, des modèles constitutifs ont été développés pour décrire le comportement non linéaire macroscopique des céramiques ferroélectriques.

1.7.2 Modélisation des comportements ferroélectrique et ferroélastique

Modélisation phénoménologique des processus de réorientation

La modélisation du comportement non linéaire des matériaux ferroélectriques représente un défi majeur puisque ces matériaux présentent un comportement électromécanique *anisotrope*, fortement *hystérétique* avec un phénomène de saturation de la polarisation électrique et de la déformation mécanique macroscopiques. Toutes ces caractéristiques compliquent la mise au point des relations de comportement non linéaires [39].
Chen et al. [21, 20] semblent avoir été les premiers à développer un modèle phénoménologique ferroélectrique pour décrire la dépendance des céramiques ferroélectriques vis-à-vis de l'histoire de chargement [47]. Leur objectif était le développement d'un modèle constitutif phénoménologique pour décrire les propriétés macroscopiques des céramiques ferroélectriques et qui peut être utilisé pour analyser les contraintes. Pour décrire la dépendance vis-à-vis de l'histoire de chargement, des variables internes ont été introduites pour représenter la déformation et la polarisation rémanentes. Ces variables internes caractérisent le degré d'alignement des dipôles microscopiques suivant la direction de chargement. Ce modèle a été principalement développé dans le cas uniaxial et il est limité aux chargements électriques [47].
Un modèle phénoménologique, qui respecte les lois de la thermodynamique, a été proposé par Bassiouny et al. dans [10, 11]. Ce modèle a été basé sur des concepts de la thermo-élastoplasticité et la représentation phénoménologique utilisée en ferromagnétisme. L'hypothèse principale de ce modèle est la décomposition additive de la polarisation et la déformation macroscopiques en deux parties *réversible* et *irréversible* :

$$\underline{P} = \underbrace{\underline{P}^{el}}_{\text{réversible}} + \underbrace{\underline{P}^{r}}_{\text{rémanente}} \quad ; \quad \underline{\underline{\varepsilon}} = \underbrace{\underline{\underline{\varepsilon}}^{el}}_{\text{réversible}} + \underbrace{\underline{\underline{\varepsilon}}^{r}}_{\text{rémanente}} \tag{1.58}$$

La polarisation et la déformation irréversibles (rémanentes) sont les variables internes du modèle. En se basant sur l'inégalité de Clausius-Duhem, les équations d'évolution des variables internes en fonction des conditions de chargement ont été proposées par le biais d'un potentiel de dissipation.
En se basant sur ce dernier concept, plusieurs modèles phénoménologiques ont été développés [24, 50, 48, 64, 30]. Dans toutes ces contributions, la polarisation et la déformation irréversibles (rémanentes) ont servi comme variables internes pour contrôler le processus d'écrouissage cinématique.
Une autre décomposition en deux parties de la déformation rémanente a été introduite par Kamlah et al. dans [50, 48]. La première déformation rémanente, appelée déformation de polarisation et notée $\underline{\underline{\varepsilon}}^{p}$, apparaît suite à l'alignement des domaines ferroélectriques dans la même direc-

tion du chargement électrique lors du processus de polarisation. Cette déformation est supposée directement liée à la polarisation rémanente par la relation suivante :

$$\underline{\underline{\varepsilon}}^p = \frac{3}{2}\varepsilon^{sat}\frac{||\underline{P}^r||}{P^{sat}}(\underline{e}^p \otimes \underline{e}^p - \frac{1}{3}\underline{\underline{\delta}}) \quad \text{avec} \quad \underline{e}^p = \frac{\underline{P}^r}{||\underline{P}^r||} \tag{1.59}$$

La deuxième déformation irréversible, notée $\underline{\underline{\varepsilon}}^f$, est due au chargement mécanique et est déterminée par une équation d'évolution. Quatre critères ont été utilisés dans [48] pour caractériser le début et la saturation des réorientations ferroélectrique et ferroélastique des domaines dans la céramique.
Le modèle d'Elhadrouz et al. [30] utilise la même décomposition de la déformation rémanente que dans [50, 48]. De plus, une décomposition additive de la polarisation rémanente a été introduite : il est distingué entre la polarisation irréversible causée par un champ électrique, notée $\underline{P}^e$, et la polarisation rémanente causée par une contrainte mécanique, notée $\underline{P}^\sigma$ qui apparaît pour des configurations de chargement spéciales (chargement de compression dans la même direction que la polarisation initiale). Deux critères d'écoulement ont été utilisés pour contrôler les hystérésis ferroélectrique et ferroélastique et aucun critère pour contrôler les phénomènes de saturation n'a été présenté .
Des lois de comportement multiaxiales ont été introduites par McMeeking et Landis [64] et Landis [57]. Les modèles multiaxiaux sont nécessaires pour décrire la rotation de la polarisation généralement observée dans les céramiques ferroélectriques. Une relation directe entre la déformation et la polarisation rémanentes est utilisée dans [64]. Par conséquent, une seule variable interne est nécessaire pour contrôler le mouvement du centre de la surface d'écoulement dans un processus avec écrouissage cinématique. Le modèle général, sans la relation directe entre la déformation et la polarisation rémanentes, est présenté dans [57]. Ce modèle multiaxial est capable de simuler les hystérésis ferroélectriques et ferroélastiques.
Klinkel [52] a développé un modèle constitutif thermodynamiquement cohérent qui utilise la déformation irréversible et le *champ électrique irréversible* comme variables internes. Cette formulation est très proche de la théorie de plasticité où les déformations sont décomposées en partie réversible et partie irréversible [52]. La formulation de Klinkel est basée sur l'énergie libre de Helmholtz et une surface de charge scalaire est définie pour contrôler la réorientation des domaines.

Modélisation micromécanique des processus de réorientation

Puisque la microstructure des céramiques ferroélectriques détermine la réponse macroscopique aux chargements électromécaniques, plusieurs efforts ont été menés ces dernières années pour calculer la réponse macroscopique des céramiques en se basant sur des modèles micromécaniques. Il est montré dans [62] que les processus de réorientation des domaines ferroélectriques sont gouvernés par des principes énergétiques. Par conséquent, une approche basée sur un critère énergétique a été adoptée dans [41] et a inspiré plusieurs chercheurs pour développer des modèles

très proches des mécanismes de réorientation microscopique [47]. Le comportement polycristallin dans [41] a été simulé en moyennant les réponses de 10.000 grains monodomaines. Chaque grain possède une orientation cristallographique et une polarisation spontanée à l'état initial. Le critère de réorientation d'un seul grain est décrit par un comportement hystérétique rectangulaire. La réorientation d'un grain de 90° ou de 180° est active si la somme des travaux électrique et mécanique dépassent une valeur critique :

$$E_i \triangle P_i + \sigma_{ij} \triangle \varepsilon_{ij} \geq 2P_0 E_c \tag{1.60}$$

où $\triangle P_i$ et $\triangle \varepsilon_{ij}$ sont les changements de la polarisation et la déformation spontanées, respectivement, et P_0 est la norme de la polarisation spontanée initiale. La polarisation et la déformation macroscopiques ont été décomposées en une partie réversible et une autre rémanente, où les quantités rémanentes ont été définies comme les moyennes des quantités microscopiques rémanentes sur tous les grains. Ce modèle numérique est capable de représenter qualitativement les hystérésis mécanique et électrique.

Dans [70], l'approche utilisée dans [41] a été mise au point analytiquement et les quantités macroscopiques ont été déduites par une moyenne analytique. A l'échelle microscopique, le même critère de réorientation que celui de l'Équation (1.60) a été adopté.

Ce dernier critère (Équation (1.60)) représente une version simplifiée du critère de réorientation énergétique car il néglige toute interaction entre les domaines d'un grain et entre les grains du polycristal. Pour tenir compte de ces interactions, l'énergie potentielle d'une inclusion piézoélectrique calculée dans [68] a été introduite dans une formulation améliorée du critère de réorientation de l'Equation (1.60) dans [44]. La décomposition de la polarisation et la déformation en partie réversible et irréversible a été adoptée et une relation simplifiée entre le tenseur piézoélectrique direct et la polarisation rémanente d'un grain a été utilisée. Par comparaison au travail de [41], ce modèle décrit d'une manière plus réaliste les phénomènes de réorientation puisqu'il tient compte des contraintes physiques appliquées sur un grain par son voisinage. Dans le cas spécial des comportements purement diélectrique et purement mécanique, la méthode des éléments finis a été utilisée pour étudier un cube polycristallin contenant $10 \times 10 \times 10$ éléments [43, 42]. Chaque élément fini a représenté un grain monodomaine qui peut être réorienté.

Elhadrouz et al. [31] ont présenté un modèle micromécanique pour étudier la réorientation des domaines dans un monocristal. Une structure tétragonale avec six variantes (six orientations possibles de la polarisation spontanée) a été considérée et les fractions volumiques de ces variantes ont été utilisées comme des variables internes. L'interaction entre les domaines ferroélectriques a été décrite par une matrice d'interaction. Des lois constitutives homogénéisées sur tout le monocristal ont été déduites. Ce modèle est capable de représenter les hystérésis ferroélectriques et ferroélastiques. L'utilisation de ce modèle micromécanique pour étudier un polycristal n'a pas été encore publiée.

Kamlah et al. [49] ont calculé le comportement global d'une céramique ferroélectrique en utilisant la méthode des éléments finis. Chaque élément a représenté un grain dans le polycristal. Les

propriétés de chaque grain ont été décrites par un modèle micromécanique développé dans [40]. Une attention particulière à l'influence des propriétés de chaque grain et de l'interaction entre les grains sur la réponse macroscopique de la céramique a été prise en compte.

1.8 Éléments finis électromécaniques

Depuis les années 1970, plusieurs éléments finis ont été proposés pour l'analyse des structures piézoélectriques. Ces éléments ont été consacrés principalement au dimensionnement des transducteurs ultrasoniques jusqu'aux années 1990 [7, 6]. Une certaine maturité a été atteinte si bien que certains éléments finis piézoélectriques sont devenus disponibles dans quelques codes d'éléments finis commerciaux tels que Abaqus® et Ansys® [60]. Ces derniers éléments intègrent, en général, un comportement piézoélectrique linéaire (celui de voigt) parfois insuffisant pour étudier des structures piézoélectriques soumises à des chargements électromécaniques de forte intensité. Durant les deux dernières décennies, la modélisation par éléments finis des structures intelligentes a attiré beaucoup de chercheurs et est devenue une thématique de recherche principale [13]. Les premières investigations ont été consacrées aux éléments 3D qui représentent des degrés de liberté mécaniques et électriques. Les éléments 3D proposés sont tétraédriques [6] et hexaédriques [37, 32]. Le potentiel électrique est supposé linéaire à l'exception des éléments hexaédriques à 20 noeuds où il est quadratique [7, 83]. Des éléments finis électromécaniques 3D présentant des modèles phénoménologiques non linéaires (ferroélectricité et ferroélasticité) ont été proposés également [48, 32, 52]. Ces derniers éléments présentent des variables internes pour décrire l'histoire du chargement.
Pour étudier les structures piézoélectriques minces, comme les tubes piézoélectriques utilisés dans les microscopes à effet tunnel [16], quelques éléments coques piézoélectriques ont été proposés [13, 14, 54]. L'avantage de ces éléments est qu'ils sont plus rentables que les éléments solides dans le calcul des structures piézoélectriques minces. Des éléments solide-coques piézoélectriques ont été proposés également [82, 53]. En les comparant aux précédents (éléments solides et coques), ces éléments offrent la possibilité d'utiliser les lois de comportement tridimensionnelles tout en conservant les interpolations utilisées dans les éléments finis coques. Contrairement aux éléments 3D, les éléments coques proposés jusqu'à présent présentent un comportement piézoélectrique linéaire.

1.9 Conclusion

Dans ce premier chapitre introductif, nous avons essayé de montrer l'origine des effets piézoélectriques direct et inverse dans les céramiques ferroélectriques qui représentent le premier matériau piézoélectrique sur le marché. Les phénomènes de réorientation ferroélectrique et ferroélastique, origine des réponses hystérétiques des céramiques piézoélectriques, ont été analysés pour mettre en évidence la nécessité de modéliser ces comportements non linéaires. Une synthèse

bibliographique des modèles phénoménologiques et micromécaniques a été présentée.
Le chapitre suivant est consacré à la présentation d'un modèle phénoménologique ferroélectrique et ferroélastique. Une version ferroélectrique bidimensionnelle de ce modèle est développée en considérant l'hypothèse des contraintes planes. Cette dernière version 2D est couplée avec un élément fini coque dans le chapitre 3 pour étudier les structures ferroélectriques minces. La version 3D de ce modèle est couplée avec un élément hexaédrique dans le chapitre 4 pour l'étude des structures ferroélectriques quelconques.

Chapitre 2

Modélisation phénoménologique du comportement non linéaire des céramiques ferroélectriques

Sommaire

2.1 Introduction 44
2.2 Présentation du modèle phénoménologique 44
2.2.1 Les variables d'état 44
2.2.2 Fonction critère ferroélastique 48
2.2.3 Fonction critère ferroélectrique 51
2.3 Méthode de résolution adoptée 52
2.4 Module tangent électromécanique cohérent 53
2.5 Intégration de la loi ferroélectrique et ferroélastique 54
2.5.1 Comportement piézoélectrique réversible 55
2.5.2 Comportement ferroélectrique 55
2.5.3 Comportement ferroélastique 56
2.5.4 Comportement ferroélectrique et ferroélastique 57
2.5.5 Résultats 58
2.6 Adaptation 2D du modèle phénoménologique 63
2.6.1 Intégration de la loi ferroélectrique bidimensionnelle 65
2.6.2 Résultats 68
2.7 Conclusion 70

2.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous présentons une nouvelle version améliorée du modèle phénoménologique ferroélectrique et ferroélastique développé dans le cadre de la thèse d'Elhadrouz [29]. Inspiré des travaux de Kamlah et al. [50, 48], ce modèle comporte des variables internes macroscopiques et des surfaces de charges similaires à celles utilisées en plasticité.
La gestion des saturations de la polarisation et la déformation rémanentes a été traitée d'une manière explicite dans [29] (un test est effectué à chaque incrément pour vérifier si la saturation est atteinte ou non). Afin d'améliorer cette procédure, deux fonctions de pénalisation exponentielles continues sont adoptées pour gérer ces contraintes cinématiques de saturation. D'autre part, un schéma d'intégration implicite basé sur la méthode de retour radial est considéré pour intégrer les équations différentielles. En effet, cette méthode d'intégration est plus avantageuse qu'un schéma d'intégration explicite (adopté dans la thèse d'Elhadrouz [29]) car cette dernière technique n'est pas aussi précise que la première et son résultat dépend fortement du nombre d'incréments utilisé (généralement, un grand nombre d'incréments doit être considéré pour obtenir une solution raisonnable du problème).
L'intégration implicite de la loi ferroélectrique et ferroélastique est présentée dans la Section 2.5. Le couplage de cette loi tridimensionnelle avec un élément hexaédrique électromécanique est développé dans le chapitre 4.
Une adaptation bidimensionnelle du modèle phénoménologique est effectuée dans la section 2.6. Cette adaptation concerne spécialement l'hypothèse des contraintes planes, souvent considérée dans les théories des plaques et coques, et la polarisation rémanente qui apparaît suivant l'épaisseur dans les structures piézoélectriques minces. Intégré implicitement, ce modèle ferroélectrique bidimensionnel est couplé avec un élément fini coque dans le chapitre 3 pour le calcul des structures ferroélectriques minces.

2.2 Présentation du modèle phénoménologique

2.2.1 Les variables d'état

Pour les phénomènes non linéaires irréversibles, en l'occurrence les comportements ferroélectrique et ferroélastique, l'état actuel de la céramique dépend non seulement des variables observables, qui sont la polarisation électrique (ou bien le déplacement électrique) $\underline{P}$ (ou $\underline{D}$), la déformation totale $\underline{\underline{\varepsilon}}$ et la température T, mais aussi des variables internes qui peuvent décrire l'histoire du chargement et qui sont directement liées aux phénomènes de dissipation qui apparaissent en réponse aux chargements électromécaniques de forte intensité. Les courbes expérimentales [63] montrent que les comportements ferroélectrique et ferroélastique se caractérisent à l'échelle macroscopique par une déformation rémanente $\underline{\underline{\varepsilon}}^r$ et une polarisation rémanente $\underline{P}^r$ qui restent après l'arrêt du chargement. Pour cette raison, nous adopterons la décomposition suivante de la déformation totale et de la polarisation électrique introduite pour la première fois

par Bassiouny et al. [10] et adoptée également dans [48, 64, 30] :

$$\underline{\underline{\varepsilon}} = \underline{\underline{\varepsilon}}^{el} + \underline{\underline{\varepsilon}}^{r} \tag{2.1}$$

$$\underline{D} = \underline{P}^{el} + \underline{P}^{r} \tag{2.2}$$

où $\underline{\underline{\varepsilon}}^{el}$ et $\underline{P}^{el}$ sont la déformation et la polarisation réversibles qui s'annulent quand le chargement électromécanique est supprimé. Elles sont décrites par les équations piézoélectriques linéaires explicitées précédemment [45]. $\underline{\underline{\varepsilon}}^{r}$ et $\underline{P}^{r}$ sont les parties rémanentes qui subsistent après la suppression du chargement extérieur.
Dans le cas où la déformation $\underline{\underline{\varepsilon}}$ et le champ électrique $\underline{E}$ sont les variables de contrôle (choix adapté à un calcul par éléments finis), $\underline{\underline{\varepsilon}}^{el}$ et $\underline{P}^{el}$ sont liés au tenseur des contraintes mécaniques $\underline{\underline{\sigma}}$ et le vecteur champ électrique $\underline{E}$ par les équations piézoélectriques suivantes :

$$\begin{cases} \sigma_{ij} &= C^{E}_{ijkl}\varepsilon^{el}_{kl} - e_{kij}E_k \\ P^{el}_{i} &= e_{ijk}\varepsilon^{el}_{jk} + \epsilon^{\varepsilon}_{ij}E_j \end{cases} \tag{2.3}$$

$\underline{\underline{\underline{e}}}$ est le tenseur piézoélectrique inverse d'ordre 3 qui est directement lié au tenseur piézoélectrique direct $\underline{\underline{\underline{d}}}$ par la relation suivante :

$$e_{kij} = C^{E}_{ijmn}d_{kmn} \tag{2.4}$$

En combinant les Equations (2.1), (2.2) et (2.3), nous obtenons les lois de comportement instantanées qui gouvernent les céramiques ferroélectriques :

$$\begin{cases} \sigma_{ij} &= C^{E}_{ijkl}(\varepsilon_{kl} - \varepsilon^{r}_{kl}) - e_{kij}E_k \\ D_{i} &= e_{ijk}(\varepsilon_{jk} - \varepsilon^{r}_{jk}) + \epsilon^{\varepsilon}_{ij}E_j + P^{r}_{i} \end{cases} \tag{2.5}$$

D'autres partitions des quantités rémanentes peuvent être également envisagées. En effet, la déformation rémanente peut être induite à la fois par un chargement mécanique et/ou électrique. A l'échelle de la maille élémentaire, il y a une relation directe entre la déformation et la polarisation spontanées au travers des coefficients d'électrostriction [29]. Les évolutions des différentes grandeurs peuvent être décrites ainsi par celle de la polarisation spontanée. Par contre, cette relation directe n'existe plus à l'échelle d'un polycristal étant donnée l'orientation aléatoire des grains et des domaines ferroélectriques dans les grains. De plus, une déformation rémanente peut être induite sans qu'il n'y ait de polarisation induite, comme dans le cas d'un test de compression sur une céramique non polarisée. Ainsi, la décomposition suivante de la déformation rémanente peut être considérée [50, 48, 30] :

$$\underline{\underline{\varepsilon}}^{r} = \underline{\underline{\varepsilon}}^{e} + \underline{\underline{\varepsilon}}^{f} \tag{2.6}$$

La première contribution $\underline{\underline{\varepsilon}}^{e}$ est la déformation de polarisation (ou ferroélectrique) directement liée à la réorientation des domaines ferroélectriques sous l'influence d'un champ électrique ex-

térieur de forte intensité lors du processus de polarisation. Ces domaines vont s'aligner dans la direction du champ électrique ce qui entraîne une déformation rémanente de polarisation après suppression du chargement électrique. La deuxième contribution est la déformation ferroélastique $\underline{\underline{\varepsilon}}^f$ non induite par le processus de polarisation et qui résulte de la réorientation ferroélastique des domaines en appliquant une contrainte mécanique de forte amplitude.
La réorientation ferroélastique des domaines, caractérisée par la déformation $\underline{\underline{\varepsilon}}^f$, peut provoquer aussi une baisse de la polarisation rémanente macroscopique : ce phénomène est celui de la dépolarisation mécanique. Il résulte du basculement des domaines ferroélectriques dont l'orientation initiale de la polarisation était proche de la polarisation macroscopique rémanente. Pour cette raison, nous introduisons une deuxième partition de la polarisation rémanente comme proposée dans [29] :

$$\underline{P}^r = \underline{P}^e + \underline{P}^\sigma \tag{2.7}$$

où $\underline{P}^e$ est la polarisation ferroélectrique rémanente induite par le champ électrique et $\underline{P}^\sigma$ est la dépolarisation mécanique induite par la réorientation ferroélastique des domaines. Ainsi, le comportement ferroélectrique est caractérisé par l'évolution de la polarisation rémanente $\underline{P}^e$ et la déformation de polarisation $\underline{\underline{\varepsilon}}^e$. Ces deux quantités peuvent être liées entre elles par la relation suivante [48, 64, 30] :

$$\underline{\underline{\varepsilon}}^e = \frac{3}{2}\varepsilon^{sat}\frac{||\underline{P}^e||}{P^{sat}}(\underline{e}^p \otimes \underline{e}^p - \frac{1}{3}\underline{\underline{\delta}}) \tag{2.8}$$

où ε^{sat} et P^{sat} sont les valeurs maximales (ou de saturation) de la déformation et de la polarisation rémanentes, respectivement, $\underline{\underline{\delta}}$ est le tenseur de Kronecker et $\underline{e}^p$ est la direction de polarisation rémanente définie par :

$$\underline{e}^p = \frac{\underline{P}^r}{||\underline{P}^r||} \tag{2.9}$$

La relation (2.8) qui lie la déformation de polarisation à la polarisation ferroélectrique a été basée sur les observations expérimentales de Cao et Evans [15] qui ont montré que la réorientation des domaines ferroélectriques sous l'effet d'un champ électrique extérieur se déroule à volume constant. Ainsi, la déformation de polarisation est purement déviatorique comme a été supposé dans [41, 48, 30]. La déformation ferroélectrique est égale à $\varepsilon^{sat}(||\underline{P}^e||/P^{sat})$ dans la direction de polarisation et $-(1/2)\varepsilon^{sat}(||\underline{P}^e||/P^{sat})$ suivant les directions transversales.
Le comportement ferroélastique est caractérisé, quant à lui, par l'évolution de la déformation ferroélastique $\underline{\underline{\varepsilon}}^f$ et de la dépolarisation mécanique $\underline{P}^\sigma$. Comme expliqué dans [29] et mis en évidence expérimentalement dans [63, 15], cette dernière polarisation rémanente est induite quand la céramique *polarisée* est soumise à une contrainte de compression suivant la direction de polarisation initiale (Figure 2.1). Cette dépolarisation est le résultat de la réorientation ferroélastique qui diminue le nombre de domaines ayant une direction de polarisation parallèle à la polarisation rémanente initiale. Les domaines nouvellement formés dans les directions transverses ne contribuent pas à une polarisation rémanente transverse à cause du caractère aléatoire de la réorientation ferroélastique (Figure 1.23). L'évolution de la polarisation rémanente $\underline{P}^\sigma$ peut être

liée à celle de la déformation ferroélastique comme suit :

$$\underline{P}^{\sigma} = \tau \frac{P^{sat}}{\varepsilon^{sat}} \underline{\underline{\varepsilon}}^{f} \cdot \underline{e}_0^p \times h(-\frac{\underline{e}_0^p \cdot \underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{e}_0^p}{\sigma_c}) \tag{2.10}$$

τ est un paramètre matériau qui décrit le degré de la dépolarisation mécanique dans la céramique ($\tau = 0.5$ dans [29]) et $\underline{e}_0^p$ est la direction de polarisation de la céramique qui précède directement l'application de la contrainte mécanique. Puisque cette dépolarisation n'a lieu que si la contrainte de compression admet une direction proche de celle de la polarisation rémanente initiale, nous avons considéré la fonction h, définie par

$$h(x) = \frac{1}{2}\Big(1 + \tanh(k\,x)\Big) \tag{2.11}$$

pour vérifier cette condition. Comme montré sur la Figure 2.2, h est nulle s'il s'agit d'un essai de traction ($\underline{e}_0^p \cdot \underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{e}_0^p > 0$) et égale à 1 s'il s'agit d'un essai de compression suivant la direction de polarisation initiale ($\underline{e}_0^p \cdot \underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{e}_0^p < 0$). Le paramètre k de h contrôle la rapidité de transition entre 0 et 1.

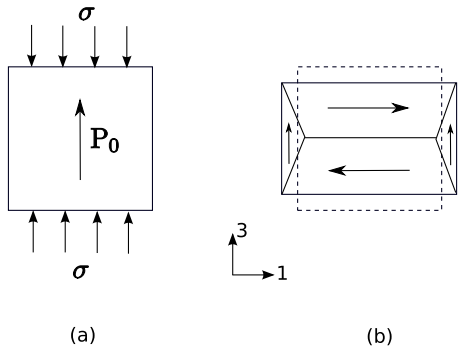


Fig. 2.1 : *(a) Céramique ferroélectrique initialement polarisée suivant 3 soumise à une contrainte de compression de forte intensité. (b) Dépolarisation mécanique de la céramique et persistance d'une polarisation rémanente de faible intensité suivant 3*

Ainsi, le modèle phénoménologique présente deux variables internes qui sont : la polarisation ferroélectrique $\underline{P}^e$ et la déformation ferroélastique $\underline{\underline{\varepsilon}}^f$. Des mesures expérimentales effectuées par Lynch [63] ont montré que les coefficients piézoélectriques dépendent de la norme de la polarisation rémanente. Ainsi, l'expression suivante qui lie le tenseur piézoélectrique direct $\underline{\underline{d}}$ à la polarisation rémanente $\underline{P}^r$ peut être considérée [48, 64, 30] :

$$d_{ijk} = \frac{\|\underline{P}^r\|}{P^{sat}}\Big\{d_{33}e_i^p e_j^p e_k^p + d_{31}(\delta_{jk} - e_j^p e_k^p)e_i^p + \frac{d_{15}}{2}[(\delta_{ij} - e_i^p e_j^p)e_k^p + (\delta_{ik} - e_i^p e_k^p)e_j^p]\Big\} \tag{2.12}$$

d_{33}, d_{31} et d_{15} sont les coefficients piézoélectriques non nuls d'une céramique ferroélectrique polarisée.

Il est nécessaire maintenant de définir les lois d'évolution des variables internes du modèle que

nous développerons dans la section suivante.

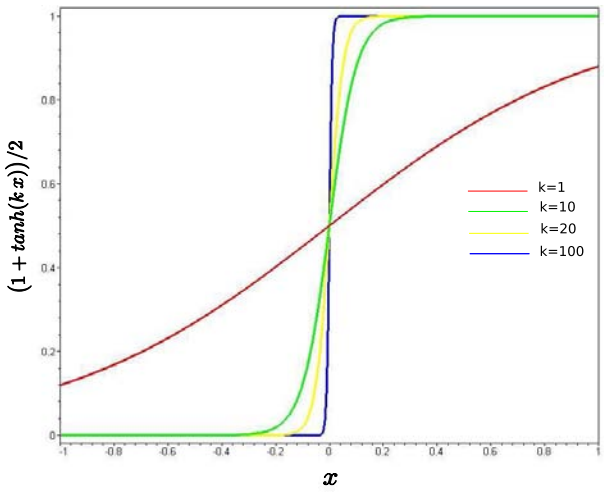


FIG. 2.2 : *La fonction* $(1 + tanh(kx))/2$

2.2.2 Fonction critère ferroélastique

Les courbes expérimentales présentées par Lynch dans [63] montrent que la réorientation ferroélastique des domaines commence quand la contrainte mécanique (en général de compression) atteint une valeur critique appelée contrainte coercitive et notée σ_c. En dessous de cette valeur, la réponse des céramiques ferroélectriques est linéaire réversible et le comportement peut être décrit par les équations piézoélectriques classiques. Un critère isotrope de Von Mises peut être considéré (adopté aussi dans [48]) et une fonction de charge ferroélastique est définie pour indiquer le début de la réorientation ferroélastique des domaines :

$$f^{\sigma} = \|\frac{3}{2}(\underline{\underline{s}} - \underline{\underline{X}}^{\sigma})\| - \hat{\sigma}_c = \sqrt{\frac{3}{2}(s_{ij} - X^{\sigma}_{ij})(s_{ij} - X^{\sigma}_{ij})} - \hat{\sigma}_c \leq 0 \tag{2.13}$$

$\underline{\underline{s}}$ est le tenseur déviateur des contraintes ($s_{ij} = \sigma_{ij} - \frac{1}{3}tr(\underline{\underline{\sigma}})\delta_{ij}$), $\underline{\underline{X}}^{\sigma}$ est un tenseur d'*écrouissage cinématique* d'ordre 2 utilisé pour décrire le déplacement du centre de la surface de charge. Le critère isotrope de Von Mises est souvent considéré en plasticité quand la réponse du solide est symétrique en traction et compression. Généralement, cette symétrie n'est pas observable chez les céramiques ferroélectriques à cause de leur importante rigidité en compression et leur fragilité en traction. En particulier, il est montré dans [33] que pour un même niveau de contrainte de traction et de compression, les déformations ferroélastiques de traction étaient deux fois supérieures à celles de compression ce qui induit forcément une dissymétrie de comportement $\sigma - \varepsilon$. La fragilité des céramiques ferroélectriques en traction nous dicte d'envisager plus des essais de compression sur ces céramiques pour mettre en évidence la réorientation ferroélastique des domaines et les phénomènes non linéaires qui en résultent. De plus, le critère simplifié de

Von Mises est considéré dans la suite (malgré la dissymétrie de la réponse $\sigma - \varepsilon$) pour indiquer le début de la réorientation ferroélastique des domaines spécialement quand la céramique est soumise à un essai de compression.

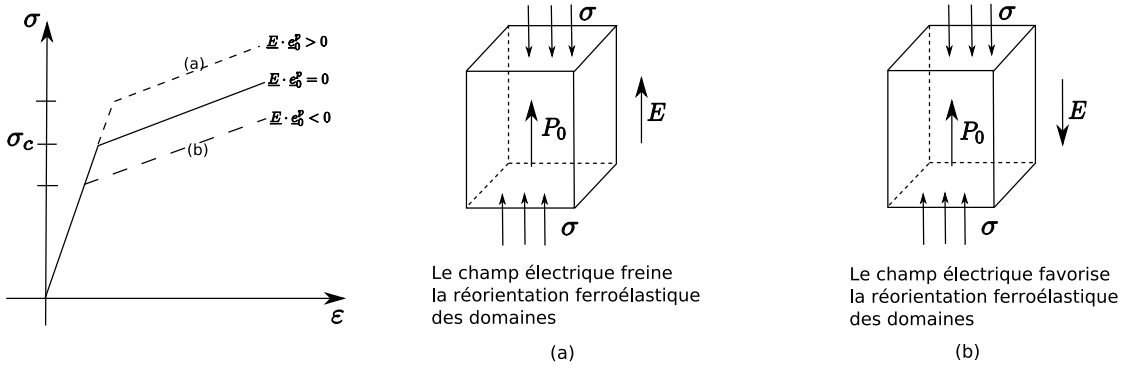


FIG. 2.3 : *Ecrouissage isotrope de la surface de charge ferroélastique lors d'un essai de compression sur une céramique initialement polarisée.*

La contrainte coercitive $\hat{\sigma}_c$ dépend du champ électrique appliqué et de la direction de polarisation initiale ajoutant ainsi un *écrouissage isotrope* au comportement ferroélastique se traduisant par une expansion uniforme de la surface de charge $f^\sigma = 0$. En effet, ce dernier écrouissage isotrope a été mis en valeur expérimentalement par Schäufele et Härdtl [73] en effectuant des essais de compression sur des céramiques de PZT polarisées et en superposant un champ électrique dans le même sens que la polarisation initiale. Ils ont montré que la contrainte coercitive augmentait linéairement avec le champ électrique. Chaplya et Carman [18] ont montré expérimentalement, sur un essai de compression aussi, que la contrainte coercitive était proche de zéro quand ils ont superposé un champ électrique opposé à la polarisation rémanente d'intensité proche du champ électrique coercitif E_c. Ainsi, la contrainte coercitive peut varier en fonction du champ électrique quand une céramique ferroélectrique polarisée est soumise premièrement, à un essai de compression dans la même direction que la polarisation rémanente initiale, et deuxièmement, à un champ électrique parallèle à la direction de polarisation comme illustré par la Figure 2.3. Une façon de tenir compte de ces observations est de considérer l'expression suivante de la contrainte coercitive :

$$\hat{\sigma}_c =< \sigma_c + \delta\, \underline{E} \cdot \underline{e}_0^p \times h(-\frac{\underline{e}_0^p \cdot \underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{e}_0^p}{\sigma_c}) > \tag{2.14}$$

Les crochets de MacCauley [50] $< \cdot >$ vérifient la propriété suivante :

$$< x >= \begin{cases} 0 & \text{si} \quad x \leq 0 \\ x & \text{si} \quad x \geq 0 \end{cases} \tag{2.15}$$

Ils sont donc utilisés pour s'assurer que $\hat{\sigma}_c$ ne prenne pas des valeurs négatives. σ_c est la contrainte coercitive en l'absence d'un champ électrique appliqué, δ est un paramètre matériau positif qui détermine l'influence du champ électrique sur la contrainte coercitive et h est la fonction définie

dans l'Equation (2.11). L'expression de $\hat{\sigma}_c$ peut être écrite en utilisant la fonction h en remarquant que $< x > \approx x\, h(x)$.

Des considérations thermodynamiques [10, 11, 30] montrent que la ferroélasticité induit une dissipation instantanée. Dans ce cas, la fonction de charge ferroélastique f^σ est choisie comme un potentiel de dissipation à partir duquel dérive l'évolution de la variable interne $\underline{\underline{\varepsilon}}^f$. f^σ est convexe et dérivable, donc la règle de normalité permet de donner la loi d'évolution de la déformation ferroélastique :

$$\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}^f = \dot{\lambda}^\sigma \frac{\partial f^\sigma}{\partial \underline{\underline{\sigma}}} \tag{2.16}$$

où λ^σ est un multiplicateur ferroélastique déterminé par la condition de cohérence : $\dot{f}^\sigma = 0$. Un *flux* ferroélastique peut avoir lieu seulement si les conditions suivantes sont simultanément satisfaites :

1. le point représentatif de l'état des contraintes est situé sur la surface de charge $f^\sigma = 0$;
2. le point représentatif de l'état des contraintes ne quitte pas la surface de charge ($f^\sigma > 0$ est impossible) et la condition de cohérence $\dot{f}^\sigma = 0$ doit être satisfaite.

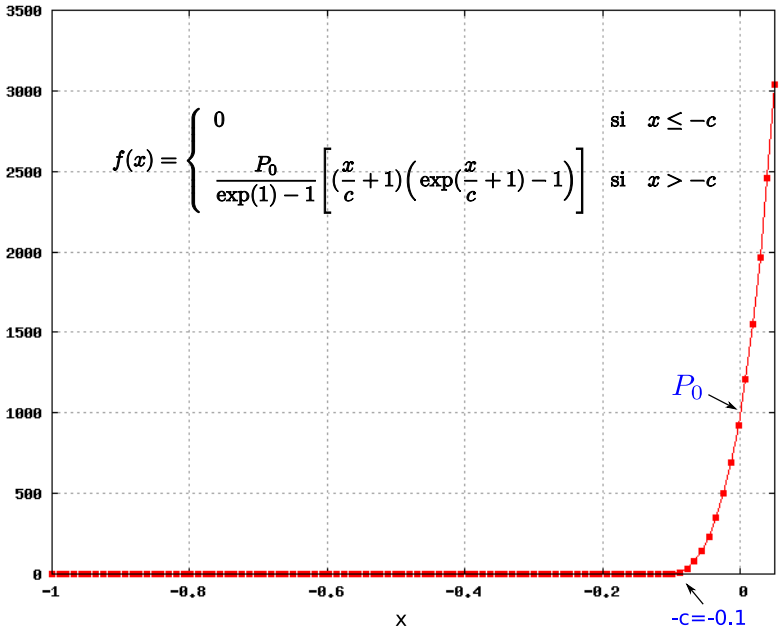


Fig. 2.4 : *Courbe de la fonction de pénalisation utilisée pour contrôler les saturations de la déformation et polarisation rémanentes. c=0.1 et P_0=1000.*

La déformation rémanente ne peut pas dépasser une valeur maximale qui est la déformation rémanente de saturation ε^{sat} qui correspond au cas où tous les domaines ferroélectriques sont orientés suivant la direction du chargement électromécanique. Pour satisfaire cette contrainte

cinématique, nous définissons une déformation rémanente équivalente ε^r_{eq} :

$$\varepsilon^r_{eq} = \|\frac{2}{3}\underline{\underline{\varepsilon}}^r\| = \sqrt{\frac{2}{3}\varepsilon^r_{ij}\varepsilon^r_{ij}} \tag{2.17}$$

qui doit vérifier la condition cinématique suivante :

$$0 \leq \varepsilon^r_{eq} \leq \varepsilon^{sat} \tag{2.18}$$

Pour satisfaire cette dernière inégalité, nous utiliserons la forme suivante du tenseur d'écrouissage $\underline{\underline{X}}^\sigma$:

$$\underline{\underline{X}}^\sigma = \gamma\underline{\underline{\varepsilon}}^f\Big(1 + g_1(\varepsilon^r_{eq})\Big) \tag{2.19}$$

où γ est un paramètre matériau et g_1 est une fonction exponentielle définie par :

$$g_1(\varepsilon^r_{eq}) = \begin{cases} 0 & \text{si} \quad J^s \leq -c^s \\ \dfrac{P^s_0}{\exp(1)-1}\left[(\dfrac{J^s}{c^s}+1)\Big(\exp(\dfrac{J^s}{c^s}+1)-1\Big)\right] & \text{si} \quad J^s > -c^s \end{cases} \quad \text{et} \quad J^s = \frac{\varepsilon^r_{eq}}{\varepsilon^{sat}} - 1 \tag{2.20}$$

La fonction de pénalisation g_1 (Figure 2.4) est introduite dans le tenseur $\underline{\underline{X}}^\sigma$ pour contrôler la saturation de la déformation rémanente (Equation (2.18)). En effet, elle est nulle si la déformation rémanente équivalente est en dessous de ε^{sat} et prend une valeur importante quand ε^r_{eq} est très proche de ε^{sat} pour annuler l'incrément de $\underline{\underline{\varepsilon}}^f$. P^s_0 et c^s sont les paramètres de cette fonction exponentielle ferroélastique.

2.2.3 Fonction critère ferroélectrique

La réorientation ferroélectrique des domaines dans une céramique commence quand le champ électrique atteint une valeur critique appelée le champ électrique coercitif et notée E_c. En dessous de cette valeur, la réponse de la céramique est linéaire réversible et le comportement peut être décrit par les équations piézoélectriques. Une fonction de charge électrique est introduite pour indiquer le début de la réorientation ferroélectrique des domaines [50, 48, 30] :

$$f^e = ||\underline{E} - \underline{X}^e|| - E_c = \sqrt{(E_i - X^e_i)(E_i - X^e_i)} - E_c \leq 0 \tag{2.21}$$

où $\underline{X}^e$ est équivalent à un vecteur d'écrouissage cinématique. Des considérations thermodynamiques [10, 11, 30] montrent que la ferroélectricté induit également une dissipation instantanée. Dans ce cas, la fonction de charge ferroélectrique f^e est choisie comme un potentiel de dissipation électrique à partir duquel dérive l'évolution de la variable interne $\underline{P}^e$. f^e est convexe et dérivable, donc la règle de normalité permet de donner la loi d'évolution de la polarisation ferroélectrique :

$$\underline{\dot{P}}^e = \dot{\lambda}^e\frac{\partial f^e}{\partial \underline{E}} \tag{2.22}$$

où λ^e est un multiplicateur ferroélectrique déterminé par la condition de cohérence : $\dot{f}^e = 0$. Ainsi, un flux ferroélectrique se produit seulement si les deux conditions suivantes sont satisfaites :

1. le point représentatif de l'état du champ électrique est situé sur la surface de charge électrique $f^e = 0$;
2. le point représentatif de l'état du champ électrique ne quitte pas la surface de charge électrique ($f^e > 0$ est impossible) et la condition de cohérence $\dot{f}^e = 0$ doit être satisfaite.

La polarisation rémanente ne peut pas dépasser une certaine limite qui est la polarisation rémanente maximale P^{sat} :

$$0 \leq \|\underline{P}^r\| = P^r_{eq} \leq P^{sat} \tag{2.23}$$

Pour satisfaire cette dernière condition, nous utiliserons l'expression suivante du vecteur d'écrouissage $\underline{X}^e$:

$$\underline{X}^e = \beta \underline{P}^e \Big(1 + g_2(P^r_{eq})\Big) \tag{2.24}$$

où β est un paramètre matériau et g_2 est une fonction exponentielle scalaire définie par :

$$g_2(P^r_{eq}) = \begin{cases} 0 & \text{si} \quad J^e \leq -c^e \\ \dfrac{P^e_0}{\exp(1) - 1}\left[(\dfrac{J^e}{c^e} + 1)\Big(\exp(\dfrac{J^e}{c^e} + 1) - 1\Big)\right] & \text{si} \quad J^e > -c^e \end{cases} \quad \text{et} \quad J^e = \frac{P^r_{eq}}{P^{sat}} - 1 \tag{2.25}$$

La fonction de pénalisation g_2 prend une valeur nulle quand la polarisation rémanente équivalente est loin de la valeur de saturation et elle prend des valeurs importantes quand P^r_{eq} est très proche de P^{sat} pour annuler l'incrément de la polarisation ferroélectrique. P^e_0 et c^e sont les paramètres de la fonction exponentielle ferroélectrique et ils doivent être adéquatement choisis pour contrôler la saturation de P^r_{eq}.

2.3 Méthode de résolution adoptée

Le modèle ferroélectrique et ferroélastique non linéaire doit être résolu pour chaque incrément de chargement électromécanique afin de déterminer les incréments des variables internes. Pour l'intégration des équations différentielles, l'intervalle de chargement $[t_n\,,\,t_{n+1}]$ est considéré. Toutes les quantités à t_n, t_{n+1} sont notées avec l'indexe n et $n+1$, respectivement. Il est supposé que l'état local de la structure ferroélectrique au début de l'incrément est connu : les variables internes $\underline{P}^e_n$ et $\underline{\underline{\varepsilon}}^f_n$ sont connues. La méthode de retour radial [75] est adoptée pour déterminer les incréments des variables internes $\triangle\underline{P}^e$ et $\triangle\underline{\underline{\varepsilon}}^f$ en réponse à un incrément du chargement électromécanique ($\triangle\underline{\underline{\sigma}}$ et $\triangle\underline{E}$). Puisque la méthode des éléments finis sera considérée pour étudier les structures ferroélectriques et ferroélastiques, les incréments des variables internes vont plutôt apparaitre à cause de l'incrément de la déformation mécanique $\triangle\underline{\underline{\varepsilon}}$ et de $\triangle\underline{E}$.
Les équations constitutives, qui sont les relations de comportement (2.5), les lois de normalité (2.16) et (2.22) et les conditions de cohérence ($f^\sigma = 0$ et $f^e = 0$), sont regroupées dans un

système de résidus sous une forme unique $\underline{F}(\underline{X},\underline{Y}) = 0$ en notant $\underline{X}$ le vecteur des variables inconnues et $\underline{Y}$ le vecteur contenant les variables de pilotage. Dans sa forme la plus générale, $\underline{X}$ contient les contraintes mécaniques, les composantes du vecteur déplacement électrique, la polarisation ferroélectrique, les déformations ferroélastiques et les multiplicateurs ferroélectrique et ferroélastique. $\underline{Y}$ contient les déformations mécaniques totales et les composantes du vecteur champ électrique. Le système est supposé à l'équilibre au début de l'incrément $\underline{F}(\underline{X}_n,\underline{Y}_n) = 0$. Si les variables de pilotage $\underline{Y}$ sont modifiées d'un incrément $\triangle\underline{Y}$ alors le système est déséquilibré ($\underline{F}(\underline{X}_n,\underline{Y}_n + \triangle\underline{Y}) \neq 0$) et un incrément $\triangle\underline{X}$ doit être déterminé pour rééquilibrer le système, de manière à avoir : $\underline{F}(\underline{X}_n + \triangle\underline{X},\underline{Y}_n + \triangle\underline{Y}) \approx 0$.
L'approche de Newton-Raphson est considérée pour déterminer l'incrément $\triangle\underline{X}$. Elle consiste à faire un développement limité au premier ordre du système de résidus. Il s'agit donc de dériver les différentes équations en fonction des variables inconnues. Par inversion du problème, une première estimation de $\triangle\underline{X}$ est obtenue. Toutefois, le système étant non linéaire, un développement limité au premier ordre ne suffit pas à trouver la solution exacte et plusieurs itérations sont nécessaires pour converger vers la bonne solution. Chaque correction calculée à chaque itération est notée $\delta\triangle\underline{X}$. Le schéma de Newton-Raphson est le suivant :

1. A l'état initial (début de l'incrément), le système est supposé en équilibre : $\underline{F}(\underline{X}_n,\underline{Y}_n) = 0$;
2. Le système est déséquilibré par un incrément du vecteur contenant les variables de pilotage : $\underline{F}(\underline{X}_n,\underline{Y}_n + \triangle\underline{Y}) \neq 0$. Il s'agit donc de trouver l'incrément $\triangle\underline{X}$ pour lequel $\underline{F}(\underline{X}_n + \triangle\underline{X},\underline{Y}_n + \triangle\underline{Y}) \approx 0$;
3. Approximation de Newton-Raphson à l'itération $(i+1)$:

$$\underline{F}(\underline{X}_n+\triangle\underline{X}^{(i)},\underline{Y}_n+\triangle\underline{Y})+[J_X]\cdot\delta\triangle\underline{X}^{(i+1)} \approx 0 \quad ; \quad [J_X] = \frac{\partial\underline{F}}{\partial\triangle\underline{X}}\Big|_{\underline{X}_n+\triangle\underline{X}^{(i)},\underline{Y}_n+\triangle\underline{Y}} \tag{2.26}$$

4. Calcul de la correction de Newton à l'itération $(i+1)$ par inversion de la relation linéarisée :

$$\delta\triangle\underline{X}^{(i+1)} = -[J_X]^{-1}\cdot\underline{F}(\underline{X}_n + \triangle\underline{X}^{(i)},\underline{Y}_n + \triangle\underline{Y}) \tag{2.27}$$

5. Mise à jour de l'incrément :

$$\triangle\underline{X}^{(i+1)} = \triangle\underline{X}^{(i)} + \delta\triangle\underline{X}^{(i+1)} \tag{2.28}$$

6. Retour à l'étape 2 tant que $\underline{F}(\underline{X}_n + \triangle\underline{X}^{(i+1)},\underline{Y}_n + \triangle\underline{Y}) \neq 0$ à un résidu près.

2.4 Module tangent électromécanique cohérent

Comme il sera détaillé dans les chapitres 3 et 4, la résolution par éléments finis du problème ferroélectrique et ferroélastique non linéaire nécessite la définition du module tangent électromé-

canique cohérent. Pour ce faire, il faut calculer les modules tangents suivants :

$$\frac{\partial \triangle \sigma_{ij}}{\partial \triangle \varepsilon_{kl}} \quad ; \quad \frac{\partial \triangle \sigma_{ij}}{\partial \triangle E_k} \quad ; \quad \frac{\partial \triangle D_i}{\partial \triangle \varepsilon_{kl}} \quad ; \quad \frac{\partial \triangle D_i}{\partial \triangle E_k} \tag{2.29}$$

Le calcul d'un module tangent cohérent avec la méthode d'intégration implicite adoptée est assez direct. En effet, il peut être déterminé à partir d'une analyse de l'effet d'une perturbation de l'état en fin d'incrément. Nous imposons une petite perturbation du vecteur de pilotage $\delta\triangle\underline{Y}$ ce qui a pour effet de modifier linéairement le vecteur des inconnues d'une valeur $\delta\triangle\underline{X}$ en respectant toujours l'équilibre :

$$\underline{F}(\underbrace{\underline{X}_n + \triangle\underline{X}}_{\underline{X}_{n+1}} + \delta\triangle\underline{X}, \underbrace{\underline{Y}_n + \triangle\underline{Y}}_{\underline{Y}_{n+1}} + \delta\triangle\underline{Y}) \approx 0 \tag{2.30}$$

En développant cette dernière équation autour de $\underline{X}_{n+1}$ et $\underline{Y}_{n+1}$, nous obtenons

$$\underbrace{\underline{F}(\underline{X}_{n+1}, \underline{Y}_{n+1})}_{\approx 0} + \underbrace{\frac{\partial \underline{F}}{\partial \triangle \underline{X}}\Big|_{\underline{X}_{n+1}, \underline{Y}_{n+1}}}_{[J_X]} \delta\triangle\underline{X} + \underbrace{\frac{\partial \underline{F}}{\partial \triangle \underline{Y}}\Big|_{\underline{X}_{n+1}, \underline{Y}_{n+1}}}_{[J_Y]} \delta\triangle\underline{Y} \approx 0 \tag{2.31}$$

soit

$$\frac{\delta\triangle\underline{X}}{\delta\triangle\underline{Y}} = -[J_X]^{-1}\,[J_Y] \tag{2.32}$$

$[J_X]$ est le dernier jacobien calculé pour résoudre le système des résidus et $[J_Y]$ contient les dérivées du vecteur résidu $\underline{F}$ par rapport aux variables de pilotage. Finalement, le module tangent électromécanique cohérent est contenu dans la matrice $[\delta\triangle\underline{X}/\delta\triangle\underline{Y}]$.

2.5 Intégration de la loi ferroélectrique et ferroélastique

Dans cette section, il est supposé que les tenseurs élastique et diélectrique ($\underline{\underline{\underline{\underline{C}}}}^E$ et $\underline{\underline{\epsilon}}^{\varepsilon}$, respectivement) sont isotropes et restent constants sur l'incrément de chargement. Ce choix est dicté par le fait que la polarisation rémanente peut apparaître suivant les trois directions de l'espace et non uniquement suivant l'épaisseur comme c'est le cas des structures minces (voir section 2.6). Deux prédictions électrique et mécanique à la fin de l'incrément consistent à geler les *écoulements* ferroélectrique et ferroélastique :

$$f_{n+1}^{e\ pred} = \|\underline{E}_{n+1} - \underline{X}_{n+1}^{e\ pred}\| - E_c \tag{2.33}$$

$$f_{n+1}^{\sigma\ pred} = \|\frac{3}{2}(\underline{\underline{s}}_{n+1}^{pred} - \underline{\underline{X}}_{n+1}^{\sigma\ pred})\| - \hat{\sigma}_{c|n+1}^{pred} \tag{2.34}$$

avec

$$\underline{X}_{n+1}^{e\ pred} = \beta \underline{P}_n^e \tag{2.35}$$

$$\underline{\underline{X}}_{n+1}^{\sigma\ pred} = \gamma \underline{\underline{\varepsilon}}_n^f \tag{2.36}$$

$$s^{pred}_{ij|n+1} = \text{déviateur}(\underline{\underline{\sigma}}^{pred}_{n+1}) \tag{2.37}$$

$$\underline{\underline{\sigma}}^{pred}_{n+1} = \underline{\underline{\sigma}}_n + \triangle\underline{\underline{\sigma}}^{pred} \quad ; \quad \triangle\sigma^{pred}_{ij} = C^E_{ijkl}\triangle\varepsilon_{kl|n+1} - e_{kij|n}\triangle E_k \tag{2.38}$$

$$\hat{\sigma}^{pred}_{c|n+1} =< \sigma_c + \delta\, \underline{E}_{n+1}\cdot\underline{e}^p_n\, h(-\frac{\underline{e}^p_n\cdot\underline{\underline{\sigma}}^{pred}_{n+1}\cdot\underline{e}^p_n}{\sigma_c}) > \tag{2.39}$$

Suivant les signes de $f^{e\,pred}_{n+1}$ et $f^{\sigma\,pred}_{n+1}$, quatre comportements peuvent exister :

- si $f^{e\,pred}_{n+1} \leq 0$ et $f^{\sigma\,pred}_{n+1} \leq 0$ alors $\triangle\underline{P}^e = 0$ et $\triangle\underline{\underline{\varepsilon}}^f = 0$: comportement piézoélectrique réversible ;
- si $f^{e\,pred}_{n+1} > 0$ et $f^{\sigma\,pred}_{n+1} \leq 0$ alors $\triangle\underline{P}^e \neq 0$ et $\triangle\underline{\underline{\varepsilon}}^f = 0$: comportement ferroélectrique non linéaire ;
- si $f^{e\,pred}_{n+1} \leq 0$ et $f^{\sigma\,pred}_{n+1} > 0$ alors $\triangle\underline{P}^e = 0$ et $\triangle\underline{\underline{\varepsilon}}^f \neq 0$: comportement ferroélastique non linéaire ;
- si $f^{e\,pred}_{n+1} > 0$ et $f^{\sigma\,pred}_{n+1} > 0$ alors $\triangle\underline{P}^e \neq 0$ et $\triangle\underline{\underline{\varepsilon}}^f \neq 0$: comportement ferroélectrique et ferroélastique couplé.

2.5.1 Comportement piézoélectrique réversible

Lorsque les deux prédictions électrique et mécanique sont négatives

$$f^{e\,pred}_{n+1} \leq 0 \quad \text{et} \quad f^{\sigma\,pred}_{n+1} \leq 0 \tag{2.40}$$

alors le comportement est piézoélectrique réversible. Les incréments des variables internes sont nuls et les contraintes mécaniques et le vecteur déplacement électrique à la fin de l'incrément sont déterminés par les relations suivantes :

$$\left\{\begin{array}{lcl} \sigma_{ij|n+1} & = & C^E_{ijkl}(\varepsilon_{kl|n+1} - \varepsilon^e_{kl|n} - \varepsilon^f_{kl|n}) - e_{kij|n}E_{k|n+1} \\ D_{i|n+1} & = & e_{ikl|n}((\varepsilon_{kl|n+1} - \varepsilon^e_{kl|n} - \varepsilon^f_{kl|n}) + \epsilon^{\varepsilon}_{ik}E_{k|n+1} + P^r_{i|n} \end{array}\right. \tag{2.41}$$

Dans ce cas, les modules tangents (2.29) sont donnés par :

$$\frac{\partial\triangle\sigma_{ij}}{\partial\triangle\varepsilon_{kl}} = C^E_{ijkl} \quad ; \quad \frac{\partial\triangle\sigma_{ij}}{\partial\triangle E_k} = -e_{kij|n} \quad ; \quad \frac{\partial\triangle D_i}{\partial\triangle\varepsilon_{kl}} = e_{ikl|n} \quad ; \quad \frac{\partial\triangle D_i}{\partial\triangle E_k} = \epsilon^{\varepsilon}_{ik} \tag{2.42}$$

2.5.2 Comportement ferroélectrique

Un écoulement ferroélectrique pur apparaît quand la prédiction électrique est positive et la prédiction mécanique est négative :

$$f^{e\,pred}_{n+1} > 0 \quad \text{et} \quad f^{\sigma\,pred}_{n+1} \leq 0 \tag{2.43}$$

Dans ce cas, il est nécessaire de déterminer l'incrément de la polarisation ferroélectrique noté $\triangle\underline{P}^e$ pour vérifier la condition de cohérence électrique à la fin de l'incrément : $f^e_{n+1} = 0$. Pour

déterminer les inconnues $\triangle\underline{\underline{\sigma}}$, $\triangle\underline{D}$, $\triangle\underline{P}^e$ et $\triangle\lambda^e$, le système de résidus suivant doit être résolu :

$$\begin{cases} R^{\sigma}_{ij} &= \sigma_{ij|n+1} - C^E_{ijkl}(\varepsilon_{kl|n+1} - \varepsilon^e_{kl|n+1} - \varepsilon^f_{kl|n}) + e_{kij|n+1}E_{k|n+1} \\ R^D_i &= D_{i|n+1} - e_{ikl|n+1}(\varepsilon_{kl|n+1} - \varepsilon^e_{kl|n+1} - \varepsilon^f_{kl|n}) - \epsilon^{\varepsilon}_{ik}E_{k|n+1} - P^r_{i|n} - \triangle P^e_i \\ R^e_i &= \triangle P^e_i - \triangle\lambda^e \dfrac{E_{i|n+1} - X^e_{i|n+1}}{\|\underline{E}_{n+1} - \underline{X}^e_{n+1}\|} \\ R^{f^e} &= \|\underline{E}_{n+1} - \underline{X}^e_{n+1}\| - E_c \end{cases} \tag{2.44}$$

Notons

$$\begin{aligned} \{\triangle X\} &= \{\triangle\sigma_{11}\ \triangle\sigma_{12}\ \triangle\sigma_{13}\ \triangle\sigma_{21}\ \triangle\sigma_{22}\ \triangle\sigma_{23}\ \triangle\sigma_{31}\ \triangle\sigma_{32}\ \triangle\sigma_{33} \vdots \\ &\quad \triangle D_1\ \triangle D_2\ \triangle D_3 \vdots \triangle P^e_1\ \triangle P^e_2\ \triangle P^e_3 \vdots \triangle\lambda^e\}^T \end{aligned} \tag{2.45}$$

le vecteur des inconnues et

$$\{\triangle Y\} = \{\triangle\varepsilon_{11}\ \triangle\varepsilon_{12}\ \triangle\varepsilon_{13}\ \triangle\varepsilon_{21}\ \triangle\varepsilon_{22}\ \triangle\varepsilon_{23}\ \triangle\varepsilon_{31}\ \triangle\varepsilon_{32}\ \triangle\varepsilon_{33} \vdots \triangle E_1\ \triangle E_2\ \triangle E_3\}^T \tag{2.46}$$

le vecteur de pilotage qui contient l'incrément des déformations *généralisées*. A partir du Système (2.44), le vecteur résidu $\underline{F}$ est défini :

$$\{F\} = \{R^{\sigma}_{11}\ R^{\sigma}_{12}\ R^{\sigma}_{13}\ R^{\sigma}_{21}\ R^{\sigma}_{22}\ R^{\sigma}_{23}\ R^{\sigma}_{31}\ R^{\sigma}_{32}\ R^{\sigma}_{33} \vdots R^D_1\ R^D_2\ R^D_3 \vdots R^e_1\ R^e_2\ R^e_3 \vdots R^{f^e}\}^T \tag{2.47}$$

Les matrices jacobiennes $[J_X]$ et $[J_Y]$ (voir sections 2.3 et 2.4) sont déterminés à partir des dérivées des résidus $\underline{\underline{R}}^{\sigma}$, $\underline{R}^D$, $\underline{R}^e$ et R^{f^e} par rapport aux variables inconnues du vecteur $\triangle\underline{X}$ et variables de pilotage de $\triangle\underline{Y}$. Les expressions de ces dérivées ainsi que les formes globales de $[J_X]$ et $[J_Y]$ sont détaillées en annexe A.

2.5.3 Comportement ferroélastique

Quand la prédiction mécanique est positive, alors la réorientation ferroélastique des domaines est active. Dans ce cas, il est nécessaire de déterminer l'incrément de la déformation ferroélastique noté $\triangle\underline{\underline{\varepsilon}}^f$ pour vérifier la condition de cohérence ferroélastique à la fin de l'incrément : $f^{\sigma}_{n+1} = 0$. Pour déterminer $\triangle\underline{\underline{\sigma}}$ et $\triangle\underline{D}$ $\triangle\underline{\underline{\varepsilon}}^f$ et $\triangle\lambda^{\sigma}$, le système de résidus suivant doit être résolu :

$$\begin{cases} R^{\sigma}_{ij} &= \sigma_{ij|n+1} - C^E_{ijkl}(\varepsilon_{kl|n+1} - \varepsilon^e_{kl|n} - \varepsilon^f_{kl|n+1}) + e_{kij|n+1}E_{k|n+1} \\ R^D_i &= D_{i|n+1} - e_{ikl|n+1}(\varepsilon_{kl|n+1} - \varepsilon^e_{kl|n} - \varepsilon^f_{kl|n+1}) - \epsilon^{\varepsilon}_{ik}E_{k|n+1} - P^r_{i|n} - \triangle P^{\sigma}_i \\ R^f_{ij} &= \triangle\varepsilon^f_{ij} - \sqrt{\dfrac{3}{2}}\triangle\lambda^{\sigma} \dfrac{s_{ij|n+1} - X^{\sigma}_{ij|n+1}}{\|\underline{\underline{s}}_{n+1} - \underline{\underline{X}}^{\sigma}_{n+1}\|} \\ R^{f^{\sigma}} &= \sqrt{\dfrac{3}{2}}\|\underline{\underline{s}}_{n+1} - \underline{\underline{X}}^{\sigma}_{n+1}\| - \hat{\sigma}_{c|n+1} \end{cases} \tag{2.48}$$

avec

$$\triangle \underline{P}^{\sigma} = \tau \frac{P^{sat}}{\varepsilon^{sat}} \triangle \underline{\underline{\varepsilon}}^{f} \cdot \underline{e}_n^p \times h(-\frac{\underline{e}_n^p \cdot \underline{\underline{\sigma}}_{n+1} \cdot \underline{e}_n^p}{\sigma_c}) \tag{2.49}$$

et

$$\hat{\sigma}_{c|n+1} = \left\langle \sigma_c + \delta\, \underline{E}_{n+1} \cdot \underline{e}_n^p \times h(-\frac{\underline{e}_n^p \cdot \underline{\underline{\sigma}}_{n+1} \cdot \underline{e}_n^p}{\sigma_c}) \right\rangle \tag{2.50}$$

La dépolarisation mécanique diminue le nombre de domaines ferroélectriques ayant initialement une polarisation rémanente proche de $\underline{P}_n^r$ et ne fait pas apparaître une polarisation rémanente transverse à cause de la nature aléatoire de ce phénomène. Par conséquent, la réorientation ferroélastique des domaines n'annule pas la polarisation rémanente initiale (au début de l'incrément) mais affaiblit son intensité : à la fin de l'incrément, une polarisation rémanente d'intensité plus faible que la polarisation initiale persiste (Figure 2.1). Ainsi, la direction de polarisation reste inchangée sur un incrément ferroélastique ($\underline{e}_{n+1}^p = \underline{e}_n^p$) et la déformation ferroélectrique (Équation (2.8)) ne change pas puisque $\triangle \underline{P}^e$ est nul dans ce cas ($\underline{\underline{\varepsilon}}_{n+1}^e = \underline{\underline{\varepsilon}}_n^e$).
Notons

$$\begin{aligned} \{\triangle X\} \;=\; & \{\triangle\sigma_{11}\ \triangle\sigma_{12}\ \triangle\sigma_{13} \cdots \triangle\sigma_{33} \,\vdots\, \triangle D_1\ \triangle D_2\ \triangle D_3 \,\vdots \\ & \triangle\varepsilon_{11}^f\ \triangle\varepsilon_{12}^f\ \triangle\varepsilon_{13}^f\ \cdots\ \triangle\varepsilon_{33}^f \,\vdots\, \triangle\lambda^{\sigma}\}^T \end{aligned} \tag{2.51}$$

le vecteur des inconnues,

$$\{\triangle Y\} = \{\triangle\varepsilon_{11}\ \triangle\varepsilon_{12}\ \triangle\varepsilon_{13}\ \triangle\varepsilon_{21}\ \triangle\varepsilon_{22}\ \triangle\varepsilon_{23}\ \triangle\varepsilon_{31}\ \triangle\varepsilon_{32}\ \triangle\varepsilon_{33} \,\vdots\, \triangle E_1\ \triangle E_2\ \triangle E_3\}^T \tag{2.52}$$

le vecteur de pilotage et

$$\{F\} = \{R_{11}^{\sigma}\ R_{12}^{\sigma}\ R_{13}^{\sigma} \cdots R_{33}^{\sigma} \,\vdots\, R_1^D\ R_2^D\ R_3^D \,\vdots\, R_{11}^f\ R_{12}^f\ R_{13}^f \cdots R_{33}^f \,\vdots\, R^{f^{\sigma}}\}^T \tag{2.53}$$

le vecteur des résidus.
Dans ce cas, les matrices jacobiennes $[J_X]$ et $[J_Y]$ sont déterminés à partir des dérivées des résidus $\underline{\underline{R}}^{\sigma}$, $\underline{R}^D$, $\underline{\underline{R}}^f$ et $R^{f^{\sigma}}$ par rapport aux variables inconnues du vecteur $\triangle \underline{X}$ et variables de pilotage de $\triangle \underline{Y}$. Les expressions de ces dérivées ainsi que les formes globales de $[J_X]$ et $[J_Y]$ sont détaillées en annexe B.

2.5.4 Comportement ferroélectrique et ferroélastique

Des écoulements ferroélectrique et ferroélastrique sont actifs si les prédictions électrique et mécanique sont positives :

$$f_{n+1}^{\sigma\ pred} > 0 \quad \text{et} \quad f_{n+1}^{e\ pred} > 0 \tag{2.54}$$

Dans ce cas, il est nécessaire de déterminer les incréments de la polarisation ferroélectrique $\triangle \underline{P}^e$ et la déformation ferroélastique $\triangle \underline{\underline{\varepsilon}}^f$ pour vérifier les conditions de consistance ferroélectrique et ferroélastique à la fin de l'incrément : $f_{n+1}^e = 0$ et $f_{n+1}^{\sigma} = 0$. Pour déterminer $\triangle \underline{\underline{\sigma}}$, $\triangle \underline{D}$, $\triangle \underline{P}^e$,

$\triangle \underline{\underline{\varepsilon}}^f$, $\triangle\lambda^e$ et $\triangle\lambda^\sigma$, le système de résidus suivant doit être résolu :

$$\begin{cases} R^\sigma_{ij} &= \sigma_{ij|n+1} - C^E_{ijkl}(\varepsilon_{kl|n+1} - \varepsilon^e_{kl|n+1} - \varepsilon^f_{kl|n+1}) + e_{kij|n+1}E_{k|n+1} \\ R^D_i &= D_{i|n+1} - e_{ikl|n+1}(\varepsilon_{kl|n+1} - \varepsilon^e_{kl|n+1} - \varepsilon^f_{kl|n+1}) - \epsilon^\varepsilon_{ik}E_{k|n+1} - P^r_{i|n} - \triangle P^e_i - \triangle P^\sigma_i \\ R^e_i &= \triangle P^e_i - \triangle\lambda^e \dfrac{E_{i|n+1} - X^e_{i|n+1}}{\|\underline{E}_{n+1} - \underline{X}^e_{n+1}\|} \\ R^f_{ij} &= \triangle\varepsilon^f_{ij} - \sqrt{\dfrac{3}{2}}\triangle\lambda^\sigma \dfrac{s_{ij|n+1} - X^\sigma_{ij|n+1}}{\|\underline{\underline{s}}_{n+1} - \underline{\underline{X}}^\sigma_{n+1}\|} \\ R^{f^e} &= \|\underline{E}_{n+1} - \underline{X}^e_{n+1}\| - E_c \\ R^{f^\sigma} &= \sqrt{\dfrac{3}{2}}\|\underline{\underline{s}}_{n+1} - \underline{\underline{X}}^\sigma_{n+1}\| - \hat{\sigma}_{c|n+1} \end{cases} \tag{2.55}$$

Notons

$$\begin{aligned} \{\triangle X\} &= \{\triangle\sigma_{11}\ \triangle\sigma_{12}\cdots\triangle\sigma_{33} \vdots \triangle D_1\ \triangle D_2\ \triangle D_3 \vdots \triangle P^e_1\ \triangle P^e_2\ \triangle P^e_3 \vdots \\ &\quad \triangle\varepsilon^f_{11}\ \triangle\varepsilon^f_{12}\cdots\triangle\varepsilon^f_{33} \vdots \triangle\lambda^e\ \triangle\lambda^\sigma\}^T \end{aligned} \tag{2.56}$$

le vecteur des inconnues,

$$\{\triangle Y\} = \{\triangle\varepsilon_{11}\ \triangle\varepsilon_{12}\ \triangle\varepsilon_{13}\ \triangle\varepsilon_{21}\ \triangle\varepsilon_{22}\ \triangle\varepsilon_{23}\ \triangle\varepsilon_{31}\ \triangle\varepsilon_{32}\ \triangle\varepsilon_{33} \vdots \triangle E_1\ \triangle E_2\ \triangle E_3\}^T \tag{2.57}$$

le vecteur de pilotage et

$$\{F\} = \{R^\sigma_{11}\ R^\sigma_{12}\cdots R^\sigma_{33} \vdots R^D_1\ R^D_2\ R^D_3 \vdots R^e_1\ R^e_2\ R^e_3 \vdots R^f_{11}\ R^f_{12}\ \cdots R^f_{33} \vdots R^{f^e}\ R^{f^\sigma}\}^T \tag{2.58}$$

le vecteur des résidus.
Les matrices jacobiennes $[J_X]$ et $[J_Y]$ sont déterminées à partir des dérivées des résidus $\underline{\underline{R}}^\sigma$, $\underline{R}^D$, $\underline{R}^e$, $\underline{\underline{R}}^f$, R^{f^e} et R^{f^σ} par rapport aux variables inconnues du vecteur $\triangle\underline{X}$ et variables de pilotage de $\triangle\underline{Y}$. Les expressions de ces dérivées ainsi que les formes globales de $[J_X]$ et $[J_Y]$ dans le cas d'un comportement pleinement couplé sont détaillées en annexe C.

2.5.5 Résultats

Dans cette section, nous présentons quelques résultats de validation du modèle tridimensionnel. Les paramètres matériau sont donnés dans la Table 2.1. Les paramètres de la fonction scalaire de pénalisation électrique g_2 (Équation (2.25)) choisis pour la simulation sont : $P^e_0 = 10^3$ et $c^e = 10^{-2}$. Les paramètres de la fonction scalaire de pénalisation mécanique g_1 (Équation (2.25)) sont : $P^s_0 = 10^3$ et $c^s = 3 \times 10^{-2}$.
Les Figures 2.5 et 2.6 montrent le résultat d'un cyclage électrique sur une céramique ferroélec-

trique. Nous retrouvons les courbes hystérétiques proches de celles obtenues expérimentalement. Trois jeux d'incréments ont été utilisés dans la simulation (1000, 100 et 20 incréments) pour montrer que le résultat ne dépend pas du nombre d'incréments choisi puisque les conditions de cohérence sont vérifiées à la fin de l'incrément dans une approche implicite. La Figure 2.7 montre l'évolution de la polarisation ferroélectrique en fonction du champ électrique : elle commence à apparaître quand le champ électrique atteint la valeur coercitive ($E_3/E_c = 1$) et elle se sature quand la polarisation de saturation est atteinte ($P_3^e/P^{sat} = 1$).

Tab. 2.1 : *Paramètres matériau choisis pour la validation.*

Module d'Young E	(GPa)	100.
Coefficient de Poisson ν		0.3
Contrainte coercitive σ_c	(MPa)	50.
Déformation de saturation ε^{sat}		2×10^{-3}
Champ coercitif E_c	(MV/m)	1.
Polarisation de saturation P^{sat}	(C/m^2)	0.3
d_{33}	(m/V)	5.93×10^{-10}
d_{31}	(m/V)	-2.74×10^{-10}
d_{15}	(m/V)	7.41×10^{-10}
β	(V.m/C)	2×10^6
γ	(N/m^2)	$5. \times 10^9$
Constante diélectrique ϵ	(F/m)	1.5×10^{-8}
δ	(N/Vm)	60.

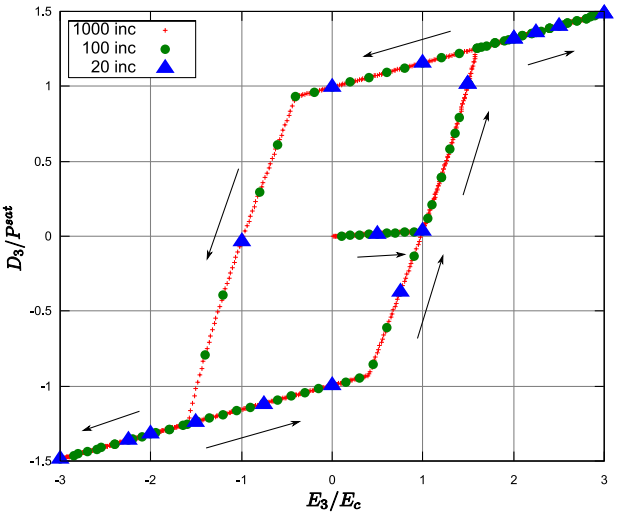


Fig. 2.5 : *Hystérésis diélectrique : évolution du déplacement électrique en fonction du champ électrique.*

La Figure 2.8 montre l'hystérésis ferroélastique obtenu quand le critère isotrope de Von Misès (Équation (2.13)) est considéré. Il ressemble beaucoup à l'hystérésis trouvé en plasticité avec saturation de la déformation ferroélastique dès qu'elle atteint ε^{sat}.

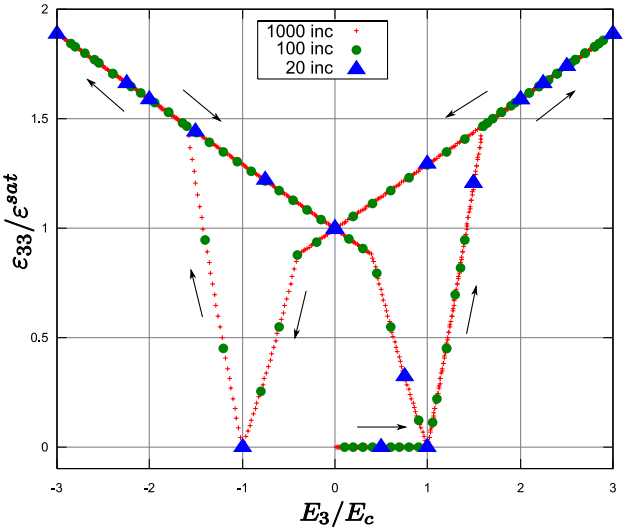


Fig. 2.6 : *Hystérésis en ailes de papillon (butterfly ferroélectrique) : évolution de la déformation totale en fonction du champ électrique.*

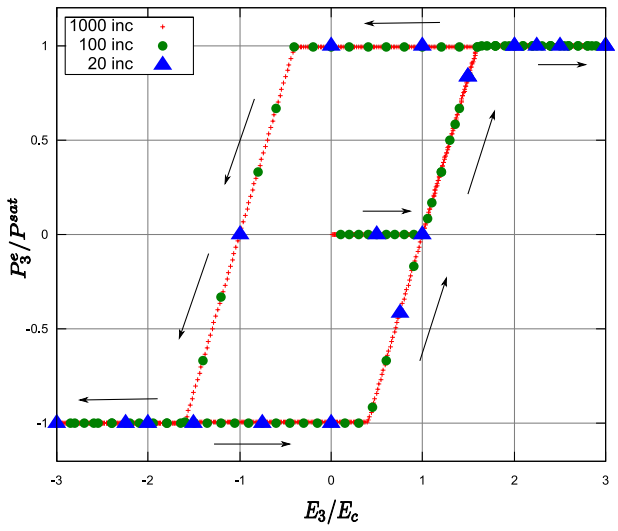


Fig. 2.7 : *Évolution de la polarisation ferroélectrique en fonction du champ électrique.*

Étant donnée qu'expérimentalement, la réorientation ferroélastique des domaines a été mise en évidence par des tests de compression sur des céramiques (en général) polarisées, il est intéressant de considérer un essai de compression sur un matériau initialement polarisé (Figure 2.9). Le matériau est polarisé jusqu'à saturation dans un premier temps (Point A, Figure 2.9) puis soumis à une contrainte de compression croissante suivant la direction de polarisation. La Figure 2.10 montre l'évolution de la contrainte en fonction de la déformation lors d'un essai de compression. La déformation initiale (point A) provient du processus de polarisation qui précède directement l'essai de compression.

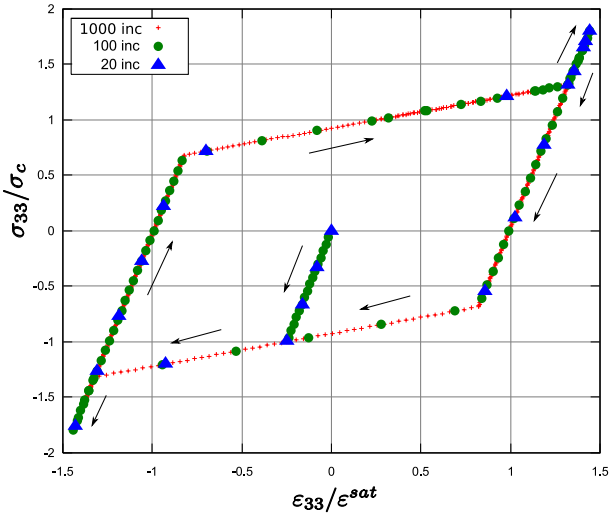


Fig. 2.8 : *Hystérésis ferroélastique : évolution de la contrainte en fonction de la déformation.*

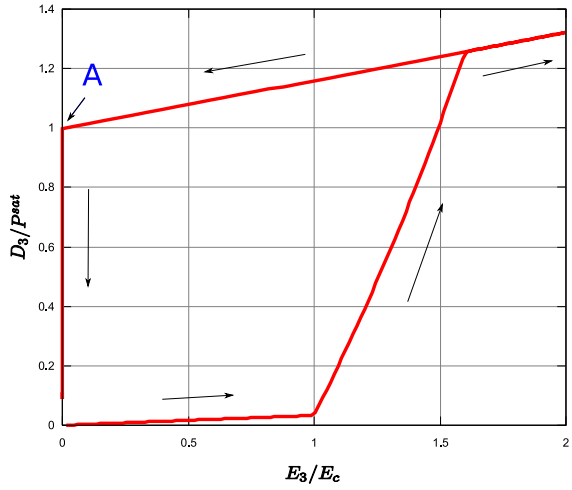


Fig. 2.9 : *Évolution du déplacement électrique en fonction du champ électrique lors d'un processus de polarisation.*

La réorientation ferroélastique induit une déformation rémanente (ferroélastique) négative dans la direction de polarisation initiale et abaisse le niveau de polarisation de la céramique puisque le nombre de domaines ayant une polarisation proche de la polarisation rémanente initiale diminue (dépolarisation mécanique, Figure 2.11). La réorientation ferroélastique se termine lorsque la déformation rémanente atteint la valeur de saturation. Il est à noter que les pentes de la courbe de la Figure 2.11, correspondant à la réponse piézoélectrique $\sigma - D$ sont différentes. Comme expliqué dans le chapitre 1, cette différence est due au changement de la polarisation rémanente macroscopique de la céramique qui diminue à cause de la contrainte de compression. Figure 2.12 montre les hystérésis $\sigma - D$ obtenus pour différentes valeurs de τ.

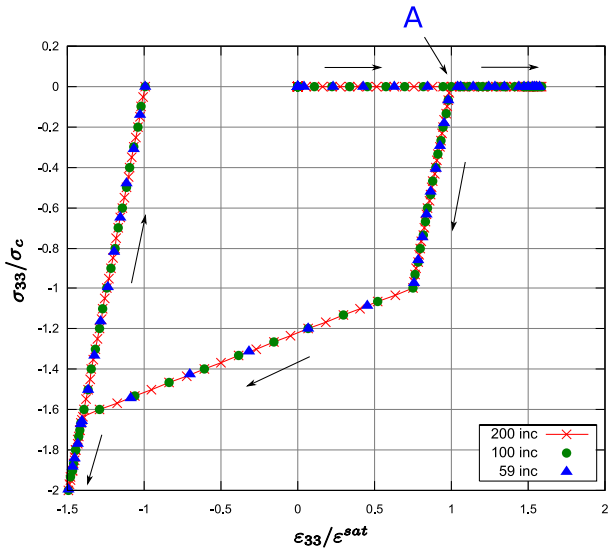


Fig. 2.10 : *Évolution de la contrainte en fonction de la déformation lors d'un essai de compression sur une céramique polarisée.*

La Figure 2.13 illustre l'écrouissage isotrope de la surface de charge ferroélastique en présence d'un champ électrique. En effet, un champ électrique positif (dans le même sens que la polarisation rémanente initiale) retarde la réorientation ferroélastique des domaines ($\hat{\sigma}_c$ augmente) et un champ électrique négatif facilite cette réorientation ($\hat{\sigma}_c$ diminue).

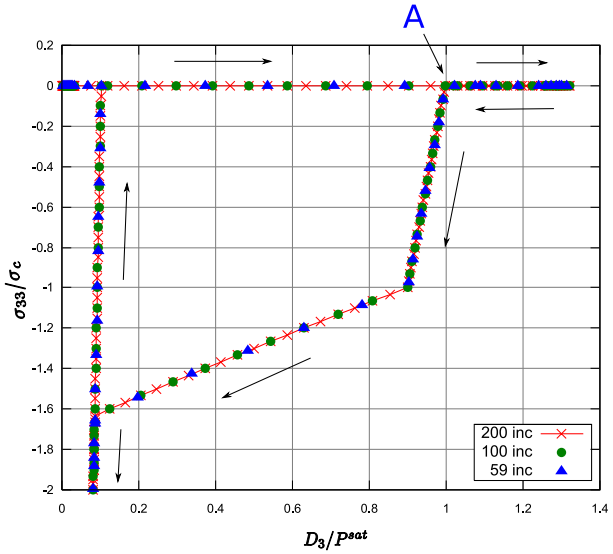


Fig. 2.11 : *Evolution de la polarisation électrique en fonction de la contrainte lors d'un essai de compression sur une céramique polarisée : dépolarisation mécanique ($\tau = 0.45$).*

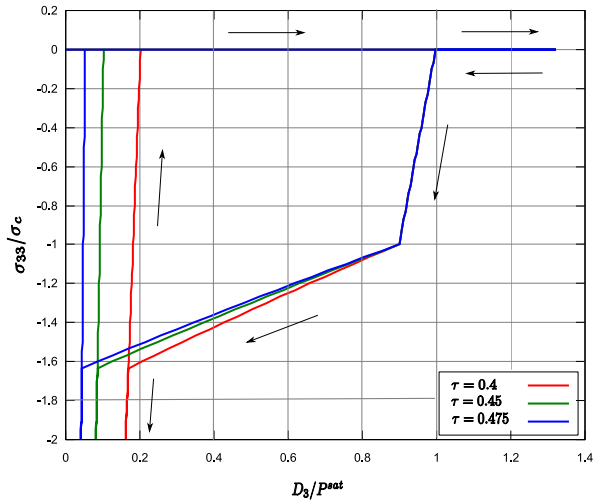


FIG. 2.12 : *Evolution de la polarisation électrique en fonction de la contrainte lors d'un essai de compression sur une céramique polarisée pour différentes valeurs de τ.*

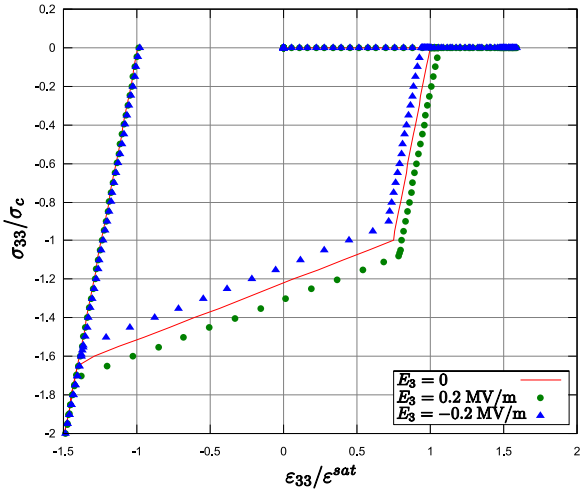


FIG. 2.13 : *Evolution de la contrainte en fonction de la déformation lors d'un essai de compression en présence d'un champ électrique (écrouissage isotrope).*

2.6 Adaptation 2D du modèle phénoménologique

Considérons une structure ferroélectrique mince. La géométrie de cette structure est caractérisée par une surface moyenne A considérée comme surface de référence et une épaisseur constante h (Figure 2.14). En chaque point de la surface moyenne, nous définissons (voir chapitre 3) une base tangente orthonormée $[Q] = [\underline{t}_1\ \underline{t}_2\ \underline{n}]$ constante suivant l'épaisseur ($\underline{n}$ est le vecteur normal à la surface moyenne). Cette base tangente permet de définir le système de coordonnées curvilignes (x,y,z). Pour simplifier la discussion, les chiffres 1, 2 et 3 sont utilisés à la place des coordonnées x, y et z (par exemple, $\sigma_{11} \equiv \sigma_{xx}$).

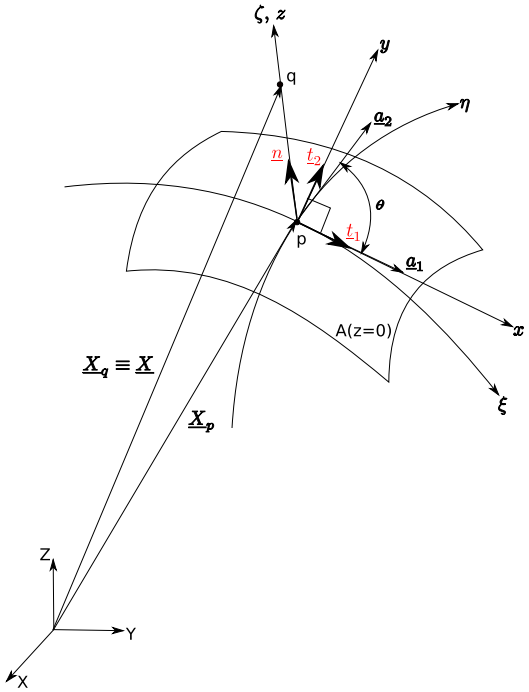


Fig. 2.14 : *Surface de référence d'une structure coque et définition des bases covariante et tangente.*

Il est supposé que les polarisations réversible et rémanente apparaissent uniquement suivant l'épaisseur puisque le champ électrique agit, généralement, suivant cette direction dans les structures ferroélectriques minces (localement $P_\alpha^{el} = P_\alpha^r = 0$ avec $\alpha = 1, 2$). En adoptant l'hypothèse des contraintes planes, souvent considérée dans les théories des plaques et coques, la contrainte normale suivant l'épaisseur peut être négligée devant les autres composantes du tenseur des contraintes mécaniques (localement $\sigma_{33} \approx 0$). Cette hypothèse exclut donc la réorientation ferroélastique de 90° des domaines ferroélectriques puisque la polarisation rémanente est supposée apparaître uniquement suivant l'épaisseur. Si nous supposons aussi que la contrainte mécanique de traction dans le plan (σ_{11} et σ_{22}) reste suffisamment faible pour éviter la rupture des céramiques minces, la réorientation ferroélastique et (par conséquent) la déformation ferroélastique $\underline{\underline{\varepsilon}}^f$ peuvent être négligées ($\underline{\underline{\varepsilon}}^r = \underline{\underline{\varepsilon}}^e$). La relation instantanée (2.10) entre la déformation ferroélastique et la dépolarisation mécanique permet de négliger $\underline{P}^\sigma$. Par conséquent, la polarisation ferroélectrique est la seule considérée dans la suite : $\underline{P}^r = \underline{P}^e$ et elle est considérée comme la seule variable interne du modèle bidimensionnel puisque la déformation ferroélastique est négligée.
Il est supposé aussi que les tenseurs élastique et diélectrique ($\underline{\underline{\underline{\underline{C}}}}^E$ et $\underline{\underline{\epsilon}}^\varepsilon$, respectivement) sont ceux d'une céramique ferroélectrique isotrope transverse polarisée suivant la normale à la surface moyenne (axe 3) et restent constants sur l'incrément de chargement. Ce choix est dicté par le fait que la polarisation rémanente apparaît suivant l'épaisseur dans ce cas des structures minces. Puisque le champ électrique agit suivant l'épaisseur, alors nous ne considérons que la troisième composante normale du vecteur champ électrique ($E_z = E_3 = -\dfrac{\triangle\varphi}{h}$, où $\triangle\varphi$ est la différence

de potentiel appliquée sur les faces supérieure et inférieure de la structure mince) et en conséquence, les polarisations réversible et rémanente suivant l'épaisseur sont les seules considérées ($P^{el}_{\alpha} = P^{r}_{\alpha} = 0$ avec $\alpha = 1, 2$).

2.6.1 Intégration de la loi ferroélectrique bidimensionnelle

Il est supposé que l'état local de la céramique ferroélectrique mince au début de l'incrément est connu (la variable interne $P^{r}_{z|n} = P^{r}_{3|n}$ est connue). La méthode de retour radial est adoptée pour déterminer l'incrément $\triangle P^{r}_{3}$ de la variable interne induit par l'incrément du champ électrique. Une prédiction électrique à la fin de l'incrément consiste à geler l'*écoulement* ferroélectrique :

$$f^{e\,pred}_{n+1} = |E_{3|n+1} - X^{e\,pred}_{3|n+1}| - E_c = \sqrt{(E_{3|n+1} - X^{e\,pred}_{3|n+1})^2} \quad ; \quad X^{e\,pred}_{3|n+1} = X^{e}_{3|n} = \beta\, P^{r}_{3|n} \tag{2.59}$$

Comportement piézoélectrique

Si $f^{e\,pred}_{n+1} \leq 0$, alors il n'y a pas de réorientation ferroélectrique des domaines et $\triangle P^{r}_{3} = 0$. Dans ce cas, le comportement est piézoélectrique linéaire : les incréments de la déformation rémanente, des tenseurs piézoélectriques direct et inverse sont nuls. L'hypothèse d'une contrainte normale nulle suivant l'épaisseur (hypothèse des contraintes planes) avec $D_1 = D_2 = 0$ (puisque la polarisation électrique est supposée apparaître suivant l'épaisseur) permettent d'exprimer le vecteur des contraintes curvilignes généralisées $\{\Sigma\} = \{\sigma_{11}\ \sigma_{22}\ \sigma_{12}\ \sigma_{13}\ \sigma_{23}\ D_3\}^T$ en fonction du vecteur des déformations curvilignes généralisées $\{\Gamma\} = \{\varepsilon_{11}\ \varepsilon_{22}\ 2\varepsilon_{12}\ 2\varepsilon_{13}\ 2\varepsilon_{23}\ E_3\}^T$ à la fin de l'incrément :

$$\left\{ \begin{array}{lcl} \{\sigma_{n+1}\} & = & [C^{E}_{n}](\{\varepsilon_{n+1}\} - \{\varepsilon^{r}_{n}\}) - \{e_n\} E_{3|n+1} \\ D_{3|n+1} & = & \{e_n\}^T(\{\varepsilon_{n+1}\} - \{\varepsilon^{r}_{n}\}) + (\epsilon^{\varepsilon}_{33} + \dfrac{e^2_{33|n}}{C^{E}_{33}}) E_{3|n+1} + P^{r}_{3|n} \end{array} \right. \tag{2.60}$$

où

$$[C^{E}_{n}] = \left[\begin{array}{ccccc} Q^{E}_{11} & Q^{E}_{12} & 0 & 0 & 0 \\ Q^{E}_{12} & Q^{E}_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & Q^{E}_{66} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & Q^{E}_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & Q^{E}_{44} \end{array} \right] \quad ; \quad \left\{ \begin{array}{lcl} Q^{E}_{11} & = & C^{E}_{11} - \dfrac{C^{E\,2}_{13}}{C^{E}_{33}} \\ Q^{E}_{12} & = & C^{E}_{12} - \dfrac{C^{E\,2}_{13}}{C^{E}_{33}} \\ Q^{E}_{44} & = & C^{E}_{44} + \dfrac{e^2_{15|n}}{\epsilon^{\varepsilon}_{11}} \\ Q^{E}_{66} & = & \dfrac{1}{2}(C^{E}_{11} - C^{E}_{12}) \end{array} \right. \tag{2.61}$$

et

$$\{e_n\} = \{e_{31|n} - e_{33|n}\frac{C^{E}_{13}}{C^{E}_{33}} \vdots e_{31|n} - e_{33|n}\frac{C^{E}_{13}}{C^{E}_{33}} \vdots 0 \vdots 0 \vdots 0\}^T \tag{2.62}$$

Dans ce cas piézoélectrique réversible, le module tangent curviligne peut être déterminé à partir du système (2.60) :

$$\left[\frac{\partial \underline{\Sigma}_{n+1}}{\partial \underline{\Gamma}_{n+1}}\right] = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial \underline{\sigma}_{n+1}}{\partial \underline{\varepsilon}_{n+1}} & \dfrac{\partial \underline{\sigma}_{n+1}}{\partial E_{3|n+1}} \\ \dfrac{\partial D_{3|n+1}}{\partial \underline{\varepsilon}_{n+1}} & \dfrac{\partial D_{3|n+1}}{\partial E_{3|n+1}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} [C_n^E] & -\{e_n\} \\ \{e_n\}^T & \epsilon_{33}^{\varepsilon} + \dfrac{e_{33|n}^2}{C_{33}^E} \end{bmatrix} \tag{2.63}$$

Comportement ferroélectrique

Si $f_{n+1}^{e\,pred} > 0$ alors le comportement est ferroélectrique non linéaire. Pour vérifier la condition de cohérence ($f_{n+1}^e = 0$) à la fin de l'incrément, nous devons déterminer l'incrément de la polarisation rémanente $\triangle P_3^r$. Pour le chercher, le système de résidus suivant doit être résolu :

$$\begin{cases} F_1 = \triangle P_3^r - \triangle\lambda^e \dfrac{E_{3|n+1} - X_{3|n+1}^e}{|E_{3|n+1} - X_{3|n+1}^e|} \\ F_2 = |E_{3|n+1} - X_{3|n+1}^e| - E_c \end{cases} \tag{2.64}$$

Notons $\{\triangle X\} = \{\triangle P_3^r \vdots \triangle\lambda^e\}^T$ le vecteur des inconnues, $\triangle Y = \triangle E_3$ la variable de pilotage et $\{F\} = \{F_1 \vdots F_2\}^T$ le vecteur résidu.
La matrice jacobienne $\frac{\partial \underline{F}}{\partial \triangle \underline{X}}$ est constituée par les dérivées de F_1 et F_2 par rapport à $\triangle P_3^r$ et $\triangle\lambda^e$:

$$[J_X] = \left[\frac{\partial \underline{F}}{\partial \triangle \underline{X}}\right] = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial F_1}{\partial \triangle P_3^r} & \dfrac{\partial F_1}{\partial \triangle \lambda^e} \\ \dfrac{\partial F_2}{\partial \triangle P_3^r} & \dfrac{\partial F_2}{\partial \triangle \lambda^e} \end{bmatrix} \tag{2.65}$$

avec

$$\begin{cases} \dfrac{\partial F_1}{\partial \triangle P_3^r} = 1 + \dfrac{\triangle\lambda^e}{|E_{3|n+1} - X_{3|n+1}^e|} \dfrac{\partial X_{3|n+1}^e}{\partial \triangle P_3^r} - \triangle\lambda^e \dfrac{(E_{3|n+1} - X_{3|n+1}^e)^2}{|E_{3|n+1} - X_{3|n+1}^e|^3} \dfrac{\partial X_{3|n+1}^e}{\partial \triangle P_3^r} = 1 \\ \dfrac{\partial F_1}{\partial \triangle \lambda^e} = -\dfrac{E_{3|n+1} - X_{3|n+1}^e}{|E_{3|n+1} - X_{3|n+1}^e|} \\ \dfrac{\partial F_2}{\partial \triangle P_3^r} = -\dfrac{E_{3|n+1} - X_{3|n+1}^e}{|E_{3|n+1} - X_{3|n+1}^e|} \dfrac{\partial X_{3|n+1}^e}{\partial \triangle P_3^r} \\ \dfrac{\partial F_2}{\partial \triangle \lambda^e} = 0 \end{cases} \tag{2.66}$$

Dans le cas particulier des structures ferroélectriques minces, nous considérons l'expression suivante du vecteur d'écrouissage $\underline{X}^e$:

$$\underline{X}^e = \beta \underline{P}^r \left(1 + g_2(P_{eq}^r) + \frac{\alpha}{P^{sat} - P_{eq}^r}\right) \tag{2.67}$$

Notons ici que le troisième terme de cette expression est une fonction inverse introduite pour ajouter un effet non linéaire à la réorientation ferroélectrique des domaines. α est le paramètre numérique de cette fonction caractérisant le niveau de non linéarité de l'écrouissage.
En ne considérant que la composante normale de la polarisation rémanente, l'expression (2.67) s'écrit à la fin de l'incrément :

$$X^e_{3|n+1} = \beta P^r_{3|n+1}\Big(1 + g_2(|P^r_{3|n+1}|) + \frac{\alpha}{P^{sat} - |P^r_{3|n+1}|}\Big) \tag{2.68}$$

Nous en déduisons la dérivée de $X^e_{3|n+1}$ par rapport à l'incrément de la polarisation rémanente normale :

$$\frac{\partial X^e_{3|n+1}}{\partial \triangle P^r_3} = \beta\Big(1+g_2(|P^r_{3|n+1}|)+\frac{\alpha}{P^{sat} - |P^r_{3|n+1}|}\Big)+\beta P^r_{3|n+1}\Big(\frac{\partial g_2}{\partial \triangle P^r_3}+\frac{\alpha}{(P^{sat} - |P^r_{3|n+1}|)^2}\frac{P^r_{3|n+1}}{|P^r_{3|n+1}|}\Big) \tag{2.69}$$

où

$$\frac{\partial g_2}{\partial \triangle P^r_3} = \begin{cases} 0 & \text{si} \quad |P^r_{3|n+1}| \leq (1-c^e)P^{sat} \\ \dfrac{P^e_0}{\exp(1)-1}\Big(\exp(p) - 1 + p\,\exp(p)\Big)\dfrac{\partial p}{\partial \triangle P^r_3} & \text{si} \quad |P^r_{3|n+1}| > (1-c^e)P^{sat} \end{cases} \tag{2.70}$$

et

$$p = \frac{|P^r_{3|n+1}| - P^{sat}}{c^e P^{sat}} + 1 \quad ; \quad \frac{\partial p}{\partial \triangle P^r_3} = \frac{1}{c^e P^{sat}}\frac{P^r_{3|n+1}}{|P^r_{3|n+1}|} \tag{2.71}$$

Les variations de F_1 et F_2 par rapport à $\triangle E_3$ permettent de déterminer le vecteur $\{J_Y\}$:

$$\{J_Y\} = \Big\{\frac{\partial \underline{F}}{\partial \triangle Y}\Big\} = \begin{Bmatrix} \dfrac{\partial F_1}{\partial \triangle E_3} \\ \dfrac{\partial F_2}{\partial \triangle E_3} \end{Bmatrix} \tag{2.72}$$

avec

$$\frac{\partial F_1}{\partial \triangle E_3} = 0 \quad ; \quad \frac{\partial F_2}{\partial \triangle E_3} = \frac{E_{3|n+1} - X^e_{3|n+1}}{|E_{3|n+1} - X^e_{3|n+1}|} \tag{2.73}$$

Dès que l'incrément de la polarisation rémanente est déterminé, le tenseur des déformations ferroélectriques $\underline{\underline{\varepsilon}}^e_{n+1}$ (Equation (2.8)) et les tenseurs piézoélectriques direct $\underline{\underline{d}}_{n+1}$ (Equation (2.12)) et inverse $\underline{\underline{e}}_{n+1}$ (Equation (2.4)) sont déterminés en fonction de $P^r_{3|n+1} = P^r_{3|n} + \triangle P^r_3$.
Le vecteur des contraintes curvilignes généralisées $\{\Sigma\}$ est lié au vecteur des déformations curvilignes généralisés $\{\Gamma\}$ par :

$$\begin{cases} \{\sigma_{n+1}\} &= [C^E_{n+1}](\{\varepsilon_{n+1}\} - \{\varepsilon^r_{n+1}\}) - \{e_{n+1}\}E_{3|n+1} \\ D_{3|n+1} &= \{e_{n+1}\}^T(\{\varepsilon_{n+1}\} - \{\varepsilon^r_{n+1}\}) + (\epsilon^{\varepsilon}_{33} + \dfrac{e^2_{33|n+1}}{C^E_{33}})E_{3|n+1} + P^r_{3|n+1} \end{cases} \tag{2.74}$$

Le module tangent curviligne ferroélectrique peut être déterminé à partir du système (2.74) :

$$\left[\frac{\partial \underline{\Sigma}_{n+1}}{\partial \underline{\Gamma}_{n+1}}\right] = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial \underline{\sigma}_{n+1}}{\partial \underline{\varepsilon}_{n+1}} & \dfrac{\partial \underline{\sigma}_{n+1}}{\partial E_{3|n+1}} \\ \dfrac{\partial D_{3|n+1}}{\partial \underline{\varepsilon}_{n+1}} & \dfrac{\partial D_{3|n+1}}{\partial E_{3|n+1}} \end{bmatrix} \tag{2.75}$$

avec

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \underline{\sigma}_{n+1}}{\partial \underline{\varepsilon}_{n+1}} = [C^E_{n+1}] \\ \dfrac{\partial \underline{\sigma}_{n+1}}{\partial E_{3|n+1}} = \dfrac{\partial [C^E_{n+1}]}{\partial E_{3|n+1}}(\underline{\varepsilon}_{n+1} - \underline{\varepsilon}^r_{n+1}) - [C^E_{n+1}]\dfrac{\partial \underline{\varepsilon}^r_{n+1}}{\partial E_{3|n+1}} - \dfrac{\partial \underline{e}_{n+1}}{\partial E_{3|n+1}} E_{3|n+1} - \underline{e}_{n+1} \\ \dfrac{\partial D_{3|n+1}}{\partial \underline{\varepsilon}_{n+1}} = \underline{e}^T_{n+1} \\ \dfrac{\partial D_{3|n+1}}{\partial E_{3|n+1}} = \dfrac{\partial \underline{e}^T_{n+1}}{\partial E_{3|n+1}}(\underline{\varepsilon}_{n+1} - \underline{\varepsilon}^r_{n+1}) - \underline{e}^T_{n+1}\dfrac{\partial \underline{\varepsilon}^r_{n+1}}{\partial E_{3|n+1}} + (\epsilon^{\varepsilon}_{33} + \dfrac{e^2_{33|n+1}}{C^E_{33}}) + \\ \qquad \dfrac{1}{C^E_{33}}\dfrac{\partial e^2_{33|n+1}}{\partial E_{3|n+1}} E_{3|n+1} + \dfrac{\partial P^r_{3|n+1}}{\partial E_{3|n+1}} \end{cases} \tag{2.76}$$

Puisque la polarisation rémanente P^r_3 est la seule variable interne du modèle, le module tangent ferroélectrique (2.76) s'exprime en fonction de $\partial \triangle P^r_3 / \partial \triangle E_3 = \partial P^r_{3|n+1} / \partial E_{3|n+1}$. Cette dérivée est directement déterminée à partir du vecteur $\frac{\delta \triangle \underline{X}}{\delta \triangle Y}$ donné par la relation suivante :

$$\frac{\delta \triangle \underline{X}}{\delta \triangle Y} = -[J_X]^{-1}\{J_Y\} \tag{2.77}$$

2.6.2 Résultats

Dans cette section, nous présentons quelques résultats de validation du modèle ferroélectrique bidimensionnel. Puisque nous négligeons le comportement ferroélastique à cause de l'hypothèse des contraintes planes, les hystérésis ferroélectriques induites par un chargement électrique sont montrées. Les paramètres matériau utilisés dans la simulation sont résumés dans le Tableau 2.2. Les paramètres de la fonction scalaire de pénalisation électrique g_2 (Équation (2.25)) choisis pour la simulation sont : $P^e_0 = 10^3$ et $c^e = 10^{-2}$. Un écrouissage linéaire ($\alpha = 0$) et non linéaire ($\alpha = 0.005$) sont considérés dans la simulation où α est le paramètre de la fonction inverse (Equation (2.67)).
Les Figures 2.15 et 2.16 montrent les hystérésis diélectrique et en ailes de papillon observées expérimentalement.

Tab. 2.2 : *Paramètres matériau choisis pour la validation du modèle bidimensionnel.*

C_{11}^E	=	$127.205 \times 10^9\ Pa$	d_{33}	=	$5.93 \times 10^{-10}\ C/N$	β	=	$2 \times 10^6\ V\,m/C$
C_{12}^E	=	$80.212 \times 10^9\ Pa$	d_{31}	=	$-2.74 \times 10^{-10}\ C/N$	ε^{sat}	=	2×10^{-3}
C_{13}^E	=	$84.670 \times 10^9\ Pa$	d_{15}	=	$7.41 \times 10^{-10}\ C/N$	P^{sat}	=	$0.3\ C/m^2$
C_{33}^E	=	$117.436 \times 10^9\ Pa$	$\epsilon_{11}^{\varepsilon}$	=	$1.5 \times 10^{-8}\ F/m$	E_c	=	$10^6\ V/m$
C_{66}^E	=	$23.474 \times 10^9\ Pa$	$\epsilon_{33}^{\varepsilon}$	=	$1.3 \times 10^{-8}\ F/m$			
C_{44}^E	=	$22.988 \times 10^9\ Pa$						

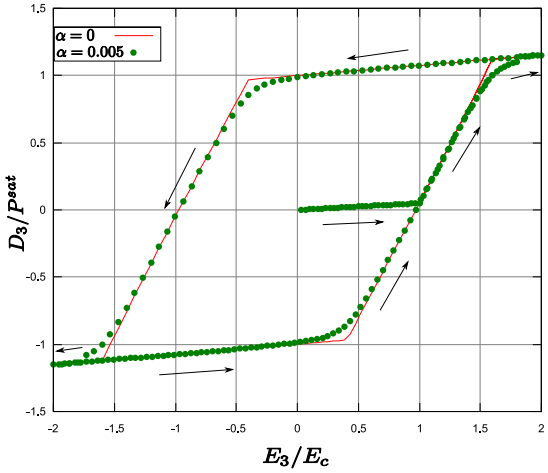


Fig. 2.15 : *L'hystérésis diélectrique (écrouissage linéaire pour $\alpha = 0$ et écrouissage non linéaire pour $\alpha = 0.005$.)*

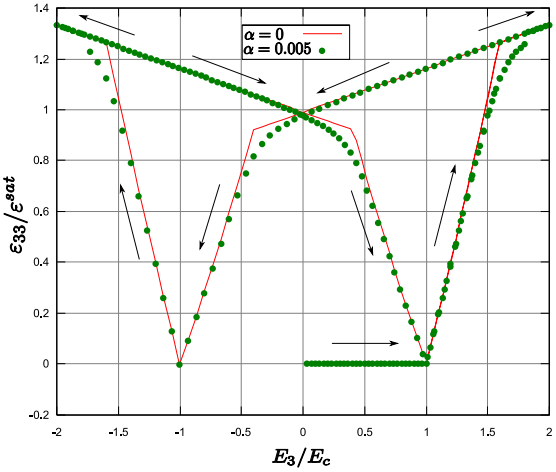


Fig. 2.16 : *L'hystérésis en ailes de papillon (écrouissage linéaire pour $\alpha = 0$ et écrouissage non linéaire pour $\alpha = 0.005$.)*

2.7 Conclusion

Dans ce chapitre, une loi constitutive a été développée pour décrire les comportements ferroélectrique et ferroélastique non linéaires des céramiques piézoélectriques. Deux variables internes, qui sont la polarisation ferroélectrique et la déformation ferroélastique, ont été introduites pour prendre en compte l'histoire du chargement. Contrairement à une approche micromécanique, ce modèle phénoménologique est bien adapté à un calcul de structures grâce au nombre raisonnable de variables internes. D'autre part, deux fonctions analytiques ont été considérées pour contrôler les saturations de la polarisation et la déformation rémanentes. Une intégration implicite de cette loi basée sur la méthode de retour radial a été adoptée. Cette méthode d'intégration est plus bénéfique qu'un schéma d'intégration explicite dont le résultat dépend beaucoup du nombre d'incréments considéré.
L'adaptation bidimensionnelle de cette loi ferroélectrique et ferroélastique a été effectuée et il s'est avéré que cette adaptation néglige la réorientation ferroélastique des domaines à cause de l'hypothèse des contraintes planes adoptée.
Dans le chapitre suivant, la loi ferroélectrique bidimensionnelle est couplée avec un élément fini coque pour étudier les structures ferroélectriques minces. La loi ferroélectrique et ferroélastique tridimensionnelle est couplée avec un élément fini hexaédrique dans le chapitre 4 pour le calcul des structures ferroélectriques quelconques.

Chapitre 3

Développement d'un élément coque ferroélectrique

Sommaire

3.1 Introduction 72
3.2 Formulation variationnelle du problème électromécanique 72
3.3 Les champs gradients 73
3.3.1 Matrice de transformation géométrique 73
3.3.2 Déplacement mécanique et déformations curvilignes 75
3.3.3 Le potentiel et champ électriques 76
3.4 Approximation par éléments finis 77
3.4.1 Correction de type MITC des déformations γ_{xz} et γ_{yz} 78
3.4.2 Le potentiel électrique 81
3.4.3 Le vecteur des degrés de liberté 81
3.4.4 Procédure incrémentale 83
3.5 Cas tests de validation 85
3.5.1 Cas tests mécaniques 85
3.5.2 Cas tests piézoélectriques de type actionneur 95
3.5.3 Cas tests piézoélectriques de type capteur 103
3.5.4 Cas test ferroélectrique 106
3.6 Conclusion 108

3.1 Introduction

Dans ce chapitre, la loi ferroélectrique bidimensionnelle développée dans le chapitre 2 est couplée avec un élément fini coque classique basé sur la théorie de Reissner/Mindlin. L'élément coque et la loi de comportement sont implémentés dans le code Abaqus ® via la routine User ELement (UEL).
L'élément coque électromécanique est baptisé Q4TSF où 'Q4' signifie quadrilatéral à quatre noeuds, 'TS' signifie 'Transverse Shear' ou bien Cisaillement Transverse et 'F' signifie Ferroélectrique. Q4TSF est basé sur la théorie de déformation de cisaillement de premier ordre FSDT (First-order Shear Deformation Theory) ou bien la théorie de Reissner/Mindlin. Une correction de type MITC (interpolation mixte des composantes tensorielles) est utilisée pour éviter le blocage en cisaillement transverse généralement présent dans les éléments basés sur la théorie FSDT.

3.2 Formulation variationnelle du problème électromécanique

Considérons un domaine piézoélectrique B_0 non soumis à des forces volumiques et ne possédant pas des charges électriques volumiques libres. Les équations d'équilibres mécanique et électrique locaux s'écrivent dans le cas quasi-statique [45] :

$$\begin{cases} \mathrm{div}(\underline{\underline{\sigma}}) = 0 \\ \qquad\qquad \text{dans } B_0 \\ \mathrm{div}(\underline{D}) = 0 \end{cases} \tag{3.1}$$

où $\underline{\underline{\sigma}}$ est le tenseur des contraintes mécaniques et $\underline{D}$ est le vecteur déplacement électrique.

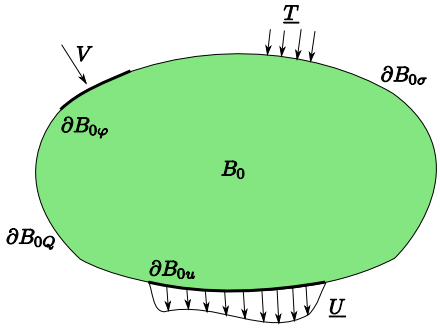


Fig. 3.1 : *Équilibre du domaine piézoélectrique B_0 : notations.*

Une force mécanique $\underline{T}$ ou un déplacement mécanique $\underline{U}$ peuvent être appliqués sur ∂B_0, la frontière de B_0, qui se décompose en $\partial B_{0\sigma}$ et ∂B_{0u} formant une partition de ∂B_0 : $\partial B_0 = \partial B_{0u} \bigcup \partial B_{0\sigma}$ et $\partial B_{0u} \bigcap \partial B_{0\sigma} = \emptyset$. D'autre part, la frontière ∂B_0 peut être soumise à une charge électrique surfacique Q sur ∂B_{0Q} ou un potentiel électrique V sur $\partial B_{0\varphi}$. ∂B_{0Q} et $\partial B_{0\varphi}$ forment aussi une partition de ∂B_0 : $\partial B_0 = \partial B_{0\varphi} \bigcup \partial B_{0Q}$ et $\partial B_{0\varphi} \bigcap \partial B_{0Q} = \emptyset$. En utilisant ces notations,

les conditions aux limites peuvent être écrites sous cette forme (Figure 3.1) :

$$\begin{cases} u_i & = & U_i & sur & \partial B_{0u} \\ \sigma_{ij} n_j & = & T_i & sur & \partial B_{0\sigma} \\ \varphi & = & V & sur & \partial B_{0\varphi} \\ D_i n_i & = & -Q & sur & \partial B_{0Q} \end{cases} \tag{3.2}$$

où n_i est la $i^{\text{ème}}$ composante du vecteur normal à la frontière ∂B_0. La forme faible de l'équilibre électromécanique (Système (3.1)) peut être obtenue en introduisant des champs virtuels admissibles $\delta\underline{u}$ et $\delta\varphi$ tels que $\delta\underline{u} = 0$ sur ∂B_{0u} et $\delta\varphi = 0$ sur $\partial B_{0\varphi}$: intégrons par parties et utilisons le théorème de la divergence, nous obtenons la forme faible suivante de l'équilibre électromécanique :

$$\delta\pi = \underbrace{\int_{B_0} \sigma_{ij}\delta\varepsilon_{ij} d\Omega + \int_{B_0} D_i \delta E_i d\Omega}_{\delta W_{int}} - \Big[\underbrace{\int_{\partial B_0} T_i \delta u_i dA + \int_{\partial B_0} Q\delta\varphi dA}_{\delta W_{ext}} \Big] = 0 \tag{3.3}$$

où δW_{int} et δW_{ext} sont respectivement les travaux intérieur et extérieur électromécaniques virtuels. Le tenseur des déformations virtuelles $\delta\underline{\underline{\varepsilon}}$ et le champ électrique virtuel $\delta\underline{E}$ sont définis par :

$$\begin{cases} \delta\underline{\underline{\varepsilon}} & = & \frac{1}{2}\Big(\underline{\underline{grad}}(\delta\underline{u}) + \underline{\underline{grad}}^T(\delta\underline{u})\Big) \\ \delta\underline{E} & = & -\underline{grad}\,\delta\varphi \end{cases} \tag{3.4}$$

Pour résoudre l'Équation (3.3) dans le cas de structures piézoélectriques minces, quelques hypothèses sur le déplacement mécanique $\underline{u}$ et le potentiel électrique φ sont détaillées dans la section suivante.

3.3 Les champs gradients

Dans cette section, les expressions du tenseur des déformations linéarisé $\underline{\underline{\varepsilon}}$ et du champ électrique $\underline{E}$ sont données dans le système des coordonnées curvilignes. La géométrie d'une structure coque est caractérisée par une surface moyenne A qui va être considérée comme la surface de référence et une épaisseur constante h. La surface moyenne A est décrite par deux coordonnées paramétriques notées ξ et η (Figure 3.2).

3.3.1 Matrice de transformation géométrique

Soit $\underline{X}_p(\xi,\eta)$ le vecteur position cartésien d'un point p de la surface de référence. Le vecteur position d'un point q de la coque se trouvant à une distance z de la surface moyenne A peut être

lié au vecteur position de p (Figure 3.2) :

$$\underline{X}_q(\xi,\eta,z) = \underline{X}_p(\xi,\eta) + z\,\underline{n}(\xi,\eta) \quad ; \quad z = \frac{h}{2}\zeta \quad ; \quad -1 \leq \zeta \leq 1 \tag{3.5}$$

où $\underline{n}(\xi,\eta)$ est le vecteur normal à la surface moyenne exprimé dans le repère cartésien global.

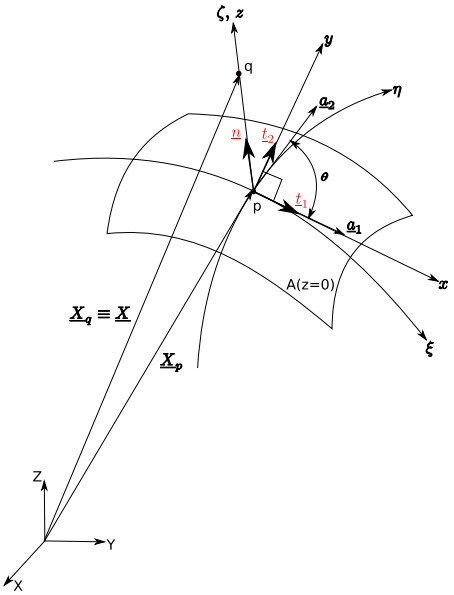


Fig. 3.2 : *Vecteur position d'une structure coque.*

Au niveau de la surface moyenne $A(z=0)$, les vecteurs de la base covariante en p sont définis par :

$$\underline{a}_1(\xi,\eta) = \underline{X}_{p,\xi} \quad ; \quad \underline{a}_2(\xi,\eta) = \underline{X}_{p,\eta} \quad ; \quad \underline{n} = \frac{\underline{a}_1 \wedge \underline{a}_2}{\parallel \underline{a}_1 \wedge \underline{a}_2 \parallel} \tag{3.6}$$

où $\underline{X}_{p,\alpha} = \partial \underline{X}_p / \partial\alpha$, $\alpha = \xi,\ \eta$. Ces vecteurs covariants définissent une base paramétrique, dite covariante :

$$[F_0] = [\underline{a}_1 \vdots \underline{a}_2 \vdots \underline{n}] \tag{3.7}$$

En général, les vecteurs covariants $\underline{a}_1$ et $\underline{a}_2$ ne sont ni orthogonaux ni unitaires, donc une nouvelle base tangente orthonormée $[Q(\xi,\eta)] = [\underline{t}_1\ \underline{t}_2\ \underline{n}]$ (Figure 3.2) constante suivant l'épaisseur est introduite pour définir le système de coordonnées curvilignes (x,y,z). Les vecteurs $\underline{t}_1$ et $\underline{t}_2$ sont définis à partir des vecteurs de $[F_0]$ par :

$$\underline{t}_1 = \frac{\underline{a}_1}{||\underline{a}_1||} \quad ; \quad \underline{t}_2 = \underline{n} \wedge \underline{t}_1 \tag{3.8}$$

Au niveau de la surface $A_z(z \neq 0)$, les vecteurs de la base covariante en q sont donnés par :

$$\underline{a}_{1z} = \underline{X}_{q,\xi} = \underline{a}_1 + z\,\underline{n}_{,\xi} \quad ; \quad \underline{a}_{2z} = \underline{X}_{q,\eta} = \underline{a}_2 + z\,\underline{n}_{,\eta} \quad ; \quad \underline{a}_{3z} = \underline{n} \tag{3.9}$$

La matrice covariante $[F_z] = [\underline{a}_{1z} \vdots \underline{a}_{2z} \vdots \underline{n}]$ est définie pour lier les vecteurs différentiels $\{dX_q\} \equiv \{dX\} = \{dX\ dY\ dZ\}^T$ et $\{d\xi\} = \{d\xi\ d\eta\ dz\}^T$:

$$\{dX\} = [F_z]\{d\xi\} \quad ; \quad \{d\xi\} = [F_z]^{-1}\{dX\} \tag{3.10}$$

Nous introduisons deux vecteurs tangents notés $\underline{a}_z^1$ et $\underline{a}_z^2$ de la base contravariante (ou réciproque ou duale) au point q vérifiant les relations suivantes :

$$\underline{a}_z^1 \cdot \underline{a}_{1z} = \underline{a}_z^2 \cdot \underline{a}_{2z} = 1 \quad ; \quad \underline{a}_z^1 \cdot \underline{a}_{2z} = \underline{a}_z^2 \cdot \underline{a}_{1z} = 0 \tag{3.11}$$

Nous pouvons remarquer que les vecteurs de la base contravariante $\underline{a}_z^1$, $\underline{a}_z^2$ et $\underline{n}$ sont les lignes de la matrice $[F_z]^{-1}$:

$$[F_z]^{-1} = \begin{bmatrix} \{a_z^1\}^T \\ \{a_z^2\}^T \\ \{n\}^T \end{bmatrix} \quad ; \quad [F_z]^{-1}[F_z] = \begin{bmatrix} \underline{a}_z^1 \cdot \underline{a}_{1z} & \underline{a}_z^1 \cdot \underline{a}_{2z} & \underline{a}_z^1 \cdot \underline{n} \\ \underline{a}_z^2 \cdot \underline{a}_{1z} & \underline{a}_z^2 \cdot \underline{a}_{2z} & \underline{a}_z^2 \cdot \underline{n} \\ \underline{n} \cdot \underline{a}_{1z} & \underline{n} \cdot \underline{a}_{2z} & \underline{n} \cdot \underline{n} \end{bmatrix} = [I_3] \tag{3.12}$$

avec $[I_3]$ est la matrice identité d'ordre 3.

3.3.2 Déplacement mécanique et déformations curvilignes

L'hypothèse cinématique des sections droites (hypothèse de Reissner/Mindlin) [12] permet d'exprimer le vecteur déplacement mécanique cartésien de q ($\underline{U}_q \equiv \underline{U}$) en fonction de celui de p ($\underline{U}_p$) :

$$\underline{U}(\xi,\eta,z) = \underline{U}_p(\xi,\eta) + z\ \underline{\beta}(\xi,\eta) \quad ; \quad \underline{\beta} = \underline{\theta} \wedge \underline{n} = \theta_2\ \underline{t}_1(\xi,\eta) - \theta_1\ \underline{t}_2(\xi,\eta) \tag{3.13}$$

où θ_1 and θ_2 sont les rotations du vecteur normal $\underline{n}$ autour des vecteurs tangentiels $\underline{t}_1$ et $\underline{t}_2$, respectivement, définis par les relations (3.8). Une nouvelle matrice $[L_z]$ est définie pour lier le vecteur différentiel $\{dU\} = \{dU\ dV\ dW\}^T$ au vecteur $\{d\xi\} = \{d\xi\ d\eta\ dz\}^T$:

$$\{dU\} = [L_z]\{d\xi\} \quad ; \quad [L_z] = [\underline{U}_{,\xi} \vdots \underline{U}_{,\eta} \vdots \underline{\beta}] \tag{3.14}$$

En utilisant les Équations (3.10) et (3.14), nous pouvons définir la matrice gradient de déplacement $[L]$ dans la base cartésienne globale :

$$\{dU\} = \underbrace{[L_z][F_z]^{-1}}_{[L]}\{dX\} \tag{3.15}$$

En remarquant que $[Q] = [\underline{t}_1 \vdots \underline{t}_2 \vdots \underline{n}]$ est la matrice de passage entre les systèmes de cordonnées cartésiennes et curvilignes, la matrice gradient de déplacement dans la base curviligne notée $[L_t]$ peut être définie en fonction de $[L]$ pour déterminer le tenseur des déformations curvilignes :

$$[L_t] = [Q]^T[L][Q] \quad ; \quad [\varepsilon_t] = \frac{1}{2}([L_t] + [L_t]^T) \quad ; \quad [\varepsilon_t] = \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ sym & & \varepsilon_{zz} \end{bmatrix} \tag{3.16}$$

En introduisant la matrice $[C_z] = [F_z]^{-1}[Q]$, les composantes du tenseur des déformations curvilignes linéarisé ont les expressions suivantes :

$$\begin{cases} \varepsilon_{xx} &= \underline{t}_1.(\underline{U}_{,\xi}C_{z11} + \underline{U}_{,\eta}C_{z21}) \\ \varepsilon_{yy} &= \underline{t}_2.(\underline{U}_{,\xi}C_{z12} + \underline{U}_{,\eta}C_{z22}) \\ 2\varepsilon_{xy} &= \underline{t}_1.(\underline{U}_{,\xi}C_{z12} + \underline{U}_{,\eta}C_{z22}) + \underline{t}_2.(\underline{U}_{,\xi}C_{z11} + \underline{U}_{,\eta}C_{z21}) \\ 2\varepsilon_{xz} &= \underline{n}.(\underline{U}_{,\xi}C_{z11} + \underline{U}_{,\eta}C_{z21}) + \underline{t}_1.\underline{\beta} \\ 2\varepsilon_{yz} &= \underline{n}.(\underline{U}_{,\xi}C_{z12} + \underline{U}_{,\eta}C_{z22}) + \underline{t}_2.\underline{\beta} \\ \varepsilon_{zz} &= 0 \end{cases} \tag{3.17}$$

avec $C_{z\alpha\beta} = C_z(\alpha, \beta) \quad \alpha, \beta = 1, 2.$

3.3.3 Le potentiel et champ électriques

Il est généralement connu qu'une variation linéaire du potentiel électrique suivant l'épaisseur constitue une approximation raisonnable quand les applications de type actionneur sont visées (exploitation de l'effet piézoélectrique inverse). Par contre, cette approximation linéaire s'avère insuffisante dans les applications de type capteur dominées par des chargements mécaniques induisant des déformations de flexion. Dans ce cas, une approximation quadratique du potentiel électrique suivant l'épaisseur est plus adéquate [3, 55].
Pour les problèmes ferroélectriques non linéaires, il est difficile de considérer une variation quadratique du potentiel électrique. En effet, le terme quadratique du potentiel électrique est déterminé, en général pour les problèmes piézoélectriques linéaires, par une condensation statique au niveau de chaque élément fini [3] comme détaillé dans l'Annexe E. Cette condensation statique n'est pas triviale dans le cas des problèmes non linéaires. Par conséquent, une variation linéaire du potentiel électrique suivant l'épaisseur est supposée dans la suite. Ainsi, si φ_b et φ_t désignent les potentiels électriques appliqués sur les faces inférieure (bottom) et supérieure (top) de la structure piézoélectrique mince, respectivement, la variation linéaire suivante du potentiel électrique est considérée :

$$\varphi(\xi, \eta, \zeta) = \frac{1-\zeta}{2}\,\varphi_b(\xi, \eta) + \frac{1+\zeta}{2}\,\varphi_t(\xi, \eta) \tag{3.18}$$

Nous remarquons que cette dernière expression du potentiel électrique vérifie les conditions aux limites électriques : $\varphi(\xi, \eta, \zeta = 1) = \varphi_t(\xi, \eta)$ et $\varphi(\xi, \eta, \zeta = -1) = \varphi_b(\xi, \eta)$. Les composantes

curvilignes du champ électrique peuvent être déduites de la relation (3.18) :

$$\begin{cases} E_x = -\dfrac{\partial \varphi}{\partial x} = & -\left[\frac{1-\zeta}{2}\,\varphi_{b,x} + \frac{1+\zeta}{2}\,\varphi_{t,x}\right] \\ E_y = -\dfrac{\partial \varphi}{\partial y} = & -\left[\frac{1-\zeta}{2}\,\varphi_{b,y} + \frac{1+\zeta}{2}\,\varphi_{t,y}\right] \\ E_z = -\dfrac{\partial \varphi}{\partial z} = & -\dfrac{\varphi_t - \varphi_b}{h} \end{cases} \tag{3.19}$$

Le tenseur des contraintes mécaniques $\underline{\underline{\sigma}}$ et le vecteur déplacement électrique $\underline{D}$ sont déterminés à partir des équations ferroélectriques bidimensionnelles développées dans la section 2.6 dans le cas des structures ferroélectriques minces.
A ce stade, toutes les équations correspondantes au comportement ferroélectrique des structures minces sont définies dans leur forme faible. Ces équations sont généralement résolues par la méthode des éléments finis. La section suivante décrit cette résolution en implémentant un élément fini coque ferroélectrique dans le code commercial Abaqus®.

3.4 Approximation par éléments finis

La solution du problème électromécanique (Équation (3.3)) peut être obtenue par la méthode des éléments finis. L'approximation par éléments finis consiste à diviser le domaine piézoélectrique B_0 en domaines élémentaires de sorte que $B_0 = \bigcup_{n=1}^{n=n_{el}} B_e$ avec n_{el} le nombre total d'éléments. Pour étudier le comportement non linéaire des céramiques ferroélectriques minces, un élément coque électromécanique à quatre noeuds (Figure 3.3) basé sur la théorie de Reissner/Mindlin est développé et implanté dans le code Abaqus® via la routine UEL (User ELement).

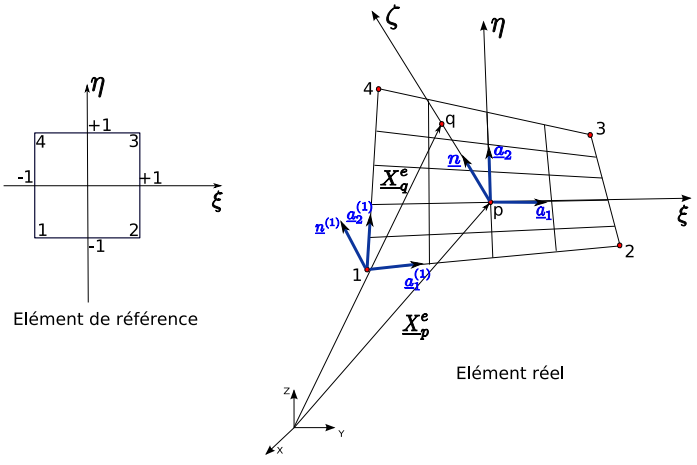


Fig. 3.3 : *Élément coque quadrilatéral à quatre noeuds et représentation de la base covariante de la surface moyenne.*

L'élément coque proposé est un élément quadrilatéral à quatre noeuds avec des degrés de liberté

mécaniques et électriques. La fonction de forme bilinéaire au niveau d'un noeud i est donnée par :

$$N_i(\xi,\eta) = \frac{1}{4}(1+\xi_i\xi)(1+\eta_i\eta) \qquad \text{avec} \quad -1 \leq \xi,\eta \leq +1 \tag{3.20}$$

Par le biais du concept isoparamétrique, les fonctions de forme bilinéaires N_i (Équation (3.20)) interpolent au niveau élémentaire (exposant e) le vecteur position cartésien de la surface moyenne $\underline{X}_p^e(\xi,\eta)$, le vecteur déplacement mécanique cartésien de la surface moyenne $\underline{U}_p^e(\xi,\eta)$ et le vecteur rotation $\underline{\beta}^e(\xi,\eta)$ du vecteur normal (Équation (3.13)). Les approximations suivantes sont utilisées :

$$\left\{\begin{array}{lcll} \underline{X}_p^e(\xi,\eta) & = & \sum_{i=1}^4 N_i(\xi,\eta)\underline{X}^{(i)} & ; \quad \{X^{(i)}\} = \{X_i\ Y_i\ Z_i\}^T \\ \underline{U}_p^e(\xi,\eta) & = & \sum_{i=1}^4 N_i(\xi,\eta)\underline{U}^{(i)} & ; \quad \{U^{(i)}\} = \{U_i\ V_i\ W_i\}^T \\ \underline{\beta}^e(\xi,\eta) & = & \sum_{i=1}^4 N_i(\xi,\eta)(\theta_2^{(i)}\underline{t}_1^{(i)} - \theta_1^{(i)}\underline{t}_2^{(i)}) & \end{array}\right. \tag{3.21}$$

avec $\underline{X}^{(i)}$ et $\underline{U}^{(i)}$ sont respectivement le vecteur position cartésien et le vecteur déplacement mécanique cartésien du noeud i. $\theta_1^{(i)}$ et $\theta_2^{(i)}$ sont les rotations du vecteur normal $\underline{n}^{(i)}$ autour de $\underline{t}_1^{(i)}$ et $\underline{t}_2^{(i)}$. En substituant l'Équation (3.21) dans l'Équation (3.17), les composantes curvilignes du tenseur des déformations s'écrivent en fonction des degrés de liberté mécaniques comme suit :

$$\begin{aligned}
\varepsilon_{xx} = \ & (N_{i,\xi}C_{z11} + N_{i,\eta}C_{z21})\underline{t}_1.\underline{U}^{(i)} + z(N_{i,\xi}C_{z11} + N_{i,\eta}C_{z21})\Big[(\underline{t}_1.\underline{t}_1^{(i)})\theta_2^{(i)} - (\underline{t}_1.\underline{t}_2^{(i)})\theta_1^{(i)}\Big] \\
\varepsilon_{yy} = \ & (N_{i,\xi}C_{z12} + N_{i,\eta}C_{z22})\underline{t}_2.\underline{U}^{(i)} + z(N_{i,\xi}C_{z12} + N_{i,\eta}C_{z22})\Big[(\underline{t}_2.\underline{t}_1^{(i)})\theta_2^{(i)} - (\underline{t}_2.\underline{t}_2^{(i)})\theta_1^{(i)}\Big] \\
\gamma_{xy} = \ & (N_{i,\xi}C_{z12} + N_{i,\eta}C_{z22})\underline{t}_1.\underline{U}^{(i)} + (N_{i,\xi}C_{z11} + N_{i,\eta}C_{z21})\underline{t}_2.\underline{U}^{(i)} \\
& + z(N_{i,\xi}C_{z12} + N_{i,\eta}C_{z22})\Big[(\underline{t}_1.\underline{t}_1^{(i)})\theta_2^{(i)} - (\underline{t}_1.\underline{t}_2^{(i)})\theta_1^{(i)}\Big] \\
& + z(N_{i,\xi}C_{z11} + N_{i,\eta}C_{z21})\Big[(\underline{t}_2.\underline{t}_1^{(i)})\theta_2^{(i)} - (\underline{t}_2.\underline{t}_2^{(i)})\theta_1^{(i)}\Big] \\
\gamma_{xz} = \ & (N_{i,\xi}C_{z11} + N_{i,\eta}C_{z21})\underline{n}.\underline{U}^{(i)} + N_i(\xi,\eta)\underline{t}_1.\underline{t}_1^{(i)}\theta_2^{(i)} - N_i(\xi,\eta)\underline{t}_1.\underline{t}_2^{(i)}\theta_1^{(i)} \\
& + z(N_{i,\xi}C_{z11} + N_{i,\eta}C_{z21})\Big[(\underline{n}.\underline{t}_1^{(i)})\theta_2^{(i)} - (\underline{n}.\underline{t}_2^{(i)})\theta_1^{(i)}\Big] \\
\gamma_{yz} = \ & (N_{i,\xi}C_{z12} + N_{i,\eta}C_{z22})\underline{n}.\underline{U}^{(i)} + N_i(\xi,\eta)\underline{t}_2.\underline{t}_1^{(i)}\theta_2^{(i)} - N_i(\xi,\eta)\underline{t}_2.\underline{t}_2^{(i)}\theta_1^{(i)} \\
& + z(N_{i,\xi}C_{z12} + N_{i,\eta}C_{z22})\Big[(\underline{n}.\underline{t}_1^{(i)})\theta_2^{(i)} - (\underline{n}.\underline{t}_2^{(i)})\theta_1^{(i)}\Big]
\end{aligned} \tag{3.22}$$

avec $\gamma_{xy} = 2\varepsilon_{xy}$, $\gamma_{xz} = 2\varepsilon_{xz}$ et $\gamma_{yz} = 2\varepsilon_{yz}$.

3.4.1 Correction de type MITC des déformations γ_{xz} et γ_{yz}

Il est généralement connu que les éléments plaques et coques basés sur la théorie du premier ordre de Reissner/Mindlin souffrent d'un blocage en cisaillement transverse (C.T) surtout

pour les structures minces [12]. La méthode des déformations naturelles postulées (Assumed Natural Strain method : la méthode ANS) a montré sa fiabilité pour éliminer ce type de verrouillage [65, 28, 12, 55]. Étant donné que l'élément coque développé est quadrilatéral bilinéaire, la même représentation des déformations de cisaillement transverse que l'élément plaque MITC-4 de Bathe-Dvorkin [28] est adoptée. Cette méthode (MITC : Mixed Interpolation of Tensorial Components) permet à l'élément coque de bien représenter les modes de flexion pure sans les forces de cisaillement transverse parasites même pour des maillages complexes (non réguliers).
Dans l'approche MITC, les déformations de cisaillement transverse covariantes postulées, notés $\gamma_{\xi z}^{AS}$ et $\gamma_{\eta z}^{AS}$, sont calculées en utilisant les interpolations suivantes [12, 28] :

$$\gamma_{\xi z}^{AS} = \sum_{s=1}^{K_s} N_s^{\xi}(\xi,\eta)\gamma_{\xi z}^{S} \quad ; \quad \gamma_{\eta z}^{AS} = \sum_{s=1}^{K_s} N_s^{\eta}(\xi,\eta)\gamma_{\eta z}^{S} \tag{3.23}$$

où $\gamma_{\xi z}^{S}$ et $\gamma_{\eta z}^{S}$ sont les déformations de cisaillement transverse covariantes aux points $S(\xi_s,\eta_s)$ ($\gamma_{\xi z}^{S} = \gamma_{\xi z}(\xi_s,\eta_s)$, $\gamma_{\eta z}^{S} = \gamma_{\eta z}(\xi_s,\eta_s)$) et N_s^{ξ}, N_s^{η} sont des nouvelles fonctions d'interpolation utilisées uniquement pour interpoler les déformations de cisaillement covariantes. Pour éviter le verrouillage en cisaillement transverse, il est montré dans [12, 28] que les points d'interpolation S doivent avoir les coordonnées suivantes : $A_1(0,-1)$, $A_2(0,1)$, $B_1(-1,0)$ and $B_2(1,0)$ (Figure 3.4).
Pour obtenir $\gamma_{\xi z}^{AS}$ et $\gamma_{\eta z}^{AS}$ linéaires suivant les directions η et ξ, respectivement, les fonctions d'interpolation suivantes $N_1^{\xi}(\xi,\eta) = \dfrac{1-\eta}{2}$, $N_2^{\xi}(\xi,\eta) = \dfrac{1+\eta}{2}$, $N_1^{\eta}(\xi,\eta) = \dfrac{1-\xi}{2}$ et $N_2^{\eta}(\xi,\eta) = \dfrac{1+\xi}{2}$ sont adoptées pour interpoler les déformations de cisaillement transverse covariantes [12] :

$$\begin{cases} \gamma_{\xi z}^{AS}(\xi,\eta) = & N_1^{\xi}(\xi,\eta)\gamma_{\xi z}^{A_1} + N_2^{\xi}(\xi,\eta)\gamma_{\xi z}^{A_2} \\ \gamma_{\eta z}^{AS}(\xi,\eta) = & N_1^{\eta}(\xi,\eta)\gamma_{\eta z}^{B_1} + N_2^{\eta}(\xi,\eta)\gamma_{\eta z}^{B_2} \end{cases} \tag{3.24}$$

où $\gamma_{\xi z}^{A_1} = \gamma_{\xi z}(0,-1)$, $\gamma_{\xi z}^{A_2} = \gamma_{\xi z}(0,1)$, $\gamma_{\eta z}^{B_1} = \gamma_{\eta z}(-1,0)$ et $\gamma_{\eta z}^{B_2} = \gamma_{\eta z}(1,0)$.

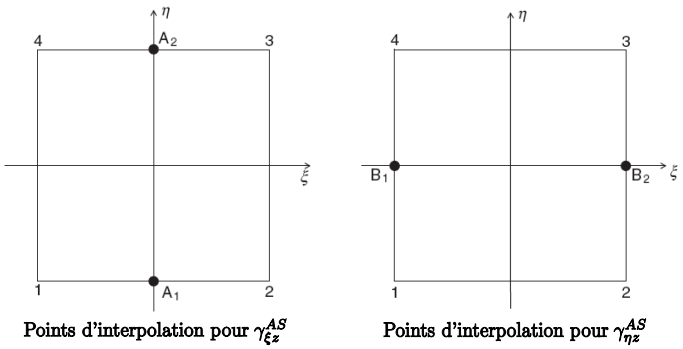


Fig. 3.4 : *Les points d'interpolation utilisés pour déterminer $\gamma_{\xi z}^{AS}$ et $\gamma_{\eta z}^{AS}$.*

Les déformations covariantes

La matrice gradient de déplacement dans la base covariante notée $[L_c]$ est donnée en fonction des vecteurs contravariants $\underline{a}_z^1$, $\underline{a}_z^2$ et $\underline{a}_z^3 = \underline{n}$:

$$[L_c] = L_{cij}\ \underline{a}_z^i \otimes \underline{a}_z^j \tag{3.25}$$

En remarquant que $[F_z]^{-T} = [\underline{a}_z^1 \vdots \underline{a}_z^2 \vdots \underline{n}]$, nous pouvons écrire la relation suivante entre les matrices gradient de déplacement dans les bases cartésienne $[L]$ et covariante $[L_c]$:

$$[L] = [F_z]^{-T}[L_c][F_z]^{-1}$$

En remarquant que $[L] = [L_z][F_z]^{-1}$, nous pouvons déduire que

$$[L_c] = [F_z]^T[L_z] \tag{3.26}$$

soit

$$[L_c] = \begin{bmatrix} \underline{a}_{1z}.\underline{U}^e_{p,\xi} & \underline{a}_{1z}.\underline{U}^e_{p,\eta} & \underline{a}_{1z}.\underline{\beta}^e \\ \underline{a}_{2z}.\underline{U}^e_{p,\xi} & \underline{a}_{2z}.\underline{U}^e_{p,\eta} & \underline{a}_{2z}.\underline{\beta}^e \\ \underline{n}.\underline{U}^e_{p,\xi} & \underline{n}.\underline{U}^e_{p,\eta} & \underline{n}.\underline{\beta}^e = 0 \end{bmatrix} + z \begin{bmatrix} \underline{a}_{1z}.\underline{\beta}^e_{,\xi} & \underline{a}_{1z}.\underline{\beta}^e_{,\eta} & 0 \\ \underline{a}_{2z}.\underline{\beta}^e_{,\xi} & \underline{a}_{2z}.\underline{\beta}^e_{,\eta} & 0 \\ \underline{n}.\underline{\beta}^e_{,\xi} & \underline{n}.\underline{\beta}^e_{,\eta} & 0 \end{bmatrix} \tag{3.27}$$

Les déformations de cisaillement transverse covariantes sont déduites de la matrice $[L_c]$ comme suit :

$$\left\{ \begin{array}{c} \gamma_{\xi z} \\ \gamma_{\eta z} \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{c} L_{c13} + L_{c31} \\ L_{c23} + L_{c32} \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{c} \underline{a}_1.\underline{\beta}^e + \underline{n}.\underline{U}^e_{p,\xi} + z(\underline{n}_{,\xi}.\underline{\beta}^e + \underline{n}.\underline{\beta}_{,\xi})^e \\ \underline{a}_2.\underline{\beta}^e + \underline{n}.\underline{U}^e_{p,\eta} + z(\underline{n}_{,\eta}.\underline{\beta}^e + \underline{n}.\underline{\beta}^e_{,\eta}) \end{array} \right\} \tag{3.28}$$

En remarquant que $\underline{n}.\underline{\beta}^e = 0$, nous aurons :

$$\left\{ \begin{array}{c} \gamma_{\xi z} \\ \gamma_{\eta z} \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{c} \underline{a}_1.\underline{\beta}^e + \underline{n}.\underline{U}^e_{p,\xi} \\ \underline{a}_2.\underline{\beta}^e + \underline{n}.\underline{U}^e_{p,\eta} \end{array} \right\} \tag{3.29}$$

En utilisant les approximations (3.21), les déformations de cisaillement transverse covariantes aux points A_1, A_2, B_1 et B_2 sont exprimées en fonction des degrés de liberté mécaniques :

$$\begin{aligned} \gamma^{A1}_{\xi z} = \ & \Big(-\tfrac{1}{2}\underline{a}_1^{A1}.\underline{t}_2^{(1)} \Big)\theta_1^{(1)} + \Big(\tfrac{1}{2}\underline{a}_1^{A1}.\underline{t}_1^{(1)} \Big)\theta_2^{(1)} + \Big(-\tfrac{1}{2}\underline{a}_1^{A1}.\underline{t}_2^{(2)} \Big)\theta_1^{(2)} + \Big(\tfrac{1}{2}\underline{a}_1^{A1}.\underline{t}_1^{(2)} \Big)\theta_2^{(2)} \\ & + \tfrac{1}{2}\underline{n}^{A1}.(\underline{U}^{(2)} - \underline{U}^{(1)}) \end{aligned} \tag{3.30}$$

$$\begin{aligned} \gamma^{A2}_{\xi z} = \ & \Big(-\tfrac{1}{2}\underline{a}_1^{A2}.\underline{t}_2^{(3)} \Big)\theta_1^{(3)} + \Big(\tfrac{1}{2}\underline{a}_1^{A2}.\underline{t}_1^{(3)} \Big)\theta_2^{(3)} + \Big(-\tfrac{1}{2}\underline{a}_1^{A2}.\underline{t}_2^{(4)} \Big)\theta_1^{(4)} + \Big(\tfrac{1}{2}\underline{a}_1^{A2}.\underline{t}_1^{(4)} \Big)\theta_2^{(4)} \\ & + \tfrac{1}{2}\underline{n}^{A2}.\big(\underline{U}^{(3)} - \underline{U}^{(4)}\big) \end{aligned} \tag{3.31}$$

$$\begin{aligned} \gamma^{B1}_{\eta z} = \ & \Big(-\tfrac{1}{2}\underline{a}_2^{B1}.\underline{t}_2^{(1)} \Big)\theta_1^{(1)} + \Big(\tfrac{1}{2}\underline{a}_2^{B1}.\underline{t}_1^{(1)} \Big)\theta_2^{(1)} + \Big(-\tfrac{1}{2}\underline{a}_2^{B1}.\underline{t}_2^{(4)} \Big)\theta_1^{(4)} + \Big(\tfrac{1}{2}\underline{a}_2^{B1}.\underline{t}_1^{(4)} \Big)\theta_2^{(4)} \\ & + \tfrac{1}{2}\underline{n}^{B1}.(\underline{U}^{(4)} - \underline{U}^{(1)}) \end{aligned} \tag{3.32}$$

$$\gamma_{\eta z}^{B2} = \Big(-\tfrac{1}{2}\underline{a}_2^{B2}.\underline{t}_2^{(2)}\Big)\theta_1^{(2)} + \Big(\tfrac{1}{2}\underline{a}_2^{B2}.\underline{t}_1^{(2)}\Big)\theta_2^{(2)} + \Big(-\tfrac{1}{2}\underline{a}_2^{B2}.\underline{t}_2^{(3)}\Big)\theta_1^{(3)} + \Big(\tfrac{1}{2}\underline{a}_2^{B2}.\underline{t}_1^{(3)}\Big)\theta_2^{(3)} + \tfrac{1}{2}\underline{n}^{B2}.(\underline{U}^{(3)} - \underline{U}^{(2)}) \tag{3.33}$$

où $\underline{n}^S = \underline{n}(\xi_s, \eta_s)$, $\underline{a}_1^S = \underline{a}_1(\xi_s, \eta_s)$ et $\underline{a}_2^S = \underline{a}_2(\xi_s, \eta_s)$ avec $S \in \{A_1,\, A_2,\, B_1,\, B_2\}$.
Après avoir déterminé les déformations covariantes de cisaillement transverse postulées $\gamma_{\xi z}^{AS}$ et $\gamma_{\eta z}^{AS}$, nous pouvons déterminer les composantes curvilignes γ_{xz}^{AS} et γ_{yz}^{AS} en utilisant la relation suivante entre la matrice gradient de déplacement dans la base curviligne $[L_t]$ et celle dans la base covariante $[L_c]$:

$$[L_t] = [Q]^T[L][Q] = [Q]^T[F_z]^{-T}[L_c]\underbrace{[F_z]^{-1}[Q]}_{[C_z]} = [C_z]^T[L_c][C_z] \tag{3.34}$$

Finalement, nous pouvons montrer que :

$$\left\{ \begin{array}{c} \gamma_{xz}^{AS} \\ \gamma_{yz}^{AS} \end{array} \right\} = \left[\begin{array}{cc} C_{z11} & C_{z21} \\ C_{z12} & C_{z22} \end{array} \right] \left\{ \begin{array}{c} \gamma_{\xi z}^{AS} \\ \gamma_{\eta z}^{AS} \end{array} \right\} \tag{3.35}$$

3.4.2 Le potentiel électrique

Par le biais du concept isoparamétrique, le potentiel électrique (Équation (3.18)) au niveau de l'élément peut être interpolé en utilisant les fonctions de forme de l'Équation (3.20) :

$$\varphi^e(\xi, \eta, \zeta) = \frac{1-\zeta}{2}\sum_{i=1}^{4} N_i(\xi, \eta)\varphi_b^{(i)} + \frac{1+\zeta}{2}\sum_{i=1}^{4} N_i(\xi, \eta)\varphi_t^{(i)} \tag{3.36}$$

avec $\varphi_b^{(i)}$ et $\varphi_t^{(i)}$ sont les potentiels électriques appliquées en dessous et au dessus de la fibre centrée au noeud i, respectivement. Comme expliqué dans le chapitre 2, il est supposé que le champ électrique agit uniquement suivant l'épaisseur dans le cas des structures ferroélectriques minces. De plus, en utilisant l'hypothèse $D_x = D_y = 0$ (la polarisation électrique apparaît uniquement suivant l'épaisseur puisque le champ électrique agit suivant cette direction), la troisième composante curviligne du champ électrique est la seule composante utile :

$$E_z = E_3 = -\frac{1}{h}\sum_{i=1}^{4} N_i(\xi, \eta)\Big(\varphi_t^{(i)} - \varphi_b^{(i)}\Big) \tag{3.37}$$

3.4.3 Le vecteur des degrés de liberté

Le vecteur des degrés de liberté *local* élémentaire, noté $\underline{d}_l^e$, est défini par :

$$\{d_l^e\} = \{\ldots \mid U_i\ V_i\ W_i \vdots \theta_1^{(i)}\ \theta_2^{(i)}\ \theta_3^{(i)} \vdots \varphi_b^{(i)}\ \varphi_t^{(i)} \mid \ldots\ i = 1, 2, 3, 4\}^T \tag{3.38}$$

Il est intéressant de noter que le terme *local* est utilisé car $\theta_1^{(i)}$, $\theta_2^{(i)}$ et $\theta_3^{(i)}$ sont les rotations locales du vecteur normal $\underline{n}^{(i)}$ autour de $\underline{t}_1^{(i)}$, $\underline{t}_2^{(i)}$ et $\underline{n}^{(i)}$, respectivement. U_i, V_i et W_i sont

les déplacements mécaniques nodaux exprimés dans la base cartésienne. Même si localement $\theta_3(\xi,\eta) = 0$, la rotation locale de $\underline{n}^{(i)}$ autour de lui même est considérée dans le vecteur des degrés de liberté (Équation (3.38)) et un travail fictif δW_z^e est introduit dans la forme faible de l'équilibre électromécanique pour éviter la singularité de la matrice de rigidité après l'assemblage comme proposé dans [12] :

$$\delta W_z^e = \alpha H \int_{A^e} (\delta\theta_{3,x}\theta_{3,x} + \delta\theta_{3,y}\theta_{3,y}) dA \tag{3.39}$$

où A^e est la surface de référence d'un élément, α est une constante numérique ($\alpha = 10^{-6}$) et H est un coefficient pris de la matrice d'élasticité ($H = C_{11}^E$). δW_z^e ne va pas perturber la solution mais ajoute un travail fictif à la rotation locale θ_3 pour prévenir la singularité de la matrice de rigidité globale. Au niveau élémentaire, la forme faible de l'équilibre électromécanique s'écrit sous cette forme :

$$\delta\pi^e = \underbrace{\int_{B_e} \sigma_{ij}\delta\varepsilon_{ij} d\Omega + \int_{B_e} D_i \delta E_i d\Omega}_{\delta W_{int}^e} - \Big[\underbrace{\int_{\partial B_e} T_i \delta u_i dA + \int_{\partial B_e} Q\delta\varphi dA}_{\delta W_{ext}^e}\Big] + \ \delta W_z^e = 0 \tag{3.40}$$

En utilisant les expressions (3.22) et (3.35) des composantes curvilignes du tenseur des déformations et l'expression (3.37) de la composante normale du champ électrique, le vecteur regroupant les déformations curvilignes généralisés $\{\Gamma\} = \{\varepsilon_{11}\ \varepsilon_{22}\ 2\varepsilon_{12}\ 2\varepsilon_{13}\ 2\varepsilon_{23}\ E_3\}^T$ peut être lié au vecteur des degrés de liberté $\underline{d}_l^e$ (Équation (3.38)) par une matrice $[B]$ de taille 6×32 :

$$\{\Gamma\} = [B]\{d_l^e\} \tag{3.41}$$

D'autre part, avec l'approximation $\theta_3 = \sum_{i=1}^4 N_i(\xi,\eta)\theta_3^{(i)}$, nous pouvons écrire [12] :

$$\begin{cases} \theta_{3,x} = \{N_{1\theta}\}^T\{d_l^e\} \\ \theta_{3,y} = \{N_{2\theta}\}^T\{d_l^e\} \end{cases} \tag{3.42}$$

En substituant les Équations (3.41) et (3.42) dans la forme faible de l'équilibre (Équation (3.40)), cette dernière relation peut être réécrite comme suit :

$$\begin{aligned} \delta\pi^e = \ \{\delta d_l^e\}^T \Big[& \underbrace{\int_{B_e} [B]^T\{\Sigma\} d\Omega - \int_{\partial B_e} [N_1]^T\{T\} dA - \int_{\partial B_e} \{N_2\}^T Q dA}_{} \\ & + \underbrace{\alpha H \int_{A^e} \Big(\{N_{1\theta}\}\{N_{1\theta}\}^T + \{N_{2\theta}\}\{N_{2\theta}\}^T\Big) dA\ \{d_l^e\}\Big]}_{\{R_l^e\}} = 0 \end{aligned} \tag{3.43}$$

avec $\{\Sigma\} = \{\sigma_{11}\ \sigma_{22}\ \sigma_{12}\ \sigma_{13}\ \sigma_{23}\ D_3\}^T$ le vecteur des contraintes curvilignes généralisées, $[N_1]$ est une matrice 3×32 reliant le vecteur déplacement mécanique $\{U\} = \{U\ V\ W\}^T$ à $\underline{d}_l^e$ et $\underline{N_2}$ est un vecteur reliant le potentiel électrique φ à $\underline{d}_l^e$. $\underline{R}_l^e$ est le vecteur résidu local au niveau de

l'élément. La matrice de passage $[P]$ suivante (Équation (3.44)) est utilisée pour exprimer toutes les quantités dans le repère cartésien ($\{d_g^e\} = \{d^e\} = [P]\{d_l^e\}$ et $\{R_g^e\} = \{R^e\} = [P]\{R_l^e\}$ avec g signifie global) :

$$\underbrace{[P]}_{32\times 32} = \begin{bmatrix} [I_3] & & & & & & & \\ & [Q_1] & & & & & & \\ & & [I_2] & & & & & \\ & & & \ddots & & & & \\ & & & & [I_3] & & & \\ & & & & & [Q_4] & & \\ & & & & & & [I_2] & \end{bmatrix} \tag{3.44}$$

$[I_2]$ et $[I_3]$ sont, respectivement, les matrices identités d'ordres 2 et 3 et $[Q_i] = [\underline{t}_1^{(i)}\ \underline{t}_2^{(i)}\ \underline{n}^{(i)}]$ est la matrice curviligne tangente au noeud i. Après assemblage à travers tous les éléments, nous obtenons la forme faible globale $\delta\pi = \mathop{\mathbf{A}}_{e=1}^{n_{el}} \delta\pi^e$, le vecteur résidu global $\underline{R} = \mathop{\mathbf{A}}_{e=1}^{n_{el}} \underline{R}^e$ et le vecteur des degrés de liberté de tous les éléments $\underline{d} = \mathop{\mathbf{A}}_{e=1}^{n_{el}} \underline{d}^e$ dans le système de coordonnées cartésiennes. $\mathbf{A}$ est l'opérateur d'assemblage standard en éléments finis [75].
Le problème qui consiste à trouver le vecteur des degrés de libertés électromécaniques $\underline{d}$ pour lequel $\underline{R}(\underline{d}) = \underline{0}$ est résolu en utilisant une procédure incrémentale développée dans la section suivante.

3.4.4 Procédure incrémentale

Soit $[t_n\,,\, t_{n+1}]$ l'intervalle de chargement. Supposons que la structure ferroélectrique mince est en équilibre à $t = t_n$: $\underline{R}_n = \underline{R}(\underline{d}_n) = \underline{0}$. Un incrément du chargement extérieur induit un incrément $\triangle\underline{d}_{n+1}$ du vecteur des degrés de liberté nodaux. Le problème qui consiste à déterminer $\triangle\underline{d}_{n+1}$ est généralement résolu par une procédure itérative de Newton-Raphson [75]. A l'itération $(k+1)$, la relation linéarisée suivante permet d'obtenir une correction $\delta\triangle\underline{d}_{n+1}^{(k+1)}$ de $\triangle\underline{d}_{n+1}^{(k)}$:

$$\underline{R}_{n+1}^{(k)} + \frac{\partial \underline{R}_{n+1}^{(k)}}{\partial \underline{d}_{n+1}^{(k)}} \delta\triangle\underline{d}_{n+1}^{(k+1)} \approx \underline{0} \quad ; \quad \underline{R}_{n+1}^{(k)} = \underline{R}(\underbrace{\underline{d}_n + \triangle\underline{d}_{n+1}^{(k)}}_{\underline{d}_{n+1}^{(k)}}) \tag{3.45}$$

En introduisant l'opérateur d'assemblage $\mathbf{A}$, nous pouvons vérifier que :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \underline{R}_{n+1}^{(k)}}{\partial \underline{d}_{n+1}^{(k)}} \delta\triangle\underline{d}_{n+1}^{(k+1)} &= \mathop{\mathbf{A}}_{e=1}^{n_{el}} \frac{\partial \underline{R}_{n+1}^{e\,(k)}}{\partial \underline{d}_{n+1}^{e\,(k)}} \delta\triangle\underline{d}_{n+1}^{e\,(k+1)} \\ &= \mathop{\mathbf{A}}_{e=1}^{n_{el}} \Bigg[\underbrace{\left([P] \int_{B_e} [B]^T \left[\frac{\partial \underline{\Sigma}_{n+1}^{(k)}}{\partial \underline{\Gamma}_{n+1}^{(k)}} \right] [B]\, dV\ [P]^T \ + \ [k_z^e] \right)}_{[k_{n+1}^{e\,(k)}]} \delta\triangle\underline{d}_{n+1}^{e\,(k+1)} \Bigg] \\ &= [K_{n+1}^{(k)}] \delta\triangle\underline{d}_{n+1}^{(k+1)} \end{aligned} \tag{3.46}$$

avec $[k_z^e] = \alpha H[P]\Big[\int_{A^e}(\{N_{1\theta}\}\{N_{1\theta}\}^T + \{N_{2\theta}\}\{N_{2\theta}\}^T)dA\Big][P]^T$ (Équation (3.43)), $[k_{n+1}^{e\,(k)}]$ et $[K_{n+1}^{(k)}]$ sont respectivement les matrices de rigidité élémentaire et globale à t_{n+1} et l'itération (k) dans le système de coordonnées cartésiennes. $\left[\dfrac{\partial \underline{\Sigma}_{n+1}^{(k)}}{\partial \underline{\Gamma}_{n+1}^{(k)}}\right]$ est l'opérateur tangent curviligne électromécanique défini dans le chapitre 2 dans le cas des structures ferroélectriques minces. En se basant sur les Équations (3.45) et (3.46), la correction du vecteur des degrés de liberté $\delta\triangle\underline{d}_{n+1}^{(k+1)}$ peut être approchée par l'expression suivante :

$$\delta\triangle\underline{d}_{n+1}^{(k+1)} = -[K_{n+1}^{(k)}]^{-1}\,\underline{R}_{n+1}^{(k)} \tag{3.47}$$

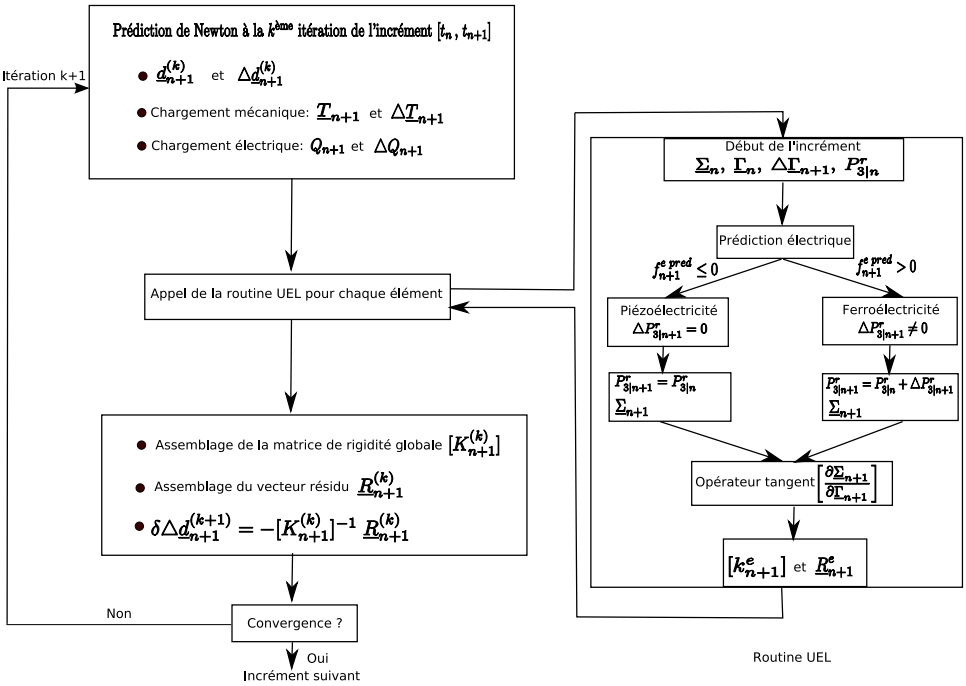


Fig. 3.5 : *Résolution du problème électromécanique bidimensionnel dans Abaqus® via la routine UEL.*

L'élément coque ferroélectrique est implanté dans Abaqus® en utilisant la routine UEL [2]. Abaqus® Standard utilise le schéma de Newton pour la résolution du système global comme montré sur l'algorithme de la Figure 3.5. Au niveau élémentaire, nous devons définir [2] :

1. d'abord, la matrice de rigidité élémentaire à la fin de l'incrément dans le repère cartésien :

$$\begin{aligned}[k^e_{n+1}] \;=\; & [P]\Big(\int_{B_e}[B]^T\left[\frac{\partial \underline{\Sigma}_{n+1}}{\partial \underline{\Gamma}_{n+1}}\right][B]dV\Big)[P]^T \\ & + \alpha H[P]\Big[\int_{A^e}(\{N_{1\theta}\}\{N_{1\theta}\}^T + \{N_{2\theta}\}\{N_{2\theta}\}^T)dA\Big][P]^T\end{aligned} \tag{3.48}$$

   Cette matrice sera stockée dans la matrice prédéfinie AMATRX d'Abaqus® ;

2. ensuite, le vecteur résidu élémentaire à la fin de l'incrément $-\underline{R}^e_{n+1} = -\underline{R}^e(\underline{d}^e_{n+1})$ dans le repère cartésien. Ce vecteur sera stocké dans le vecteur prédéfini RHS d'Abaqus®.

Pour valider la formulation électromécanique de l'élément coque, des cas tests mécaniques et électriques sont considérés dans les sections qui suivent.

3.5 Cas tests de validation

3.5.1 Cas tests mécaniques

Pour valider la réponse élastique de l'élément coque développé, quelques cas tests mécaniques linéaires sont étudiés. Les calculs sont effectués avec Q4TS, Q4TSE7, S4 et S4R avec Q4TS est la version purement mécanique de l'élément ferroélectrique Q4TSF, Q4TSE7 est une version de Q4TS avec une correction des déformations de membrane en utilisant la méthode des déformations postulées améliorées développée dans l'Annexe D, S4 est un élément coque quadrilatéral d'Abaqus® avec intégration exacte et des corrections des déformations de membrane et de cisaillement transverse. S4R est également un élément coque quadrilatéral d'Abaqus® avec intégration réduite et stabilisation des modes d'hourglass [1]. L'objectif principal est de montrer que l'élément coque développé Q4TS n'admet pas de verrouillages numériques et de comparer sa réponse à celles des éléments coques d'Abaqus®.

Flexion d'une plaque

La Figure 3.6 montre une plaque encastrée soumise à deux types de chargement : une force de cisaillement dans le plan et hors plan ($F_Y = F_Z = 2 \times 10^{-3}\,N$). Cette plaque est modélisée par un maillage distordu de deux éléments avec une excentricité e. L'intérêt de ce cas test est de tester la sensibilité de l'élément développé à la distorsion du maillage et la présence éventuelle du verrouillage en membrane et en cisaillement transverse. La géométrie de la plaque ainsi que ces propriétés élastiques sont résumées sur la Figure 3.6.

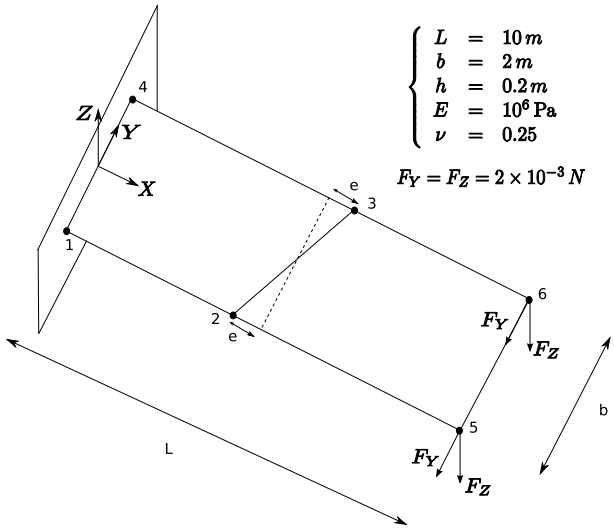


Fig. 3.6 : *Flexion plane et transversale d'une plaque : effet de la distorsion du maillage.*

Une solution de référence du déplacement du noeud 6 a été obtenue en considérant un maillage régulier très fin de l'élément quadratique à 20 noeuds d'Abaqus® C3D20 [1] (100 éléments suivant la longueur, 20 éléments suivant la largeur et quatre éléments suivant l'épaisseur) : $V_6^{ref} = -1.027 \times 10^{-5}\, m$ quand $F_Y = 2 \times 10^{-3}\, N$ et $F_Z = 0$ et $W_6^{ref} = -9.873 \times 10^{-4}\, m$ quand $F_Y = 0$ et $F_Z = 2 \times 10^{-3}\, N$. Les Tableaux 3.1 et 3.2 résument les résultats des éléments coques dans le cas de la flexion plane et la flexion transversale, respectivement.

Tab. 3.1 : *Déplacement normalisé V_6/V_6^{ref} dans le cas de la flexion plane (e en mètre).*

Maillage	Q4TS	Q4TSE7	S4	S4R
$e = 0$	0.28	0.9371	0.9259	43.3495
$e = 1$	0.1769	0.3393	0.7431	26.4946
$e = 2$	0.1401	0.2394	0.4474	14.1772
$e = 3$	0.1218	0.2479	0.2937	8.0369
$e = 4$	0.1050	0.2762	0.1862	3.9795

Tab. 3.2 : *Déplacement normalisé W_6/W_6^{ref} dans le cas de la flexion transversale (e en mètre).*

Maillage	Q4TS	Q4TSE7	S4	S4R
$e = 0$	0.9249	0.9249	0.925	0.9461
$e = 1$	0.8865	0.8865	0.8874	0.9521
$e = 2$	0.8337	0.8337	0.8430	0.9698
$e = 3$	0.8025	0.8025	0.8618	1.0070
$e = 4$	0.7851	0.7851	0.7986	1.0070

Dans le cas de la flexion plane, nous remarquons que la méthode EAS (Enhanced Assumed Strain method) développée dans l'Annexe D améliore le résultat de Q4TS (surtout pour $e = 0$) qui souffre d'un blocage en membrane pour des maillages grossiers. D'autre part, Q4TS et Q4TSE7 sont plus sensibles à la distorsion du maillage que l'élément S4. Les résultats de S4R sont trop loin de la solution de référence (Tableau 3.1) et donc il est plus intéressant d'utiliser l'élément S4 à la place de S4R dans ce type de situation (flexion plane avec un maillage grossier).
Pour la flexion hors plan, la méthode EAS n'améliore pas le résultat de Q4TS puisque ce cas test est dominé par les déformations de cisaillement transverse et par conséquent, Q4TS et Q4TSE7 donnent le même résultat. L'élément Q4TS donne des résultats très proches de ceux de S4 et il est moins sensible à la distorsion du maillage que dans le premier cas. L'élément S4R donne d'excellents résultats et la distorsion du maillage augmente sa précision (Figure 3.8). Il est alors plus avantageux d'utiliser l'élément S4R à la place de S4 dans cette situation (flexion transversale avec un maillage grossier).

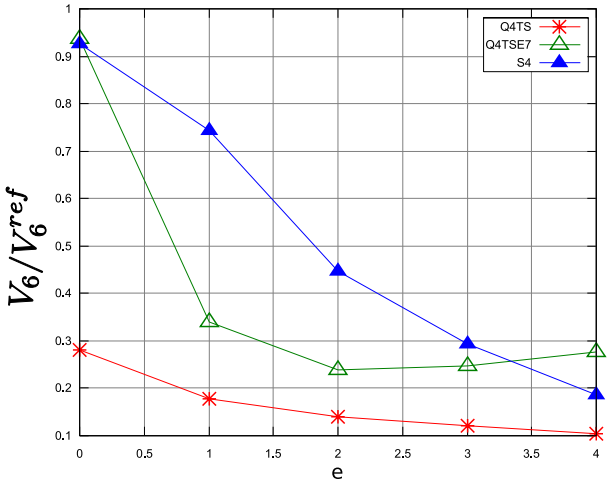


Fig. 3.7 : *Effet de la distorsion du maillage sur la convergence des éléments : flexion plane*

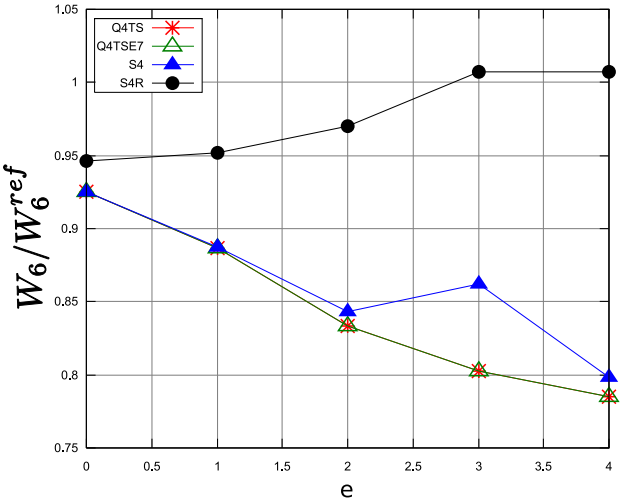


Fig. 3.8 : *Effet de la distorsion du maillage sur la convergence des éléments : flexion transversale*

Cylindre pincé avec diaphragmes

Le cas test d'un cylindre soumis à deux charges concentrées diamétralement opposées et reposant à ses extrémités sur deux diaphragmes rigides fait partie des cas tests de validation des éléments coques proposés dans [66]. La symétrie du problème permet de considérer un huitième du cylindre (portion ABCD, Figure 3.9). Les conditions aux limites et de symétrie du problème s'écrivent sous cette forme [12] :

$$\begin{aligned} U = V = \theta_Z = 0 \quad & \text{sur AD} \\ V = \theta_X = \theta_Z = 0 \quad & \text{sur AB} \\ W = \theta_X = \theta_Y = 0 \quad & \text{sur BC} \\ U = \theta_Y = \theta_Z = 0 \quad & \text{sur CD} \end{aligned}$$

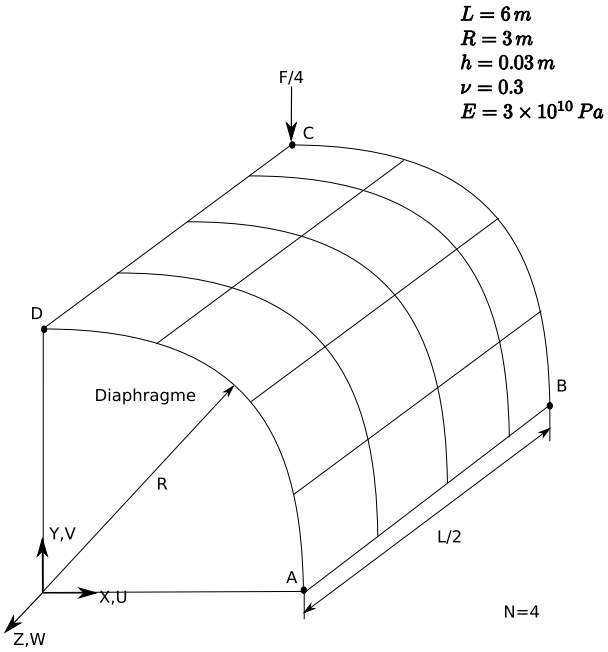


Fig. 3.9 : *Cylindre pincé avec diaphragme.*

Cet exemple constitue l'un des tests les plus sévères pour étudier la capacité d'un élément coque à décrire des champs de déformations de membrane complexes avec une part importante de flexion sans extension de la surface moyenne [12]. Le cylindre est soumis à une paire de forces concentrées diamétralement opposées $F = 1N$. Le déplacement de référence suivant Y du point C (Figure 3.9) est $V_C^{ref} = -1.82488 \times 10^{-7}\, m$ [61]. Les résultats obtenus pour les quatre éléments coques en utilisant des maillages réguliers de N=2, 4, 8, 16 et 32 éléments sur chaque côté du huitième du cylindre sont montrés dans le Tableau 3.3.

Tab. 3.3 : *Déplacement normalisé V_C/V_C^{ref} pour le cylindre pincé*

Maillage	Q4TS	Q4TSE7	S4	S4R
$N = 2$	0.0371	0.0413	0.0424	0.0666
$N = 4$	0.3708	0.3874	0.3882	0.4742
$N = 8$	0.7427	0.7532	0.7545	0.8049
$N = 16$	0.9280	0.9314	0.9327	0.9542
$N = 32$	0.9897	0.9906	0.9902	0.9976

Nous remarquons que les éléments coques utilisés montrent une convergence lente pour les maillages grossiers à cause de l'aspect sévère de cet exemple (Figure 3.10). Par contre, plus le maillage est affiné et plus les éléments convergent vers la solution de référence. La méthode EAS améliore légèrement le résultat de Q4TS et des résultats équivalents à ceux de S4 sont

obtenus avec Q4TSE7. L'intégration réduite utilisée avec S4R améliore sa réponse surtout pour les maillages grossiers.

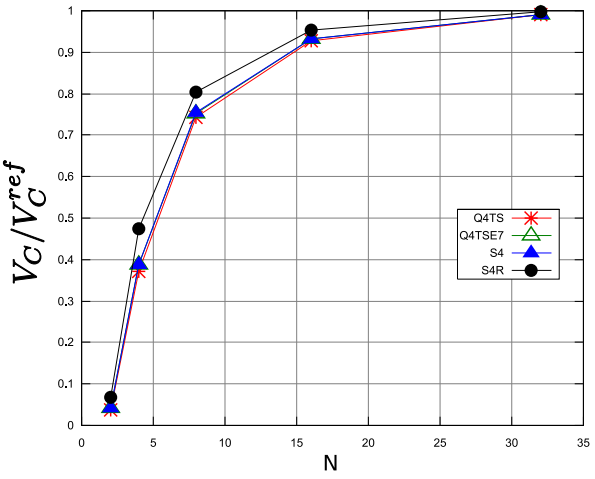


Fig. 3.10 : *Cylindre pincé : convergence de* V_C/V_C^{ref}.

La plaque asymétrique de Cook

Le cas test d'une plaque trapézoïdale encastrée d'un côté et soumise à une force répartie sur le côté libre, comme montré sur la Figure 3.11, a été introduit dans [77]. Comme les déformations de cisaillement planes sont dominantes dans cet example, il représente un cas test intéressant pour montrer l'efficacité de la méthode EAS développée pour réduire le blocage en membrane.

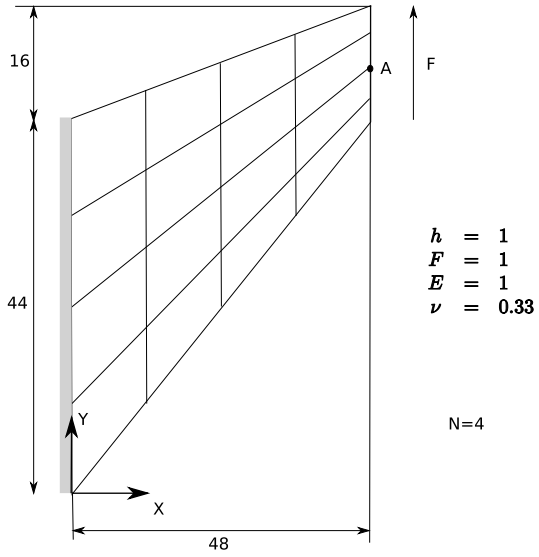


Fig. 3.11 : *La plaque asymétrique de Cook : gémoétrie, propriétés du matériau, conditions aux limites et chargement.*

La géométrie, les propriétés élastiques, les conditions aux limites et le chargement sont résumés sur la Figure 3.11 (les unités internationales à savoir le Newton et le mètre sont considérées). Le problème consiste à calculer le déplacement suivant Y du point A, qui est le milieu du côté libre, quand ce dernier est soumis à la force répartie F. Des maillages réguliers avec N=2, 4, 8 et 16 éléments par côté sont considérés. La solution de référence est donnée dans [77] : $V_A^{ref} = 23.91$. Les résultats obtenus avec les quatre éléments sont résumés sur le Tableau 3.4.

Tab. 3.4 : *Déplacement normalisé V_A/V_A^{ref} pour la plaque asymétrique de Cook.*

Maillage	Q4TS	Q4TSE7	S4	S4R
$N = 2$	0.4951	0.8833	0.8665	1.2525
$N = 4$	0.7653	0.9627	0.9606	1.0296
$N = 8$	0.9234	0.9903	0.9887	1.0055
$N = 16$	0.9799	0.9987	0.9974	1.0025

Nous remarquons que la méthode EAS améliore nettement la réponse de Q4TS qui souffre d'un blocage en membrane pour des maillages grossiers et accélère ainsi la convergence de cet élément vers la solution de référence (Figure 3.12). De plus, l'élément Q4TSE7 donne des résultats meilleurs que ceux de S4 surtout pour N=2 (Tableau 3.4).

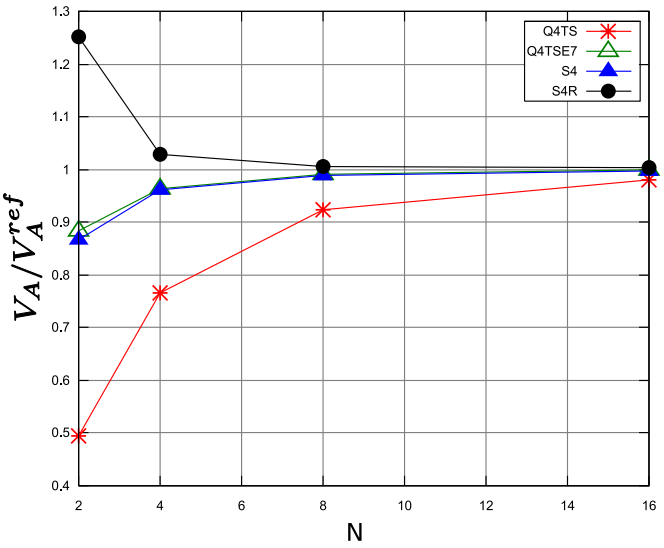


Fig. 3.12 : *Plaque asymétrique de Cook. Convergence de V_A/V_A^{ref}.*

Hémisphère sous charges diamétralement opposées

Le test d'un hémisphère mince ($\frac{R}{h} = 250$) (avec ou sans trou Figures 3.13 et 3.14) soumis à la base libre à quatre charges concentrées est utilisé pour vérifier l'absence de blocage en membrane

et la bonne représentation des mouvements de corps rigides [12]. Ce problème fait partie des cas tests proposés dans [66]. La symétrie du problème permet de considérer un quart de l'hémisphère. La géométrie, les propriétés matériau et les conditions aux limites du problème sont résumés sur la Figure 3.13.

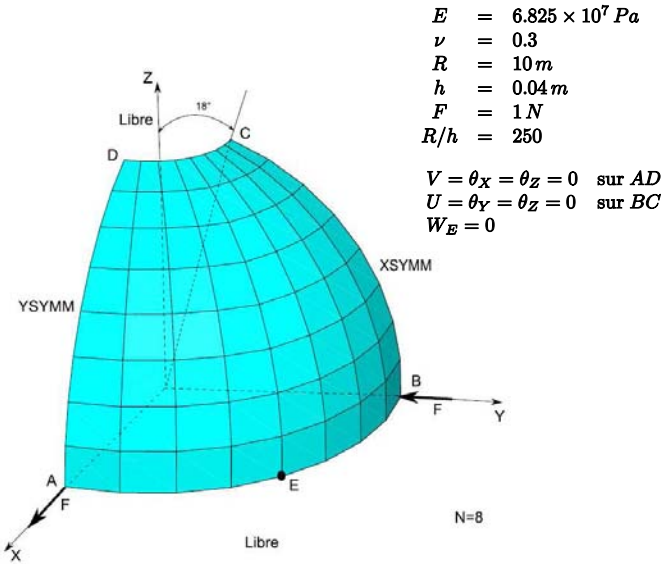


Fig. 3.13 : *Hémisphère pincé avec trou. Géométrie, propriétés matérielles et conditions aux limites.*

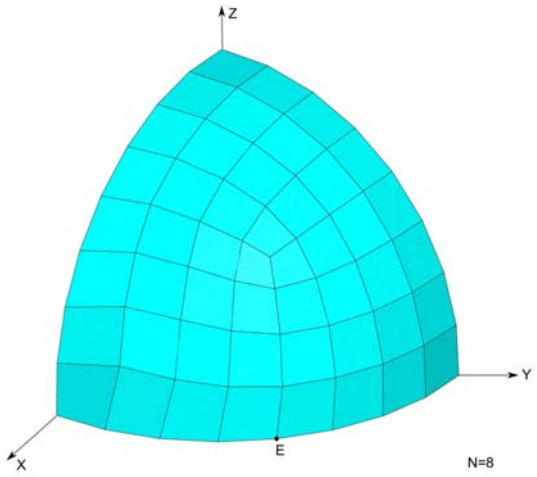


Fig. 3.14 : *Hémisphère pincé sans trou.*

La solution de référence pour l'hémisphère avec trou est $U_A = -V_B = 0.094\, m$ et celle pour l'hémisphère sans trou est $U_A = -V_B = 0.0925\, m$ [66]. Le premier cas test (hémisphère avec trou) permet d'utiliser un maillage composé par des éléments quadrilatéraux plats, alors que le deuxième cas test (hémisphère sans trou) permet d'utiliser un maillage formé d'éléments distordus ce qui le rend plus sévère que le premier cas. Des maillages réguliers avec N=2, 4, 8, 12, 16 et 20 éléments sur chaque côté de l'hémisphère sont considérés. Nous montrons dans les Tableaux 3.5

et 3.6 les résultats obtenus avec les quatre éléments.

Tab. 3.5 : *Déplacement normalisé U_A/U_A^{ref} pour l'hémisphère avec trou.*

Maillage	Q4TS	Q4TSE7	S4	S4R
$N = 2$	0.8957	0.8957	0.8559	0.8962
$N = 4$	0.9824	0.9862	0.9704	1.0173
$N = 8$	0.9855	0.9878	0.9842	1.0024
$N = 12$	0.9861	0.9889	0.9872	0.9996
$N = 16$	0.9879	0.9905	0.9894	0.9980
$N = 20$	0.9896	0.9918	0.9910	0.9972

Tab. 3.6 : *Déplacement normalisé U_A/U_A^{ref} pour l'hémisphère sans trou*

Maillage	Q4TS	Q4TSE7	S4	S4R
$N = 2$	0.0701	0.1424	0.1614	0.8276
$N = 4$	0.4347	0.5545	0.5157	0.9876
$N = 8$	0.9222	0.9729	0.9632	1.0188
$N = 12$	0.9836	0.9947	0.9924	1.0134
$N = 16$	0.9915	0.9972	0.9964	1.0091
$N = 20$	0.9941	0.9976	0.9974	1.0060

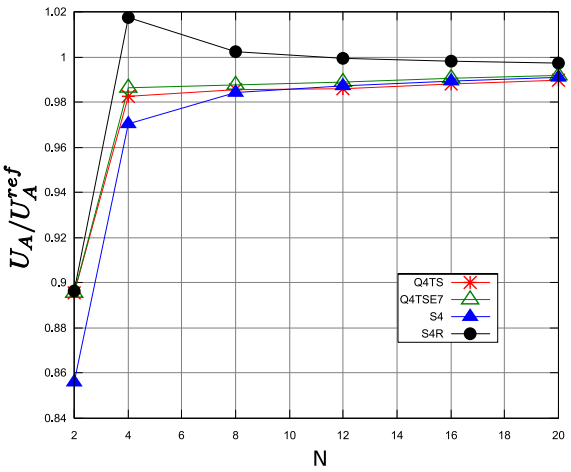


Fig. 3.15 : *Hémisphère pincé avec trou : convergence des éléments coques.*

Pour le cas de l'hémisphère avec une ouverture de 18°, la méthode EAS améliore légèrement la réponse de Q4TS. Les réponses de Q4TS et Q4TSE7 sont équivalentes à celle de S4. S4R converge

plus rapidement vers la solution de référence que les autres éléments coques grâce à l'intégration réduite.
Pour le deuxième cas (l'hémisphère sans ouverture) qui est plus sévère que le premier, nous remarquons que la méthode EAS améliore nettement la réponse de Q4TS (voir les résultats de N=2, Tableau 3.6). Q4TSE7 donne des résultats légèrement meilleurs que ceux de S4. L'élément S4R converge plus rapidement vers la solution de référence que les autres éléments coques comme dans le premier cas.

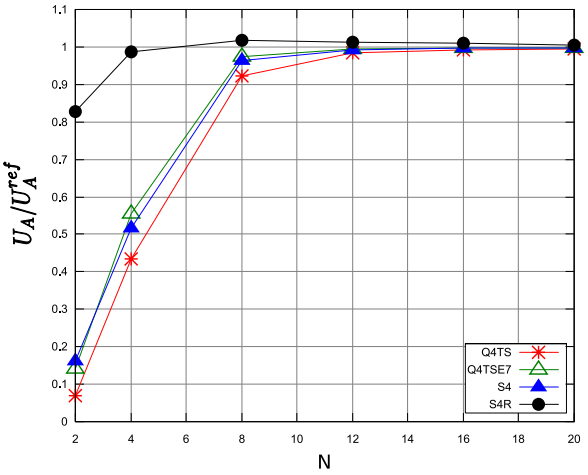


Fig. 3.16 : *Hémisphère pincé sans trou : convergence des éléments coques.*

La poutre vrillée

Le problème d'une poutre hélicoïdale (ou bien vrillée) encastrée à une extrémité et soumise à des charges concentrées à l'autre extrémité (Figure 3.17) permet d'étudier l'influence du gauchissement des éléments quadrilatéraux.

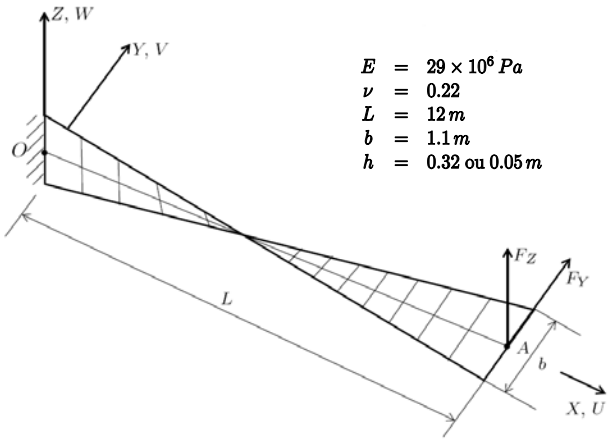


Fig. 3.17 : *Poutre vrillée maillée avec* 2×12 *éléments. Données et chargements.*

Cet exemple a été défini et proposé dans [66] et fait partie depuis 1985 des cas tests de validation des éléments coques. La géométrie vrillée d'un angle de 90° conduit à des éléments distordus rendant ainsi le cas test assez sévère. La surface moyenne de la poutre est définie par les paramètres s et θ tels que :

$$\begin{gathered} X = \frac{2\theta L}{\pi} \quad ; \quad Y = s\sin(\theta) \quad ; \quad Z = s\cos(\theta) \\ 0 \leq \theta \leq \frac{\pi}{2} \quad ; \quad \frac{-b}{2} \leq s \leq \frac{b}{2} \end{gathered} \tag{3.49}$$

Tab. 3.7 : *Déplacement normalisé du point A suivant Y (poutre mince : $h = 0.05\,m$).*

Maillage	Q4TS	Q4TSE7	S4	S4R
1×6	0.9769	0.9767	1.0165	1.0769
2×12	0.9899	0.9906	1.0007	1.0028
4×24	0.9956	0.9956	0.9985	0.9992

Tab. 3.8 : *Déplacement normalisé du point A suivant Z (poutre mince : $h = 0.05\,m$).*

Maillage	Q4TS	Q4TSE7	S4	S4R
1×6	0.9218	0.9268	0.9641	1.9312
2×12	0.9784	0.9804	0.9896	0.9918
4×24	0.9895	0.9906	0.9947	0.9953

La Figure 3.17 résume la géométrie de la poutre, les propriétés du matériau, les conditions aux limites et les deux chargements appliqués à l'extrémité droite (une force $F_Y = 1\,N$ dans le plan XY et une force de cisaillement transverse $F_Z = 1\,N$). Deux cas de la poutre vrillée sont considérés dans la suite : la poutre mince avec $h = 0.05$ ($\frac{L}{h} = 240$) et la poutre épaisse d'épaisseur $h = 0.32$ ($\frac{L}{h} = 37.5$). Trois maillages 1×6, 2×12 et 4×24 sont utilisés dans le calcul. La solution de référence quand la poutre est chargée dans le plan ($F_Y = 1\,N$ et $F_Z = 0\,N$) est $V_A^{ref} = 1.39\,m$ pour la poutre mince et $V_A^{ref} = 5.424 \times 10^{-3}\,m$ pour la poutre épaisse [66]. La solution de référence quand la poutre est soumise à la force transversale ($F_Y = 0\,N$ et $F_Z = 1\,N$) est $W_A^{ref} = 0.3431\,m$ pour la poutre mince et $W_A^{ref} = 1.754 \times 10^{-3}\,m$ pour la poutre épaisse [66]. Les Tableaux 3.7, 3.8, 3.9 et 3.10 résument les résultats obtenus avec les quatre éléments coques dans les différentes configurations.

Dans le cas de la poutre mince, les éléments Q4TS et Q4TSE7 donnent pratiquement les mêmes résultats dans les deux cas de chargement. D'autre part, la réponse de S4 est meilleure que les autres éléments.

Dans le cas de la poutre épaisse, nous remarquons que la méthode EAS améliore la réponse de Q4TS surtout dans le cas de chargement transversal (Tableau 3.10). L'élément S4R présente une réponse relativement loin de la solution de référence pour le chargement transversal avec le

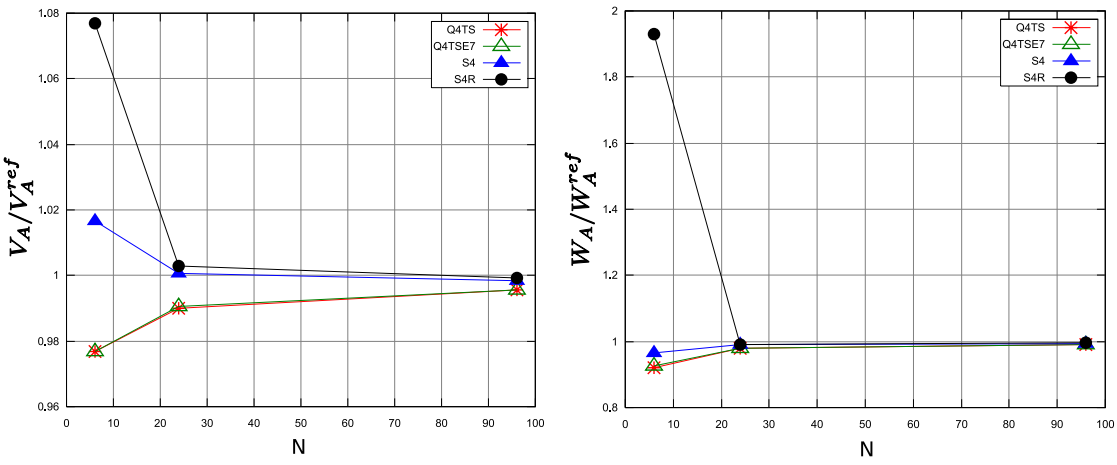
maillage 1×6.

Tab. 3.9 : *Déplacement normalisé du point A suivant Y (poutre épaisse : $h = 0.32\,m$).*

Maillage	Q4TS	Q4TSE7	S4	S4R
1×6	0.9633	0.9742	1.0145	1.3371
2×12	0.9860	0.9908	1.0029	1.0102
4×24	0.9921	0.9944	1.0008	1.0027

Tab. 3.10 : *Déplacement normalisé du point A suivant Z (poutre épaisse : $h = 0.32\,m$).*

Maillage	Q4TS	Q4TSE7	S4	S4R
1×6	0.7911	0.9450	0.9644	5.0205
2×12	0.9157	0.9826	0.9858	1.0645
4×24	0.9564	0.9906	0.9924	1.0090

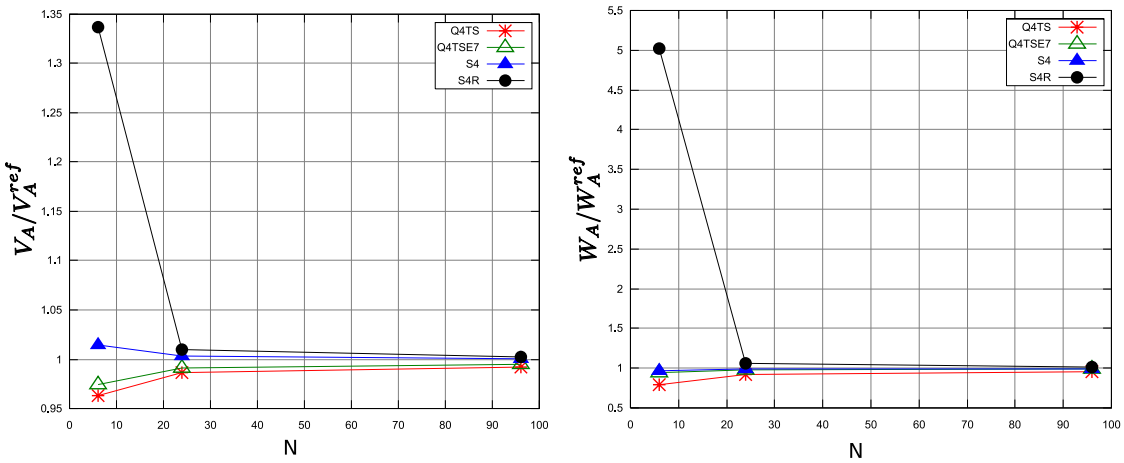


(a) (b)

Fig. 3.18 : *Poutre vrillée mince. (a) Chargement dans le plan, (b) Chargement hors plan*

3.5.2 Cas tests piézoélectriques de type actionneur

Dans cette section, deux cas tests piézoélectriques de type actionneur (exploitation de l'effet piézoélectrique inverse) sont considérés. Une céramique piézoélectrique est définie comme une céramique ferroélectrique polarisée ($||\underline{P}^r|| = P^{sat}$). Il est supposé que le champ électrique reste suffisamment faible pour éviter la réorientation de la polarisation électrique.



(a) (b)

Fig. 3.19 : *Poutre vrillée épaisse. (a) Chargement dans le plan, (b) Chargement hors plan*

Le tube piézoélectrique

Dans cette section, l'exemple du tube piézoélectrique (Figure 3.20) originalement proposé par Carr dans [16] est étudié. Carr a effectué des simulations numériques sur 13 tubes de PZT-5H et PZT-5A pour quantifier le déplacement transversal et longitudinal de l'extrémité libre des tubes piézoélectriques largement utilisés dans les microscopes à effet tunnel.

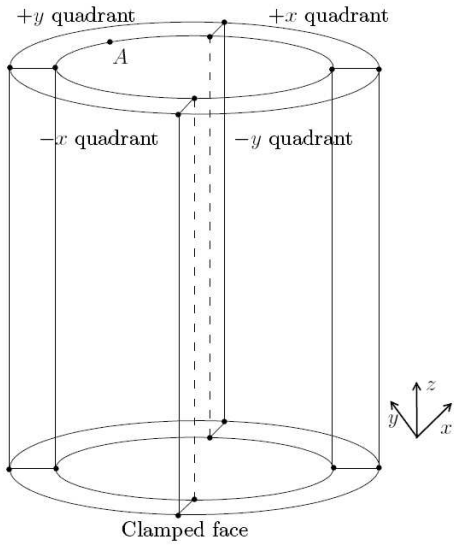


Fig. 3.20 : *Un tube piézoélectrique formé par quatre parties égales ou quadrants.*

Comme montré sur la Figure 3.20, le tube piézoélectrique considéré dans cet exemple est un cylindre creux polarisé radialement avec des électrodes intérieures et extérieures. Le tube piézoélectrique est divisé en quatre parties égales ou quadrants. La face libre du tube admet une

déflection transversale quand une différence de potentiel électrique est appliquée sur un quadrant ou deux quadrants opposés et un déplacement longitudinal en appliquant un voltage uniforme sur toutes les parties du tube. Nous avons choisi de faire l'étude de 7 tubes de PZT-5H parmi les 13 exemples de Carr rapportés dans [16]. Ce choix est simplement dicté par le fait que ces tubes sont constitués par le même matériau PZT-5H. Leurs dimensions sont résumées dans le Tableau 3.11. Les propriétés du PZT-5H sont montrées dans le Tableau 3.12.

Tab. 3.11 : *Dimensions des tubes piézoélectriques : L(mm), D_{ext}(mm), et h(mm) sont respectivement la longueur du tube, son diamètre extérieur et son épaisseur [16].*

Exemple	L	D_{ext}	h	L/D_{ext}
1	12.7	6.35	0.762	2
2	17.7	6.35	0.762	2.78
3	25.4	6.35	0.762	4
4	31.8	6.35	0.762	5
5	12.7	9.53	0.762	1.33
6	12.7	12.7	0.762	1
7	31.8	6.35	1.02	5

Tab. 3.12 : *Propriétés élastiques (GPa), piézoélectriques (C/m^2) et diélectriques (nF/m) du PZT-5H.*

C_{11}^E	=	127.205	e_{31}	=	-6.62
C_{12}^E	=	80.212	e_{33}	=	23.24
C_{13}^E	=	84.670	e_{15}	=	17.03
C_{33}^E	=	117.436	$\epsilon_{11}^{\varepsilon}$	=	15.05
C_{66}^E	=	23.474	$\epsilon_{33}^{\varepsilon}$	=	13.01
C_{44}^E	=	22.988			

Des formules analytiques pour la déflection transversale de l'extrémité libre des tubes piézoélectriques lorsqu'ils sont soumis à une différence de potentiel sur le quadrant $+x$ sont proposés dans [19, 59]. Ces formules analytiques sont déterminées en considérant un problème de flexion pure causée par les contraintes longitudinales. En effet, quand une différence de potentiel V est appliquée sur la partie $+x$ (Figure 3.21), des contraintes longitudinales apparaissent à cause de l'effet d_{31}. A l'équilibre, une distribution des contraintes et des déformations est établie de telle sorte que la force et le moment totaux appliqués sur chaque section du tube sont nuls. Cette dernière condition détermine la déflection transversale notée $\triangle x$. Les expressions analytiques suivantes sont considérées pour la comparaison avec les résultats numériques :

$$\triangle x_1^{(a)} = \frac{\sqrt{2} d_{31} V L^2}{\pi D_m h} \qquad [19] \tag{3.50}$$

$$\triangle x_2^{(a)} = \frac{2d_{31}V\cos(\beta)L^2}{\pi(R_{ou}^2 + R_{in}^2)\ln\dfrac{R_{ou}}{R_{in}}} \quad ; \quad (\beta = \frac{\pi}{4}) \qquad [59] \tag{3.51}$$

avec D_m, R_{ou} et R_{in} sont respectivement les diamètres moyen, extérieur et intérieur du tube piézoélectrique et $^{(a)}$ signifie analytique. Quand les électrodes internes du tube sont liées à la masse et un voltage V est appliqué sur les électrodes extérieures, l'extrémité du tube aura un déplacement axial (suivant z) noté $\triangle z$. En exploitant toujours l'effet d_{31}, l'expression analytique du déplacement longitudinal est donnée par :

$$\triangle z^{(a)} = -\frac{d_{31}VL}{h} \tag{3.52}$$

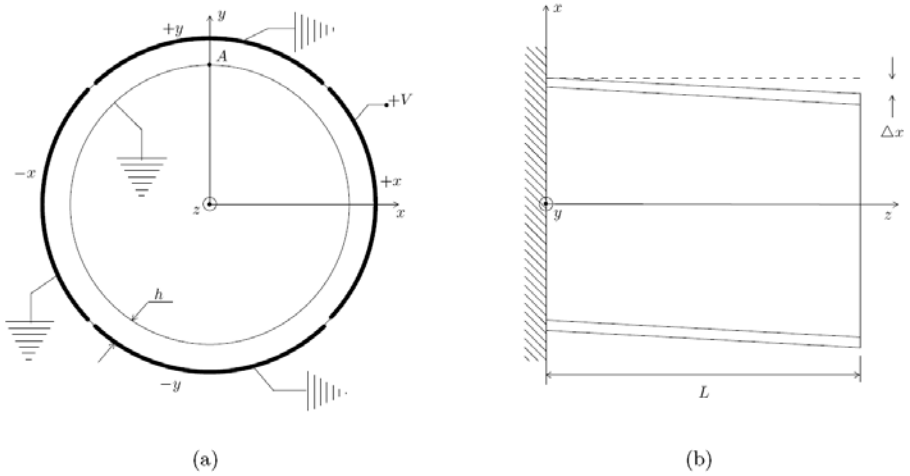


Fig. 3.21 : *Déflection d'un tube piézoélectrique dans un arrangement unipolaire. (a) Un voltage positif est appliqué uniquement sur le quadrant $+x$ et tous les autres quadrants sont liés à la masse. (b) La déflection du tube dans la direction $+x$.*

Les calculs par éléments finis sont effectués avec l'élément coque piézoélectrique développé Q4TSF, l'élément quadrilatéral S4T d'Abaqus® en considérant l'analogie thermique [72] et l'élément solide piézoélectrique C3D20E à 20 noeuds d'Abaqus®. L'analogie thermique est possible en remplaçant la troisième composante curviligne uniforme du champ électrique (E_3) par une différence de température uniforme ($\triangle T$) et les constantes piézoélectriques d_{3ij} par les coefficients de dilatation thermique α_{ij} [72]. Pour augmenter la précision de la solution, un maillage suffisamment fin est considéré pour tous les éléments (le même maillage fin est utilisé pour Q4TSF et S4T). Comme proposé dans [16], tous les résultats sont pris en un point de l'extrémité libre du tube appartenant au diamètre intérieur et se trouvant à 90° du centre de la partie chargée électriquement (point A dans les Figures 3.20 et 3.21). Les résultats obtenus sont comparés à ceux rapportés dans [16], le modèle du tube dans [81] et les expressions analytiques (3.50), (3.51) et (3.52). Les Tableaux 3.13 et 3.14 résument les résultats obtenus avec les différents éléments. Même pour de faibles rapports R_m/h (avec R_m le rayon moyen du tube), l'élément Q4TSF donne des résultats satisfaisants par comparaison aux résultats de C3D20E et ceux rapportés dans [81].

De plus, nous remarquons que l'analogie thermique peut être considérée pour des champs électriques uniformes et donne aussi de bons résultats. Ceci constitue une solution intéressante au manque d'éléments coques piézoélectriques dans le code Abaqus®.

Tab. 3.13 : *Le déplacement transversal* $\triangle x$ $(\times 10^{-8}\, m)$ *du point A défini dans la Figure 3.20 pour V=100 Volts.*

No.	Q4TSF	S4T	C3D20E	[16]	[81]	$\triangle x_1^{(a)}$	$\triangle x_2^{(a)}$
1	45.1	45	44.1	40	44.3	46.7	45.6
2	86.4	86.2	86.8	75	87.8	90.7	88.5
3	177.4	177.2	180.5	159	181.2	186.8	182.3
4	280.2	277.4	282.7	257	284.1	292.9	285.8
5	27.6	27.7	27.2	25	27.4	29.7	29.4
6	17.9	18.5	17.5	17	17.8	21.8	21.7
7	216.8	217.4	215.8	201	216.7	229.4	218.6

Tab. 3.14 : *Le déplacement axial* $\triangle z$ $(\times 10^{-8}\, m)$ *du point A pour V=100 Volts.*

No.	Q4TSF	S4T	C3D20E	[16]	[81]	$\triangle z^{(a)}$
1	46.7	46.6	45.8	42	45.6	45.6
2	64.7	64.6	63.6	57	63.4	63.6
3	92.4	92.3	91.1	85	90.8	91.3
4	115.2	115.3	114.2	106	113.7	114.3
5	47.1	46.9	46.4	43	46.2	45.6
6	47.3	47.2	46.7	43	46.6	45.6
7	86.3	86.4	84.4	79	84.3	85.4

Les résultats de Q4TSF et S4T valident l'approximation linéaire du potentiel électrique suivant l'épaisseur pour les applications de type actionneur. La différence entre les résultats de Q4TSF, S4T, C3D20E et les expressions analytiques (3.50), (3.51) peut être liée à l'élancement L/D_{ext} du tube piézoélectrique. Comme montré dans [81], quand le rapport L/D_{ext} est inférieur à 2 (exemples 5 et 6), l'hypothèse d'un modèle de flexion pure n'est plus valable (car la déformation de cisaillement devient non négligeable) ce qui conduit à des résultats analytiques non précis. De plus, nous remarquons que l'expression analytique $\triangle x_2^{(a)}$ (Équation (3.51)) est plus précise que $\triangle x_1^{(a)}$ (Équation 3.50)) quand elles sont comparées aux résultats de l'élément quadratique C3D20E. Finalement, l'écart entre les résultats de Carr rapportés dans [16] et ceux de C3D20E

peut être expliqué par le fait que Carr a modélisé premièrement, le métal formant les électrodes du tube ce qui augmente la rigidité de la structure et deuxièmement, un écart de 10° entre les électrodes extérieures adjacentes entraînant une diminution additionnelle du déplacement de la face libre.

L'actionneur spirale piézoélectrique

Pour amplifier le déplacement mécanique des actionneurs piézoélectriques, des solutions en forme de spirale ayant une géométrie compacte ont été proposées dans [4, 5, 71]. L'application d'un champ électrique suivant l'épaisseur de la spirale induit des déplacements tangentiel et radial de l'extrémité libre, le premier étant plus important que le deuxième.

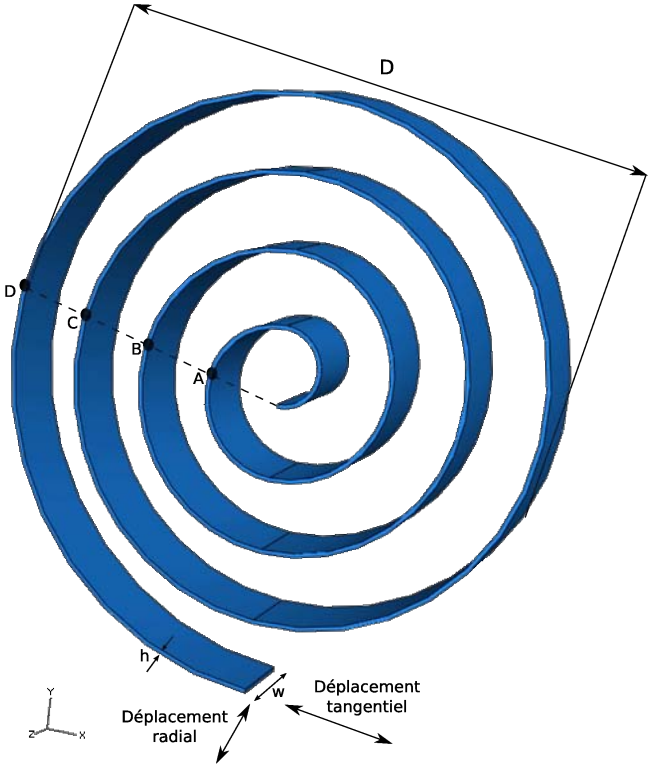


Fig. 3.22 : *L'actionneur piézoélectrique de forme spirale*

Il est montré dans [4] que pour un actionneur spiral de type PZT ayant un rayon extérieur R_{max} de $16\,mm$, une longueur effective L_{eff} de $28\,cm$, une largeur w de $2.75\,mm$ et une épaisseur h de $0.6\,mm$ (Figure 3.22), le déplacement tangentiel de son extrémité libre est 12 fois plus important que le déplacement longitudinal d'une bande rectangulaire de PZT ayant les mêmes dimensions (L_{eff}, w et h) lorsque les deux sont soumis à un champ électrique de $11.6\,kV/cm$. Ceci montre clairement qu'en jouant sur la géométrie de l'actionneur, son déplacement mécanique peut profondément être amélioré.
Considérons dans la suite un actionneur spiral mince de type PZT-5H montré sur la Figure 3.22.

Cet actionneur est polarisé suivant l'épaisseur (polarisation radiale) et une différence de potentiel est appliquée suivant cette direction également (champ électrique radial). La spirale est constituée de quatre tours avec un rayon extérieur R_{max} de $15.2\,mm$. La longueur effective (L_{eff}), la largeur (w) et l'épaisseur (h) de la spirale sont $21.5\ cm$, $3.75\ mm$, et $0.2\,mm$, respectivement. Les rayons maximal et minimal de la spirale sont, respectivement, $R_{max} = 15.2\ mm$ et $R_{min} = 1.875\ mm$ ($R_{max}/h = 76$, $R_{min}/h = 9.375$). Les propriétés matériau de cet actionneur sont celles du PZT-5H et sont données dans le Tableau 3.12.

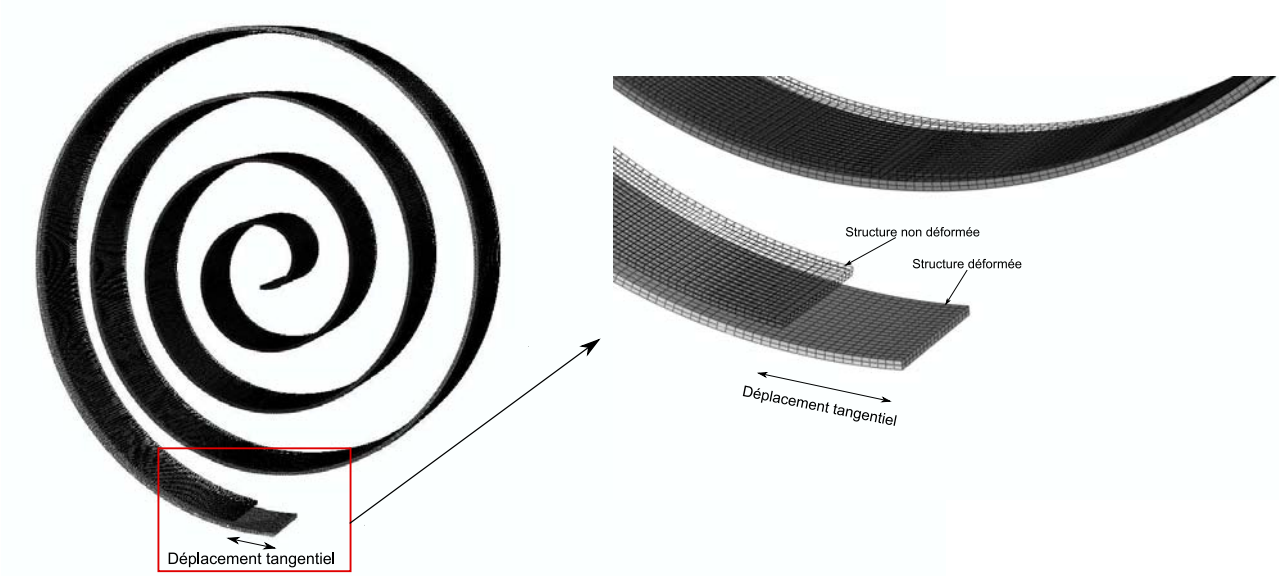


Fig. 3.23 : *Déformée de l'actionneur spiral à $\triangle V = 100\,V$: la réponse de C3D8E.*

Quand l'actionneur spiral est soumis à un champ électrique radial, son extrémité se déplace dans les directions tangentielle et radiale (Figure 3.22). Des simulations numériques sur la spirale piézoélectrique ont été effectuées en utilisant des éléments solide et coque piézoélectriques pour comparer les deux réponses. L'élément solide C3D8E d'Abaqus® a été utilisé pour la simulation 3D. Pour mieux représenter la flexion de la spirale, deux éléments C3D8E sont considérés suivant l'épaisseur. Pour la simulation 2D, les éléments Q4TSF et S4T, avec l'analogie thermique, sont considérés.

Tab. 3.15 : *Les déplacements tangentiel et radial de l'extrémité de la spirale à $\triangle V$=100 Volts*

	Déplacement tangentiel	Déplacement radial
C3D8E	$41.47\mu\,m$	$-2.59\mu\,m$
Q4TSF	$-0.62\mu\,m$	$-2.\mu\,m$
S4T	$-0.59\mu\,m$	$-2.2\mu\,m$

Les Figures 3.23 et 3.24 montrent les déformées de l'actionneur spirale simulé par les éléments

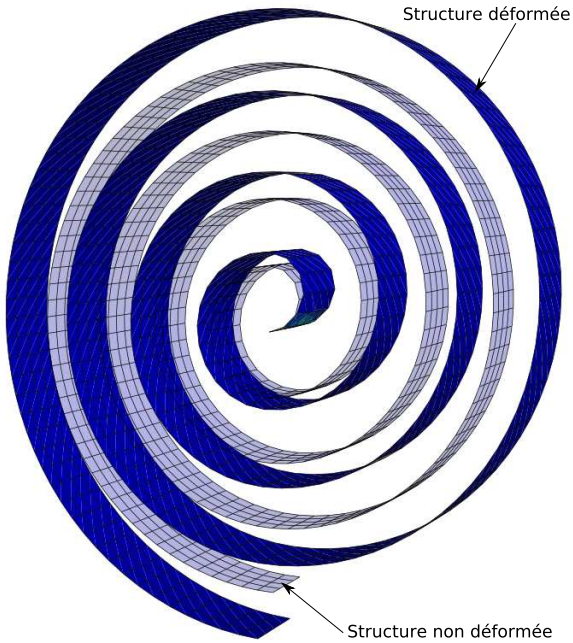


FIG. 3.24 : *Déformée de l'actionneur spiral à $\triangle V = 100\,V$: la réponse de Q4TSF.*

C3D8E et Q4TSF, respectivement. Une différence notable entre les deux déformées est observée. Les déplacements tangentiel et radial de l'extrémité de l'actionneur sont résumés dans le Tableau 3.15. La simulation avec C3D8E donne un déplacement tangentiel important de l'extrémité libre de l'actionneur ce qui est en accord avec les résultats expérimentaux rapportés dans [5]. Cependant, le déplacement tangentiel obtenu avec Q4TSF et S4T est négligeable devant le premier déplacement obtenu avec C3D8E. La différence entre ces deux résultats peut être expliqué par le fait que pour une géométrie courbée comme celle de la spirale, il existe un léger gradient de déplacement suivant l'épaisseur même pour des spirales minces [71]. En raison de l'effet d_{33}, ce dernier gradient de déplacement crée un moment de flexion qui induit un déplacement tangentiel de l'extrémité de l'actionneur. Cependant, ce gradient de déplacement n'est pas pris en compte dans les éléments coques basés sur la théorie de Reissner/Mindlin car il est supposé nul (pas de variation de l'épaisseur). En conséquence, il est difficile d'exploiter le mode d_{33} avec les éléments coques entraînant donc la différence nette entre les deux solutions.
Le Tableau 3.16 résume le déplacement suivant l'épaisseur des noeuds se trouvant initialement sur les fibres centrées aux points A, B, C, et D du maillage 3D (Figures 3.22 et 3.25). En utilisant deux éléments solides suivant l'épaisseur, les déplacements de trois noeuds par fibre sont donnés. Une variation à peu près linéaire du déplacement suivant l'épaisseur est observée. De plus, comme il est prévu, un faible gradient de déplacement est obtenu car la spirale considérée est mince. Mais même pour ce gradient faible, des contraintes de flexion sont obtenues grâce à l'effet d_{33} entraînant le déplacement tangentiel important de l'extrémité libre. Pour les éléments coques, cette variation linéaire n'est pas considérée dans la formulation (pas de variation de l'épaisseur). La différence importante entre les réponses 2D et 3D montre qu'il est nécessaire de considérer

une variation linéaire du déplacement transversal dans la formulation des éléments coques pour étudier les problèmes électromécaniques où l'effet d_{33} est prépondérant.

Tab. 3.16 : *Déplacement suivant l'épaisseur (μm) des noeuds localisés sur les fibres centrées en A, B, C and D (réponse 3D)*

	fibre A	fibre B	fibre C	fibre D
$z = -\frac{h}{2}$	-0.326	-1.548	-2.694	-3.926
$z = 0$	-0.297	-1.519	-2.665	-3.896
$z = \frac{h}{2}$	-0.267	-1.489	-2.635	-3.866

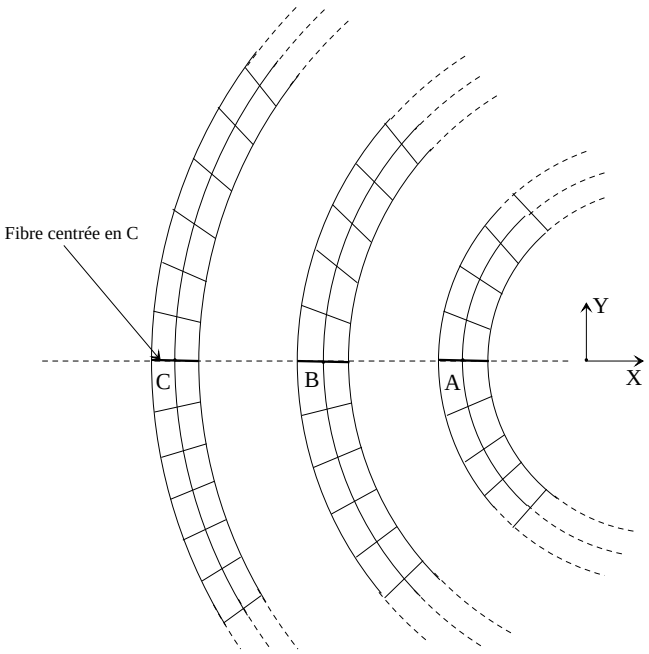


Fig. 3.25 : *Définition des fibres centrées en A, B et C.*

3.5.3 Cas tests piézoélectriques de type capteur

Dans cette section, nous considérons deux cas tests de type capteur (l'effet piézoélectrique direct est considéré : génération d'une polarisation électrique quand une contrainte mécanique est appliquée). L'objectif principal est de quantifier l'erreur commise en supposant une variation linéaire du potentiel électrique suivant l'épaisseur pour les applications de type capteur. Pour cela, nous avons développé une version Q4TSF2 linéaire piézoélectrique de l'élément coque qui admet une variation quadratique du potentiel électrique suivant l'épaisseur. Cette version est

basée sur la technique de condensation statique proposée dans [3] et développée dans l'Annexe E pour le cas de notre élément. Comme nous le verrons en étudiant les deux exemples suivants, cette méthode améliore nettement la réponse linéaire de l'élément coque dans les applications de type capteur mais son implémentation dans le cas ferroélectrique non linéaire reste difficile.

Flexion d'une poutre piézoélectrique

Nous considérons une poutre piézoélectrique (Figure 3.26) de longueur l=100 mm, de largeur b=10 mm. Deux épaisseurs sont utilisées : h_1=1 mm (poutre mince) et h_2=10 mm (poutre épaisse). La poutre est encastrée en x=0 et soumise à une traction répartie t_3 en x=l ($t_3 = -0.1N/mm^2$ pour la poutre mince et $t_3 = -10N/mm^2$ pour la poutre épaisse). Un potentiel électrique nul est appliqué sur les électrodes supérieure et inférieure de la poutre. Nous nous proposons de montrer l'importance du terme quadratique du potentiel électrique (lié à la courbure de la déformation) en calculant le déplacement transversal du point A de coordonnées x=l, y=$\frac{b}{2}$ et z=$\frac{h}{2}$ et comparant les réponses de Q4TSF et Q4TSF2. Pour cela, une solution de référence a été trouvée en utilisant un maillage fin de l'élément C3D20E (80 éléments suivant la longueur, 12 éléments suivant la largeur et quatre éléments suivant l'épaisseur pour les deux épaisseurs) pour les deux poutres mince et épaisse. Un maillage de 40 éléments suivant la longueur et 6 éléments suivant la largeur est utilisé avec les éléments Q4TSF et Q4TSF2. Les propriétés matériau de la poutre sont celles de la céramique PZT-5H (Tableau 3.12).

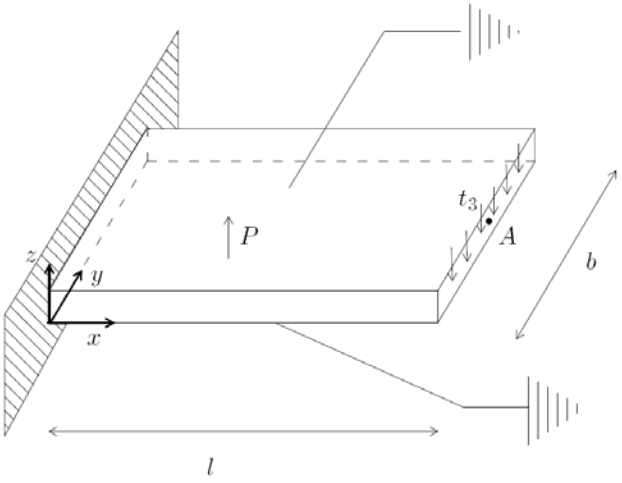


Fig. 3.26 : *Flexion d'une poutre piézoélectrique*

Le Tableau 3.17 résume les résultats trouvés avec les différents éléments. Nous remarquons que les résultats de Q4TSF2 sont très proches de ceux de C3D20E pour les deux poutres mince et épaisse. Cependant, le déplacement obtenu avec Q4TSF correspond à la théorie de l'élasticité et il est supérieur au résultat de référence (14% d'erreur). Ceci peut être expliqué par le fait que le couplage électromécanique permet de convertir l'énergie électrique en énergie mécanique et vice versa. Dans notre cas, un potentiel électrique est induit par les déformations de flexion [3]

et donc il y a une partie de l'énergie élastique qui se transforme en énergie électrique rendant la structure plus rigide puisque son énergie élastique diminue. Le terme quadratique du potentiel électrique permet effectivement de tenir compte de cette conversion d'énergie et la négligence de ce terme dans les applications de type capteur génère des résultats non précis (14% d'erreur dans ce cas).

Tab. 3.17 : *Déplacement transversal du point A($x = l$, $y = \frac{b}{2}$, $z = \frac{h}{2}$).*

Eléments	φ	$h = 1\,mm$ $W_A(mm)$	$h = 10\,mm$ $W_A(mm)$	erreur$_1$ $(h = 1\,mm)$	erreur$_2$ $(h = 10\,mm)$
C3D20E	Quadratique	-5.787	-5.913	référence	référence
Q4TSF2	Quadratique	-5.774	-5.899	-0.23%	-0.23%
Q4TSF	Linéaire	-6.641	-6.721	14.75 %	14 %

Flexion d'un demi cylindre

Dans cet exemple, nous considérons un demi-cylindre piézoélectrique mince encastré d'un côté et soumis à un chargement mécanique uniformément réparti d'amplitude $p = 10N/mm^2$ sur l'extrémité libre (Figure 3.27).

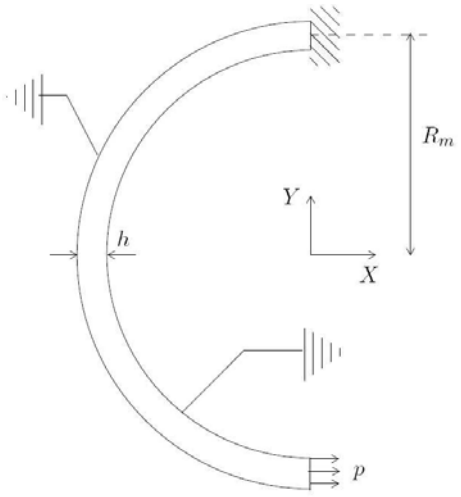


Fig. 3.27 : *Flexion d'un demi cylindre*

Les propriétés géométriques de ce demi-cylindre sont : $R_m = 20\,mm$ (le rayon moyen), $h = 1\,mm$ (l'épaisseur) et $b = 5\,mm$ (la largeur). Ses propriétés matériau sont celles du PZT-5H (Tableau 3.12). Le déplacement suivant X d'un point A de l'extrémité libre soumise à la charge répartie p est calculé en utilisant les deux versions de l'élément coque piézoélectrique Q4TSF et Q4TSF2. Une Solution de référence a été obtenue en utilisant l'élément quadratique C3D20E d'Abaqus®

en considérant un maillage fin (50 éléments suivant la moitié de la circonférence, 6 éléments suivant la largeur et 4 éléments suivant l'épaisseur).

TAB. 3.18 : *Déplacement suivant X du point $A(X = 0,\ Y = -R_m,\ Z = \frac{b}{2})$*

Eléments	φ	$U_A(\times 10^{-2}\, m)$	erreur(%)
C3D20E	Quadratique	6.581	référence
Q4TSF2	Quadratique	6.555	-0.40 %
Q4TSF	Linéaire	7.523	14.27 %

Le Tableau 3.18 résume les résultats du déplacement suivant X du point A en utilisant les trois éléments. Nous remarquons que le résultat obtenu avec Q4TSF est toujours celui d'un problème purement élastique et il est 14.27% supérieur à la solution de référence. Cependant, le résultat obtenu avec Q4TSF2 est très proche de la solution de référence (-0.40% de la référence). Ceci confirme encore une fois la nécessité de considérer des approximations d'ordre supérieur (au moins d'ordre 2) du potentiel électrique suivant l'épaisseur quand des applications de type capteur sont visées.

3.5.4 Cas test ferroélectrique

Nous considérons dans cet exemple un tube ferroélectrique (avec la même configuration que la Figure 3.20) soumis à un chargement électrique de forte intensité. Le tube ferroélectrique, de longueur $L = 100\ mm$, de rayon moyen $R_m = 5\ mm$ et d'épaisseur $h = 0.2\ mm$ ($R_m/h = 25$), est supposé initialement polarisé suivant l'épaisseur (polarisation radiale $P_3^r = P^{sat}$ avec 3 la direction locale suivant l'épaisseur). Les propriétés matériau du tube sont résumées dans le Tableau 3.19.

TAB. 3.19 : *Propriétés matériau du tube ferroélectrique.*

C_{11}^E	=	$127.205 \times 10^9\ Pa$	d_{33}	=	$5.93 \times 10^{-10}\ C/N$	β	=	$2 \times 10^6\ V\,m/C$
C_{12}^E	=	$80.212 \times 10^9\ Pa$	d_{31}	=	$-2.74 \times 10^{-10}\ C/N$	ε^{sat}	=	2×10^{-3}
C_{13}^E	=	$84.670 \times 10^9\ Pa$	d_{15}	=	$7.41 \times 10^{-10}\ C/N$	P^{sat}	=	$0.3\ C/m^2$
C_{33}^E	=	$117.436 \times 10^9\ Pa$	$\epsilon_{11}^{\varepsilon}$	=	$1.5 \times 10^{-8}\ F/m$	E_c	=	$10^6\ V/m$
C_{66}^E	=	$23.474 \times 10^9\ Pa$	$\epsilon_{33}^{\varepsilon}$	=	$1.3 \times 10^{-8}\ F/m$			
C_{44}^E	=	$22.988 \times 10^9\ Pa$						

Un écrouissage linéaire ($\alpha = 0$, Équation (2.67)) est considéré pour la simulation. Les paramètres de la fonction g_2 sont : $P_0^e = 10^3$ et $c^e = 10^{-2}$. Le quadrant $+x$ est soumis à un champ électrique de forte intensité tandis que les autres quadrants sont liés à la masse (Figure 3.21(a)). La variation du champ électrique entraîne un déplacement transversal suivant X du point A défini dans la

Figure 3.20. Trois cas de chargement électrique sont considérés : ils sont résumés sur la Figure 3.28.

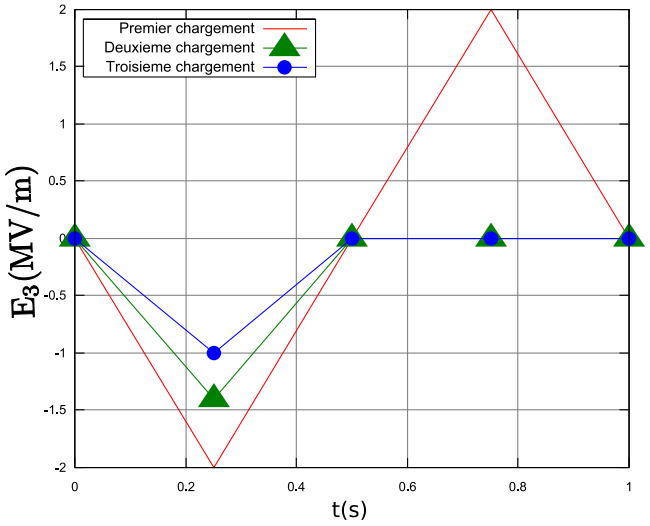
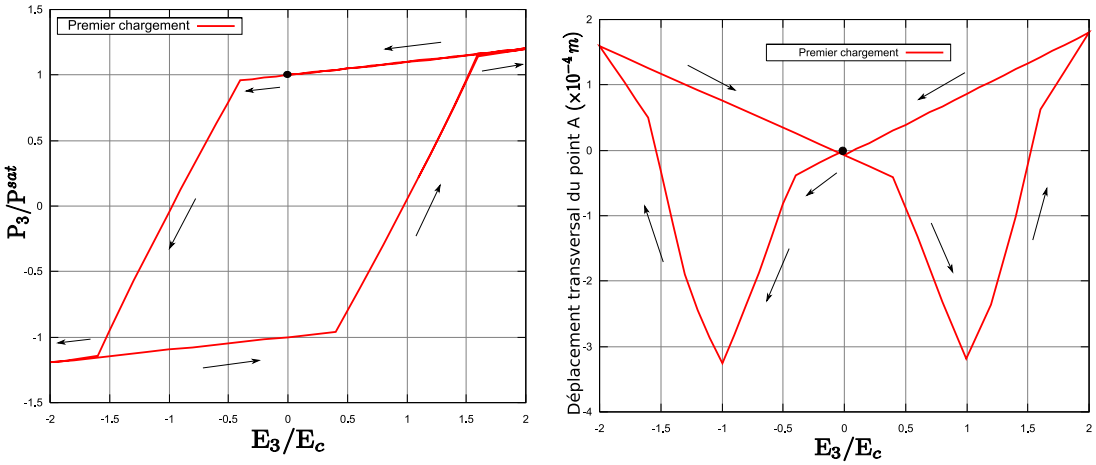


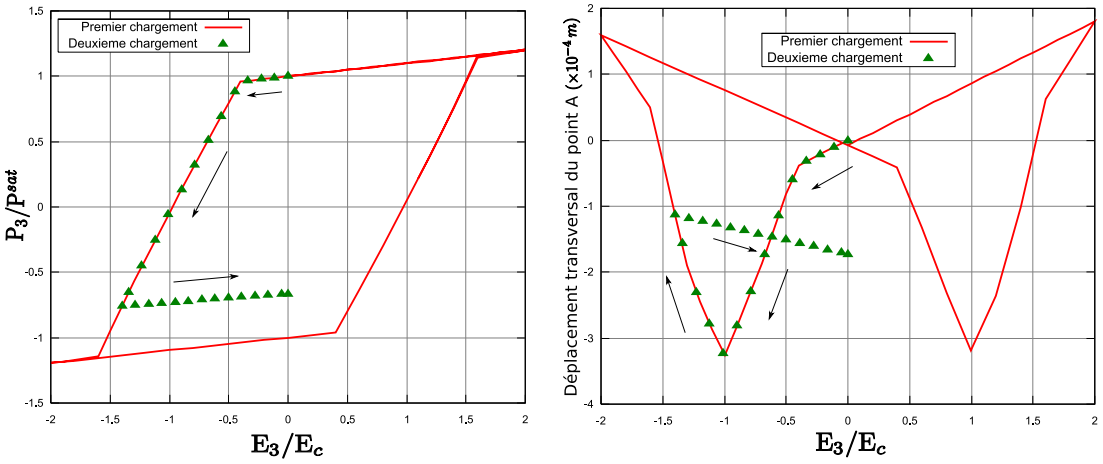
FIG. 3.28 : *Les variations du champ électrique dans le temps.*

Le déplacement du point A est montré sur les Figures 3.29, 3.30 et 3.31 en réponse à ces trois cas de chargement. Nous remarquons que le déplacement transversal du point A atteint une valeur maximale (en module) de $-3.22 \times 10^{-4}\, m$ quand le champ électrique est égal à $-E_c$. Pour cette valeur de E_3, les propriétés piézoélectriques du quadrant $+x$ sont perdues puisque la polarisation rémanente s'annule $P_3^r = 0$. Pour $E_3 \leq -E_c$, le déplacement de A décroit (en module) puisqu'il y a une réorientation de la polarisation rémanente. Les pentes de retour des Figures 3.30(b) et 3.31(b) sont différentes à cause du changement de la polarisation rémanente.



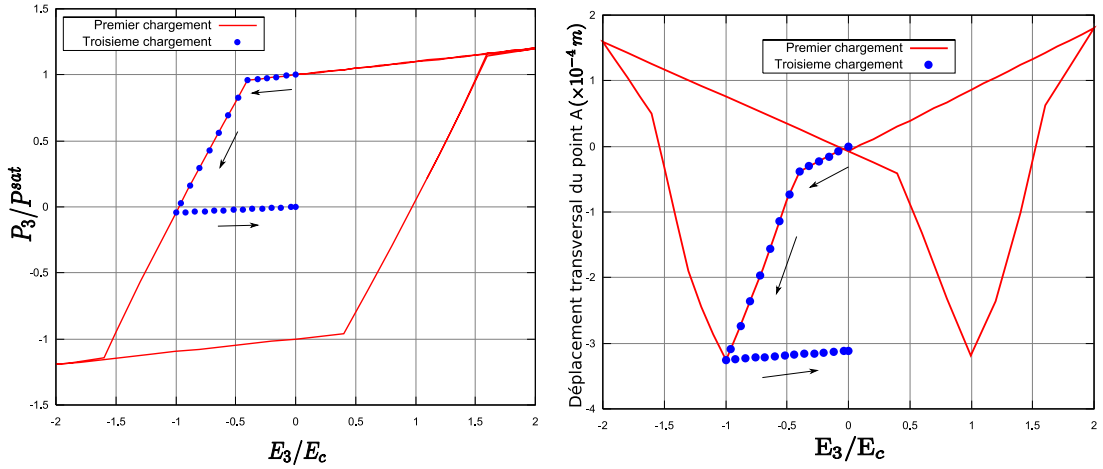
(a) (b)

FIG. 3.29 : *(a) Hystérésis diélectrique correspondant au premier chargement électrique. (b) Déplacement transversal du point A en réponse à la première variation du champ électrique.*



(a) (b)

Fig. 3.30 : *(a) Hystérésis diélectrique correspondant au deuxième chargement électrique. (b) Déplacement transversal du point A en réponse à la deuxième variation du champ électrique.*



(a) (b)

Fig. 3.31 : *(a) Hystérésis diélectrique correspondant au troisième chargement électrique. (b) Déplacement transversal du point A en réponse à la troisième variation du champ électrique.*

3.6 Conclusion

Un élément coque électromécanique a été développé pour l'analyse des structures piézoélectriques (linéaires) et ferroélectriques (non linéaires) minces. Sa formulation est basée sur la théorie de coque classique de Reissner/Mindlin, et un modèle ferroélectrique bidimensionnel intégré implicitement (voir chapitre 2). Quelques cas tests de validation mécaniques et piézoélectriques linéaires ont été considérés pour vérifier l'absence de verrouillages numériques et valider la bonne représentation du couplage électromécanique de cet élément. Un cas test ferroélectrique a été proposé pour valider la bonne implémentation de la loi ferroélectrique bidimensionnelle dans

l'élément.

Nous avons remarqué que cet élément coque peut être utilisé sûrement pour étudier les applications de type actionneur dominées par le mode d_{31} comme le tube piézoélectrique. Par contre, pour les applications dominées par l'effet d_{33} comme la spirale piézoélectrique, nous avons montré que cet élément ne représente pas de manière précise la déformée de la structure car le gradient de déplacement suivant l'épaisseur n'est pas pris en compte dans la formulation. D'autre part, l'hypothèse d'un champ électrique constant suivant l'épaisseur (potentiel électrique linéaire suivant l'épaisseur) ne permet pas de prendre en compte les phénomènes non linéaires qui apparaissent suivant cette direction (voir le processus de polarisation des tubes piézoélectriques présenté dans le chapitre 4).

Pour tenir compte de tous les modes de couplage électromécanique, il est nécessaire de considérer des théories de coques d'ordre supérieur qui tiennent compte de la variation de l'épaisseur ou bien développer un élément fini solide avec une loi ferroélectrique tridimensionnelle pour tenir compte de tous les modes de déformation. Ce dernier développement fera l'objet du chapitre suivant.

Chapitre 4

Développement d'un élément fini solide ferroélectrique

Sommaire

4.1 Introduction 112

4.2 Les champs gradients 112

4.2.1 Tenseur des déformations curvilignes 113

4.2.2 Champ électrique curviligne 114

4.3 Approximations par éléments finis 115

4.3.1 Formulation de H8F 115

4.3.2 Formulation de SFR8P 117

4.3.3 Méthode de dilatation volumique constante : la $\bar{B}$-méthode 120

4.4 Cas tests de validation 123

4.4.1 Cas test mécanique : Flexion plane d'une poutre encastrée 123

4.4.2 Cas tests piézoélectriques 124

4.4.3 Cas tests ferroélectriques 130

4.5 Conclusion 140

4.1 Introduction

Les résultats obtenus dans le chapitre précédent ont montré la nécessité de prendre en compte le gradient du déplacement mécanique suivant l'épaisseur afin de bien représenter les déformées des structures dominées par le mode d_{33}. L'hypothèse de la non variation de l'épaisseur, adoptée pour développer l'élément coque électromécanique, peut donc conduire à des résultats erronés même pour des structures piézoélectriques minces (voir l'exemple de la spirale piézoélectrique). Par conséquent, il est nécessaire de considérer des théories de coques d'ordre supérieur qui tiennent compte des déformations suivant l'épaisseur. Une autre alternative consiste à implémenter le modèle ferroélectrique et ferroélastique dans un élément solide. Cette alternative fait l'objet de ce quatrième chapitre où un élément hexaédrique à huit noeuds, baptisé H8F, est couplé avec la loi constitutive ferroélectrique et ferroélastique développée et intégrée implicitement (pour réduire le coût de calcul) dans le chapitre 2. Une attention particulière est accordée à un élément hexaédrique piézoélectrique linéaire baptisé SFR8P. Cet élément à huit noeuds est basé sur le concept SFR (Space Fiber Rotation) ou rotation d'une fibre spatiale [9] et est proposé pour améliorer la réponse piézoélectrique linéaire de H8F particulièrement dans le cas des structures minces.
Pour tenir compte de l'anisotropie du comportement piézoélectrique, le tenseur des déformations mécaniques et le vecteur champ électrique sont exprimés dans un système de coordonnées curvilignes locales pour étudier des structures piézoélectriques fortement courbées.

4.2 Les champs gradients

Dans cette section, le tenseur des déformations linéarisé et le vecteur champ électrique sont exprimés dans un système de coordonnées curvilignes. Considérons un domaine piézoélectrique tridimensionnel décrit par trois coordonnées paramétriques ξ, η et ζ (Figure 4.1). Trois vecteurs covariants peuvent être définis en un point p de la structure :

$$\underline{a}_1 = \underline{X}_{,\xi} \quad ; \quad \underline{a}_2 = \underline{X}_{,\eta} \quad ; \quad \underline{a}_3 = \underline{X}_{,\zeta} \tag{4.1}$$

Ces vecteurs constituent la base covariante $[F_z] = [\underline{a}_1\ \underline{a}_2\ \underline{a}_3]$ de laquelle nous déduisons une base orthonormée $[Q] = [\underline{t}_1\ \underline{t}_2\ \underline{t}_3]$ pour définir le système de coordonnées curvilignes (x,y,z). Les vecteurs tangents unitaires de $[Q]$ sont définis en fonction des vecteurs covariants comme suit [53] :

$$\underline{t}_1 = \frac{\underline{a}_1}{||\underline{a}_1||} \quad ; \quad \underline{t}_2 = \frac{\underline{a}_3 \wedge \underline{a}_1}{||\underline{a}_3 \wedge \underline{a}_1||} \quad ; \quad \underline{t}_3 = \underline{t}_1 \wedge \underline{t}_2 \tag{4.2}$$

La base covariante $[F_z]$ lie les vecteurs différentiels $\{dX\} = \{dX\ dY\ dZ\}^T$ et $\{d\xi\} = \{d\xi\ d\eta\ d\zeta\}^T$:

$$\{dX\} = [F_z]\{d\xi\} \tag{4.3}$$

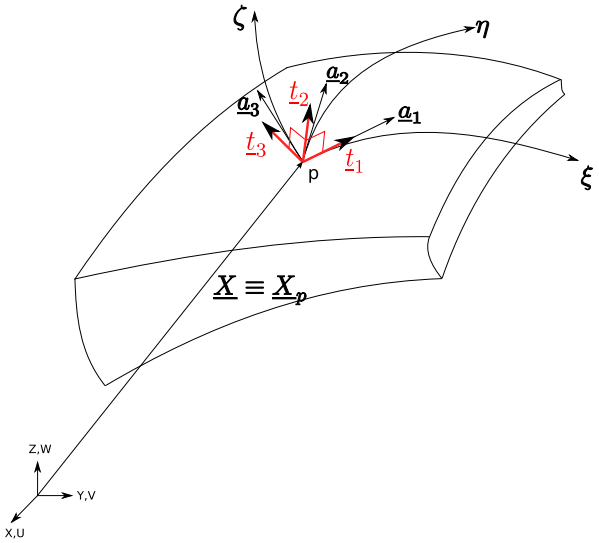


FIG. 4.1 : *Définition des vecteurs covariants et tangents en un point de la structure tridimensionnelle.*

4.2.1 Tenseur des déformations curvilignes

Une nouvelle matrice $[L_z]$ est définie pour lier les vecteurs différentiels $\{dU\} = \{dU\ dV\ dW\}^T$ et $\{d\xi\}$:

$$\{dU\} = [L_z]\{d\xi\} \quad ; \quad [L_z] = [\underline{U}_{,\xi} \vdots \underline{U}_{,\eta} \vdots \underline{U}_{,\zeta}] \tag{4.4}$$

avec $\{U\} = \{U\ V\ W\}^T$ est le vecteur déplacement mécanique cartésien de la structure tridimensionnelle. A partir des relations (4.3) et (4.4), nous pouvons définir la matrice gradient de déplacement $[L_X]$ dans le système de coordonnées cartésiennes (X,Y,Z) :

$$\{dU\} = \underbrace{[L_z][F_z]^{-1}}_{[L_X]}\{dX\} \tag{4.5}$$

et le tenseur des déformations cartésiennes s'écrit en fonction de $[L_X]$:

$$[\varepsilon_X] = \frac{1}{2}\Big([L_X] + [L_X]^T\Big) \tag{4.6}$$

La matrice tangente $[Q]$ est la matrice de passage entre la base cartésienne globale et la base curviligne locale. La matrice gradient de déplacement curviligne notée $[L_t]$ est introduite pour déterminer le tenseur des déformations curvilignes $\underline{\underline{\varepsilon}}_t$:

$$[L_t] = [Q]^T[L_X][Q] = [Q]^T[L_z]\underbrace{[F_z]^{-1}[Q]}_{[C_z]} \quad ; \quad [\varepsilon_t] = \frac{1}{2}([L_t]+[L_t]^T) \quad ; \quad [\varepsilon_t] = \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \text{sym} & & \varepsilon_{zz} \end{bmatrix} \tag{4.7}$$

soit, en utilisant les coefficients de la matrice $[C_z] = [F_z]^{-1}[Q]$

$$[L_t] = \begin{bmatrix} \underline{t}_1 \cdot \underline{U}_{,\xi} & \underline{t}_1 \cdot \underline{U}_{,\eta} & \underline{t}_1 \cdot \underline{U}_{,\zeta} \\ \underline{t}_2 \cdot \underline{U}_{,\xi} & \underline{t}_2 \cdot \underline{U}_{,\eta} & \underline{t}_2 \cdot \underline{U}_{,\zeta} \\ \underline{t}_3 \cdot \underline{U}_{,\xi} & \underline{t}_3 \cdot \underline{U}_{,\eta} & \underline{t}_3 \cdot \underline{U}_{,\zeta} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_{z11} & C_{z12} & C_{z13} \\ C_{z21} & C_{z22} & C_{z23} \\ C_{z31} & C_{z32} & C_{z33} \end{bmatrix} \tag{4.8}$$

Les déformations curvilignes locales s'expriment en fonction des composantes de $[L_t]$:

$$\left\{ \begin{array}{lcll} \varepsilon_{xx} & = & L_{t11} & = C_{z11}(\underline{t}_1 \cdot \underline{U}_{,\xi}) + C_{z21}(\underline{t}_1 \cdot \underline{U}_{,\eta}) + C_{z31}(\underline{t}_1 \cdot \underline{U}_{,\zeta}) \\ \varepsilon_{yy} & = & L_{t22} & = C_{z12}(\underline{t}_2 \cdot \underline{U}_{,\xi}) + C_{z22}(\underline{t}_2 \cdot \underline{U}_{,\eta}) + C_{z32}(\underline{t}_2 \cdot \underline{U}_{,\zeta}) \\ \varepsilon_{zz} & = & L_{t33} & = C_{z13}(\underline{t}_3 \cdot \underline{U}_{,\xi}) + C_{z23}(\underline{t}_3 \cdot \underline{U}_{,\eta}) + C_{z33}(\underline{t}_3 \cdot \underline{U}_{,\zeta}) \\ \gamma_{xy} & = & L_{t12} + L_{t21} & = C_{z12}(\underline{t}_1 \cdot \underline{U}_{,\xi}) + C_{z22}(\underline{t}_1 \cdot \underline{U}_{,\eta}) + C_{z32}(\underline{t}_1 \cdot \underline{U}_{,\zeta}) \\ & & & \quad + C_{z11}(\underline{t}_2 \cdot \underline{U}_{,\xi}) + C_{z21}(\underline{t}_2 \cdot \underline{U}_{,\eta}) + C_{z31}(\underline{t}_2 \cdot \underline{U}_{,\zeta}) \\ \gamma_{xz} & = & L_{t13} + L_{t31} & = C_{z13}(\underline{t}_1 \cdot \underline{U}_{,\xi}) + C_{z23}(\underline{t}_1 \cdot \underline{U}_{,\eta}) + C_{z33}(\underline{t}_1 \cdot \underline{U}_{,\zeta}) \\ & & & \quad + C_{z11}(\underline{t}_3 \cdot \underline{U}_{,\xi}) + C_{z21}(\underline{t}_3 \cdot \underline{U}_{,\eta}) + C_{z31}(\underline{t}_3 \cdot \underline{U}_{,\zeta}) \\ \gamma_{yz} & = & L_{t23} + L_{t32} & = C_{z13}(\underline{t}_2 \cdot \underline{U}_{,\xi}) + C_{z23}(\underline{t}_2 \cdot \underline{U}_{,\eta}) + C_{z33}(\underline{t}_2 \cdot \underline{U}_{,\zeta}) \\ & & & \quad + C_{z12}(\underline{t}_3 \cdot \underline{U}_{,\xi}) + C_{z22}(\underline{t}_3 \cdot \underline{U}_{,\eta}) + C_{z32}(\underline{t}_3 \cdot \underline{U}_{,\zeta}) \end{array} \right. \tag{4.9}$$

avec $\gamma_{xy} = 2\varepsilon_{xy}$, $\gamma_{xz} = 2\varepsilon_{xz}$ et $\gamma_{yz} = 2\varepsilon_{yz}$.

4.2.2 Champ électrique curviligne

Notons $\varphi(\xi, \eta, \zeta)$ le potentiel électrique en un point de la structure piézoélectrique tridimensionnelle. Puisque le vecteur champ électrique est le gradient du potentiel électrique alors, nous pouvons écrire dans la base cartésienne :

$$\begin{Bmatrix} E_X \\ E_Y \\ E_Z \end{Bmatrix} = - \begin{Bmatrix} \partial\varphi/\partial X \\ \partial\varphi/\partial Y \\ \partial\varphi/\partial Z \end{Bmatrix} \tag{4.10}$$

En faisant intervenir les coordonnées paramétriques ξ, η et ζ, les composantes cartésiennes du champ électrique s'écrivent en fonction de la matrice de transformation géométrique $[F_z]$:

$$\begin{Bmatrix} E_X \\ E_Y \\ E_Z \end{Bmatrix} = - \underbrace{\begin{bmatrix} \frac{\partial\xi}{\partial X} & \frac{\partial\eta}{\partial X} & \frac{\partial\zeta}{\partial X} \\ \frac{\partial\xi}{\partial Y} & \frac{\partial\eta}{\partial Y} & \frac{\partial\zeta}{\partial Y} \\ \frac{\partial\xi}{\partial Z} & \frac{\partial\eta}{\partial Z} & \frac{\partial\zeta}{\partial Z} \end{bmatrix}}_{[F_z]^{-T}} \begin{Bmatrix} \frac{\partial\varphi}{\partial\xi} \\ \frac{\partial\varphi}{\partial\eta} \\ \frac{\partial\varphi}{\partial\zeta} \end{Bmatrix} \tag{4.11}$$

Les composantes curvilignes du vecteur champ électrique peuvent être déduites des composantes cartésiennes en utilisant la matrice tangente $[Q]$:

$$\left\{ \begin{array}{c} E_x \\ E_y \\ E_z \end{array} \right\} = [Q]^T \left\{ \begin{array}{c} E_X \\ E_Y \\ E_Z \end{array} \right\} = \underbrace{[Q]^T [F_z]^{-T}}_{[C_z]^T} \left\{ \begin{array}{c} \frac{\partial \varphi}{\partial \xi} \\ \frac{\partial \varphi}{\partial \eta} \\ \frac{\partial \varphi}{\partial \zeta} \end{array} \right\} \tag{4.12}$$

soit, en utilisant les composantes de $[C_z]$

$$\left\{ \begin{array}{rcl} E_x &=& -\Big(C_{z11} \frac{\partial \varphi}{\partial \xi} + C_{z21} \frac{\partial \varphi}{\partial \eta} + C_{z31} \frac{\partial \varphi}{\partial \zeta} \Big) \\ E_y &=& -\Big(C_{z12} \frac{\partial \varphi}{\partial \xi} + C_{z22} \frac{\partial \varphi}{\partial \eta} + C_{z32} \frac{\partial \varphi}{\partial \zeta} \Big) \\ E_z &=& -\Big(C_{z13} \frac{\partial \varphi}{\partial \xi} + C_{z23} \frac{\partial \varphi}{\partial \eta} + C_{z33} \frac{\partial \varphi}{\partial \zeta} \Big) \end{array} \right. \tag{4.13}$$

Le tenseur des contraintes mécaniques et le vecteur déplacement électrique curvilignes sont déterminés à partir des équations constitutives ferroélectriques et ferroélastiques développées et intégrées implicitement dans le chapitre 2. Ainsi, à ce stade, toutes les équations correspondantes au comportement non linéaire des structures piézoélectriques tridimensionnelles sont définies dans leur forme faible. Ces équations sont généralement résolues par la méthode des éléments finis. La section suivante décrit cette résolution par l'implémentation d'un élément hexaédrique électromécanique dans le code commercial Abaqus®. D'autre part, une attention particulière sera accordée à un nouveau concept d'éléments finis solides qui est le concept SFR (Space Fiber Rotation). En l'occurrence, une version piézoélectrique linéaire de l'élément hexaédrique SFR8 (développé par Ayad [9]) sera présentée.

4.3 Approximations par éléments finis

La solution du problème électromécanique (Équation (3.3)) peut être obtenue par la méthode des éléments finis. Cette dernière approximation consiste à diviser le domaine piézoélectrique tridimensionnel B_0 en domaines élémentaires si bien que $B_0 = \bigcup_{n=1}^{n=n_{el}} B_e$ où n_{el} est le nombre total d'éléments. Pour étudier des structures piézoélectriques quelconques, deux éléments finis hexaédriques, baptisés H8F et SFR8P, sont développés et implémentés dans Abaqus® via la routine UEL. H8F (Figure 4.2) est un élément hexaédrique de premier ordre couplé avec la loi ferroélectrique et ferroélastique tridimensionnelle présentée dans le chapitre 2. SFR8P est un élément hexaédrique basé sur le concept SFR (Rotation d'une Fibre Spatiale) et couplé, dans un premier temps, avec le modèle piézoélectrique linéaire pour tester sa réponse électromécanique.

4.3.1 Formulation de H8F

H8F (Figure 4.2) est un élément électromécanique à huit noeuds qui présente un comportement ferroélectrique et ferroélastique lui permettant d'étudier la réponse non linéaire des struc-

tures piézoélectriques. La fonction de forme trilinéaire au niveau du noeud i est donnée par :

$$N_i(\xi,\eta,\zeta) = \frac{1}{8}(1+\xi_i\xi)(1+\eta_i\eta)(1+\zeta_i\zeta) \quad \text{avec} \quad -1 \leq \xi,\eta,\zeta \leq +1 \tag{4.14}$$

Par le biais du concept isoparamétrique, les fonctions de forme N_i (Equation (4.14)) interpolent au niveau de l'élément (indice e) le vecteur position cartésien $\underline{X}^e(\xi,\eta,\zeta)$, le vecteur déplacement mécanique cartésien $\underline{U}^e(\xi,\eta,\zeta)$ et le potentiel électrique $\varphi^e(\xi,\eta,\zeta)$ d'un point de l'élément hexaédrique :

$$\left\{\begin{array}{lcll} \underline{X}^e(\xi,\eta,\zeta) & = & \sum_{i=1}^{8} N_i(\xi,\eta,\zeta)\underline{X}_i & ; \quad \{X_i\} = \{X_i\ Y_i\ Z_i\}^T \\ \underline{U}^e(\xi,\eta,\zeta) & = & \sum_{i=1}^{8} N_i(\xi,\eta,\zeta)\underline{U}_i & ; \quad \{U_i\} = \{U_i\ V_i\ W_i\}^T \\ \varphi^e(\xi,\eta,\zeta) & = & \sum_{i=1}^{8} N_i(\xi,\eta,\zeta)\varphi_i & \end{array}\right. \tag{4.15}$$

avec $\underline{X}^{(i)}$, $\underline{U}^{(i)}$ et $\varphi^{(i)}$ sont respectivement le vecteur position cartésien, le vecteur déplacement mécanique cartésien et le potentiel électrique du noeud i. Le vecteur des degrés de liberté électromécaniques est formé par les déplacements mécaniques cartésiens et les potentiels électriques nodaux :

$$\{d^e\} = \{\ldots |\ U_i\ V_i\ W_i \vdots \varphi_i\ | \ldots\ i = 1,8\}^T \tag{4.16}$$

En utilisant les expressions (4.9) et les approximations (4.15), les déformations mécaniques curvilignes de H8F s'expriment en fonction des degrés de liberté mécaniques :

$$\left\{\begin{array}{lcl} \varepsilon_{xx} & = & \Big(C_{z11}N_{i,\xi} + C_{z21}N_{i,\eta} + C_{z31}N_{i,\zeta}\Big)\underline{t}_1 \cdot \underline{U}_i \\ \varepsilon_{yy} & = & \Big(C_{z12}N_{i,\xi} + C_{z22}N_{i,\eta} + C_{z32}N_{i,\zeta}\Big)\underline{t}_2 \cdot \underline{U}_i \\ \varepsilon_{zz} & = & \Big(C_{z13}N_{i,\xi} + C_{z23}N_{i,\eta} + C_{z33}N_{i,\zeta}\Big)\underline{t}_3 \cdot \underline{U}_i \\ \gamma_{xy} & = & \Big(C_{z12}N_{i,\xi} + C_{z22}N_{i,\eta} + C_{z32}N_{i,\zeta}\Big)\underline{t}_1 \cdot \underline{U}_i \\ & + & \Big(C_{z11}N_{i,\xi} + C_{z21}N_{i,\eta} + C_{z31}N_{i,\zeta}\Big)\underline{t}_2 \cdot \underline{U}_i \\ \gamma_{xz} & = & \Big(C_{z13}N_{i,\xi} + C_{z23}N_{i,\eta} + C_{z33}N_{i,\zeta}\Big)\underline{t}_1 \cdot \underline{U}_i \\ & + & \Big(C_{z11}N_{i,\xi} + C_{z21}N_{i,\eta} + C_{z31}N_{i,\zeta}\Big)\underline{t}_3 \cdot \underline{U}_i \\ \gamma_{yz} & = & \Big(C_{z13}N_{i,\xi} + C_{z23}N_{i,\eta} + C_{z33}N_{i,\zeta}\Big)\underline{t}_2 \cdot \underline{U}_i \\ & + & \Big(C_{z12}N_{i,\xi} + C_{z22}N_{i,\eta} + C_{z32}N_{i,\zeta}\Big)\underline{t}_3 \cdot \underline{U}_i \end{array}\right. \tag{4.17}$$

En utilisant les expressions (4.13) et les approximations (4.15), les composantes curvilignes du vecteur champ électrique de H8F s'expriment en fonction des degrés de liberté électriques :

$$\begin{cases} E_x &= -\Big(C_{z11}N_{i,\xi} + C_{z21}N_{i,\eta} + C_{z31}N_{i,\zeta}\Big)\varphi_i \\ E_y &= -\Big(C_{z12}N_{i,\xi} + C_{z22}N_{i,\eta} + C_{z32}N_{i,\zeta}\Big)\varphi_i \\ E_z &= -\Big(C_{z13}N_{i,\xi} + C_{z23}N_{i,\eta} + C_{z33}N_{i,\zeta}\Big)\varphi_i \end{cases} \tag{4.18}$$

En utilisant les expressions (4.17) et (4.18), nous pouvons montrer que le vecteur des déformations curvilignes généralisé $\{\Gamma^e\} = \{\varepsilon_{11}\ \varepsilon_{22}\ \varepsilon_{33}\ \gamma_{12}\ \gamma_{13}\ \gamma_{23}\ E_1\ E_2\ E_3\}^T$ (avec $1 \equiv x$, $2 \equiv y$ et $3 \equiv z$) est lié au vecteur des degrés de liberté électromécaniques via une matrice [B] de taille 9×32 :

$$\{\Gamma\} = [B]\{d^e\} \quad \text{avec} \quad \underbrace{[B]}_{9\times32} = \begin{bmatrix} \underbrace{[B_m]}_{6\times32} \\ \underbrace{[B_e]}_{3\times32} \end{bmatrix} \tag{4.19}$$

où $[B_m]$ et $[B_e]$ sont deux matrices qui lient respectivement les déformations mécaniques curvilignes $\{\varepsilon_{11}\ \varepsilon_{22}\ \varepsilon_{33}\ \gamma_{12}\ \gamma_{13}\ \gamma_{23}\}$ et les composantes curvilignes du vecteur champ électrique $\{E_1\ E_2\ E_3\}$ au vecteur degrés de liberté $\underline{d}^e$ de H8F.

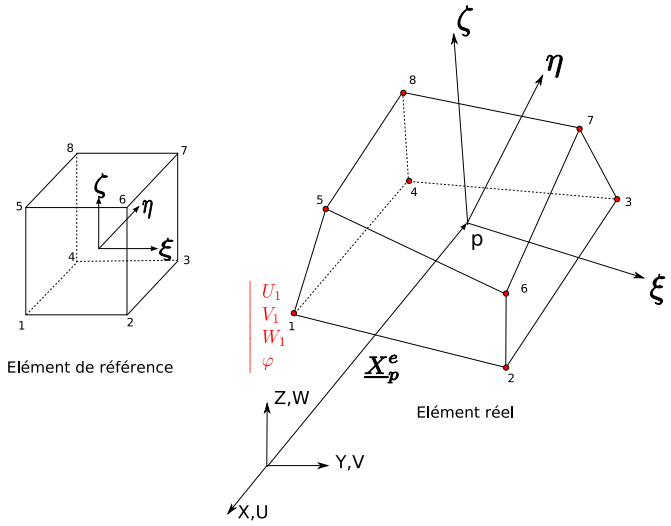


Fig. 4.2 : *Elément hexaédrique à huit noeuds.*

4.3.2 Formulation de SFR8P

Le modèle SFR (Space Fiber Rotation ou Rotation d'une Fibre dans l'Espace) a été proposé par Ayad dans [9] pour développer un élément hexaédrique à huit noeuds baptisé SFR8 (Figure 4.3). Cet élément améliore la réponse des éléments volumiques classiques de premier

ordre souvent délaissés à cause de la faible précision de leurs résultats. En effet, un maillage suffisamment fin est exigé pour ces éléments pour s'assurer de la convergence vers une solution raisonnable. Le modèle SFR est basé sur la rotation dans l'espace tridimensionnel d'une fibre matérielle élémentaire. La Figure 4.3 représente l'élément SFR8 qui est un élément hexaédrique à huit noeuds animé d'une fibre spatiale nodale $\underline{ip}$ qui, en effectuant une rotation tridimensionnelle *fictive* d'angle $\underline{\theta}$, engendre un vecteur déplacement additionnel qui viendrait enrichir le déplacement du point p, classiquement utilisé pour formuler les éléments solides standards.
L'utilisation de SFR8 dans les problèmes purement mécaniques a montré qu'il est capable de donner des résultats meilleurs que les éléments hexaédriques de premier ordre et parfois équivalents à ceux des éléments quadratiques [9]. Ce constat nous a donc motivé à développer une version piézoélectrique linéaire de cet élément (en ajoutant le degré de liberté électrique), baptisée SFR8P, pour tester sa réponse électromécanique et la comparer à celles des éléments piézoélectriques linéaires de premier ordre comme l'élément C3D8E d'Abaqus® [1]. L'approximation du potentiel électrique dans l'élément SFR8P est la même que celle de l'élément H8F. Cependant, l'approximation du vecteur déplacement mécanique et par la suite du tenseur des déformations curvilignes n'est pas la même et donc fera l'objet du paragraphe suivant.

Approximation du vecteur déplacement mécanique de SFR8P

La Figure 4.3 montre la géométrie de SFR8 et ses variables cinématiques nodales correspondantes. L'élément SFR8P possède la même géométrie que SFR8 avec un degré de liberté électrique en plus. A chaque noeud i de l'élément SFR8P, les rotations θ_{Xi}, θ_{Yi} et θ_{Zi} de la fibre $\underline{ip}$ s'ajoutent aux degrés de liberté classiques qui sont les déplacements cartésiens globaux U_i, V_i et W_i.
L'introduction du vecteur rotation $\underline{\theta}_i$ de la fibre $\underline{ip}$ permet d'obtenir une expression enrichie du champ des déplacements d'un point p de l'élément [9] :

$$\underline{U}^e_p(\xi,\eta,\zeta) = \sum_{i=1}^{8} N_i(\xi,\eta,\zeta)\Big(\underline{U}_i + \underline{\theta}_i \wedge \underline{ip}\Big) \quad ; \quad \underline{ip} = \underline{X} - \underline{X}_i \quad ; \quad \underline{X} \equiv \underline{X}^e_p \tag{4.20}$$

avec

$$\{U_i\} = \{U_i\ V_i\ W_i\}^T \quad ; \quad \underline{\theta}_i = \{\theta_{Xi}\ \theta_{Yi}\ \theta_{Zi}\}^T \quad ; \quad \{X_i\} = \{X_i\ Y_i\ Z_i\}^T \tag{4.21}$$

En effectuant le produit vectoriel $\underline{\theta}_i \wedge \underline{ip}$, l'Equation (4.20) devient :

$$\begin{aligned} \underline{U}(\xi,\eta,\zeta) = \textstyle\sum_{i=1}^{8} \Big[& N_i\underline{U}_i \\ & + \Big(N_i(Z-Z_i)\theta_{Yi} - N_i(Y-Y_i)\theta_{Zi}\Big)\underline{e}_1 \\ & + \Big(N_i(X-X_i)\theta_{Zi} - N_i(Z-Z_i)\theta_{Xi}\Big)\underline{e}_2 \\ & + \Big(N_i(Y-Y_i)\theta_{Xi} - N_i(X-X_i)\theta_{Yi}\Big)\underline{e}_3 \Big] \end{aligned} \tag{4.22}$$

où $\underline{e}_1$, $\underline{e}_2$ et $\underline{e}_3$ sont les vecteurs unitaires de la base cartésienne globale. X, Y et Z sont les coordonnées du point p de l'élément SFR8P traduisant la géométrie de l'élément :

$$X = \sum_{i=1}^{8} N_i X_i \quad ; \quad Y = \sum_{i=1}^{8} N_i Y_i \quad ; \quad Z = \sum_{i=1}^{8} N_i Z_i \tag{4.23}$$

Calcul des déformations curvilignes de SFR8P

Le vecteur déplacement mécanique du SFR8P (Equation (4.22)) peut s'écrire sous cette forme :

$$\begin{aligned} \underline{U}(\xi,\eta,\zeta) = \textstyle\sum_{i=1}^{8} \Big[N_i \underline{U}_i \quad &+ \quad \Big(N_i(Y-Y_i)\underline{e}_3 - N_i(Z-Z_i)\underline{e}_2\Big)\theta_{Xi} \\ &+ \quad \Big(N_i(Z-Z_i)\underline{e}_1 - N_i(X-X_i)\underline{e}_3\Big)\theta_{Yi} \\ &+ \quad \Big(N_i(X-X_i)\underline{e}_2 - N_i(Y-Y_i)\underline{e}_1\Big)\theta_{Zi} \Big] \end{aligned} \tag{4.24}$$

Les variations du vecteur déplacement mécanique $\underline{U}$ par rapport à ξ, η et ζ sont données par (en utilisant la convention d'Einstein sur les indices répétés) :

$$\begin{aligned} \underline{U}_{,\alpha} = N_{i,\alpha}\,\underline{U}_i \quad &+ \quad \Big[\Big(N_{i,\alpha}(Y-Y_i) + N_i Y_{,\alpha}\Big)\underline{e}_3 - \Big(N_{i,\alpha}(Z-Z_i) + N_i Z_{,\alpha}\Big)\underline{e}_2\Big]\theta_{Xi} \\ &+ \quad \Big[\Big(N_{i,\alpha}(Z-Z_i) + N_i Z_{,\alpha}\Big)\underline{e}_1 - \Big(N_{i,\alpha}(X-X_i) + N_i X_{,\alpha}\Big)\underline{e}_3\Big]\theta_{Yi} \\ &+ \quad \Big[\Big(N_{i,\alpha}(X-X_i) + N_i X_{,\alpha}\Big)\underline{e}_2 - \Big(N_{i,\alpha}(Y-Y_i) + N_i Y_{,\alpha}\Big)\underline{e}_1\Big]\theta_{Zi} \end{aligned} \tag{4.25}$$

avec $\alpha \in \{\xi,\eta,\zeta\}$. Le produit scalaire $\underline{t}_j \cdot \underline{U}_{,\alpha}$ utilisé dans le Système (4.9) pour calculer les déformations curvilignes est donné dans le cas de SFR8P par :

$$\begin{aligned} \underline{t}_j \cdot \underline{U}_{,\alpha} = N_{i,\alpha}\,\underline{t}_j \cdot \underline{U}_i \quad &+ \quad \Big[\Big(N_{i,\alpha}(Y-Y_i) + N_i Y_{,\alpha}\Big)t_{jZ} - \Big(N_{i,\alpha}(Z-Z_i) + N_i Z_{,\alpha}\Big)t_{jY}\Big]\theta_{Xi} \\ &+ \quad \Big[\Big(N_{i,\alpha}(Z-Z_i) + N_i Z_{,\alpha}\Big)t_{jX} - \Big(N_{i,\alpha}(X-X_i) + N_i X_{,\alpha}\Big)t_{jZ}\Big]\theta_{Yi} \\ &+ \quad \Big[\Big(N_{i,\alpha}(X-X_i) + N_i X_{,\alpha}\Big)t_{jY} - \Big(N_{i,\alpha}(Y-Y_i) + N_i Y_{,\alpha}\Big)t_{jX}\Big]\theta_{Zi} \end{aligned} \tag{4.26}$$

avec t_{jX}, t_{jY} et t_{jZ} sont les coordonnées cartésiennes du vecteur tangent $\underline{t}_j$. En considérant les vecteurs suivants

$$\begin{cases} X_{\alpha\, i} = N_{i,\alpha}(X-X_i) + N_i X_{,\alpha} \\ Y_{\alpha\, i} = N_{i,\alpha}(Y-Y_i) + N_i Y_{,\alpha} \\ Z_{\alpha\, i} = N_{i,\alpha}(Z-Z_i) + N_i Z_{,\alpha} \end{cases} \tag{4.27}$$

le produit scalaire (4.26) devient donc :

$$\begin{aligned} \underline{t}_j \cdot \underline{U}_{,\alpha} = N_{i,\alpha}\, \underline{t}_j \cdot \underline{U}_i \quad &+ \quad \Big[Y_{\alpha i} t_{jZ} - Z_{\alpha i} t_{jY}\Big]\theta_{Xi} + \Big[Z_{\alpha i} t_{jX} - X_{\alpha i} t_{jZ}\Big]\theta_{Yi} \\ &+ \quad \Big[X_{\alpha i} t_{jY} - Y_{\alpha i} t_{jX}\Big]\theta_{Zi} \end{aligned} \tag{4.28}$$

En utilisant le Système (4.9) et les approximations (4.28), les déformations curvilignes de SFR8P sont données dans l'Annexe F en fonction des degrés de liberté mécaniques.
Les comportements ferroélectrique et ferroélastique sont caractérisés par une réorientation de la polarisation rémanente à volume constant (voir chapitres 1 et 2). Ceci pourrait provoquer des contraintes cinématiques de quasi-incompressibilité souvent indétectables par les éléments hexaédriques de premier ordre comme l'élément H8F. Dans la section suivante, nous présentons la méthode de dilatation volumique constante, connue aussi sous la $\bar{B}$-méthode, adoptée pour éviter ces contraintes d'incompressibilité.

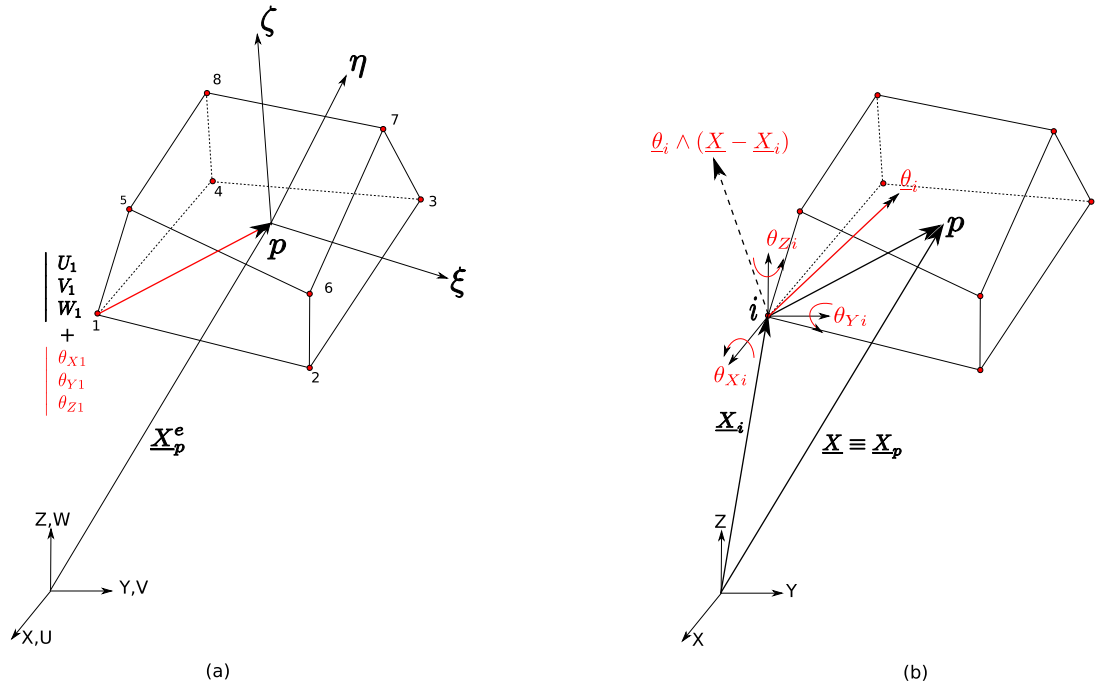


Fig. 4.3 : *Elément SFR8. (a) Variables nodales de SFR8. (b) Rotation fictive de la fibre ip induisant un déplacement additionnel.*

4.3.3 Méthode de dilatation volumique constante : la $\bar{B}$-méthode

Pour calculer la matrice de rigidité élémentaire ($[k^e] = \int_{V^e} [B]^T [L][B]\, dV$, avec $[L]$ le module tangent électromécanique), la méthode de quadrature de Gauss est adoptée. L'intégration exacte de $[k^e]$ consiste à utiliser huit points de Gauss dont les coordonnées sont données dans le Tableau 4.1. Cette intégration exacte évite l'apparition des modes de déformations parasites (à énergie

de déformation nulle) appelés aussi les modes d'Hourglass qui perturbent beaucoup la solution. D'autre part, l'intégration complète de l'élément hexaédrique électromécanique de premier ordre H8F peut induire quelques phénomènes de verrouillages numériques pour certaines situations. Nous pouvons en citer le cisaillement transverse parasite qui apparaît dans les éléments hexaédriques de premier ordre pleinement intégrés dans un essai de flexion pure et qui perturbe la bonne reproduction des modes de flexion sans cisaillement. Un autre type de verrouillage peut être induit par les comportements ferroélectrique et ferroélastique caractérisés par une réorientation de la polarisation rémanente à volume constant, ce qui provoque une contrainte cinématique de quasi-incompressibilité [29].

Les éléments hexaédriques de premier ordre classiques basés sur une formulation en déplacement pure sont incapables de détecter ces contraintes d'incompressibilité et verrouillent (réponses trop rigides et résultats souvent inutilisables). La méthode des déformations postulées améliorées (méthode EAS) peut être considérée en calculant les modes incompatibles comme c'est développé au niveau de l'Annexe D pour l'élément coque. Cette méthode peut très bien fonctionner dans le cas des problèmes linéaires comme l'élément C3D8I d'Abaqus [1] mais reste inutilisable dans le cas des problèmes non linéaires comme celui de la ferroélectricité et la ferroélasticité. La méthode d'intégration sélective de la matrice de rigidité, qui consiste à sous intégrer la partie sphérique de la matrice de rigidité, est généralement limitée aux cas isotropes et l'extension aux cas anisotropes et non linéaires reste difficile [29]. Finalement, la $\bar{B}$-méthode ou méthode de dilatation volumique constante, largement utilisée dans les problèmes linéaires et non linéaires car il s'agit d'une approche en déplacement, consiste à intégrer les parties sphériques et déviatoriques de la déformation mécanique indépendamment. C'est la méthode que nous avons choisi pour éviter les contraintes d'incompressibilité.

Le principe de la méthode de dilatation constante consiste à modifier les déformations volumiques afin d'obtenir une variation de volume identique en chaque point de Gauss. Pour ce faire, introduisons le vecteur $\underline{\Gamma}^{vol}$ qui contient la moyenne des déformations volumiques curvilignes généralisées :

$$\{\Gamma^{vol}\} = \frac{1}{3}\begin{Bmatrix} \varepsilon_{11}+\varepsilon_{22}+\varepsilon_{33} \\ \varepsilon_{11}+\varepsilon_{22}+\varepsilon_{33} \\ \varepsilon_{11}+\varepsilon_{22}+\varepsilon_{33} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{Bmatrix} = [P^{vol}]\{\Gamma\} \quad \text{avec} \quad [P^{vol}] = \frac{1}{3}\begin{bmatrix} 1&1&1&0&0&0&0&0&0 \\ 1&1&1&0&0&0&0&0&0 \\ 1&1&1&0&0&0&0&0&0 \\ 0&0&0&0&0&0&0&0&0 \\ 0&0&0&0&0&0&0&0&0 \\ 0&0&0&0&0&0&0&0&0 \\ 0&0&0&0&0&0&0&0&0 \\ 0&0&0&0&0&0&0&0&0 \\ 0&0&0&0&0&0&0&0&0 \end{bmatrix} \tag{4.29}$$

Nous définissons ensuite la matrice $[B^{vol}]$ qui lie le vecteur $\underline{\Gamma}^{vol}$ au vecteur des degrés de liberté électromécaniques :

$$\{\Gamma^{vol}\} = [P^{vol}]\{\Gamma\} = \underbrace{[P^{vol}][B]}_{[B^{vol}]}\{d^e\} = [B^{vol}]\{d^e\} \tag{4.30}$$

Introduisons le vecteur $\underline{\Gamma}^{dev}$ qui contient les déformations curvilignes déviatoriques généralisées :

$$\{\Gamma^{dev}\} = \{\Gamma\} - \{\Gamma^{vol}\} = \underbrace{\Big([I_9] - [P^{vol}]\Big)}_{[P^{dev}]}\{\Gamma\} = [P^{dev}]\{\Gamma\} \tag{4.31}$$

avec $[I_9]$ est la matrice identité d'ordre 9 et

$$[P^{dev}] = \begin{bmatrix} \frac{2}{3} & -\frac{1}{3} & -\frac{1}{3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{3} & \frac{2}{3} & -\frac{1}{3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{3} & -\frac{1}{3} & \frac{2}{3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{4.32}$$

Une matrice $[B^{dev}]$ est introduite pour lier le vecteur $\underline{\Gamma}^{dev}$ à $\underline{d}^e$:

$$\{\Gamma^{dev}\} = [P^{dev}]\{\Gamma\} = \underbrace{[P^{dev}][B]}_{[B^{dev}]}\{d^e\} = [B^{dev}]\{d^e\} \tag{4.33}$$

La méthode de dilatation constante consiste à calculer une valeur moyenne $[\bar{B}^{vol}]$ de $[B^{vol}]$ sur l'élément et qui sera la même pour tous les points de Gauss :

$$[\bar{B}^{vol}] = \frac{1}{V^e}\int_{V^e}[B^{vol}]\,dV \tag{4.34}$$

Nous obtenons ainsi une nouvelle matrice $[\bar{B}]$ définie par :

$$[\bar{B}(\xi,\eta,\zeta)] = [B^{dev}(\xi,\eta,\zeta)] + [\bar{B}^{vol}] \tag{4.35}$$

A ce stade, nous rappelons que l'implémentation de H8F et SFR8P dans Abaqus® se fait de la même manière que l'élément coque ferroélectrique Q4TSF en suivant l'algorithme de la Figure 3.5 et la même démarche que la section 3.4. Pour l'élément SFR8P, le module tangent reste constant (piézoélectricité linéaire) tandis que pour l'élément H8F, le module tangent ne l'est pas

Tab. 4.1 : *Coordonnées des huit points d'intégration.*

Point d'intégration	Coordonnées (ξ,η,ζ)
1	$(-\frac{1}{\sqrt{3}}, -\frac{1}{\sqrt{3}}, -\frac{1}{\sqrt{3}})$
2	$(\frac{1}{\sqrt{3}}, -\frac{1}{\sqrt{3}}, -\frac{1}{\sqrt{3}})$
3	$(\frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{\sqrt{3}}, -\frac{1}{\sqrt{3}})$
4	$(-\frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{\sqrt{3}}, -\frac{1}{\sqrt{3}})$
5	$(-\frac{1}{\sqrt{3}}, -\frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{\sqrt{3}})$
6	$(\frac{1}{\sqrt{3}}, -\frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{\sqrt{3}})$
7	$(\frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{\sqrt{3}})$
8	$(\frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{\sqrt{3}})$

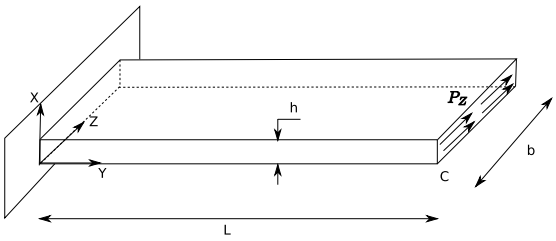
et dépend de l'histoire du chargement comme expliqué dans le chapitre 2.
Dans la section suivante, nous présentons quelques cas tests de validation mécaniques, piézoélectriques linéaires et ferroélectriques non linéaires des éléments H8F et SFR8P.

4.4 Cas tests de validation

4.4.1 Cas test mécanique : Flexion plane d'une poutre encastrée

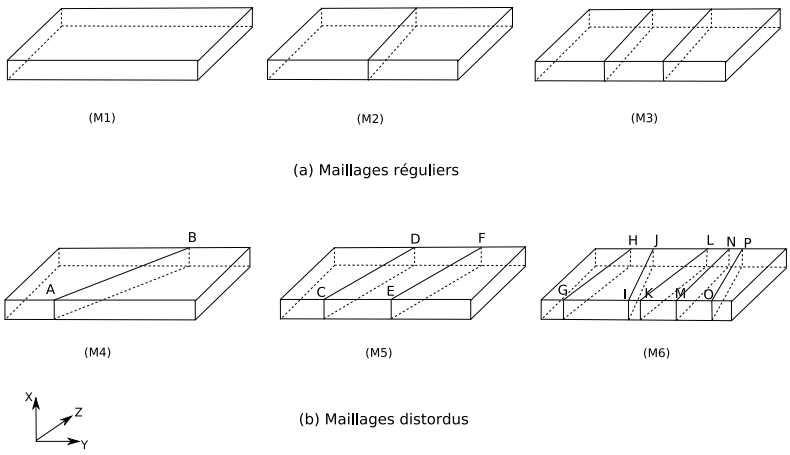
Il s'agit d'évaluer le déplacement suivant Z de l'extrémité libre d'une poutre encastrée soumise à une charge uniformément répartie $P_Z = 10^3\, N/m^2$ (Figure 4.4). Ce test assez sévère est utile pour étudier l'influence de la distorsion géométrique sur les éléments. Une solution de référence du déplacement suivant Z du point C (Figure 4.4), basée sur la théorie des poutres, est donnée dans [9] : $W_C^{ref} = 4.03\, m$. Nous présentons dans le Tableau 4.2 les résultats obtenus avec les éléments SFR8, H8, C3D8, C3D8I et C3D20. Les trois derniers éléments sont des éléments d'Abaqus® : C3D8 est un élément hexaédrique à huit noeuds, C3D8I est un élément hexaédrique à huit noeuds avec des modes incompatibles pour améliorer sa réponse et C3D20 est un élément hexaédrique à 20 noeuds [1]. H8 est la version purement mécanique de H8F. Les maillages utilisés dans le calcul sont montrés sur la Figure 4.5.
Nous remarquons que :

- pour les maillages réguliers M1, M2 et M3, l'élément SFR8 donne des résultats nettement meilleurs que ceux des éléments H8 et C3D8. Sa solution est du même ordre de grandeur que celle de l'élément quadratique C3D20 et l'élément C3D8I. La méthode EAS (Enhanced Assumed Strain) utilisée pour développer l'élément C3D8I [1] donne des résultats nettement meilleurs que ceux de l'élément classique C3D8 et équivalents à ceux de l'élément C3D20.
- pour les maillages distordus, nous remarquons que SFR8 donne des résultats meilleurs que ceux de l'élément C3D8I pour les maillages M4 et M6 ce qui montre qu'il est moins sensible à la distorsion du maillage que ce dernier. SFR8 est meilleur que C3D20 pour le maillage M4 et donne des résultats équivalents à ceux de C3D20 pour M5 et M6.



$$\begin{cases} E &= 10^7\,Pa \\ \nu &= 0.3 \\ L &= 100\,m \\ b &= 10\,m \\ h &= 1\,m \\ P_Z &= 10^3\,N/m^2 \end{cases}$$

Fig. 4.4 : *Poutre en flexion plane.*



A(1,25,0) ; B(1,75,10) ; C(1,16.7,0) ; D(1,50,10) ; E(1,50,0) ; F(1,83.3,10)
G(1,10,0) ; H(1,20,10) ; I(1,40,0) ; J(1,30,10) ; K(1,45,0) ; L(1,60,10)
M(1,65,0) ; N(1,70,10) ; O(1,90,0) ; P(1,80,10)

Fig. 4.5 : *Maillages tridimensionnels utilisés.*

Tab. 4.2 : *Résultats de la poutre en flexion plane ($W_C^{ref} = 4.03\,m$).*

Maillage	H8	SFR8	C3D8	C3D8I	C3D20
M1	0.103	2.761	0.103	2.986	2.963
M2	0.399	3.512	0.399	3.675	3.625
M3	0.854	3.560	0.854	3.848	3.798
M4	0.161	1.103	0.161	0.443	0.591
M5	0.245	1.576	0.245	1.892	1.712
M6	0.930	3.315	0.930	1.244	3.463

4.4.2 Cas tests piézoélectriques

Bimorphe piézoélectrique

Nous considérons dans cet exemple un actionneur piézoélectrique constitué par deux couches de PZT-5H ayant une même polarisation électrique (Figure 4.6). Cet actionneur, connu aussi sous

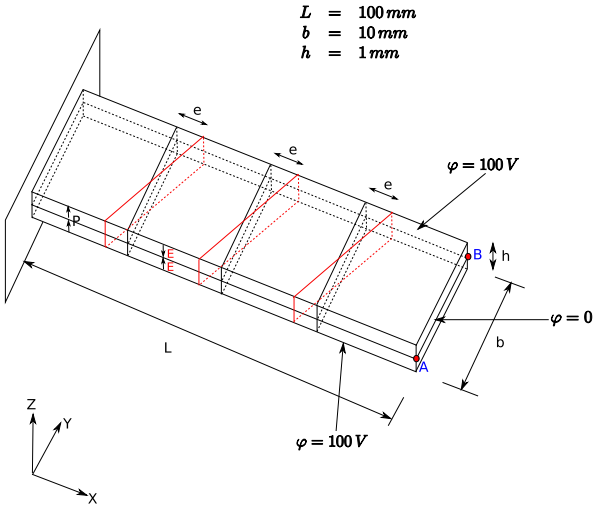


FIG. 4.6 : *Bimorphe piézoélectrique : effet de la distorsion du maillage.*

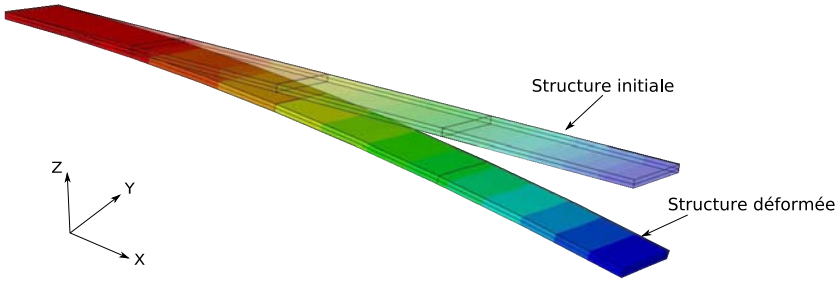


FIG. 4.7 : *Déformée du bimorphe piézoélectrique.*

le nom de *bimorphe* piézoélectrique, est généralement considéré pour amplifier le déplacement transversal de l'extrémité libre. Les faces supérieure et inférieure du bimorphe sont soumises à une tension électrique de 100 V tandis que la face moyenne est liée à la masse ($\varphi = 0$). Un champ électrique négatif apparaît dans la couche supérieure et un autre positif est appliqué sur la couche inférieure (Figure 4.6). Grâce au mode de couplage d_{31}, la couche supérieure se dilate (travaille en traction) et la couche inférieure se comprime (travaille en compression) permettant ainsi d'avoir un déplacement transversal important de l'extrémité libre comme illustré par la Figure 4.7. Une expression analytique du déplacement transversal de l'extrémité libre de l'actionneur bimorphe est proposée dans [79] :

$$\delta = \frac{3\, d_{31}\, L^2\, V}{h^2} \tag{4.36}$$

Des calculs sont effectués avec les éléments H8F, SFR8P, C3D8E et C3D20E. Les deux derniers éléments sont des éléments piézoélectriques (linéaires) d'Abaqus® [1] : C3D8E est un élément hexaédrique à huit noeuds (de premier ordre) et C3D20E est un élément hexaédrique à 20

noeuds. Le bimorphe piézoélectrique est modélisé par un maillage distordu de huit éléments avec une excentricité e (Figure 4.6). Un tel maillage est considéré pour tester la sensibilité des éléments, utilisés dans le calcul, à la distorsion du maillage. Les Tableaux 4.3 et 4.4 résument les déplacements transversaux des points A et B de l'extrémité libre (Figure 4.6).

Tab. 4.3 : *Déplacement transversal normalisé du point A* ($W_A^{ref} = -8.22 \times 10^{-4}\, m$).

Maillage	H8F	SFR8P	C3D8E	C3D20E
$e = 0$	5.624×10^{-3}	0.954	5.624×10^{-3}	0.821
$e = 3\,mm$	0.042	0.954	0.042	0.823
$e = 6\,mm$	0.043	0.954	0.043	0.798
$e = 9\,mm$	0.038	0.954	0.038	0.669

Tab. 4.4 : *Déplacement transversal normalisé du point B* ($W_B^{ref} = -8.22 \times 10^{-4}\, m$).

Maillage	H8F	SFR8P	C3D8E	C3D20E
$e = 0$	5.624×10^{-3}	0.954	5.624×10^{-3}	0.821
$e = 3\,mm$	-0.031	0.955	-0.031	0.823
$e = 6\,mm$	-0.032	0.956	-0.032	0.796
$e = 9\,mm$	-0.027	0.955	-0.027	0.662

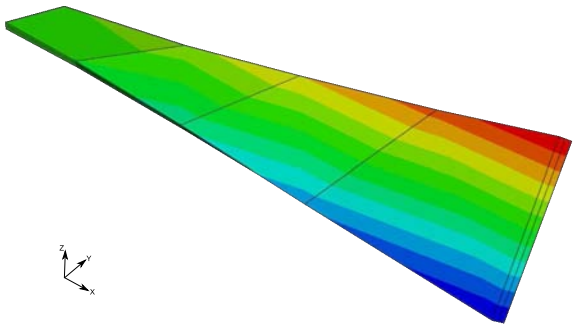


Fig. 4.8 : *Déformée du bimorphe piézoélectrique simulée par l'élément C3D8E* ($e = 3\,mm$).

Nous remarquons que l'élément SFR8P donne d'excellents résultats dans ce cas test. En effet, il converge vers un résultat 5% plus faible que le déplacement de référence et la distorsion du maillage n'influence pratiquement pas sa réponse. La réponse de SFR8P est meilleure que celle de C3D20E qui devient plus sensible à la distorsion du maillage quand l'excentricité e augmente (voir les resultats de C3D20E pour $e = 9\,mm$). Les éléments H8F et C3D8E, qui donnent des résultats équivalents, sont très sensibles à la distorsion du maillage (à l'inverse de l'élément SFR8P) et

leur réponse diverge considérablement de la solution analytique dès qu'une excentricité $e \neq 0$ est considérée dans le maillage (voir la déformée du bimorphe piézoélectrique simulée par l'élément C3D8E pour $e = 3\,mm$, Figure 4.8). En effet, le point A conserve un déplacement transversal négatif tandis que le déplacement du point B devient positif.

Demi cylindre piézoélectrique

Le demi cylindre utilisé comme actionneur

Nous considérons dans cette section un demi cylindre piézoélectrique (Figure 4.9) polarisé suivant l'épaisseur et soumis à une différence de potentiel radiale $\triangle V = 100$ V. Les propriétés matériau de ce demi cylindre sont celles du PZT-5H montrées dans le Tableau 3.12. L'application d'un champ électrique radial permet d'obtenir un déplacement tangentiel important de l'extrémité libre (Figure 4.10) grâce au gradient de déplacement suivant l'épaisseur qui, à cause du mode longitudinal d_{33}, crée des contraintes de flexion. Des calculs ont été effectués avec les éléments H8F, SFR8P, C3D8E et C3D20E. Une solution de référence du déplacement maximal suivant X de l'extrémité libre a été obtenue en utilisant un maillage fin du C3D20E (100 éléments suivant la circonférence, 10 éléments suivant la largeur et quatre éléments suivant l'épaisseur) : $U^{ref} = 2.758 \times 10^{-6}\,m$. Les résultats obtenus avec les quatre éléments sont résumés dans le Tableau 4.5 pour des maillages réguliers $8 \times 1 \times 2$ (huit éléments suivant la circonférence, un élément suivant la largeur et deux éléments suivant l'épaisseur), $16 \times 2 \times 2$, $32 \times 4 \times 2$ et $64 \times 8 \times 2$. L'utilisation de deux éléments suivant l'épaisseur permet de mieux prendre en compte la variation de l'épaisseur surtout pour les éléments de premier ordre C3D8E et H8F.

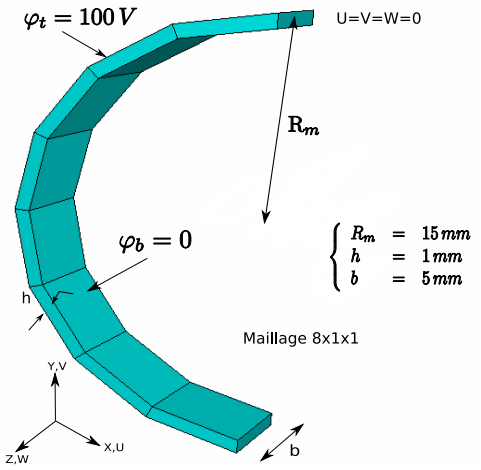


FIG. 4.9 : *Demi cylindre piézoélectrique.*

Nous remarquons que l'élément H8F donne des résultats équivalents à ceux du C3D8E surtout pour le maillage $64 \times 8 \times 2$. Ceci permet de valider le couplage électromécanique linéaire de l'élément H8F. D'autre part, la convergence de ces deux éléments de premier ordre vers la solution

de référence est relativement lente par comparaison à la réponse de C3D20E qui converge vers la solution de référence à partir du maillage $16 \times 2 \times 2$. De plus, l'élément SFR8P converge vers une solution 22% plus importante que la solution de référence. Pour le maillage $8 \times 1 \times 2$, la réponse de ce dernier élément est meilleure que celle du C3D20E. Globalement, SFR8P donne des résultats meilleurs que ceux du C3D8E et H8F surtout pour les maillages grossiers. Cependant, sa convergence vers la solution de référence reste difficile même en affinant le maillage.

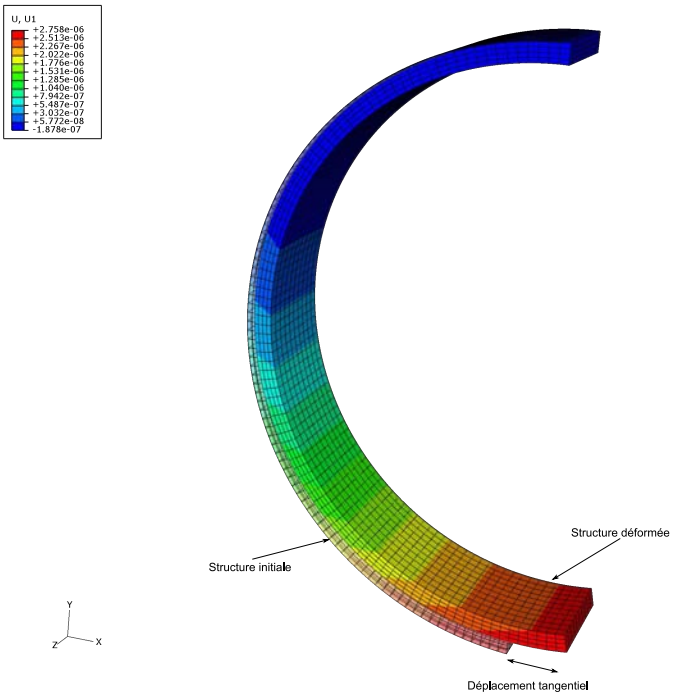


Fig. 4.10 : *Déformée du demi cylindre piézoélectrique soumis à une différence de potentiel de 100 V.*

Tab. 4.5 : *Déplacement maximal normalisé de l'extrémité libre du demi-cylindre soumis à* $\triangle V = 100\ V$ *(*$U^{ref} = 2.758 \times 10^{-6}\, m$*).*

Maillage	C3D8E	C3D20E	H8F	SFR8P
$8 \times 1 \times 2$	0.123	1.157	0.112	1.250
$16 \times 2 \times 2$	0.184	1.000	0.154	1.186
$32 \times 4 \times 2$	0.497	0.998	0.464	1.215
$64 \times 8 \times 2$	0.816	1.000	0.811	1.225

Le demi cylindre utilisé comme capteur

Dans cet exemple, le demi cylindre de la Figure 4.9 est utilisé comme un capteur. Les deux faces supérieure et inférieure sont liées à la masse ($\varphi_t = \varphi_b = 0$) et une pression p d'amplitude

$10^3\,N/m^2$ est appliquée sur l'extrémité libre. Une solution de référence du déplacement suivant X de l'extrémité libre a été obtenue en utilisant le même maillage fin du C3D20E que l'exemple précédent : $U^{ref} = 2.685 \times 10^{-6}\,m$. Les mêmes maillages réguliers que l'exemple de l'actionneur, avec un et deux éléments suivant l'épaisseur, sont considérés. Les Tableaux 4.6 et 4.7 résument les résultats obtenus avec les quatre éléments H8F, SFR8P, C3D8E et C3D20E.
Nous remarquons que les éléments H8F et C3D8E donnent des résultats équivalents et leur convergence lente vers la solution de référence est toujours observée. Leurs réponses divergent du déplacement de référence en utilisant le maillage $64 \times 8 \times 1$ (Tableau 4.6). Ceci peut être expliqué par le fait que cet exemple est un cas test de flexion mécanique et il serait mieux d'utiliser au moins deux éléments de premier ordre suivant l'épaisseur pour avoir une réponse correcte. Ce constat est confirmé par les résultats du Tableau 4.7 où des maillages avec deux éléments suivant l'épaisseur sont considérés.

Tab. 4.6 : *Déplacement maximal normalisé de l'extrémité libre du demi cylindre soumis à une pression $p = 10^3\,N/m^2$ (un seul élément suivant l'épaisseur).*

Maillage	C3D8E	C3D20E	H8F	SFR8P
$8 \times 1 \times 1$	0.083	0.721	0.083	1.873
$16 \times 2 \times 1$	0.316	0.964	0.316	0.913
$32 \times 4 \times 1$	0.967	0.992	0.967	0.911
$64 \times 8 \times 1$	2.459	0.997	2.459	0.910

Tab. 4.7 : *Déplacement maximal normalisé de l'extrémité libre du demi cylindre soumis à une pression $p = 10^3\,N/m^2$ (deux éléments suivant l'épaisseur).*

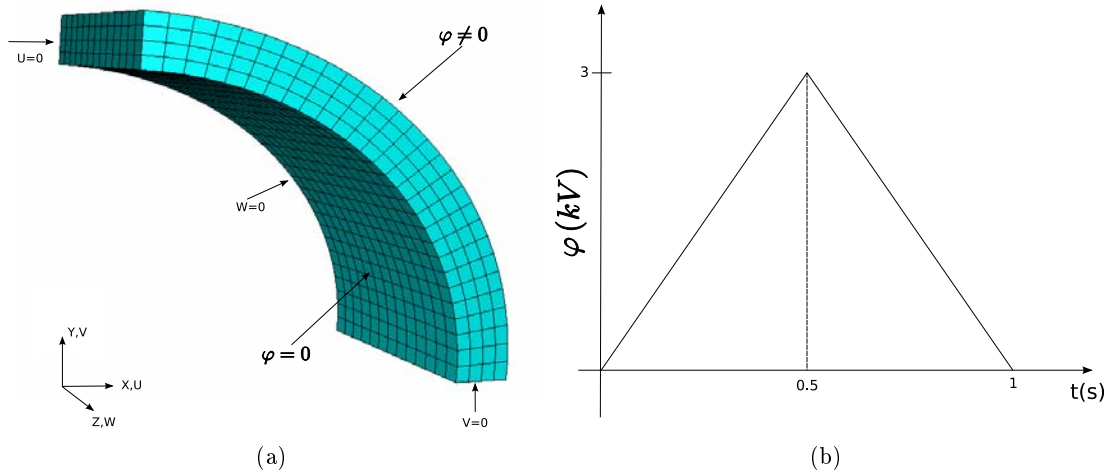
Maillage	C3D8E	C3D20E	H8F	SFR8P
$8 \times 1 \times 2$	0.078	0.581	0.080	1.050
$16 \times 2 \times 2$	0.262	0.974	0.279	1.048
$32 \times 4 \times 2$	0.602	0.996	0.610	1.055
$64 \times 8 \times 2$	0.901	0.998	0.905	1.060

Globalement, l'élément SFR8P donne des résultats meilleurs que ceux des éléments H8F et C3D8E et ne souffre pas d'un blocage en flexion pour le maillage $64 \times 8 \times 1$. Il converge vers une solution 9 % plus faible que le déplacement de référence quand des maillages avec un seul élément suivant l'épaisseur sont considérés (Tableau 4.6). D'autre part, SFR8P converge vers une solution 5% plus faible que le déplacement de référence à partir du maillage $8 \times 1 \times 2$. Pour ce maillage, il donne même un résultat meilleur que celui du C3D20E.

4.4.3 Cas tests ferroélectriques

Polarisation d'un tube ferroélectrique

Cet exemple a été proposé par Laskewitz et al. dans [58]. Le processus de polarisation des tubes ferroélectriques dans la direction radiale a été simulé par la méthode des éléments finis pour montrer les distributions hétérogènes des champs électriques et des contraintes durant et après le processus de polarisation. En effet, comme expliqué dans [58], les investigations analytiques donnent une première indication de la distribution non linéaire du potentiel électrique suivant l'épaisseur et, par conséquent, du champ électrique hétérogène.



(a) (b)

Fig. 4.11 : *(a) Huitième du tube ferroélectrique soumis à une différence de potentiel de forte intensité. (b) L'histoire de chargement.*

Tab. 4.8 : *Paramètres matériau utilisés dans la simulation.*

Module d'Young E	(GPa)	1.
Coefficient de Poisson ν		0.3
Contrainte coercitive σ_c	(MPa)	50.
Déformation de saturation ε^{sat}		2×10^{-3}
Champ coercitif E_c	(MV/m)	1.
Polarisation de saturation P^{sat}	(C/m^2)	0.3
d_{33}	(m/V)	5.93×10^{-10}
d_{31}	(m/V)	-2.74×10^{-10}
d_{15}	(m/V)	7.41×10^{-10}
β	(V.m/C)	2×10^{6}
γ	(N/m^2)	$5. \times 10^{9}$
Constante diélectrique ϵ	(F/m)	1.5×10^{-8}
δ	(N/Vm)	60.

Un tube avec les mêmes dimensions adoptées dans [58] est considéré (longueur $L = 13\,mm$, rayon intérieur $R_{int} = 8.75\,mm$, rayon extérieur $R_{ext} = 10.25\,mm$ et épaisseur $h = 1.5\,mm$).

Grâce à la symétrie du problème, un huitième du tube est considéré dans la simulation comme montré sur la Figure 4.11(a). L'histoire du chargement de la surface extérieure du tube est montrée sur la Figure 4.11(b) (la surface intérieure est liée à la masse). Quatre éléments suivant l'épaisseur sont utilisés pour mieux représenter les phénomènes non linéaires qui apparaissent suivant cette direction radiale. A cause de quelques difficultés numériques liées éventuellement au conditionnement de la matrice de rigidité (à cause de l'écart très important entre les constantes mécaniques et électriques du matériau), nous avons considéré des paramètres matériau différents de ceux proposés dans [58]. Ce nouveau jeu de paramètres est résumé dans le Tableau 4.8.

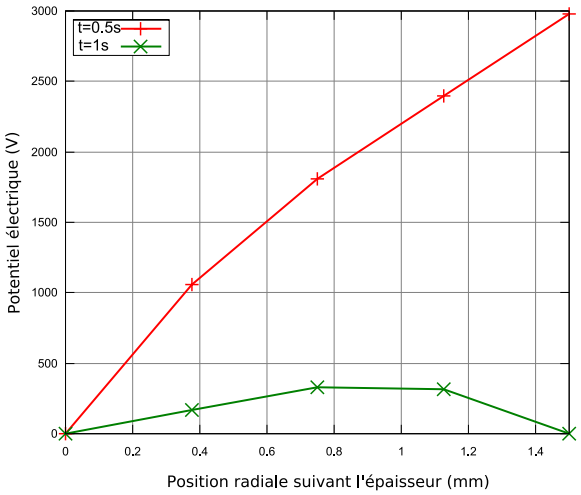


Fig. 4.12 : *Potentiel électrique en fonction de la position radiale à la tension maximale ($t = 0.5\,s$) et quand le tube est déchargé ($t = 1\,s$).*

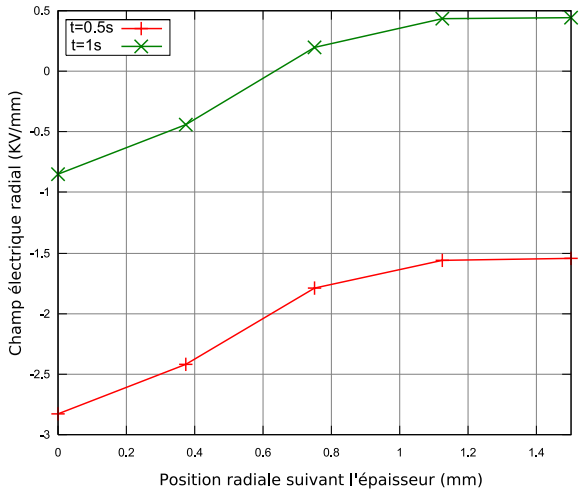


Fig. 4.13 : *Champ électrique radial en fonction de la position suivant l'épaisseur à la tension maximale ($t = 0.5\,s$) et quand le tube est déchargé ($t = 1\,s$).*

La Figure 4.12 montre la distribution non linéaire du potentiel électrique suivant l'épaisseur à

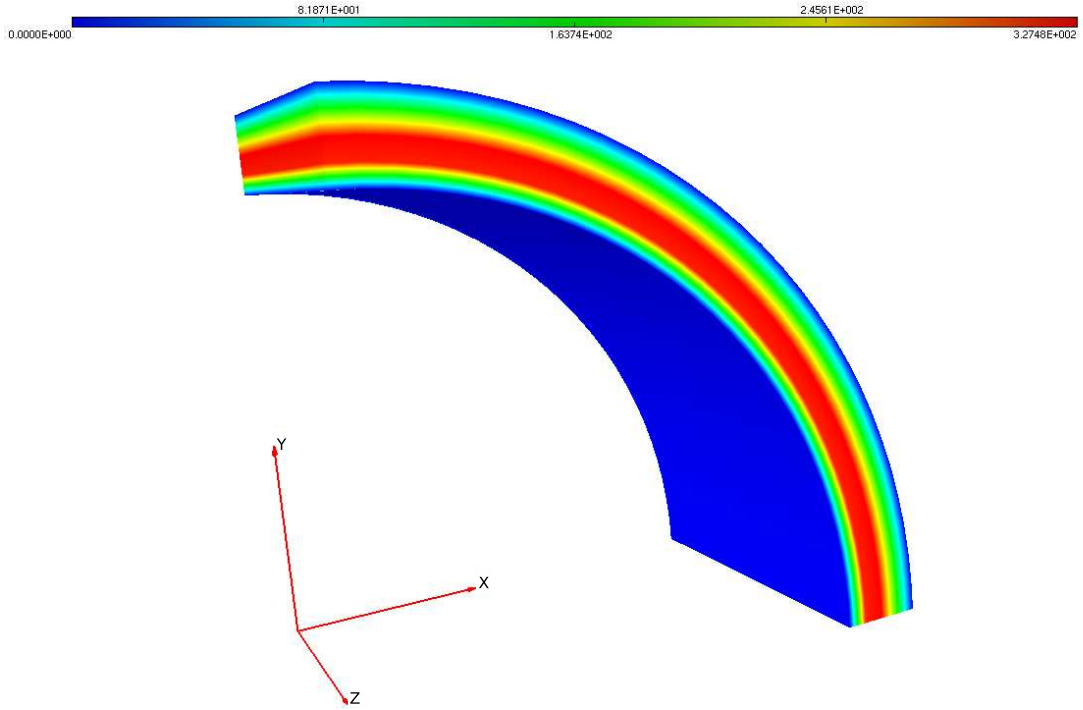


Fig. 4.14 : *Distribution du potentiel électrique à l'intérieur du tube à la fin du chargement ($t = 1\,s$).*

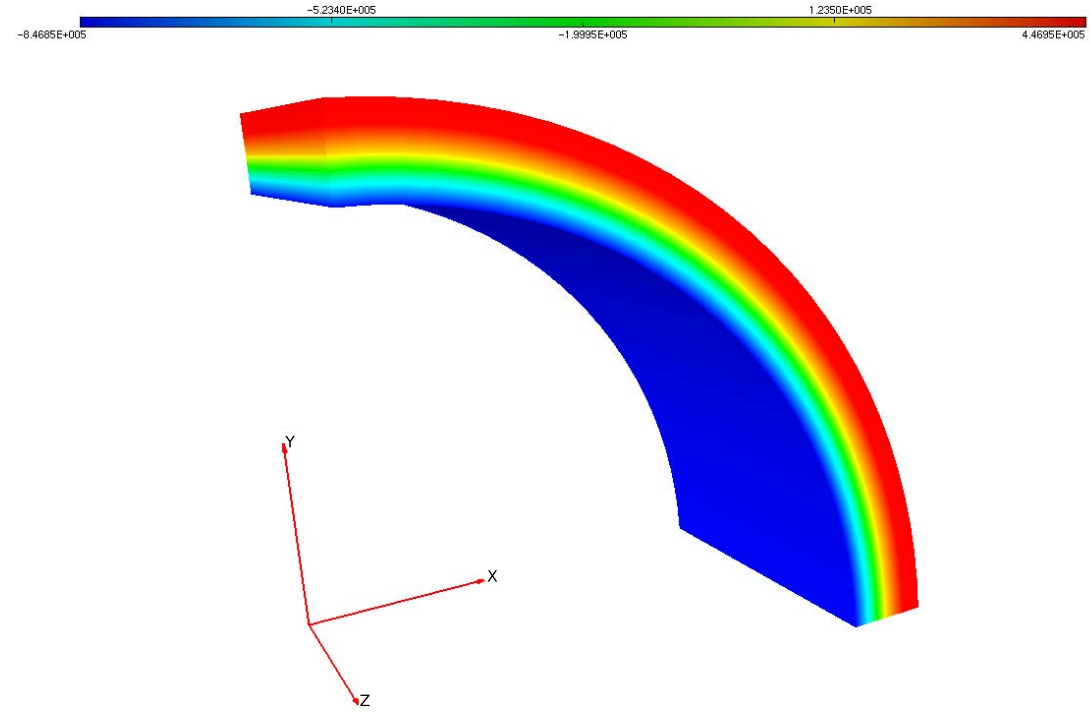


Fig. 4.15 : *Distribution du champ électrique radial à l'intérieur du tube à la fin du chargement ($t = 1\,s$).*

la tension maximale ($t = 0.5\,s$) et quand le tube est électriquement déchargé ($t = 1\,s$) comme observé dans [58]. Cette non linéarité du potentiel électrique suivant l'épaisseur induit un champ

électrique radial hétérogène comme montré sur la Figure 4.13. Quand le tube ferroélectrique est déchargé, il reste un potentiel électrique résiduel à l'intérieur du tube (Figure 4.14). Dans ce cas, la tension électrique maximale est proche de 327 V qui est suffisamment élevée comme expliqué dans [58]. La Figure 4.15 montre la distribution hétérogène du champ électrique radial à la fin du chargement.

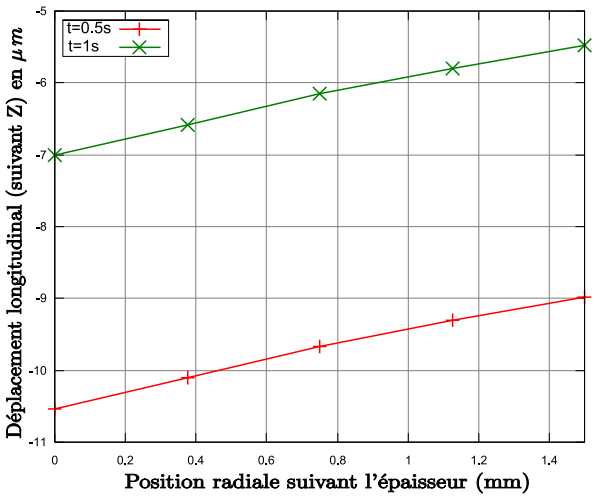


Fig. 4.16 : *Variation du déplacement longitudinal en fonction de la position radiale de l'extrémité libre du tube.*

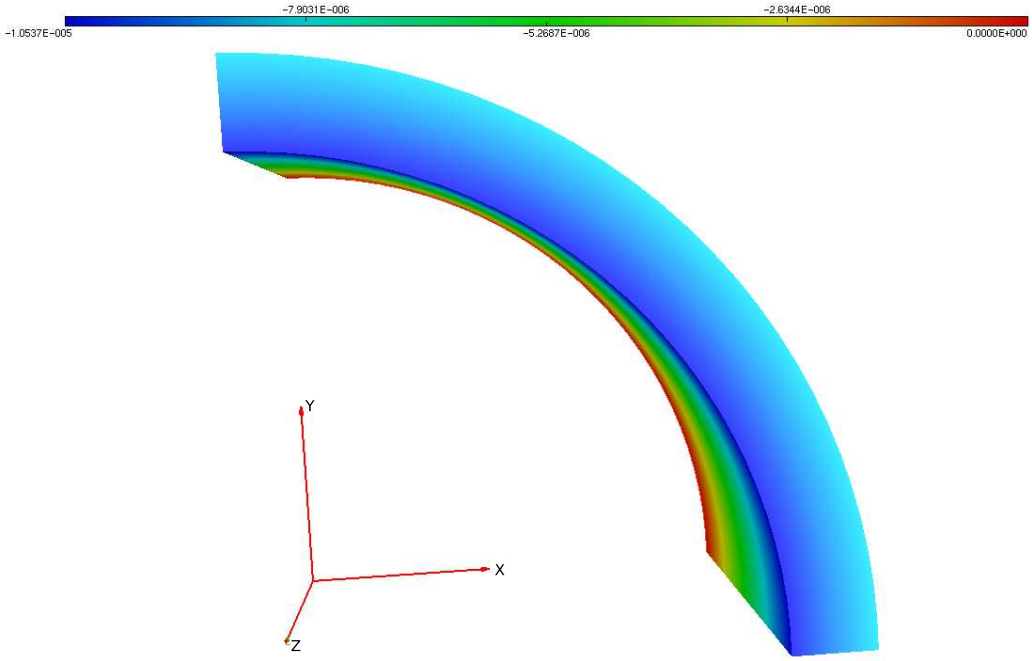


Fig. 4.17 : *Distribution du déplacement longitudinal (suivant Z) à* $t = 0.5\,s$.

D'autre part, nous remarquons que la surface intérieure du tube admet un déplacement longi-

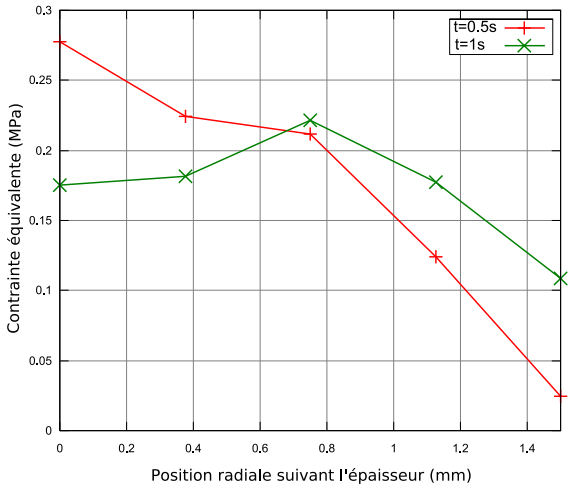


Fig. 4.18 : *Variation de la contrainte équivalente en fonction de la position radiale.*

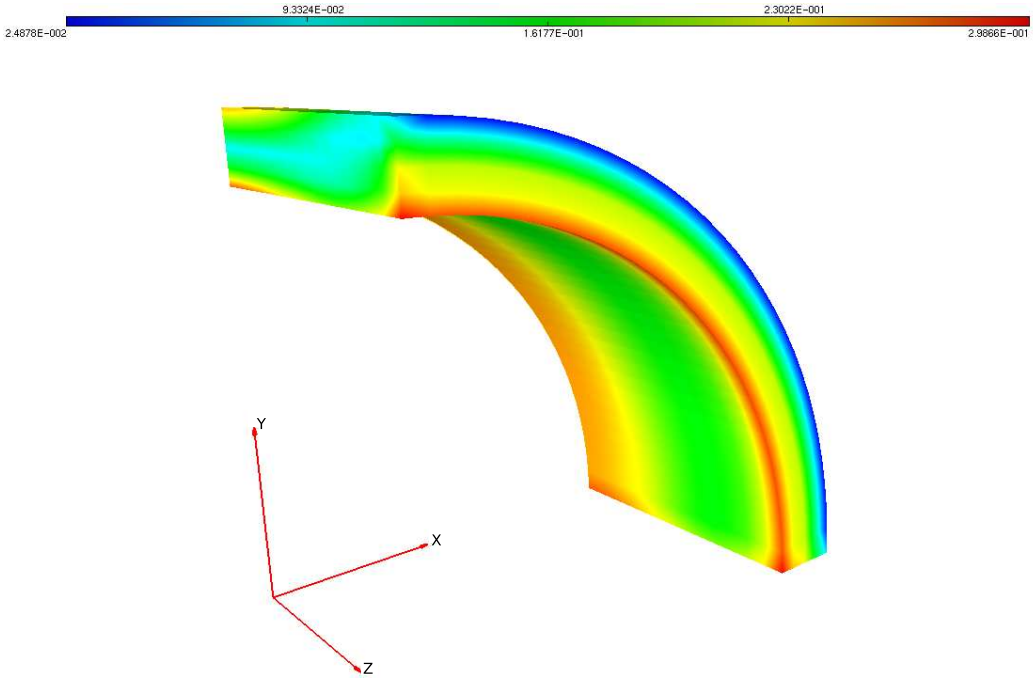


Fig. 4.19 : *Distribution de la contrainte équivalente à* $t = 0.5\,s$.

tudinal (suivant Z) plus important que celui de la surface extérieure comme rapporté dans [58] (Figures 4.16 et 4.17). En effet, une variation linéaire du déplacement longitudinal suivant la direction radiale durant et à la fin du chargement électrique est observée (Figure 4.16). Ce gradient de déplacement cause un gauchissement vers l'intérieur du tube ferroélectrique comme rapporté dans [58].

Les Figures 4.18 et 4.19 montrent la distribution non linéaire de la contrainte équivalente durant et à la fin du chargement électrique. De même, les Figures 4.20 et 4.21 montrent la distribution non linéaire de la polarisation ferroélectrique radiale.

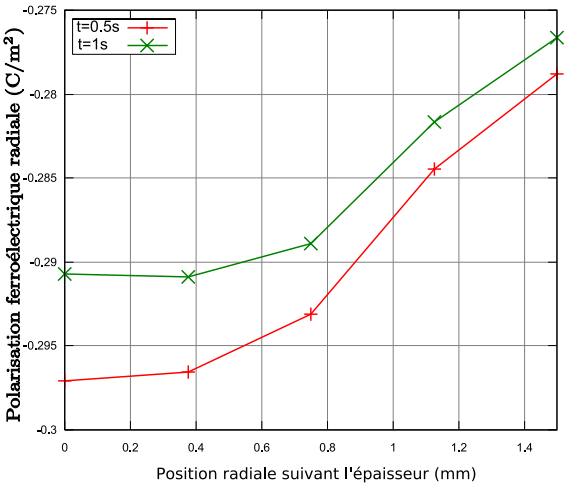


Fig. 4.20 : *Variation de la polarisation ferroélectrique radiale en fonction de la position suivant l'épaisseur.*

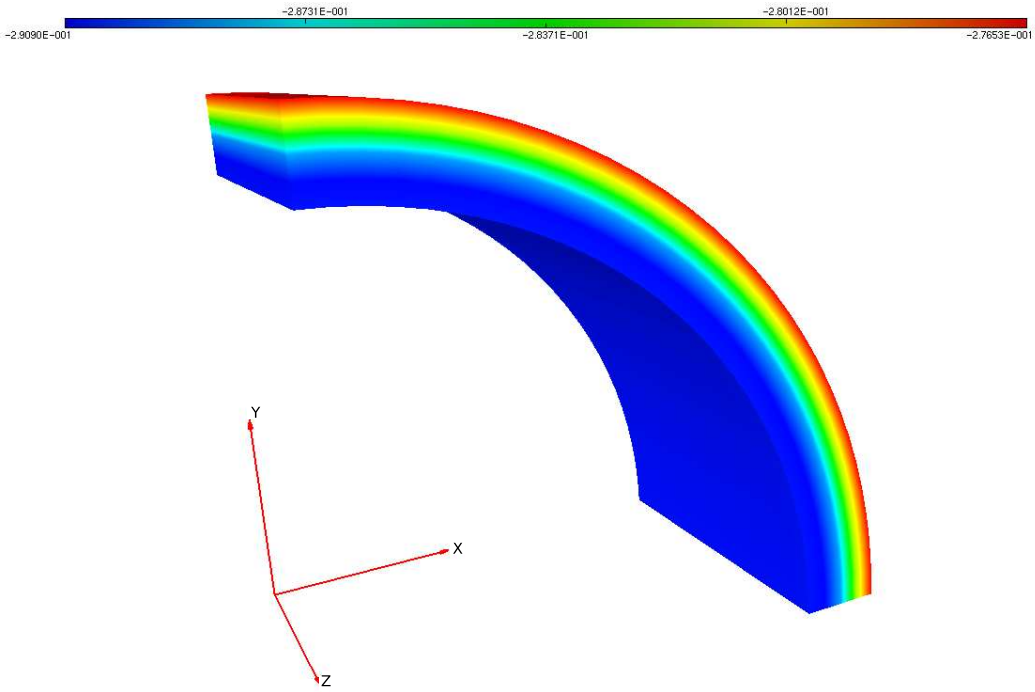


Fig. 4.21 : *Distribution de la polarisation ferroélectrique radiale à* $t = 1\,s$.

Polarisation d'une plaque trouée

La polarisation d'une plaque ferroélectrique trouée est étudiée dans cet exemple. L'intérêt d'un tel cas test est premièrement, la validation de la formulation de l'élément H8F en traitant un exemple numérique sévère et deuxièmement, montrer les concentrations des champs électriques et des contraintes mécaniques qui peuvent apparaître autour du trou. La plaque trouée peut être vue comme une céramique ferroélectrique qui représente un défaut de fabrication qui induit sa

fissuration et sa ruine à cause des concentrations des contraintes et des champs électriques qui persistent après le processus de polarisation.

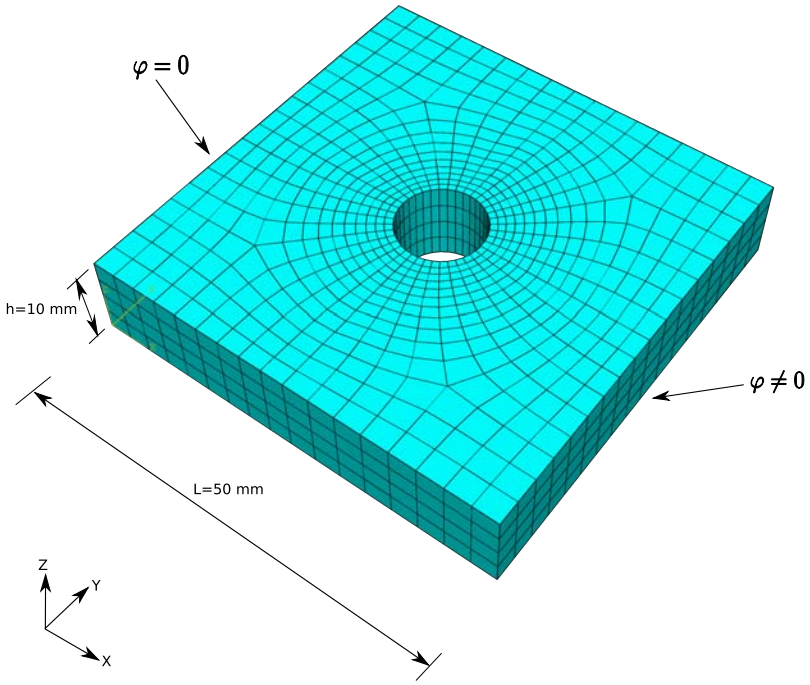


Fig. 4.22 : *Plaque ferroélectrique trouée soumise à une différence de potentiel de forte intensité.*

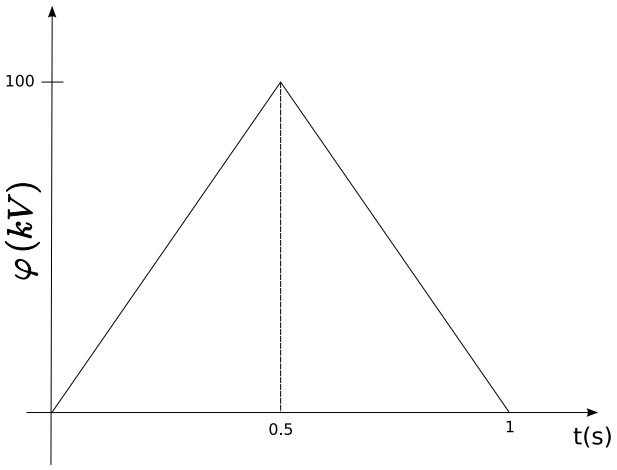


Fig. 4.23 : *Histoire du chargement de la plaque trouée.*

Une plaque ferroélectrique carrée trouée (diamètre $\phi = 10\,mm$) de côté $L = 50\,mm$ et d'épaisseur $h = 10\,mm$ est soumise à une différence de potentiel de forte intensité (Figure 4.22). L'histoire du chargement de la face d'abscisse $X = 50\,mm$ est montrée sur la Figure 4.23. Un maillage suffisamment fin est considéré dans la simulation (Figure 4.22). Les paramètres matériau de la plaque trouée sont les mêmes utilisés dans l'exemple précédent (Tableau 4.8).

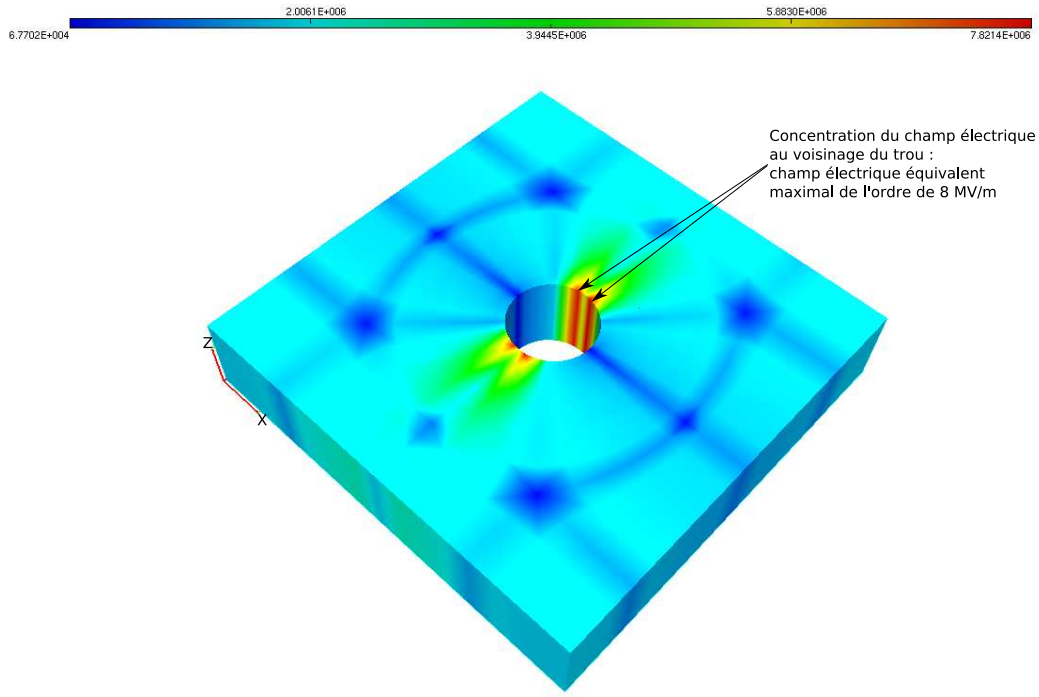


Fig. 4.24 : *Distribution du champ électrique équivalent à* $t = 0.5\,s$.

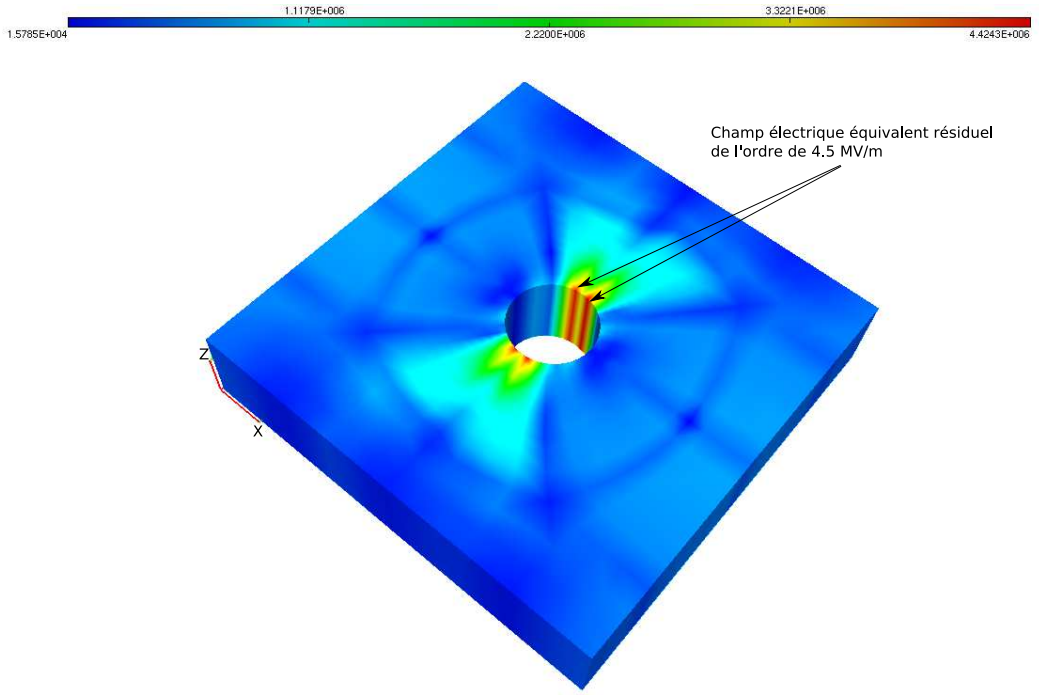


Fig. 4.25 : *Distribution du champ électrique équivalent à* $t = 1\,s$.

Les Figures 4.24 et 4.25 montrent les distributions hétérogènes du champ électrique équivalent à la tension maximale ($t = 0.5\,s$) et quand la plaque est électriquement déchargée ($t = 1\,s$). Nous pouvons en remarquer les concentrations du champ électrique équivalent autour du trou.

En effet, à la tension maximale, le champ électrique équivalent atteint la valeur maximale de 7.82 MV/m au voisinage du trou. Cette valeur très importante vaut presque huit fois la valeur du champ électrique coercitif. A la fin du chargement électrique, un champ électrique équivalent égal à 4.5 MV/m persiste autour du trou. Cette valeur résiduelle vaut presque cinq fois la valeur du champ électrique coercitif et conduit à des réorientations locales de la polarisation rémanente et à la fissuration de la plaque.

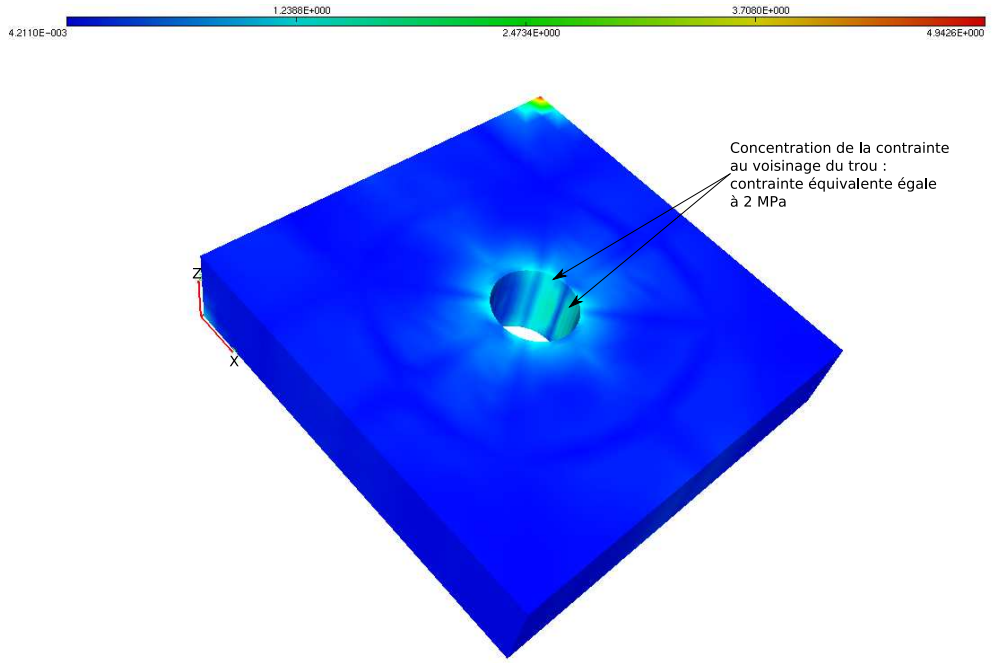


FIG. 4.26 : *Distribution de la contrainte mécanique équivalente à $t = 1\,s$.*

La Figure 4.26 montre la distribution de la contrainte équivalente dans la plaque à la fin du chargement électrique. Une contrainte équivalente égale à 2 MPa est observée autour du trou. Cette valeur est 10 fois plus faible que la contrainte mécanique coercitive.
La Figure 4.27 montre la distribution du potentiel électrique dans la plaque à la fin du chargement. Des potentiels électriques résiduels maximaux de 10 KV et -10 KV sont observés au voisinage du trou. Ces valeurs du potentiel électrique sont suffisamment élevées pour créer des champs électriques internes supérieurs au champ électrique coercitif comme montré sur la Figure 4.25.
La Figure 4.28 montre la distribution de la polarisation électrique (déplacement électrique) équivalente (équivalent) dans la plaque à $t = 1\,s$. Au voisinage du trou, une polarisation équivalente maximale égale à 0.36 $\mathrm{C/m^2}$ est observée perpendiculairement à la direction du chargement électrique. Une polarisation équivalente minimale égale à 6×10^{-4} $\mathrm{C/m^2}$ est observée dans la même direction que le chargement électrique.

Finalement, La Figure 4.29 montre la distribution de la déformation totale équivalente à l'intérieur de la plaque quand cette dernière est électriquement déchargée. Une déformation équivalente de l'ordre de 6×10^{-3} est observée au voisinage du trou.

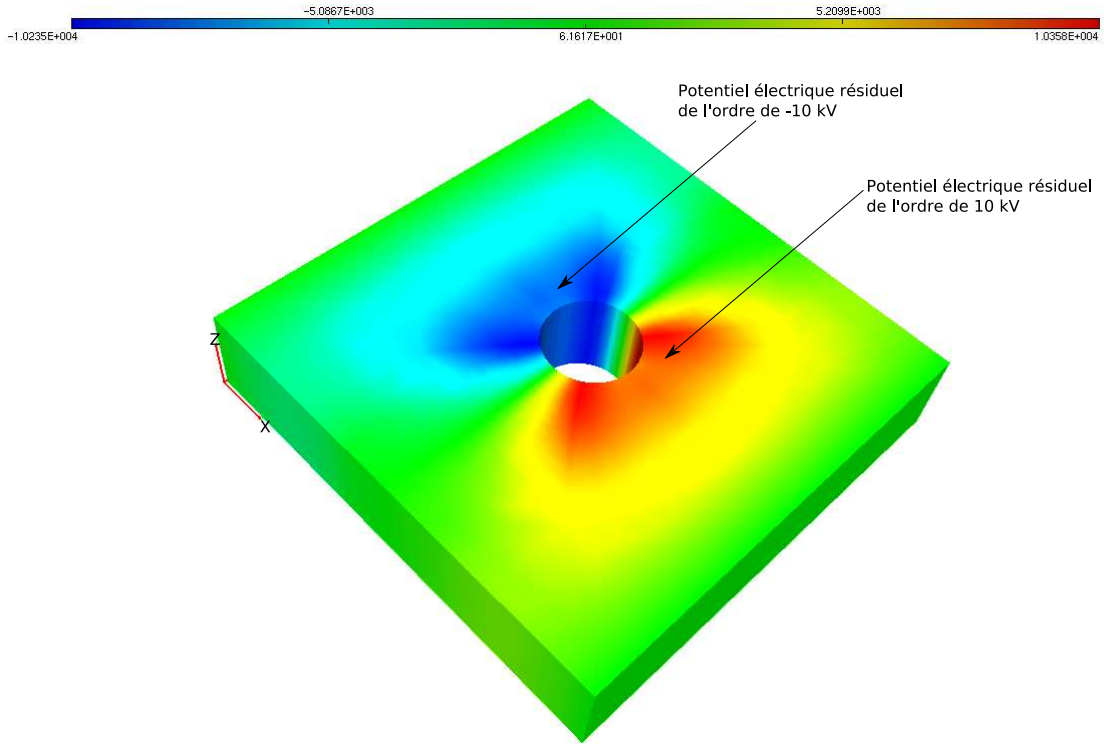


Fig. 4.27 : *Distribution du potentiel électrique à la fin du chargment ($t = 1\,s$).*

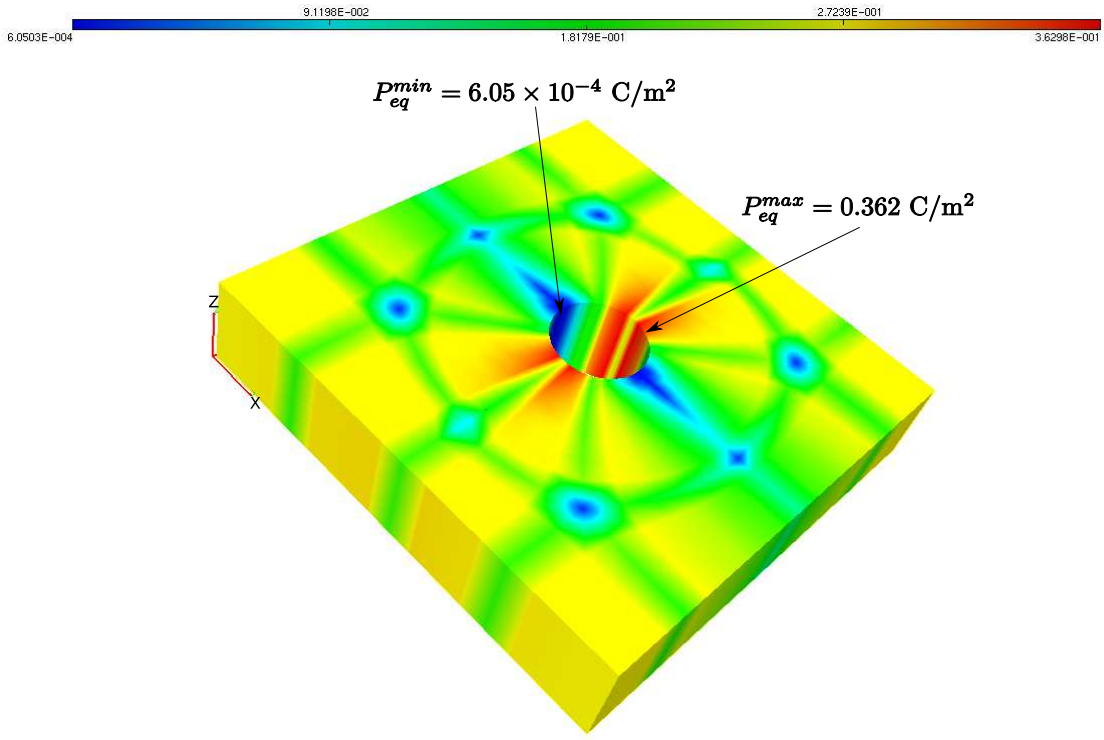


Fig. 4.28 : *Distribution de la polarisation électrique à la fin du chargment ($t = 1\,s$).*

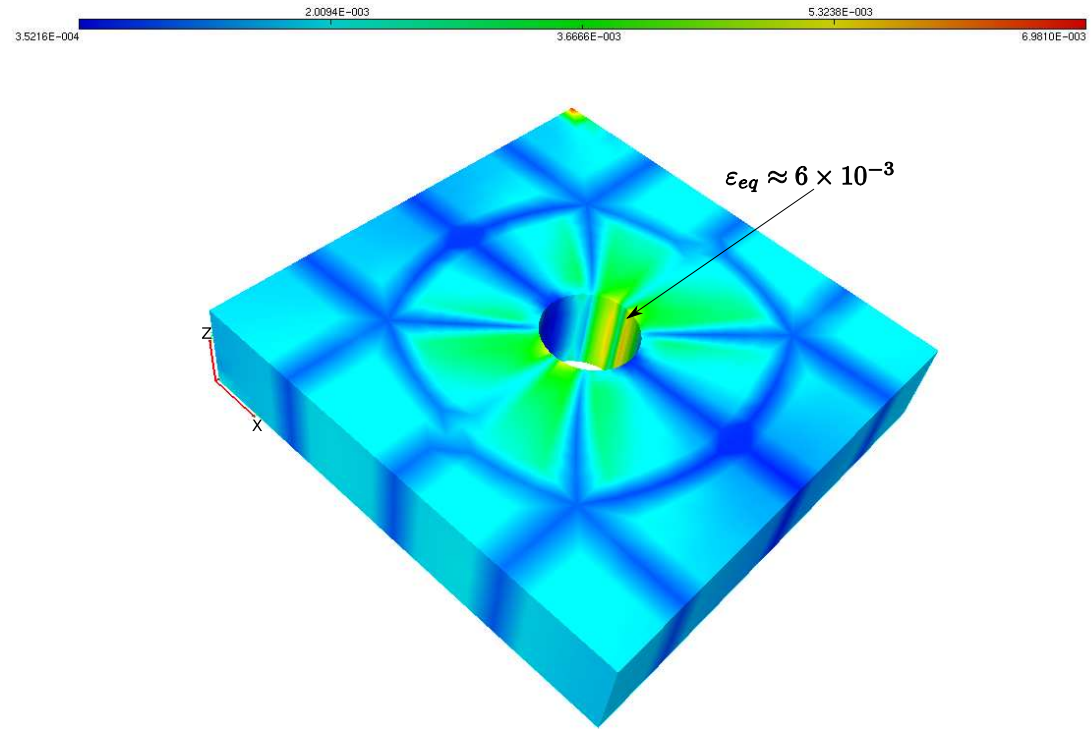


FIG. 4.29 : *Distribution de la déformation mécanique équivalente à la fin du chargment ($t = 1\,s$).*

4.5 Conclusion

Deux éléments finis électromécaniques (H8F et SFR8P) ont été proposés pour l'analyse des structures piézoélectriques linéaires et des structures ferroélectriques et ferroélastiques. L'élément SFR8P est un élément fini basé sur le concept SFR ou rotation d'une fibre spatiale. Dans un premier temps, une version piézoélectrique linéaire de cet élément a été proposée pour améliorer la réponse linéaire de l'élément hexaédrique de premier ordre H8F. Ce dernier élément est couplé avec le modèle ferroélectrique et ferroélastique (intégré implicitement pour réduire le temps de calcul) présenté dans le chapitre 2. Pour tenir compte de l'anisotropie du comportement piézoélectrique, le tenseur des déformations mécaniques et le vecteur champ électrique ont été exprimés dans un système de coordonnées curvilignes. Cette formulation permet d'étudier des structures piézoélectriques de formes quelconques fortement courbées où la définition d'un repère local cylindrique ou sphérique devient très difficile. Quelques cas tests de validation mécanique, piézoélectriques linéaires et ferroélectriques non linéaires ont été proposés pour valider les réponses de SFR8P et H8F.

En traitant les exemples du bimorphe et demi cylindre piézoélectriques, nous avons montré que l'élément SFR8P peut améliorer considérablement la réponse piézoélectrique linéaire de H8F surtout pour les maillages grossiers. L'exemple du bimorphe piézoélectrique a montré que SFR8P est presque insensible à la distorsion du maillage à l'inverse des éléments classiques de premier ordre H8F et C3D8E qui présentent une réponse erronée pour les maillages distordus. Pour l'exemple

du demi cylindre piézoélectrique, SFR8P a donné des résultats meilleurs que ceux de H8F et C3D8E surtout pour les maillages grossiers. Cependant, sa convergence vers la solution de référence (surtout dans le cas de l'actionneur) a été difficile. Ceci montre sans doutes la nécessité d'approfondir la formulation de SFR8P sur le plan fondamental pour qu'il puisse passer la majorité des cas tests électromécaniques.
L'élément H8F a été capable de montrer les distributions hétérogènes des champs électriques et des contraintes mécaniques durant et après le processus de polarisation des tubes ferroélectriques comme rapporté dans [58]. Ces phénomènes fortement non linéaires ne peuvent pas être détectés par l'élément coque ferroélectrique Q4TSF car le champ électrique est supposé constant suivant l'épaisseur. D'autre part, l'élément H8F a passé avec succès le cas test sévère de la plaque ferroélectrique trouée soumise à une différence de potentiel perpendiculaire à la direction du trou. Des concentrations de champs électriques très élevées autour du trou ont été observées durant et après le processus de polarisation. Ces concentrations pourraient constituer une cause directe de la fissuration des céramiques piézoélectriques qui représentent des défauts de fabrication. L'expression du tenseur des déformations mécaniques et du vecteur champ électrique dans le système de coordonnées curvilignes est très pratique spécialement quand des structures courbées sont étudiées (comme le tube ferroélectrique). L'intégration implicite du modèle phénoménologique est plus avantageuse qu'un schéma d'intégration explicite car cette dernière technique est très coûteuse et rend le résultat directement dépendant du nombre d'incréments utilisé.

Conclusion générale

Ce travail de thèse s'inscrit dans une démarche de développement d'outils numériques de dimensionnement d'applications électromécaniques qui tiennent compte des comportements ferroélectrique et ferroélastique non linéaires que présentent les céramiques piézoélectriques lorsqu'elles sont soumises à des chargements électromécaniques de forte intensité. La modélisation de ces comportements non linéaires reste une question complexe et non triviale à cause de l'anisotropie du comportement électromécanique et les phénomènes de saturation de la polarisation électrique et la déformation mécanique. Quelques modèles de comportement phénoménologiques et micromécaniques ont été proposés ces deux dernières décennies pour tenir compte de ces phénomènes non linéaires. Le premier type de modèles (macroscopiques) est plus adapté au calcul de structures dans la mesure où le nombre de variables internes à chaque point d'intégration reste raisonnable. Le temps de calcul et la capacité mémoire sont acceptables comparativement à ce qui serait nécessaire dans le cadre d'une loi de comportement micromécanique non linéaire.

Une loi constitutive ferroélectrique et ferroélastique a été proposée. Deux variables internes, qui sont la polarisation ferroélectrique et la déformation ferroélastique, ont été considérées pour décrire l'histoire du chargement. Deux fonctions de pénalisation ont été proposées pour contrôler les saturations de la polarisation et la déformation rémanentes. Une intégration implicite des équations différentielles a été adoptée. Cette approche implicite est plus intéressante qu'un schéma d'intégration explicite qui nécessite beaucoup plus d'incréments que le premier schéma pour converger vers une solution raisonnable.

La demande croissante des applications piézoélectriques miniaturisées taillées dans des films minces ferroélectriques entraîne le développement d'outils de dimensionnement numériques spéciaux. Ces outils doivent intégrer des lois de comportement non linéaires pour fournir des informations fiables concernant l'état des champs électroélastiques. En l'occurrence, un élément fini coque ferroélectrique a été développé et implémenté dans Abaqus® via la routine utilisateur UEL. Le modèle phénoménologique proposé a été adapté au cas des structures minces en adoptant l'hypothèse des contraintes planes communément utilisée dans les théories des plaques et coques. Il a été supposé que la polarisation rémanente apparaît uniquement suivant l'épaisseur puisque le champ électrique agit, généralement, suivant cette direction dans les structures piézoélectriques minces. Nous avons remarqué que cet élément coque électromécanique peut être utilisé sûrement pour étudier les applications piézoélectriques linéaires de type actionneur dominées par le mode d_{31} comme le tube piézoélectrique. Cependant, l'hypothèse des sections droites,

qui néglige la variation de l'épaisseur des structures minces, ne permet pas de prendre en compte le mode de couplage d_{33} et par conséquent, il a été montré que l'élément coque ne représente pas de manière précise la déformée de la spirale piézoélectrique mince. D'autre part, l'hypothèse d'une variation linéaire du potentiel électrique suivant l'épaisseur (champ électrique constant) ne permet pas de prendre en compte les phénomènes non linéaires qui apparaissent suivant cette direction même pour des structures minces. A titre d'exemple, les distributions hétérogènes des champs électriques et des contraintes mécaniques qui apparaissent suite à la polarisation des tubes ferroélectriques suivant la direction radiale ne peuvent pas être simulées par l'élément coque électromécanique puisque un maillage fin suivant l'épaisseur du tube est demandé dans ce cas.

Toutes ces observations ont motivé le développement d'un élément fini hexaédrique électromécanique (H8F) qui intègre la loi ferroélectrique et ferroélastique tridimensionnelle intégrée implicitement. Le tenseur des déformations mécaniques et le vecteur champ électrique ont été exprimés dans un système de coordonnées curvilignes pour tenir compte de l'anisotropie des comportements ferroélectrique et ferroélastique. Cette dernière formulation est très pratique dans le cas des structures courbées ou de géométrie quelconque et évite de définir un repère local par élément (le même pour tous les points de Gauss) ce qui pourrait engendrer des erreurs surtout pour des maillages non réguliers.

L'élément hexaédrique électromécanique H8F a été capable de montrer les distributions hétérogènes des champs électriques et des contraintes mécaniques durant et après le processus de polarisation des tubes ferroélectriques. De plus, il a passé avec succès le cas test sévère de la plaque ferroélectrique trouée soumise à une différence de potentiel perpendiculaire à la direction du trou. Des concentrations de champs électriques très élevées autour du trou ont été observées durant et après le processus de polarisation.

Une attention particulière a été accordée à un nouveau type d'éléments basé sur le concept SFR (rotation d'une fibre spatiale) développé pour améliorer la précision des éléments finis linéaires classiques (hexaèdre à 8 noeuds dans notre cas). Une version piézoélectrique linéaire baptisée SFR8P a été développée et testée. L'exemple du bimorphe piézoélectrique a montré la valeur ajoutée de cet élément qui s'est avéré pratiquement insensible à la distorsion du maillage à l'inverse des éléments de premier ordre. Cependant, cette première version nécessite sans doutes plus d'approfondissement sur le plan fondamental surtout en ce qui concerne la convergence vers les solutions de références quand le maillage est affiné.

Pour tenir compte des modes de déformation suivant l'épaisseur dans les structures minces (telle que la spirale piézoélectrique) en restant sur des coûts de calcul raisonnables, les théories de coques d'ordre supérieur peuvent être considérées. Les éléments solide-coques, qui offrent la possibilité d'utiliser des lois de comportement tridimensionnelles tout en conservant les interpolations utilisées dans les éléments coques, peuvent être envisagés également.

Enfin, la description du comportement à l'échelle microscopique est envisageable car elle permet de tenir compte de manière plus précise des mécanismes physiques responsables du com-

portement non linéaire. Plus particulièrement, il est possible de modéliser plus efficacement les réorientations ferroélectrique et ferroélastique des domaines.

Annexe A

Comportement ferroélectrique

A.1 Calcul de J_X

Dans le cas d'un comportement ferroélectrique, les variations des résidus $\underline{\underline{R}}^{\sigma}$, $\underline{R}^{D}$, $\underline{R}^{e}$ et R^{f^e} par rapport aux inconnues $\triangle\underline{\underline{\sigma}}$, $\triangle\underline{D}$, $\triangle\underline{P}^e$ et $\triangle\lambda^e$ sont données par :

$$\begin{gathered}
\frac{\partial R^{\sigma}_{ij}}{\partial \triangle \sigma_{pq}} = \delta_{ip}\delta_{jq} \quad ; \quad \frac{\partial R^{\sigma}_{ij}}{\partial \triangle D_p} = 0 \\
\frac{\partial R^{\sigma}_{ij}}{\partial \triangle P^e_m} = C^E_{ijkl}\frac{\partial \varepsilon^e_{kl|n+1}}{\partial \triangle P^e_m} + \frac{\partial e_{kij|n+1}}{\partial \triangle P^e_m}E_{k|n+1} \quad ; \quad \frac{\partial R^{\sigma}_{ij}}{\partial \triangle \lambda^e} = 0
\end{gathered} \tag{A.1}$$

$$\begin{gathered}
\frac{\partial R^{D}_{i}}{\partial \triangle \sigma_{kl}} = 0 \quad ; \quad \frac{\partial R^{D}_{i}}{\partial \triangle D_k} = \delta_{ik} \\
\frac{\partial R^{D}_{i}}{\partial \triangle P^e_m} = -\frac{\partial e_{ikl|n+1}}{\partial \triangle P^e_m}(\varepsilon_{kl|n+1} - \varepsilon^e_{kl|n+1} - \varepsilon^f_{kl|n}) + e_{ikl|n+1}\frac{\partial \varepsilon^e_{kl|n+1}}{\partial \triangle P^e_m} - \delta_{im} \quad ; \quad \frac{\partial R^{D}_{i}}{\partial \triangle \lambda^e} = 0
\end{gathered} \tag{A.2}$$

$$\begin{gathered}
\frac{\partial R^{e}_{i}}{\partial \triangle \sigma_{kl}} = 0 \quad ; \quad \frac{\partial R^{e}_{i}}{\partial \triangle D_k} = 0 \\
\frac{\partial R^{e}_{i}}{\partial \triangle P^e_k} = \delta_{ik} + \frac{\triangle\lambda^e}{\|\underline{E}_{n+1} - \underline{X}^e_{n+1}\|}\frac{\partial X^e_{i|n+1}}{\partial \triangle P^e_k} - \triangle\lambda^e\frac{E_{i|n+1} - X^e_{i|n+1}}{\|\underline{E}_{n+1} - \underline{X}^e_{n+1}\|^3}(E_{l|n+1} - X^e_{l|n+1})\frac{\partial X^e_{l|n+1}}{\partial \triangle P^e_k} \\
\frac{\partial R^{e}_{i}}{\partial \triangle \lambda^e} = -\frac{E_{i|n+1} - X^e_{i|n+1}}{\|\underline{E}_{n+1} - \underline{X}^e_{n+1}\|}
\end{gathered} \tag{A.3}$$

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial R^{f^e}}{\partial \triangle \sigma_{ij}} = 0 \quad ; \quad \frac{\partial R^{f^e}}{\partial \triangle D_i} = 0 \\
&\frac{\partial R^{f^e}}{\partial \triangle P^e_k} = -\frac{1}{\|\underline{E}_{n+1} - \underline{X}^e_{n+1}\|} \times (E_{l|n+1} - X^e_{l|n+1}) \frac{\partial X^e_{l|n+1}}{\partial \triangle P^e_k} \quad ; \quad \frac{\partial R^{f^e}}{\partial \triangle \lambda^e} = 0
\end{aligned} \tag{A.4}$$

Calcul de $\dfrac{\partial e_{kij|n+1}}{\partial \triangle P^e_m}$

Nous rappelons qu'à la fin de l'incrément, le tenseur piézoélectrique direct admet l'expression suivante :

$$\begin{aligned}
d_{ijk|n+1} \;=\; & \frac{\|\underline{P}^r_{n+1}\|}{P^{sat}} \Big[d_{33} e^p_{i|n+1} e^p_{j|n+1} e^p_{k|n+1} + d_{31}(\delta_{jk} - e^p_{j|n+1} e^p_{k|n+1}) e^p_{i|n+1} \\
& + \frac{d_{15}}{2} \big[(\delta_{ij} - e^p_{i|n+1} e^p_{j|n+1}) e^p_{k|n+1} + (\delta_{ik} - e^p_{i|n+1} e^p_{k|n+1}) e^p_{j|n+1} \big] \Big]
\end{aligned} \tag{A.5}$$

avec

$$e^p_{i|n+1} = \frac{P^r_{i|n+1}}{\|\underline{P}^r_{n+1}\|} \quad ; \quad \underline{P}^r_{n+1} = \underline{P}^r_n + \triangle \underline{P}^e \tag{A.6}$$

Nous pouvons montrer que la variation du tenseur piézoélectrique direct par rapport à l'incrément de la polarisation ferroélectrique est donnée par l'expression suivante :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial d_{ijk|n+1}}{\partial \triangle P^e_l} = \; & \frac{P^r_{l|n+1}}{P^{sat} \|\underline{P}^r_{n+1}\|} \Big\{ d_{33} e^p_{i|n+1} e^p_{j|n+1} e^p_{k|n+1} + d_{31}(\delta_{jk} - e^p_{j|n+1} e^p_{k|n+1}) e^p_{i|n+1} \\
& + \frac{d_{15}}{2} \big[(\delta_{ij} - e^p_{i|n+1} e^p_{j|n+1}) e^p_{k|n+1} + (\delta_{ik} - e^p_{i|n+1} e^p_{k|n+1}) e^p_{j|n+1} \big] \Big\} \\
& + \frac{\|\underline{P}^r_{n+1}\|}{P^{sat}} \Big\{ d_{33} \Big[\frac{\partial e^p_{i|n+1}}{\partial \triangle P^e_l} e^p_{j|n+1} e^p_{k|n+1} + e^p_{i|n+1} \frac{\partial e^p_{j|n+1}}{\partial \triangle P^e_l} e^p_{k|n+1} + e^p_{i|n+1} e^p_{j|n+1} \frac{\partial e^p_{k|n+1}}{\partial \triangle P^e_l} \Big] \\
& + d_{31} \Big[- \frac{\partial e^p_{j|n+1}}{\partial \triangle P^e_l} e^p_{k|n+1} - e^p_{j|n+1} \frac{\partial e^p_{k|n+1}}{\partial \triangle P^e_l} \Big] e^p_{i|n+1} + d_{31}(\delta_{jk} - e^p_{j|n+1} e^p_{k|n+1}) \frac{\partial e^p_{i|n+1}}{\partial \triangle P^e_l} \\
& + \frac{d_{15}}{2} \Big[- \frac{\partial e^p_{i|n+1}}{\partial \triangle P^e_l} e^p_{j|n+1} - e^p_{i|n+1} \frac{\partial e^p_{j|n+1}}{\partial \triangle P^e_l} \Big] e^p_{k|n+1} + \frac{d_{15}}{2} (\delta_{ij} - e^p_{i|n+1} e^p_{j|n+1}) \frac{\partial e^p_{k|n+1}}{\partial \triangle P^e_l} \\
& + \frac{d_{15}}{2} \Big[- \frac{\partial e^p_{i|n+1}}{\partial \triangle P^e_l} e^p_{k|n+1} - e^p_{i|n+1} \frac{\partial e^p_{k|n+1}}{\partial \triangle P^e_l} \Big] e^p_{j|n+1} + \frac{d_{15}}{2} (\delta_{ik} - e^p_{i|n+1} e^p_{k|n+1}) \frac{\partial e^p_{j|n+1}}{\partial \triangle P^e_l} \Big\}
\end{aligned} \tag{A.7}$$

avec

$$\frac{\partial e^p_{i|n+1}}{\partial \triangle P^e_l} = \frac{\delta_{il}}{\|\underline{P}^r_{n+1}\|} - \frac{P^r_{i|n+1} P^r_{l|n+1}}{\|\underline{P}^r_{n+1}\|^3} \tag{A.8}$$

La variation du tenseur piézoélectrique inverse par rapport à l'incrément de la polarisation ferroélectrique peut être déduite de l'Équation (A.7) :

$$e_{kij|n+1} = C^E_{ijpq} d_{kpq|n+1} \quad \Longrightarrow \quad \frac{\partial e_{kij|n+1}}{\partial \triangle P^e_l} = C^E_{ijpq} \frac{\partial d_{kpq|n+1}}{\partial \triangle P^e_l} \tag{A.9}$$

Calcul de $\dfrac{\partial \varepsilon^e_{ij|n+1}}{\partial \triangle P^e_k}$

Le tenseur des déformations ferroélectriques à la fin de l'incrément est lié directement à la polarisation ferroélectrique :

$$\underline{\underline{\varepsilon}}^e_{n+1} = \frac{3}{2}\varepsilon^{sat}\frac{||\underline{P}^e_{n+1}||}{P^{sat}}(\underline{e}^p_{n+1} \otimes \underline{e}^p_{n+1} - \frac{1}{3}\underline{\underline{\delta}}) \tag{A.10}$$

Nous en déduisons donc la variation de $\underline{\underline{\varepsilon}}^e_{n+1}$ par rapport à $\triangle \underline{P}^e$:

$$\frac{\partial \varepsilon^e_{ij|n+1}}{\partial \triangle P^e_k} = \frac{3}{2}\frac{\varepsilon^{sat}}{P^{sat}}\left[\frac{P^e_{k|n+1}}{\|\underline{P}^e_{n+1}\|}\big(e^p_{i|n+1}e^p_{j|n+1} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\big) + \|\underline{P}^e_{n+1}\|\big(\frac{\partial e^p_{i|n+1}}{\partial \triangle P^e_k}e^p_{j|n+1} + e^p_{i|n+1}\frac{\partial e^p_{j|n+1}}{\partial \triangle P^e_k}\big)\right] \tag{A.11}$$

Calcul de $\dfrac{\partial X^e_{i|n+1}}{\partial \triangle P^e_k}$

Pour contrôler la saturation de la polarisation rémanente, l'expression suivante du vecteur d'écrouissage ferroélectrique est considérée :

$$\underline{X}^e_{n+1} = \beta \underline{P}^e_{n+1}\Big(1 + g_2(P^r_{eq|n+1})\Big) \tag{A.12}$$

avec

$$g_2(P^r_{eq|n+1}) = \begin{cases} 0 & \text{si} \quad J^e_{n+1} \leq -c^e \\ \frac{P^e_0}{\exp(1)-1}\left[(\frac{J^e_{n+1}}{c^e}+1)\Big(\exp(\frac{J^e_{n+1}}{c^e}+1)-1\Big)\right] & \text{si} \quad J^e_{n+1} > -c^e \end{cases} \quad \text{et} \quad J^e_{n+1} = \frac{P^r_{eq|n+1}}{P^{sat}} - 1 \tag{A.13}$$

La variation de $\underline{X}^e_{n+1}$ par rapport à $\triangle \underline{P}^e$ est donnée par :

$$\frac{\partial X^e_{i|n+1}}{\partial \triangle P^e_k} = \beta\delta_{ik}\Big(1 + g_2(P^r_{eq|n+1})\Big) + \beta P^e_{i|n+1}\frac{\partial g_2}{\partial \triangle P^e_k} \tag{A.14}$$

avec

$$\frac{\partial g_2}{\partial \triangle P^e_k} = \begin{cases} 0 & \text{si} \quad J^e_{n+1} \leq -c^e \\ \frac{P^e_0}{\exp(1)-1}\left[\exp(\frac{J^e_{n+1}}{c^e}+1) - 1 + (\frac{J^e_{n+1}}{c^e}+1)\exp(\frac{J^e_{n+1}}{c^e}+1)\right]\frac{1}{c^e}\frac{\partial J^e_{n+1}}{\partial \triangle P^e_k} & \text{si} \quad J^e_{n+1} > -c^e \end{cases} \tag{A.15}$$

et

$$\frac{\partial J^e_{n+1}}{\partial \triangle P^e_k} = \frac{P^r_{k|n+1}}{P^{sat}||\underline{P}^r_{n+1}||} \tag{A.16}$$

Les systèmes de dérivées (A.1), (A.2), (A.3) et (A.4) permettent de déterminer la matrice jacobienne $[J_X]$:

$$[J_X] = \left[\frac{\partial \underline{F}}{\partial \triangle \underline{X}}\right] =$$

$$\begin{bmatrix}
\frac{\partial R^{\sigma}_{11}}{\partial \triangle \sigma_{11}} & \frac{\partial R^{\sigma}_{11}}{\partial \triangle \sigma_{12}} & \frac{\partial R^{\sigma}_{11}}{\partial \triangle \sigma_{13}} & \cdots & \frac{\partial R^{\sigma}_{11}}{\partial \triangle \sigma_{33}} & 0 & 0 & 0 & \frac{\partial R^{\sigma}_{11}}{\partial \triangle P^e_1} & \frac{\partial R^{\sigma}_{11}}{\partial \triangle P^e_2} & \frac{\partial R^{\sigma}_{11}}{\partial \triangle P^e_3} & 0 \\
\frac{\partial R^{\sigma}_{12}}{\partial \triangle \sigma_{11}} & \frac{\partial R^{\sigma}_{12}}{\partial \triangle \sigma_{12}} & \frac{\partial R^{\sigma}_{12}}{\partial \triangle \sigma_{13}} & \cdots & \frac{\partial R^{\sigma}_{12}}{\partial \triangle \sigma_{33}} & 0 & 0 & 0 & \frac{\partial R^{\sigma}_{12}}{\partial \triangle P^e_1} & \frac{\partial R^{\sigma}_{12}}{\partial \triangle P^e_2} & \frac{\partial R^{\sigma}_{12}}{\partial \triangle P^e_3} & 0 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
\frac{\partial R^{\sigma}_{33}}{\partial \triangle \sigma_{11}} & \frac{\partial R^{\sigma}_{33}}{\partial \triangle \sigma_{12}} & \frac{\partial R^{\sigma}_{33}}{\partial \triangle \sigma_{13}} & \cdots & \frac{\partial R^{\sigma}_{33}}{\partial \triangle \sigma_{33}} & 0 & 0 & 0 & \frac{\partial R^{\sigma}_{33}}{\partial \triangle P^e_1} & \frac{\partial R^{\sigma}_{33}}{\partial \triangle P^e_2} & \frac{\partial R^{\sigma}_{33}}{\partial \triangle P^e_3} & 0 \\
0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & \frac{\partial R^{D}_{1}}{\partial \triangle D_1} & \frac{\partial R^{D}_{1}}{\partial \triangle D_2} & \frac{\partial R^{D}_{1}}{\partial \triangle D_3} & \frac{\partial R^{D}_{1}}{\partial \triangle P^e_1} & \frac{\partial R^{D}_{1}}{\partial \triangle P^e_2} & \frac{\partial R^{D}_{1}}{\partial \triangle P^e_3} & 0 \\
0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & \frac{\partial R^{D}_{2}}{\partial \triangle D_1} & \frac{\partial R^{D}_{2}}{\partial \triangle D_2} & \frac{\partial R^{D}_{2}}{\partial \triangle D_3} & \frac{\partial R^{D}_{2}}{\partial \triangle P^e_1} & \frac{\partial R^{D}_{2}}{\partial \triangle P^e_2} & \frac{\partial R^{D}_{2}}{\partial \triangle P^e_3} & 0 \\
0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & \frac{\partial R^{D}_{3}}{\partial \triangle D_1} & \frac{\partial R^{D}_{3}}{\partial \triangle D_2} & \frac{\partial R^{D}_{3}}{\partial \triangle D_3} & \frac{\partial R^{D}_{3}}{\partial \triangle P^e_1} & \frac{\partial R^{D}_{3}}{\partial \triangle P^e_2} & \frac{\partial R^{D}_{3}}{\partial \triangle P^e_3} & 0 \\
0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\partial R^{e}_{1}}{\partial \triangle P^e_1} & \frac{\partial R^{e}_{1}}{\partial \triangle P^e_2} & \frac{\partial R^{e}_{1}}{\partial \triangle P^e_3} & \frac{\partial R^{e}_{1}}{\partial \triangle \lambda^e} \\
0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\partial R^{e}_{2}}{\partial \triangle P^e_1} & \frac{\partial R^{e}_{2}}{\partial \triangle P^e_2} & \frac{\partial R^{e}_{2}}{\partial \triangle P^e_3} & \frac{\partial R^{e}_{2}}{\partial \triangle \lambda^e} \\
0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\partial R^{e}_{3}}{\partial \triangle P^e_1} & \frac{\partial R^{e}_{3}}{\partial \triangle P^e_2} & \frac{\partial R^{e}_{3}}{\partial \triangle P^e_3} & \frac{\partial R^{e}_{3}}{\partial \triangle \lambda^e} \\
0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\partial R^{f^e}}{\partial \triangle P^e_1} & \frac{\partial R^{f^e}}{\partial \triangle P^e_2} & \frac{\partial R^{f^e}}{\partial \triangle P^e_3} & 0
\end{bmatrix} \tag{A.17}$$

A.2 Calcul de J_Y

Les variations des résidus $\underline{\underline{R}}^{\sigma}$, $\underline{R}^{D}$, $\underline{R}^{e}$ et R^{f^e} par rapport aux variables de pilotage $\triangle \underline{\underline{\varepsilon}}$ et $\triangle \underline{E}$ sont données par :

$$\frac{\partial R^{\sigma}_{ij}}{\partial \triangle \varepsilon_{pq}} = -C^{E}_{ijpq} \quad ; \quad \frac{\partial R^{\sigma}_{ij}}{\partial \triangle E_p} = e_{pij|n+1} \tag{A.18}$$

$$\frac{\partial R^{D}_{i}}{\partial \triangle \varepsilon_{pq}} = -e_{ipq|n+1} \quad ; \quad \frac{\partial R^{D}_{i}}{\partial \triangle E_p} = -\epsilon^{\varepsilon}_{ip} \tag{A.19}$$

$$\frac{\partial R^{e}_{i}}{\partial \triangle \varepsilon_{pq}} = 0$$

$$\frac{\partial R^{e}_{i}}{\partial \triangle E_p} = -\frac{\triangle \lambda^e}{\|\underline{E}_{n+1} - \underline{X}^{e}_{n+1}\|} \times \delta_{ip} + \frac{\triangle \lambda^e}{\|\underline{E}_{n+1} - \underline{X}^{e}_{n+1}\|^3}(E_{i|n+1} - X^{e}_{i|n+1})(E_{p|n+1} - X^{e}_{p|n+1}) \tag{A.20}$$

$$\frac{\partial R^{f^e}}{\partial \triangle \varepsilon_{pq}} = 0 \quad ; \quad \frac{\partial R^{f^e}}{\partial \triangle E_p} = \frac{E_{p|n+1} - X^e_{p|n+1}}{\|\underline{E}_{n+1} - \underline{X}^e_{n+1}\|} \tag{A.21}$$

En utilisant les dérivées (A.18), (A.19), (A.20) et (A.21), nous pouvons constituer la matrice jacobienne $[J_Y]$ comme suit :

$$[J_Y] = \left[\frac{\partial \underline{F}}{\partial \triangle \underline{Y}}\right] = \begin{bmatrix}
\frac{\partial R^\sigma_{11}}{\partial \triangle \varepsilon_{11}} & \frac{\partial R^\sigma_{11}}{\partial \triangle \varepsilon_{12}} & \frac{\partial R^\sigma_{11}}{\partial \triangle \varepsilon_{13}} & \cdots & \frac{\partial R^\sigma_{11}}{\partial \triangle \varepsilon_{33}} & \frac{\partial R^\sigma_{11}}{\partial \triangle E_1} & \frac{\partial R^\sigma_{11}}{\partial \triangle E_2} & \frac{\partial R^\sigma_{11}}{\partial \triangle E_3} \\
\frac{\partial R^\sigma_{12}}{\partial \triangle \varepsilon_{11}} & \frac{\partial R^\sigma_{12}}{\partial \triangle \varepsilon_{12}} & \frac{\partial R^\sigma_{12}}{\partial \triangle \varepsilon_{13}} & \cdots & \frac{\partial R^\sigma_{12}}{\partial \triangle \varepsilon_{33}} & \frac{\partial R^\sigma_{12}}{\partial \triangle E_1} & \frac{\partial R^\sigma_{12}}{\partial \triangle E_2} & \frac{\partial R^\sigma_{12}}{\partial \triangle E_3} \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
\frac{\partial R^\sigma_{33}}{\partial \triangle \varepsilon_{11}} & \frac{\partial R^\sigma_{33}}{\partial \triangle \varepsilon_{12}} & \frac{\partial R^\sigma_{33}}{\partial \triangle \varepsilon_{13}} & \cdots & \frac{\partial R^\sigma_{33}}{\partial \triangle \varepsilon_{33}} & \frac{\partial R^\sigma_{33}}{\partial \triangle E_1} & \frac{\partial R^\sigma_{33}}{\partial \triangle E_2} & \frac{\partial R^\sigma_{33}}{\partial \triangle E_3} \\
\frac{\partial R^D_1}{\partial \triangle \varepsilon_{11}} & \frac{\partial R^D_1}{\partial \triangle \varepsilon_{12}} & \frac{\partial R^D_1}{\partial \triangle \varepsilon_{13}} & \cdots & \frac{\partial R^D_1}{\partial \triangle \varepsilon_{33}} & \frac{\partial R^D_1}{\partial \triangle E_1} & \frac{\partial R^D_1}{\partial \triangle E_2} & \frac{\partial R^D_1}{\partial \triangle E_3} \\
\frac{\partial R^D_2}{\partial \triangle \varepsilon_{11}} & \frac{\partial R^D_2}{\partial \triangle \varepsilon_{12}} & \frac{\partial R^D_2}{\partial \triangle \varepsilon_{13}} & \cdots & \frac{\partial R^D_2}{\partial \triangle \varepsilon_{33}} & \frac{\partial R^D_2}{\partial \triangle E_1} & \frac{\partial R^D_2}{\partial \triangle E_2} & \frac{\partial R^D_2}{\partial \triangle E_3} \\
\frac{\partial R^D_3}{\partial \triangle \varepsilon_{11}} & \frac{\partial R^D_3}{\partial \triangle \varepsilon_{12}} & \frac{\partial R^D_3}{\partial \triangle \varepsilon_{13}} & \cdots & \frac{\partial R^D_3}{\partial \triangle \varepsilon_{33}} & \frac{\partial R^D_3}{\partial \triangle E_1} & \frac{\partial R^D_3}{\partial \triangle E_2} & \frac{\partial R^D_3}{\partial \triangle E_3} \\
0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & \frac{\partial R^e_1}{\partial \triangle E_1} & \frac{\partial R^e_1}{\partial \triangle E_2} & \frac{\partial R^e_1}{\partial \triangle E_3} \\
0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & \frac{\partial R^e_2}{\partial \triangle E_1} & \frac{\partial R^e_2}{\partial \triangle E_2} & \frac{\partial R^e_2}{\partial \triangle E_3} \\
0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & \frac{\partial R^e_3}{\partial \triangle E_1} & \frac{\partial R^e_3}{\partial \triangle E_2} & \frac{\partial R^e_3}{\partial \triangle E_3} \\
0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & \frac{\partial R^{f^e}}{\partial \triangle E_1} & \frac{\partial R^{f^e}}{\partial \triangle E_2} & \frac{\partial R^{f^e}}{\partial \triangle E_3}
\end{bmatrix} \tag{A.22}$$

Annexe B

Comportement ferroélastique

B.1 Calcul de J_X

Dans le cas d'un comportement ferroélastique, les variations des résidus $\underline{\underline{R}}^{\sigma}$, $\underline{R}^{D}$, $\underline{\underline{R}}^{f}$ et $R^{f^{\sigma}}$ par rapport aux inconnues $\triangle\underline{\underline{\sigma}}$, $\triangle\underline{D}$, $\triangle\underline{\underline{\varepsilon}}^{f}$ et $\triangle\lambda^{\sigma}$ sont données par :

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial R^{\sigma}_{ij}}{\partial\triangle\sigma_{pq}} = \delta_{ip}\delta_{jq} + \frac{\partial e_{kij|n+1}}{\partial\triangle\sigma_{pq}}E_{k|n+1} \quad ; \quad \frac{\partial R^{\sigma}_{ij}}{\partial\triangle D_p} = 0 \\
&\frac{\partial R^{\sigma}_{ij}}{\partial\triangle\varepsilon^{f}_{pq}} = C^{E}_{ijpq} + \frac{\partial e_{kij|n+1}}{\partial\triangle\varepsilon^{f}_{pq}}E_{k|n+1} \quad ; \quad \frac{\partial R^{\sigma}_{ij}}{\partial\triangle\lambda^{\sigma}} = 0
\end{aligned} \tag{B.1}$$

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial R^{D}_{i}}{\partial\triangle\sigma_{pq}} = -\frac{\partial e_{ikl|n+1}}{\partial\triangle\sigma_{pq}}(\varepsilon_{kl|n+1} - \varepsilon^{e}_{kl|n} - \varepsilon^{f}_{kl|n+1}) - \frac{\partial\triangle P^{\sigma}_{i}}{\partial\triangle\sigma_{pq}} \quad ; \quad \frac{\partial R^{D}_{i}}{\partial\triangle D_p} = \delta_{ip} \\
&\frac{\partial R^{D}_{i}}{\partial\triangle\varepsilon^{f}_{pq}} = -\frac{\partial e_{ikl|n+1}}{\partial\triangle\varepsilon^{f}_{pq}}(\varepsilon_{kl|n+1} - \varepsilon^{e}_{kl|n} - \varepsilon^{f}_{kl|n+1}) + e_{ipq|n+1} - \frac{\partial\triangle P^{\sigma}_{i}}{\partial\triangle\varepsilon^{f}_{pq}} \quad ; \quad \frac{\partial R^{D}_{i}}{\partial\triangle\lambda^{\sigma}} = 0
\end{aligned} \tag{B.2}$$

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial R^{f}_{ij}}{\partial\triangle\sigma_{pq}} = -\sqrt{\frac{3}{2}}\frac{\triangle\lambda^{\sigma}}{\|\underline{\underline{s}}_{n+1} - \underline{\underline{X}}^{\sigma}_{n+1}\|} \times \frac{\partial s_{ij|n+1}}{\partial\triangle\sigma_{pq}} + \sqrt{\tfrac{3}{2}}\triangle\lambda^{\sigma}\frac{s_{ij|n+1} - X^{\sigma}_{ij|n+1}}{\|\underline{\underline{s}}_{n+1} - \underline{\underline{X}}^{\sigma}_{n+1}\|^{3}} \times (s_{kl|n+1} - X^{\sigma}_{kl|n+1})\frac{\partial s_{kl|n+1}}{\partial\triangle\sigma_{pq}} \\
&\frac{\partial R^{f}_{ij}}{\partial\triangle\varepsilon^{f}_{pq}} = \delta_{ip}\delta_{jq} + \sqrt{\tfrac{3}{2}}\frac{\triangle\lambda^{\sigma}}{\|\underline{\underline{s}}_{n+1} - \underline{\underline{X}}^{\sigma}_{n+1}\|} \times \frac{\partial X^{\sigma}_{ij|n+1}}{\partial\triangle\varepsilon^{f}_{pq}} - \sqrt{\tfrac{3}{2}}\triangle\lambda^{\sigma}\frac{s_{ij|n+1} - X^{\sigma}_{ij|n+1}}{\|\underline{\underline{s}}_{n+1} - \underline{\underline{X}}^{\sigma}_{n+1}\|^{3}} \times (s_{kl|n+1} - X^{\sigma}_{kl|n+1})\frac{\partial X^{\sigma}_{kl|n+1}}{\partial\triangle\varepsilon^{f}_{pq}} \\
&\frac{\partial R^{f}_{ij}}{\partial\triangle D_p} = 0 \quad ; \quad \frac{\partial R^{f}_{ij}}{\partial\triangle\lambda^{\sigma}} = -\sqrt{\tfrac{3}{2}}\,\frac{s_{ij|n+1} - X^{\sigma}_{ij|n+1}}{\|\underline{\underline{s}}_{n+1} - \underline{\underline{X}}^{\sigma}_{n+1}\|}
\end{aligned} \tag{B.3}$$

$$\frac{\partial R^{f^\sigma}}{\partial \triangle \sigma_{pq}} = \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{1}{\|\underline{\underline{s}}_{n+1} - \underline{\underline{X}}^{\sigma}_{n+1}\|} \times (s_{kl|n+1} - X^{\sigma}_{kl|n+1}) \frac{\partial s_{kl|n+1}}{\partial \triangle \sigma_{pq}} - \frac{\partial \hat{\sigma}_{c|n+1}}{\partial \triangle \sigma_{pq}} \quad ; \quad \frac{\partial R^{f^\sigma}}{\partial \triangle D_p} = 0$$
$$\frac{\partial R^{f^\sigma}}{\partial \triangle \varepsilon^{f}_{pq}} = -\sqrt{\frac{3}{2}} \frac{1}{\|\underline{\underline{s}}_{n+1} - \underline{\underline{X}}^{\sigma}_{n+1}\|} \times (s_{kl|n+1} - X^{\sigma}_{kl|n+1}) \frac{\partial X^{\sigma}_{kl|n+1}}{\partial \triangle \varepsilon^{f}_{pq}} \quad ; \quad \frac{\partial R^{f^\sigma}}{\partial \triangle \lambda^{\sigma}} = 0 \tag{B.4}$$

La variation du tenseur déviateur des contraintes $\underline{\underline{s}}_{n+1}$ par rapport $\triangle \underline{\underline{\sigma}}$ est donnée par l'expression suivante :

$$\frac{\partial s_{ij|n+1}}{\partial \triangle \sigma_{pq}} = \delta_{ip}\delta_{jq} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\delta_{pq} \tag{B.5}$$

Calcul de $\dfrac{\partial \triangle P^{\sigma}_{i}}{\partial \triangle \varepsilon^{f}_{kl}}$ et $\dfrac{\partial \triangle P^{\sigma}_{i}}{\partial \triangle \sigma_{kl}}$

Nous rappelons que l'incrément de la polarisation ferroélastique est directement lié l'incrément de la déformation ferroélastique comme suit :

$$\triangle \underline{P}^{\sigma} = \tau \frac{P^{sat}}{\varepsilon^{sat}} \triangle \underline{\underline{\varepsilon}}^{f} \cdot \underline{e}^{p}_{n} \times h\left(-\frac{\underline{e}^{p}_{n} \cdot \underline{\underline{\sigma}}_{n+1} \cdot \underline{e}^{p}_{n}}{\sigma_c}\right) \tag{B.6}$$

Nous pouvons donc en déduire les variation de $\triangle \underline{P}^{\sigma}$ par rapport à $\triangle \underline{\underline{\sigma}}$ et $\triangle \underline{\underline{\varepsilon}}^{f}$:

$$\frac{\partial \triangle P^{\sigma}_{i}}{\partial \triangle \varepsilon^{f}_{rs}} = \tau \frac{P^{sat}}{\varepsilon^{sat}} \delta_{ir} e^{p}_{s|n} \times h\left(-\frac{e^{p}_{k|n} e^{p}_{l|n} \sigma_{kl|n+1}}{\sigma_c}\right) \tag{B.7}$$

$$\frac{\partial \triangle P^{\sigma}_{i}}{\partial \triangle \sigma_{rs}} = \tau \frac{P^{sat}}{\varepsilon^{sat}} \triangle \varepsilon^{f}_{ij} e^{p}_{j|n} \times \Big[-\frac{e^{p}_{r|n} e^{p}_{s|n}}{\sigma_c} \times \frac{k}{2\cosh^2(-\frac{k}{\sigma_c} e^{p}_{k|n} e^{p}_{l|n} \sigma_{kl|n+1})} \Big] \tag{B.8}$$

Calcul de $\dfrac{\partial e_{kij|n+1}}{\partial \triangle \varepsilon^{f}_{pq}}$ et $\dfrac{\partial e_{kij|n+1}}{\partial \triangle \sigma_{pq}}$

Le tenseur piézoélectrique direct est donnée par l'expression suivante ($\underline{e}^{p}_{n+1} = \underline{e}^{p}_{n}$ et $\triangle \underline{P}^{e} = 0$) :

$$\begin{aligned} d_{ijk|n+1} = \; & \frac{\|\underline{P}^{r}_{n} + \triangle \underline{P}^{\sigma}\|}{P^{sat}} \Bigg\{ d_{33} e^{p}_{i|n} e^{p}_{j|n} e^{p}_{k|n} + d_{31}(\delta_{jk} - e^{p}_{j|n} e^{p}_{k|n}) e^{p}_{i|n} \\ & + \frac{d_{15}}{2} \big[(\delta_{ij} - e^{p}_{i|n} e^{p}_{j|n}) e^{p}_{k|n} + (\delta_{ik} - e^{p}_{i|n} e^{p}_{k|n}) e^{p}_{j|n} \big] \Bigg\} \end{aligned} \tag{B.9}$$

Les variations de $\underline{\underline{d}}_{n+1}$ par rapport $\triangle \underline{\underline{\sigma}}$ et $\triangle \underline{\underline{\varepsilon}}^{f}$ font intervenir les variations de la polarisation ferroélastique par rapport aux incréments de la contrainte et de la déformation ferroélastique :

$$\begin{aligned} \frac{\partial d_{ijk|n+1}}{\partial \triangle \sigma_{pq}} = \; & \frac{1}{P^{sat} \|\underline{P}^{r}_{n+1}\|} \times P^{r}_{m|n+1} \frac{\partial \triangle P^{\sigma}_{m}}{\partial \triangle \sigma_{pq}} \Bigg\{ d_{33} e^{p}_{i|n} e^{p}_{j|n} e^{p}_{k|n} + d_{31}(\delta_{jk} - e^{p}_{j|n} e^{p}_{k|n}) e^{p}_{i|n} \\ & + \frac{d_{15}}{2} \big[(\delta_{ij} - e^{p}_{i|n} e^{p}_{j|n}) e^{p}_{k|n} + (\delta_{ik} - e^{p}_{i|n} e^{p}_{k|n}) e^{p}_{j|n} \big] \Bigg\} \end{aligned} \tag{B.10}$$

$$\frac{\partial d_{ijk|n+1}}{\partial \triangle \varepsilon^f_{pq}} = \frac{1}{P^{sat}\|\underline{P}^r_{n+1}\|} \times P^r_{m|n+1} \frac{\partial \triangle P^\sigma_m}{\partial \triangle \varepsilon^f_{pq}} \Bigg\{ d_{33} e^p_{i|n} e^p_{j|n} e^p_{k|n} + d_{31}(\delta_{jk} - e^p_{j|n} e^p_{k|n}) e^p_{i|n} + \frac{d_{15}}{2}\left[(\delta_{ij} - e^p_{i|n} e^p_{j|n}) e^p_{k|n} + (\delta_{ik} - e^p_{i|n} e^p_{k|n}) e^p_{j|n}\right] \Bigg\} \tag{B.11}$$

En utilisant la relation (2.4) entre les tenseurs piézoélectriques direct et inverse, les variations de $\underline{\underline{\underline{e}}}_{n+1}$ par rapport aux incréments de la contrainte et de la déformation ferroélastique peuvent être déterminées :

$$e_{kij|n+1} = C^E_{ijrs} d_{krs|n+1} \quad \Longrightarrow \quad \frac{\partial e_{kij|n+1}}{\partial \triangle \sigma_{pq}} = C^E_{ijrs} \frac{\partial d_{krs|n+1}}{\partial \triangle \sigma_{pq}} \quad \text{et} \quad \frac{\partial e_{kij|n+1}}{\partial \triangle \varepsilon^f_{pq}} = C^E_{ijrs} \frac{\partial d_{krs|n+1}}{\partial \triangle \varepsilon^f_{pq}} \tag{B.12}$$

Calcul de $\dfrac{\partial X^\sigma_{ij|n+1}}{\partial \triangle \varepsilon^f_{pq}}$

Pour contrôler la saturation de la déformation rémanente, l'expression suivante du tenseur d'écrouissage ferroélastique est considérée :

$$\underline{X}^\sigma_{n+1} = \gamma \underline{\underline{\varepsilon}}^f_{n+1} \Big(1 + g_1(\varepsilon^r_{eq|n+1})\Big) \tag{B.13}$$

avec

$$g_1(\varepsilon^r_{eq|n+1}) = \begin{cases} 0 & \text{si} \quad J^s_{n+1} \le -c^s \\ \frac{P^s_0}{\exp(1)-1}\left[(\frac{J^s_{n+1}}{c^s}+1)\Big(\exp(\frac{J^s_{n+1}}{c^s}+1)-1\Big)\right] & \text{si} \quad J^s_{n+1} > -c^s \end{cases} \quad \text{et} \quad J^s_{n+1} = \frac{\varepsilon^r_{eq|n+1}}{P^{sat}} - 1 \tag{B.14}$$

La variation de $\underline{\underline{\underline{X}}}^\sigma_{n+1}$ par rapport à $\triangle \underline{\underline{\varepsilon}}^f$ est donnée par :

$$\frac{\partial X^\sigma_{ij|n+1}}{\partial \triangle \varepsilon^f_{pq}} = \gamma \delta_{ip} \delta_{jq} \Big(1 + g_1(\varepsilon^r_{eq|n+1})\Big) + \gamma \varepsilon^f_{ij|n+1} \frac{\partial g_1}{\partial \triangle \varepsilon^f_{pq}} \tag{B.15}$$

avec

$$\frac{\partial g_1}{\partial \triangle \varepsilon^f_{pq}} = \begin{cases} 0 & \text{si} \quad J^s_{n+1} \le -c^s \\ \frac{P^s_0}{\exp(1)-1}\left[\exp(\frac{J^s_{n+1}}{c^s}+1) - 1 + (\frac{J^s_{n+1}}{c^s}+1)\exp(\frac{J^s_{n+1}}{c^s}+1)\right]\frac{1}{c^s}\frac{\partial J^s_{n+1}}{\partial \triangle \varepsilon^f_{pq}} & \text{si} \quad J^s_{n+1} > -c^s \end{cases} \tag{B.16}$$

et

$$\frac{\partial J^s_{n+1}}{\partial \triangle \varepsilon^f_{pq}} = \frac{\sqrt{2/3}}{\varepsilon^{sat}} \frac{\varepsilon^r_{pq|n+1}}{\|\underline{\underline{\varepsilon}}^r_{n+1}\|} \tag{B.17}$$

Calcul de $\dfrac{\partial \hat{\sigma}_{c|n+1}}{\partial \triangle \sigma_{pq}}$

Nous rappelons ici la relation qui lie la contrainte coercitive à la fin de l'incrément $\hat{\sigma}_{c|n+1}$ au champ électrique et à la contrainte mécanique :

$$\hat{\sigma}_{c|n+1} = \Big\langle \sigma_c + \delta\, \underline{E}_{n+1} \cdot \underline{e}^p_n \times h(-\frac{\underline{e}^p_n \cdot \underline{\underline{\sigma}}_{n+1} \cdot \underline{e}^p_n}{\sigma_c}) \Big\rangle \tag{B.18}$$

En remarquant que $< x > \approx x\, h(x)$, la variation de la contrainte coercitive par rapport à l'incrément de la contrainte mécanique peut être écrite donc sous cette forme :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \hat{\sigma}_{c|n+1}}{\partial \triangle \sigma_{rs}} \;=\; & \Big[-\delta E_{i|n+1} e^p_{i|n} \times \frac{e^p_{r|n} e^p_{s|n}}{\sigma_c} \times \frac{k}{2\cosh^2(-\frac{k}{\sigma_c} e^p_{k|n} e^p_{l|n} \sigma_{kl|n+1})} \Big] \times \\
& h\Big(\sigma_c + \delta E_{i|n+1} e^p_{i|n} \times h(-\frac{e^p_{k|n} e^p_{l|n} \sigma_{kl|n+1}}{\sigma_c})\Big) \\
& + \Big[\sigma_c + \delta E_{i|n+1} e^p_{i|n} \times h(-\frac{e^p_{k|n} e^p_{l|n} \sigma_{kl|n+1}}{\sigma_c})\Big] \times \\
& \Big[-\delta E_{i|n+1} e^p_{i|n} \times \frac{e^p_{r|n} e^p_{s|n}}{\sigma_c} \times \frac{k}{2\cosh^2(-\frac{k}{\sigma_c} e^p_{k|n} e^p_{l|n} \sigma_{kl|n+1})} \Big] \times \\
& \frac{k}{2\cosh^2\Big(k\sigma_c + \delta k E_{i|n+1} e^p_{i|n} \times h(-\frac{e^p_{k|n} e^p_{l|n} \sigma_{kl|n+1}}{\sigma_c})\Big)}
\end{aligned} \tag{B.19}$$

Les systèmes de dérivées (B.1), (B.2), (B.3) et (B.4) permettent de déterminer la matrice jacobienne $[J_X]$:

$$[J_X] = \Big[\frac{\partial \underline{F}}{\partial \triangle \underline{X}}\Big] =$$

$$\begin{bmatrix}
\frac{\partial R^\sigma_{11}}{\partial \triangle \sigma_{11}} & \frac{\partial R^\sigma_{11}}{\partial \triangle \sigma_{12}} & \cdots & \frac{\partial R^\sigma_{11}}{\partial \triangle \sigma_{33}} & 0 & 0 & 0 & \frac{\partial R^\sigma_{11}}{\partial \triangle \varepsilon^f_{11}} & \frac{\partial R^\sigma_{11}}{\partial \triangle \varepsilon^f_{12}} & \cdots & \frac{\partial R^\sigma_{11}}{\partial \triangle \varepsilon^f_{33}} & 0 \\
\frac{\partial R^\sigma_{12}}{\partial \triangle \sigma_{11}} & \frac{\partial R^\sigma_{12}}{\partial \triangle \sigma_{12}} & \cdots & \frac{\partial R^\sigma_{12}}{\partial \triangle \sigma_{33}} & 0 & 0 & 0 & \frac{\partial R^\sigma_{12}}{\partial \triangle \varepsilon^f_{11}} & \frac{\partial R^\sigma_{12}}{\partial \triangle \varepsilon^f_{12}} & \cdots & \frac{\partial R^\sigma_{12}}{\partial \triangle \varepsilon^f_{33}} & 0 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
\frac{\partial R^\sigma_{33}}{\partial \triangle \sigma_{11}} & \frac{\partial R^\sigma_{33}}{\partial \triangle \sigma_{12}} & \cdots & \frac{\partial R^\sigma_{33}}{\partial \triangle \sigma_{33}} & 0 & 0 & 0 & \frac{\partial R^\sigma_{33}}{\partial \triangle \varepsilon^f_{11}} & \frac{\partial R^\sigma_{33}}{\partial \triangle \varepsilon^f_{12}} & \cdots & \frac{\partial R^\sigma_{33}}{\partial \triangle \varepsilon^f_{33}} & 0 \\
\frac{\partial R^D_1}{\partial \triangle \sigma_{11}} & \frac{\partial R^D_1}{\partial \triangle \sigma_{12}} & \cdots & \frac{\partial R^D_1}{\partial \triangle \sigma_{33}} & \frac{\partial R^D_1}{\partial \triangle D_1} & \frac{\partial R^D_1}{\partial \triangle D_2} & \frac{\partial R^D_1}{\partial \triangle D_3} & \frac{\partial R^D_1}{\partial \triangle \varepsilon^f_{11}} & \frac{\partial R^D_1}{\partial \triangle \varepsilon^f_{12}} & \cdots & \frac{\partial R^D_1}{\partial \triangle \varepsilon^f_{33}} & 0 \\
\frac{\partial R^D_2}{\partial \triangle \sigma_{11}} & \frac{\partial R^D_2}{\partial \triangle \sigma_{12}} & \cdots & \frac{\partial R^D_2}{\partial \triangle \sigma_{33}} & \frac{\partial R^D_2}{\partial \triangle D_1} & \frac{\partial R^D_2}{\partial \triangle D_2} & \frac{\partial R^D_2}{\partial \triangle D_3} & \frac{\partial R^D_2}{\partial \triangle \varepsilon^f_{11}} & \frac{\partial R^D_2}{\partial \triangle \varepsilon^f_{12}} & \cdots & \frac{\partial R^D_2}{\partial \triangle \varepsilon^f_{33}} & 0 \\
\frac{\partial R^D_3}{\partial \triangle \sigma_{11}} & \frac{\partial R^D_3}{\partial \triangle \sigma_{12}} & \cdots & \frac{\partial R^D_3}{\partial \triangle \sigma_{33}} & \frac{\partial R^D_3}{\partial \triangle D_1} & \frac{\partial R^D_3}{\partial \triangle D_2} & \frac{\partial R^D_3}{\partial \triangle D_3} & \frac{\partial R^D_3}{\partial \triangle \varepsilon^f_{11}} & \frac{\partial R^D_3}{\partial \triangle \varepsilon^f_{12}} & \cdots & \frac{\partial R^D_3}{\partial \triangle \varepsilon^f_{33}} & 0 \\
\frac{\partial R^f_{11}}{\partial \triangle \sigma_{11}} & \frac{\partial R^f_{11}}{\partial \triangle \sigma_{12}} & \cdots & \frac{\partial R^f_{11}}{\partial \triangle \sigma_{33}} & 0 & 0 & 0 & \frac{\partial R^f_{11}}{\partial \triangle \varepsilon^f_{11}} & \frac{\partial R^f_{11}}{\partial \triangle \varepsilon^f_{12}} & \cdots & \frac{\partial R^f_{11}}{\partial \triangle \varepsilon^f_{33}} & \frac{\partial R^f_{11}}{\partial \triangle \lambda^\sigma} \\
\frac{\partial R^f_{12}}{\partial \triangle \sigma_{11}} & \frac{\partial R^f_{12}}{\partial \triangle \sigma_{12}} & \cdots & \frac{\partial R^f_{12}}{\partial \triangle \sigma_{33}} & 0 & 0 & 0 & \frac{\partial R^f_{12}}{\partial \triangle \varepsilon^f_{11}} & \frac{\partial R^f_{12}}{\partial \triangle \varepsilon^f_{12}} & \cdots & \frac{\partial R^f_{12}}{\partial \triangle \varepsilon^f_{33}} & \frac{\partial R^f_{12}}{\partial \triangle \lambda^\sigma} \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
\frac{\partial R^f_{33}}{\partial \triangle \sigma_{11}} & \frac{\partial R^f_{33}}{\partial \triangle \sigma_{12}} & \cdots & \frac{\partial R^f_{33}}{\partial \triangle \sigma_{33}} & 0 & 0 & 0 & \frac{\partial R^f_{33}}{\partial \triangle \varepsilon^f_{11}} & \frac{\partial R^f_{33}}{\partial \triangle \varepsilon^f_{12}} & \cdots & \frac{\partial R^f_{33}}{\partial \triangle \varepsilon^f_{33}} & \frac{\partial R^f_{33}}{\partial \triangle \lambda^\sigma} \\
\frac{\partial R^{f^\sigma}}{\partial \triangle \sigma_{11}} & \frac{\partial R^{f^\sigma}}{\partial \triangle \sigma_{12}} & \cdots & \frac{\partial R^{f^\sigma}}{\partial \triangle \sigma_{33}} & 0 & 0 & 0 & \frac{\partial R^{f^\sigma}}{\partial \triangle \varepsilon^f_{11}} & \frac{\partial R^{f^\sigma}}{\partial \triangle \varepsilon^f_{12}} & \cdots & \frac{\partial R^{f^\sigma}}{\partial \triangle \varepsilon^f_{33}} & 0
\end{bmatrix}$$

B.2 Calcul de J_Y

Les variations des résidus $\underline{\underline{R}}^{\sigma}$, $\underline{R}^{D}$, $\underline{R}^{f}$ et $R^{f^{\sigma}}$ par rapport aux variables de pilotage $\triangle\underline{\underline{\varepsilon}}$ et $\triangle\underline{E}$ sont données par :

$$\frac{\partial R^{\sigma}_{ij}}{\partial \triangle \varepsilon_{pq}} = -C^{E}_{ijpq} \quad ; \quad \frac{\partial R^{\sigma}_{ij}}{\partial \triangle E_{p}} = e_{pij|n+1} \tag{B.20}$$

$$\frac{\partial R^{D}_{i}}{\partial \triangle \varepsilon_{pq}} = -e_{ipq|n+1} \quad ; \quad \frac{\partial R^{D}_{i}}{\partial \triangle E_{p}} = -\epsilon^{\varepsilon}_{ip} \tag{B.21}$$

$$\frac{\partial R^{f}_{ij}}{\partial \triangle \varepsilon_{pq}} = 0 \quad ; \quad \frac{\partial R^{f}_{ij}}{\partial \triangle E_{p}} = 0 \tag{B.22}$$

$$\frac{\partial R^{f^{\sigma}}}{\partial \triangle \varepsilon_{pq}} = 0 \quad ; \quad \frac{\partial R^{f^{\sigma}}}{\partial \triangle E_{q}} = -\frac{\partial \hat{\sigma}_{c|n+1}}{\partial \triangle E_{q}} \tag{B.23}$$

avec

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \hat{\sigma}_{c|n+1}}{\partial \triangle E_{q}} \quad = \quad & \Big[\delta e^{p}_{q|n} \times h(-\tfrac{e^{p}_{k|n} e^{p}_{l|n} \sigma_{kl|n+1}}{\sigma_{c}})\Big] \times h\Big(\sigma_{c} + \delta\, E_{i|n+1} e^{p}_{i|n} \times h(-\tfrac{e^{p}_{k|n} e^{p}_{l|n} \sigma_{kl|n+1}}{\sigma_{c}})\Big) \\
& + \Big[\sigma_{c} + \delta\, E_{i|n+1} e^{p}_{i|n} \times h(-\tfrac{e^{p}_{k|n} e^{p}_{l|n} \sigma_{kl|n+1}}{\sigma_{c}})\Big] \times \Big[\delta e^{p}_{q|n} \times h(-\tfrac{e^{p}_{k|n} e^{p}_{l|n} \sigma_{kl|n+1}}{\sigma_{c}})\Big] \times \\
& \frac{k}{2\cosh^{2}\Big(k\sigma_{c} + k\delta\, E_{i|n+1} e^{p}_{i|n} \times h(-\tfrac{e^{p}_{k|n} e^{p}_{l|n} \sigma_{kl|n+1}}{\sigma_{c}})\Big)}
\end{aligned} \tag{B.24}$$

Nous pouvons donc en déduire la matrice jacobienne $[J_Y]$:

$$[J_Y] = \Big[\frac{\partial \underline{F}}{\partial \triangle \underline{Y}}\Big] = \begin{bmatrix}
\frac{\partial R^{\sigma}_{11}}{\partial \triangle \varepsilon_{11}} & \frac{\partial R^{\sigma}_{11}}{\partial \triangle \varepsilon_{12}} & \cdots & \frac{\partial R^{\sigma}_{11}}{\partial \triangle \varepsilon_{33}} & \frac{\partial R^{\sigma}_{11}}{\partial \triangle E_{1}} & \frac{\partial R^{\sigma}_{11}}{\partial \triangle E_{2}} & \frac{\partial R^{\sigma}_{11}}{\partial \triangle E_{3}} \\
\frac{\partial R^{\sigma}_{12}}{\partial \triangle \varepsilon_{11}} & \frac{\partial R^{\sigma}_{12}}{\partial \triangle \varepsilon_{12}} & \cdots & \frac{\partial R^{\sigma}_{12}}{\partial \triangle \varepsilon_{33}} & \frac{\partial R^{\sigma}_{12}}{\partial \triangle E_{1}} & \frac{\partial R^{\sigma}_{12}}{\partial \triangle E_{2}} & \frac{\partial R^{\sigma}_{12}}{\partial \triangle E_{3}} \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
\frac{\partial R^{\sigma}_{33}}{\partial \triangle \varepsilon_{11}} & \frac{\partial R^{\sigma}_{33}}{\partial \triangle \varepsilon_{12}} & \cdots & \frac{\partial R^{\sigma}_{33}}{\partial \triangle \varepsilon_{33}} & \frac{\partial R^{\sigma}_{33}}{\partial \triangle E_{1}} & \frac{\partial R^{\sigma}_{33}}{\partial \triangle E_{2}} & \frac{\partial R^{\sigma}_{33}}{\partial \triangle E_{3}} \\
\frac{\partial R^{D}_{1}}{\partial \triangle \varepsilon_{11}} & \frac{\partial R^{D}_{1}}{\partial \triangle \varepsilon_{12}} & \cdots & \frac{\partial R^{D}_{1}}{\partial \triangle \varepsilon_{33}} & \frac{\partial R^{D}_{1}}{\partial \triangle E_{1}} & \frac{\partial R^{D}_{1}}{\partial \triangle E_{2}} & \frac{\partial R^{D}_{1}}{\partial \triangle E_{3}} \\
\frac{\partial R^{D}_{2}}{\partial \triangle \varepsilon_{11}} & \frac{\partial R^{D}_{2}}{\partial \triangle \varepsilon_{12}} & \cdots & \frac{\partial R^{D}_{2}}{\partial \triangle \varepsilon_{33}} & \frac{\partial R^{D}_{2}}{\partial \triangle E_{1}} & \frac{\partial R^{D}_{2}}{\partial \triangle E_{2}} & \frac{\partial R^{D}_{2}}{\partial \triangle E_{3}} \\
\frac{\partial R^{D}_{3}}{\partial \triangle \varepsilon_{11}} & \frac{\partial R^{D}_{3}}{\partial \triangle \varepsilon_{12}} & \cdots & \frac{\partial R^{D}_{3}}{\partial \triangle \varepsilon_{33}} & \frac{\partial R^{D}_{3}}{\partial \triangle E_{1}} & \frac{\partial R^{D}_{3}}{\partial \triangle E_{2}} & \frac{\partial R^{D}_{3}}{\partial \triangle E_{3}} \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & \cdots & 0 & \frac{\partial R^{f^{\sigma}}}{\partial \triangle E_{1}} & \frac{\partial R^{f^{\sigma}}}{\partial \triangle E_{2}} & \frac{\partial R^{f^{\sigma}}}{\partial \triangle E_{3}}
\end{bmatrix} \tag{B.25}$$

Annexe C

Comportement ferroélectrique et ferroélastique

C.1 Calcul de J_X

Dans le cas d'un comportement ferroélectrique et ferroélastique pleinement couplé, les variations des résidus $\underline{\underline{R}}^{\sigma}$, $\underline{R}^{D}$, $\underline{R}^{e}$, $\underline{\underline{R}}^{f}$, R^{fe} et $R^{f\sigma}$ par rapport aux inconnues $\triangle\underline{\underline{\sigma}}$, $\triangle\underline{D}$, $\triangle\underline{P}^{e}$, $\triangle\underline{\underline{\varepsilon}}^{f}$, $\triangle\lambda^{e}$ et $\triangle\lambda^{\sigma}$ sont données par les expressions suivantes :

$$\begin{cases} \dfrac{\partial R^{\sigma}_{ij}}{\partial\triangle\sigma_{pq}} = \delta_{ip}\delta_{jq} + C^{E}_{ijkl}\dfrac{\partial\varepsilon^{e}_{kl|n+1}}{\partial\triangle\sigma_{pq}} + \dfrac{\partial e_{kij|n+1}}{\partial\triangle\sigma_{pq}}E_{k|n+1} \\ \dfrac{\partial R^{\sigma}_{ij}}{\partial\triangle P^{e}_{q}} = C^{E}_{ijkl}\dfrac{\partial\varepsilon^{e}_{kl|n+1}}{\partial\triangle P^{e}_{q}} + \dfrac{\partial e_{kij|n+1}}{\partial\triangle P^{e}_{q}}E_{k|n+1} \\ \dfrac{\partial R^{\sigma}_{ij}}{\partial\triangle\varepsilon^{f}_{pq}} = C^{E}_{ijpq} + C^{E}_{ijkl}\dfrac{\partial\varepsilon^{e}_{kl|n+1}}{\partial\triangle\varepsilon^{f}_{pq}} + \dfrac{\partial e_{kij|n+1}}{\triangle\varepsilon^{f}_{pq}}E_{k|n+1} \\ \dfrac{\partial R^{\sigma}_{ij}}{\partial\triangle D_{p}} = 0 \quad ; \quad \dfrac{\partial R^{\sigma}_{ij}}{\partial\triangle\lambda^{e}} = 0 \quad ; \quad \dfrac{\partial R^{\sigma}_{ij}}{\partial\triangle\lambda^{\sigma}} = 0 \end{cases} \tag{C.1}$$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial R^{D}_{i}}{\partial\triangle\sigma_{pq}} = -\dfrac{\partial e_{ikl|n+1}}{\partial\sigma_{pq}}((\varepsilon_{kl|n+1} - \varepsilon^{e}_{kl|n+1} - \varepsilon^{f}_{kl|n+1}) + e_{ikl|n+1}\dfrac{\partial\varepsilon^{e}_{kl|n+1}}{\partial\sigma_{pq}} - \dfrac{\partial\triangle P^{\sigma}_{i}}{\partial\triangle\sigma_{pq}} \\ \dfrac{\partial R^{D}_{i}}{\partial\triangle P^{e}_{q}} = -\dfrac{\partial e_{ikl|n+1}}{\partial\triangle P^{e}_{q}}((\varepsilon_{kl|n+1} - \varepsilon^{e}_{kl|n+1} - \varepsilon^{f}_{kl|n+1}) + e_{ikl|n+1}\dfrac{\partial\varepsilon^{e}_{kl|n+1}}{\partial\triangle P^{e}_{q}} - \delta_{iq} \\ \dfrac{\partial R^{D}_{i}}{\partial\triangle\varepsilon^{f}_{pq}} = e_{ipq|n+1} - \dfrac{\partial e_{ikl|n+1}}{\partial\triangle\varepsilon^{f}_{pq}}(\varepsilon_{kl|n+1} - \varepsilon^{e}_{kl|n+1} - \varepsilon^{f}_{kl|n+1}) + e_{ikl|n+1}\dfrac{\partial\varepsilon^{e}_{kl|n+1}}{\triangle\varepsilon^{f}_{pq}} \\ \dfrac{\partial R^{D}_{i}}{\partial\triangle D_{p}} = \delta_{ip} \quad ; \quad \dfrac{\partial R^{D}_{i}}{\partial\triangle\lambda^{e}} = 0 \quad ; \quad \dfrac{\partial R^{D}_{i}}{\partial\triangle\lambda^{\sigma}} = 0 \end{cases} \tag{C.2}$$

$$\left\{\begin{array}{l}
\dfrac{\partial R_i^e}{\partial \triangle \sigma_{pq}} = \dfrac{\triangle \lambda^e}{\|\underline{E}_{n+1} - \underline{X}^e_{n+1}\|}\dfrac{\partial X^e_{i|n+1}}{\partial \triangle \sigma_{pq}} - \triangle \lambda^e \dfrac{E_{i|n+1} - X^e_{i|n+1}}{\|\underline{E}_{n+1} - \underline{X}^e_{n+1}\|^3}(E_{k|n+1} - X^e_{k|n+1})\dfrac{\partial X^e_{k|n+1}}{\partial \triangle \sigma_{pq}} \\
\dfrac{\partial R_i^e}{\partial \triangle P_q^e} = \delta_{iq} + \dfrac{\triangle \lambda^e}{\|\underline{E}_{n+1} - \underline{X}^e_{n+1}\|}\dfrac{\partial X^e_{i|n+1}}{\partial \triangle P_q^e} - \triangle \lambda^e \dfrac{E_{i|n+1} - X^e_{i|n+1}}{\|\underline{E}_{n+1} - \underline{X}^e_{n+1}\|^3}(E_{k|n+1} - X^e_{k|n+1})\dfrac{\partial X^e_{k|n+1}}{\partial \triangle P_q^e} \\
\dfrac{\partial R_i^e}{\partial \triangle \varepsilon^f_{pq}} = \dfrac{\triangle \lambda^e}{\|\underline{E}_{n+1} - \underline{X}^e_{n+1}\|}\dfrac{\partial X^e_{i|n+1}}{\partial \triangle \varepsilon^f_{pq}} - \triangle \lambda^e \dfrac{E_{i|n+1} - X^e_{i|n+1}}{\|\underline{E}_{n+1} - \underline{X}^e_{n+1}\|^3}(E_{k|n+1} - X^e_{k|n+1})\dfrac{\partial X^e_{k|n+1}}{\partial \triangle \varepsilon^f_{pq}} \\
\dfrac{\partial R_i^e}{\partial \triangle D_q} = 0 \quad ; \quad \dfrac{\partial R_i^e}{\partial \triangle \lambda^e} = -\dfrac{E_{i|n+1} - X^e_{i|n+1}}{\|\underline{E}_{n+1} - \underline{X}^e_{n+1}\|} \quad ; \quad \dfrac{\partial R_i^e}{\partial \triangle \lambda^\sigma} = 0
\end{array}\right. \tag{C.3}$$

$$\left\{\begin{array}{rcl}
\dfrac{\partial R^f_{ij}}{\partial \triangle \sigma_{pq}} &=& -\sqrt{\dfrac{3}{2}}\dfrac{\triangle \lambda^\sigma}{\|\underline{\underline{s}}_{n+1} - \underline{\underline{X}}^\sigma_{n+1}\|} \times \Big(\dfrac{\partial s_{ij|n+1}}{\partial \triangle \sigma_{pq}} - \dfrac{\partial X^\sigma_{ij|n+1}}{\partial \triangle \sigma_{pq}}\Big) \\
&& +\sqrt{\dfrac{3}{2}}\triangle \lambda^\sigma \dfrac{s_{ij|n+1} - X^\sigma_{ij|n+1}}{\|\underline{\underline{s}}_{n+1} - \underline{\underline{X}}^\sigma_{n+1}\|^3} \times (s_{kl|n+1} - X^\sigma_{kl|n+1})\Big(\dfrac{\partial s_{kl|n+1}}{\partial \triangle \sigma_{pq}} - \dfrac{\partial X^\sigma_{kl|n+1}}{\partial \triangle \sigma_{pq}}\Big) \\
\dfrac{\partial R^f_{ij}}{\partial \triangle \varepsilon^f_{pq}} &=& \delta_{ip}\delta_{jq} + \sqrt{\dfrac{3}{2}}\dfrac{\triangle \lambda^\sigma}{\|\underline{\underline{s}}_{n+1} - \underline{\underline{X}}^\sigma_{n+1}\|} \times \dfrac{\partial X^\sigma_{ij|n+1}}{\partial \triangle \varepsilon^f_{pq}} \\
&& -\sqrt{\dfrac{3}{2}}\triangle \lambda^\sigma \dfrac{s_{ij|n+1} - X^\sigma_{ij|n+1}}{\|\underline{\underline{s}}_{n+1} - \underline{\underline{X}}^\sigma_{n+1}\|^3} \times (s_{kl|n+1} - X^\sigma_{kl|n+1})\dfrac{\partial X^\sigma_{kl|n+1}}{\partial \triangle \varepsilon^f_{pq}} \\
\dfrac{\partial R^f_{ij}}{\partial \triangle P^e_q} &=& \sqrt{\dfrac{3}{2}}\dfrac{\triangle \lambda^\sigma}{\|\underline{\underline{s}}_{n+1} - \underline{\underline{X}}^\sigma_{n+1}\|} \times \dfrac{\partial X^\sigma_{ij|n+1}}{\partial \triangle P^e_q} \\
&& -\sqrt{\dfrac{3}{2}}\triangle \lambda^\sigma \dfrac{s_{ij|n+1} - X^\sigma_{ij|n+1}}{\|\underline{\underline{s}}_{n+1} - \underline{\underline{X}}^\sigma_{n+1}\|^3} \times (s_{kl|n+1} - X^\sigma_{kl|n+1})\dfrac{\partial X^\sigma_{kl|n+1}}{\partial \triangle P^e_q} \\
\dfrac{\partial R^f_{ij}}{\partial \triangle D_q} &=& 0 \quad ; \quad \dfrac{\partial R^f_{ij}}{\partial \triangle \lambda^e} = 0 \quad ; \quad \dfrac{\partial R^f_{ij}}{\partial \triangle \lambda^\sigma} = -\sqrt{\dfrac{3}{2}}\,\dfrac{s_{ij|n+1} - X^\sigma_{ij|n+1}}{\|\underline{\underline{s}}_{n+1} - \underline{\underline{X}}^\sigma_{n+1}\|}
\end{array}\right. \tag{C.4}$$

$$\left\{\begin{array}{l}
\dfrac{\partial R^{f^e}}{\partial \triangle \sigma_{pq}} = -\dfrac{1}{\|\underline{E}_{n+1} - \underline{X}^e_{n+1}\|} \times (E_{k|n+1} - X^e_{k|n+1})\dfrac{\partial X^e_{k|n+1}}{\partial \triangle \sigma_{pq}} \\
\dfrac{\partial R^{f^e}}{\partial \triangle P^e_q} = -\dfrac{1}{\|\underline{E}_{n+1} - \underline{X}^e_{n+1}\|} \times (E_{k|n+1} - X^e_{k|n+1})\dfrac{\partial X^e_{k|n+1}}{\partial \triangle P^e_q} \\
\dfrac{\partial R^{f^e}}{\partial \triangle \varepsilon_{pq}} = -\dfrac{1}{\|\underline{E}_{n+1} - \underline{X}^e_{n+1}\|} \times (E_{k|n+1} - X^e_{k|n+1})\dfrac{\partial X^e_{k|n+1}}{\partial \triangle \varepsilon^f_{pq}} \\
\dfrac{\partial R^{f^e}}{\partial \triangle D_q} = 0 \quad ; \quad \dfrac{\partial R^{f^e}}{\partial \triangle \lambda^e} = 0 \quad ; \quad \dfrac{\partial R^{f^e}}{\partial \triangle \lambda^\sigma} = 0
\end{array}\right. \tag{C.5}$$

$$\left\{\begin{array}{l}
\dfrac{\partial R^{f^\sigma}}{\partial \triangle\sigma_{pq}} = \sqrt{\dfrac{3}{2}}\dfrac{1}{\|\underline{\underline{s}}_{n+1} - \underline{\underline{X}}^{\sigma}_{n+1}\|} \times (s_{kl|n+1} - X^{\sigma}_{kl|n+1})\Big(\dfrac{\partial s_{kl|n+1}}{\partial \triangle\sigma_{pq}} - \dfrac{\partial X^{\sigma}_{kl|n+1}}{\partial \triangle\sigma_{pq}}\Big) - \dfrac{\partial \hat{\sigma}_{c|n+1}}{\partial \triangle\sigma_{pq}} \\
\dfrac{\partial R^{f^\sigma}}{\partial \triangle P^{e}_{q}} = -\sqrt{\dfrac{3}{2}}\dfrac{1}{\|\underline{\underline{s}}_{n+1} - \underline{\underline{X}}^{\sigma}_{n+1}\|} \times (s_{kl|n+1} - X^{\sigma}_{kl|n+1})\dfrac{\partial X^{\sigma}_{kl|n+1}}{\partial \triangle P^{e}_{q}} \\
\dfrac{\partial R^{f^\sigma}}{\partial \triangle \varepsilon^{f}_{pq}} = -\sqrt{\dfrac{3}{2}}\dfrac{1}{\|\underline{\underline{s}}_{n+1} - \underline{\underline{X}}^{\sigma}_{n+1}\|} \times (s_{kl|n+1} - X^{\sigma}_{kl|n+1})\dfrac{\partial X^{\sigma}_{kl|n+1}}{\partial \triangle \varepsilon^{f}_{pq}} \\
\dfrac{\partial R^{f^\sigma}}{\partial \triangle D_{q}} = 0 \quad ; \quad \dfrac{\partial R^{f^\sigma}}{\partial \triangle \lambda^{e}} = 0 \quad ; \quad \dfrac{\partial R^{f^\sigma}}{\partial \triangle \lambda^{\sigma}} = 0
\end{array}\right. \tag{C.6}$$

Calcul de $\dfrac{\partial \varepsilon^{e}_{ij|n+1}}{\partial \triangle\sigma_{pq}}$ **et** $\dfrac{\partial \varepsilon^{e}_{ij|n+1}}{\partial \triangle \varepsilon^{f}_{pq}}$

Dans le cas où les incréments des polarisations ferroélectrique et ferroélastique sont non nuls, la direction de polarisation à la fin de l'incrément est donnée par :

$$\underline{e}^{p}_{n+1} = \frac{\underline{P}^{r}_{n+1}}{\|\underline{P}^{r}_{n+1}\|} = \frac{\underline{P}^{r}_{n} + \triangle\underline{P}^{e} + \triangle\underline{P}^{\sigma}}{\|\underline{P}^{r}_{n} + \triangle\underline{P}^{e} + \triangle\underline{P}^{\sigma}\|} \tag{C.7}$$

Ainsi, les variations de la direction de polarisation par rapport à la contrainte et la déformation ferroélastique s'écrivent :

$$\left\{\begin{array}{l}
\dfrac{\partial e^{p}_{i|n+1}}{\partial \triangle\sigma_{pq}} = \dfrac{1}{\|\underline{P}^{r}_{n+1}\|} \times \dfrac{\partial \triangle P^{\sigma}_{i}}{\partial \triangle\sigma_{pq}} - \dfrac{P^{r}_{i|n+1}}{\|\underline{P}^{r}_{n+1}\|^{3}} \times P^{r}_{k|n+1}\dfrac{\partial \triangle P^{\sigma}_{k}}{\partial \triangle\sigma_{pq}} \\
\dfrac{\partial e^{p}_{i|n+1}}{\partial \triangle \varepsilon^{f}_{pq}} = \dfrac{1}{\|\underline{P}^{r}_{n+1}\|} \times \dfrac{\partial \triangle P^{\sigma}_{i}}{\partial \triangle \varepsilon^{f}_{pq}} - \dfrac{P^{r}_{i|n+1}}{\|\underline{P}^{r}_{n+1}\|^{3}} \times P^{r}_{k|n+1}\dfrac{\partial \triangle P^{\sigma}_{k}}{\partial \triangle \varepsilon^{f}_{pq}}
\end{array}\right. \tag{C.8}$$

Les variations de la déformation ferroélectrique par rapport à $\triangle\underline{\underline{\sigma}}$ et $\triangle\underline{\underline{\varepsilon}}^{f}$ peuvent donc être déduites des relations (C.8) :

$$\left\{\begin{array}{l}
\dfrac{\partial \varepsilon^{e}_{ij|n+1}}{\partial \triangle\sigma_{pq}} = \dfrac{3}{2}\dfrac{\varepsilon^{sat}}{P^{sat}}\|\underline{P}^{e}_{n+1}\|\Big(\dfrac{\partial e^{p}_{i|n+1}}{\partial \triangle\sigma_{pq}}e^{p}_{j|n+1} + e^{p}_{i|n+1}\dfrac{\partial e^{p}_{j|n+1}}{\partial \triangle\sigma_{pq}}\Big) \\
\dfrac{\partial \varepsilon^{e}_{ij|n+1}}{\partial \triangle \varepsilon^{f}_{pq}} = \dfrac{3}{2}\dfrac{\varepsilon^{sat}}{P^{sat}}\|\underline{P}^{e}_{n+1}\|\Big(\dfrac{\partial e^{p}_{i|n+1}}{\partial \triangle \varepsilon^{f}_{pq}}e^{p}_{j|n+1} + e^{p}_{i|n+1}\dfrac{\partial e^{p}_{j|n+1}}{\partial \triangle \varepsilon^{f}_{pq}}\Big)
\end{array}\right. \tag{C.9}$$

Calcul de $\dfrac{\partial e_{kij|n+1}}{\partial \triangle \sigma_{pq}}$ et $\dfrac{\partial e_{kij|n+1}}{\partial \triangle \varepsilon^f_{pq}}$

Le tenseur piézoélectrique direct est donnée par l'expression suivante :

$$\begin{aligned} d_{ijk|n+1} = \; & \tfrac{\|\underline{\underline{P}}^r_n + \triangle \underline{\underline{P}}^e + \triangle \underline{\underline{P}}^\sigma\|}{P^{sat}} \Big\{ d_{33} e^p_{i|n+1} e^p_{j|n+1} e^p_{k|n+1} + d_{31}(\delta_{jk} - e^p_{j|n+1} e^p_{k|n+1}) e^p_{i|n+1} \\ & + \tfrac{d_{15}}{2} \big[(\delta_{ij} - e^p_{i|n+1} e^p_{j|n+1}) e^p_{k|n+1} + (\delta_{ik} - e^p_{i|n+1} e^p_{k|n+1}) e^p_{j|n+1} \big] \Big\} \end{aligned} \tag{C.10}$$

Nous en déduisons la variation de $\underline{\underline{\underline{d}}}_{n+1}$ par rapport à $\triangle \underline{\underline{\sigma}}$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial d_{ijk|n+1}}{\partial \triangle \sigma_{pq}} = \; & \frac{1}{P^{sat} \|\underline{\underline{P}}^r_{n+1}\|} \times P^r_{k|n+1} \frac{\partial \triangle P^\sigma_k}{\partial \triangle \sigma_{pq}} \Big\{ d_{33} e^p_{i|n+1} e^p_{j|n+1} e^p_{k|n+1} + d_{31}(\delta_{jk} - e^p_{j|n+1} e^p_{k|n+1}) e^p_{i|n+1} \\ & + \frac{d_{15}}{2} \big[(\delta_{ij} - e^p_{i|n+1} e^p_{j|n+1}) e^p_{k|n+1} + (\delta_{ik} - e^p_{i|n+1} e^p_{k|n+1}) e^p_{j|n+1} \big] \Big\} \\ & + \frac{\|\underline{\underline{P}}^r_{n+1}\|}{P^{sat}} \Big\{ d_{33} \Big[\frac{\partial e^p_{i|n+1}}{\partial \triangle \sigma_{pq}} e^p_{j|n+1} e^p_{k|n+1} + e^p_{i|n+1} \frac{\partial e^p_{j|n+1}}{\partial \triangle \sigma_{pq}} e^p_{k|n+1} + e^p_{i|n+1} e^p_{j|n+1} \frac{\partial e^p_{k|n+1}}{\partial \triangle \sigma_{pq}} \Big] \\ & + d_{31} \Big[- \frac{\partial e^p_{j|n+1}}{\partial \triangle \sigma_{pq}} e^p_{k|n+1} - e^p_{j|n+1} \frac{\partial e^p_{k|n+1}}{\partial \sigma_{pq}} \Big] e^p_{i|n+1} + d_{31}(\delta_{jk} - e^p_{j|n+1} e^p_{k|n+1}) \frac{\partial e^p_{i|n+1}}{\partial \triangle \sigma_{pq}} \\ & + \frac{d_{15}}{2} \Big[- \frac{\partial e^p_{i|n+1}}{\partial \triangle \sigma_{pq}} e^p_{j|n+1} - e^p_{i|n+1} \frac{\partial e^p_{j|n+1}}{\partial \triangle \sigma_{pq}} \Big] e^p_{k|n+1} + \frac{d_{15}}{2} (\delta_{ij} - e^p_{i|n+1} e^p_{j|n+1}) \frac{\partial e^p_{k|n+1}}{\partial \triangle \sigma_{pq}} \\ & + \frac{d_{15}}{2} \Big[- \frac{\partial e^p_{i|n+1}}{\partial \triangle \sigma_{pq}} e^p_{k|n+1} - e^p_{i|n+1} \frac{\partial e^p_{k|n+1}}{\partial \triangle \sigma_{pq}} \Big] e^p_{j|n+1} + \frac{d_{15}}{2} (\delta_{ik} - e^p_{i|n+1} e^p_{k|n+1}) \frac{\partial e^p_{j|n+1}}{\partial \triangle \sigma_{pq}} \Big\} \end{aligned} \tag{C.11}$$

L'expression de $\frac{\partial d_{ijk|n+1}}{\partial \triangle \varepsilon^f_{pq}}$ est similaire à $\frac{\partial d_{ijk|n+1}}{\partial \triangle \sigma_{pq}}$: il suffit de remplacer $\triangle \sigma_{pq}$ par $\triangle \varepsilon^f_{pq}$.
La relation 2.4 permet de déterminer les variations de du tenseur piézoélectrique inverse $\underline{\underline{\underline{e}}}_{n+1}$ par rapport aux incréments de la contrainte et de la déformation ferroélastique :

$$\frac{\partial e_{kij|n+1}}{\partial \triangle \sigma_{rs}} = C^E_{ijpq} \frac{\partial d_{kpq|n+1}}{\partial \triangle \sigma_{rs}} \quad ; \quad \frac{\partial e_{kij|n+1}}{\partial \triangle \varepsilon^f_{rs}} = C^E_{ijpq} \frac{\partial d_{kpq|n+1}}{\partial \triangle \varepsilon^f_{rs}} \tag{C.12}$$

Calcul de $\dfrac{\partial X^e_{i|n+1}}{\partial \triangle \sigma_{pq}}$ et $\dfrac{\partial X^e_{i|n+1}}{\partial \triangle \varepsilon^f_{pq}}$

Les variations du vecteur d'écrouissage ferroélectrique par rapport à $\triangle \underline{\underline{\sigma}}$ et $\triangle \underline{\underline{\varepsilon}}^f$ sont données par :

$$\frac{\partial X^e_{i|n+1}}{\partial \triangle \sigma_{pq}} = \beta P^e_{i|n+1} \frac{\partial g_2}{\partial \triangle \sigma_{pq}} \quad ; \quad \frac{\partial X^e_{i|n+1}}{\partial \triangle \varepsilon^f_{pq}} = \beta P^e_{i|n+1} \frac{\partial g_2}{\partial \triangle \varepsilon^f_{pq}} \tag{C.13}$$

avec

$$\frac{\partial g_2}{\partial \triangle\sigma_{pq}} = \begin{cases} 0 & \text{si} \quad J^e_{n+1} \leq -c^e \\ \frac{P^e_0}{\exp(1)-1}\left[\exp(\frac{J^e_{n+1}}{c^e}+1) - 1 + (\frac{J^e_{n+1}}{c^e}+1)\exp(\frac{J^e_{n+1}}{c^e}+1)\right]\frac{1}{c^e}\frac{\partial J^e_{n+1}}{\partial \triangle\sigma_{pq}} & \text{si} \quad J^e_{n+1} > -c^e \end{cases} \tag{C.14}$$

et

$$\frac{\partial J^e_{n+1}}{\partial \triangle\sigma_{pq}} = \frac{1}{P^{sat}||\underline{P}^r_{n+1}||} P^r_{k|n+1}\frac{\partial \triangle P^\sigma_k}{\partial \triangle\sigma_{pq}} \tag{C.15}$$

L'expression de $\frac{\partial g_2}{\partial \triangle\varepsilon^f_{pq}}$ est similaire à $\frac{\partial g_2}{\partial \triangle\sigma_{pq}}$: il suffit de remplacer $\triangle\sigma_{pq}$ par $\triangle\varepsilon^f_{pq}$.

Calcul de $\frac{\partial X^\sigma_{ij|n+1}}{\partial \triangle\sigma_{pq}}$ et $\frac{\partial X^\sigma_{ij|n+1}}{\partial \triangle\varepsilon^f_{pq}}$

Les variations du tenseur d'écrouissage ferroélastique par rapport à $\triangle\underline{\underline{\sigma}}$ et $\triangle\underline{\underline{\varepsilon}}^f$ sont données par les expressions suivantes :

$$\frac{\partial X^\sigma_{ij|n+1}}{\partial \triangle\sigma_{pq}} = \gamma\varepsilon^f_{ij|n+1}\frac{\partial g_1}{\partial \triangle\sigma_{pq}} \tag{C.16}$$

$$\frac{\partial X^\sigma_{ij|n+1}}{\partial \triangle\varepsilon^f_{pq}} = \gamma\delta_{ip}\delta_{jq}\Big(1 + g_1(\varepsilon^r_{eq|n+1})\Big) + \gamma\varepsilon^f_{ij|n+1}\frac{\partial g_1}{\partial \triangle\varepsilon^f_{pq}} \tag{C.17}$$

avec

$$\frac{\partial g_1}{\partial \triangle\sigma_{pq}} = \begin{cases} 0 & \text{si} \quad J^s_{n+1} \leq -c^s \\ \frac{P^s_0}{\exp(1)-1}\left[\exp(\frac{J^s_{n+1}}{c^s}+1) - 1 + (\frac{J^s_{n+1}}{c^s}+1)\exp(\frac{J^s_{n+1}}{c^s}+1)\right]\frac{1}{c^s}\frac{\partial J^s_{n+1}}{\partial \triangle\sigma_{pq}} & \text{si} \quad J^s_{n+1} > -c^s \end{cases} \tag{C.18}$$

$$\frac{\partial g_1}{\partial \triangle\varepsilon^f_{pq}} = \begin{cases} 0 & \text{si} \quad J^s_{n+1} \leq -c^s \\ \frac{P^s_0}{\exp(1)-1}\left[\exp(\frac{J^s_{n+1}}{c^s}+1) - 1 + (\frac{J^s_{n+1}}{c^s}+1)\exp(\frac{J^s_{n+1}}{c^s}+1)\right]\frac{1}{c^s}\frac{\partial J^s_{n+1}}{\partial \triangle\varepsilon^f_{pq}} & \text{si} \quad J^s_{n+1} > -c^s \end{cases} \tag{C.19}$$

$$\frac{\partial J^s_{n+1}}{\partial \triangle\varepsilon^f_{pq}} = \frac{\sqrt{2/3}}{\varepsilon^{sat}\|\underline{\underline{\varepsilon}}^r_{n+1}\|}\Big(\varepsilon^r_{pq|n+1} + \varepsilon^r_{kl|n+1}\frac{\partial \varepsilon^e_{kl|n+1}}{\partial \triangle\varepsilon^f_{pq}}\Big) \tag{C.20}$$

et

$$\frac{\partial J^s_{n+1}}{\partial \triangle\sigma_{pq}} = \frac{\sqrt{2/3}}{\varepsilon^{sat}\|\underline{\underline{\varepsilon}}^r_{n+1}\|}\varepsilon^r_{kl|n+1}\frac{\partial \varepsilon^e_{kl|n+1}}{\partial \triangle\sigma_{pq}} \tag{C.21}$$

Les systèmes de dérivées (C.1), (C.2), (C.3), (C.4), (C.5) et (C.6) permettent de déterminer la matrice jacobienne $[J_X]$:

$$[J_X] = \left[\frac{\partial \underline{F}}{\partial \triangle \underline{X}}\right] =$$

$$\begin{bmatrix}
\frac{\partial R^{\sigma}_{11}}{\partial \triangle \sigma_{11}} & \cdots & \frac{\partial R^{\sigma}_{11}}{\partial \triangle \sigma_{33}} & 0 & \cdot & 0 & \frac{\partial R^{\sigma}_{11}}{\partial \triangle P^{e}_{1}} & \cdot & \frac{\partial R^{\sigma}_{11}}{\partial \triangle P^{e}_{3}} & \frac{\partial R^{\sigma}_{11}}{\partial \triangle \varepsilon^{f}_{11}} & \cdots & \frac{\partial R^{\sigma}_{11}}{\partial \triangle \varepsilon^{f}_{33}} & 0 & 0 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
\frac{\partial R^{\sigma}_{33}}{\partial \triangle \sigma_{11}} & \cdots & \frac{\partial R^{\sigma}_{33}}{\partial \triangle \sigma_{33}} & 0 & \cdot & 0 & \frac{\partial R^{\sigma}_{33}}{\partial \triangle P^{e}_{1}} & \cdot & \frac{\partial R^{\sigma}_{33}}{\partial \triangle P^{e}_{3}} & \frac{\partial R^{\sigma}_{33}}{\partial \triangle \varepsilon^{f}_{11}} & \cdots & \frac{\partial R^{\sigma}_{33}}{\partial \triangle \varepsilon^{f}_{33}} & 0 & 0 \\
\frac{\partial R^{D}_{1}}{\partial \triangle \sigma_{11}} & \cdots & \frac{\partial R^{D}_{1}}{\partial \triangle \sigma_{33}} & \frac{\partial R^{D}_{1}}{\partial \triangle D_{1}} & \cdot & \frac{\partial R^{D}_{1}}{\partial \triangle D_{3}} & \frac{\partial R^{D}_{1}}{\partial \triangle P^{e}_{1}} & \cdot & \frac{\partial R^{D}_{1}}{\partial \triangle P^{e}_{3}} & \frac{\partial R^{D}_{1}}{\partial \triangle \varepsilon^{f}_{11}} & \cdots & \frac{\partial R^{D}_{1}}{\partial \triangle \varepsilon^{f}_{33}} & 0 & 0 \\
\cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\
\frac{\partial R^{D}_{3}}{\partial \triangle \sigma_{11}} & \cdots & \frac{\partial R^{D}_{3}}{\partial \triangle \sigma_{33}} & \frac{\partial R^{D}_{3}}{\partial \triangle D_{1}} & \cdot & \frac{\partial R^{D}_{3}}{\partial \triangle D_{3}} & \frac{\partial R^{D}_{3}}{\partial \triangle P^{e}_{1}} & \cdot & \frac{\partial R^{D}_{3}}{\partial \triangle P^{e}_{3}} & \frac{\partial R^{D}_{3}}{\partial \triangle \varepsilon^{f}_{11}} & \cdots & \frac{\partial R^{D}_{3}}{\partial \triangle \varepsilon^{f}_{33}} & 0 & 0 \\
\frac{\partial R^{e}_{1}}{\partial \triangle \sigma_{11}} & \cdots & \frac{\partial R^{e}_{1}}{\partial \triangle \sigma_{33}} & 0 & \cdot & 0 & \frac{\partial R^{e}_{1}}{\partial \triangle P^{e}_{1}} & \cdot & \frac{\partial R^{e}_{1}}{\partial \triangle P^{e}_{3}} & \frac{\partial R^{e}_{1}}{\partial \triangle \varepsilon^{f}_{11}} & \cdots & \frac{\partial R^{e}_{1}}{\partial \triangle \varepsilon^{f}_{33}} & \frac{\partial R^{e}_{1}}{\partial \triangle \lambda^{e}} & 0 \\
\cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\
\frac{\partial R^{e}_{3}}{\partial \triangle \sigma_{11}} & \cdots & \frac{\partial R^{e}_{3}}{\partial \triangle \sigma_{33}} & 0 & \cdot & 0 & \frac{\partial R^{e}_{3}}{\partial \triangle P^{e}_{1}} & \cdot & \frac{\partial R^{e}_{3}}{\partial \triangle P^{e}_{3}} & \frac{\partial R^{e}_{3}}{\partial \triangle \varepsilon^{f}_{11}} & \cdots & \frac{\partial R^{e}_{3}}{\partial \triangle \varepsilon^{f}_{33}} & \frac{\partial R^{e}_{3}}{\partial \triangle \lambda^{e}} & 0 \\
\frac{\partial R^{f}_{11}}{\partial \triangle \sigma_{11}} & \cdots & \frac{\partial R^{f}_{11}}{\partial \triangle \sigma_{33}} & 0 & \cdot & 0 & \frac{\partial R^{f}_{11}}{\partial \triangle P^{e}_{1}} & \cdot & \frac{\partial R^{f}_{11}}{\partial \triangle P^{e}_{3}} & \frac{\partial R^{f}_{11}}{\partial \triangle \varepsilon^{f}_{11}} & \cdots & \frac{\partial R^{f}_{11}}{\partial \triangle \varepsilon^{f}_{33}} & 0 & \frac{\partial R^{f}_{11}}{\partial \triangle \lambda^{\sigma}} \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
\frac{\partial R^{f}_{33}}{\partial \triangle \sigma_{11}} & \cdots & \frac{\partial R^{f}_{33}}{\partial \triangle \sigma_{33}} & 0 & \cdot & 0 & \frac{\partial R^{f}_{33}}{\partial \triangle P^{e}_{1}} & \cdot & \frac{\partial R^{f}_{33}}{\partial \triangle P^{e}_{3}} & \frac{\partial R^{f}_{33}}{\partial \triangle \varepsilon^{f}_{11}} & \cdots & \frac{\partial R^{f}_{33}}{\partial \triangle \varepsilon^{f}_{33}} & 0 & \frac{\partial R^{f}_{33}}{\partial \triangle \lambda^{\sigma}} \\
\frac{\partial R^{f^e}}{\partial \triangle \sigma_{11}} & \cdots & \frac{\partial R^{f^e}}{\partial \triangle \sigma_{33}} & 0 & \cdot & 0 & \frac{\partial R^{f^e}}{\partial \triangle P^{e}_{1}} & \cdot & \frac{\partial R^{f^e}}{\partial \triangle P^{e}_{3}} & \frac{\partial R^{f^e}}{\partial \triangle \varepsilon^{f}_{11}} & \cdots & \frac{\partial R^{f^e}}{\partial \triangle \varepsilon^{f}_{33}} & 0 & 0 \\
\frac{\partial R^{f^\sigma}}{\partial \triangle \sigma_{11}} & \cdots & \frac{\partial R^{f^\sigma}}{\partial \triangle \sigma_{33}} & 0 & \cdot & 0 & \frac{\partial R^{f^\sigma}}{\partial \triangle P^{e}_{1}} & \cdot & \frac{\partial R^{f^\sigma}}{\partial \triangle P^{e}_{3}} & \frac{\partial R^{f^\sigma}}{\partial \triangle \varepsilon^{f}_{11}} & \cdots & \frac{\partial R^{f^\sigma}}{\partial \triangle \varepsilon^{f}_{33}} & 0 & 0
\end{bmatrix} \tag{C.22}$$

C.2 Calcul de J_Y

Les variations des résidus $\underline{\underline{R}}^{\sigma}$, $\underline{R}^{D}$, $\underline{R}^{e}$, $\underline{\underline{R}}^{f}$, R^{fe} et $R^{f\sigma}$ par rapport aux variables de pilotage $\triangle \underline{\underline{\varepsilon}}$ et $\triangle \underline{E}$ sont données par les expressions suivantes :

$$\frac{\partial R^{\sigma}_{ij}}{\partial \triangle \varepsilon_{pq}} = -C^{E}_{ijpq} \quad ; \quad \frac{\partial R^{\sigma}_{ij}}{\partial \triangle E_{p}} = e_{pij|n+1} \tag{C.23}$$

$$\frac{\partial R^{D}_{i}}{\partial \triangle \varepsilon_{pq}} = -e_{ipq|n+1} \quad ; \quad \frac{\partial R^{D}_{i}}{\partial \triangle E_{p}} = -\epsilon^{\varepsilon}_{ip} \tag{C.24}$$

$$\frac{\partial R^{e}_{i}}{\partial \triangle \varepsilon_{pq}} = 0 \quad ; \quad \frac{\partial R^{e}_{i}}{\partial \triangle E_{p}} = -\frac{\triangle \lambda^{e}}{\|\underline{E}_{n+1} - \underline{X}^{e}_{n+1}\|}\delta_{ip} - \triangle \lambda^{e}\frac{E_{i|n+1} - X^{e}_{i|n+1}}{\|\underline{E}_{n+1} - \underline{X}^{e}_{n+1}\|^{3}}(E_{p|n+1} - X^{e}_{p|n+1}) \tag{C.25}$$

$$\frac{\partial R^f_{ij}}{\partial \triangle \varepsilon_{pq}} = 0 \quad ; \quad \frac{\partial R^f_{ij}}{\partial \triangle E_p} = 0 \tag{C.26}$$

$$\frac{\partial R^{f^e}}{\partial \triangle \varepsilon_{pq}} = 0 \quad ; \quad \frac{\partial R^{f^e}}{\partial \triangle E_p} = \frac{E_{p|n+1} - X^e_{p|n+1}}{\|\underline{E}_{n+1} - \underline{X}^e_{n+1}\|} \tag{C.27}$$

$$\frac{\partial R^{f^\sigma}}{\partial \triangle \varepsilon_{pq}} = 0 \quad ; \quad \frac{\partial R^{f^\sigma}}{\partial \triangle E_p} = -\frac{\partial \hat{\sigma}_{c|n+1}}{\partial \triangle E_p} \tag{C.28}$$

En se basant sur ces dernières dérivées, nous pouvons déterminer la matrice jacobienne $[J_Y]$:

$$[J_Y] = \left[\frac{\partial \underline{F}}{\partial \triangle \underline{Y}}\right] = \begin{bmatrix} \frac{\partial R^\sigma_{11}}{\partial \triangle \varepsilon_{11}} & \cdots & \frac{\partial R^\sigma_{11}}{\partial \triangle \varepsilon_{33}} & \frac{\partial R^\sigma_{11}}{\partial \triangle E_1} & \frac{\partial R^\sigma_{11}}{\partial \triangle E_2} & \frac{\partial R^\sigma_{11}}{\partial \triangle E_3} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial R^\sigma_{33}}{\partial \triangle \varepsilon_{11}} & \cdots & \frac{\partial R^\sigma_{33}}{\partial \triangle \varepsilon_{33}} & \frac{\partial R^\sigma_{33}}{\partial \triangle E_1} & \frac{\partial R^\sigma_{33}}{\partial \triangle E_2} & \frac{\partial R^\sigma_{33}}{\partial \triangle E_3} \\ \frac{\partial R^D_1}{\partial \triangle \varepsilon_{11}} & \cdots & \frac{\partial R^D_1}{\partial \triangle \varepsilon_{33}} & \frac{\partial R^D_1}{\partial \triangle E_1} & \frac{\partial R^D_1}{\partial \triangle E_2} & \frac{\partial R^D_1}{\partial \triangle E_3} \\ \frac{\partial R^D_2}{\partial \triangle \varepsilon_{11}} & \cdots & \frac{\partial R^D_2}{\partial \triangle \varepsilon_{33}} & \frac{\partial R^D_2}{\partial \triangle E_1} & \frac{\partial R^D_2}{\partial \triangle E_2} & \frac{\partial R^D_2}{\partial \triangle E_3} \\ \frac{\partial R^D_3}{\partial \triangle \varepsilon_{11}} & \cdots & \frac{\partial R^D_3}{\partial \triangle \varepsilon_{33}} & \frac{\partial R^D_3}{\partial \triangle E_1} & \frac{\partial R^D_3}{\partial \triangle E_2} & \frac{\partial R^D_3}{\partial \triangle E_3} \\ 0 & \cdots & 0 & \frac{\partial R^e_1}{\partial \triangle E_1} & \frac{\partial R^e_1}{\partial \triangle E_2} & \frac{\partial R^e_1}{\partial \triangle E_3} \\ 0 & \cdots & 0 & \frac{\partial R^e_2}{\partial \triangle E_1} & \frac{\partial R^e_2}{\partial \triangle E_2} & \frac{\partial R^e_2}{\partial \triangle E_3} \\ 0 & \cdots & 0 & \frac{\partial R^e_3}{\partial \triangle E_1} & \frac{\partial R^e_3}{\partial \triangle E_2} & \frac{\partial R^e_3}{\partial \triangle E_3} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \frac{\partial R^{f^e}}{\partial \triangle E_1} & \frac{\partial R^{f^e}}{\partial \triangle E_2} & \frac{\partial R^{f^e}}{\partial \triangle E_3} \\ 0 & \cdots & 0 & \frac{\partial R^{f^\sigma}}{\partial \triangle E_1} & \frac{\partial R^{f^\sigma}}{\partial \triangle E_2} & \frac{\partial R^{f^\sigma}}{\partial \triangle E_3} \end{bmatrix} \tag{C.29}$$

Annexe D

La méthode des déformations postulées améliorées

L'élément Q4TS est un élément coque intégré exactement (quatre points de Gauss sur la surface moyenne et deux points de Gauss suivant l'épaisseur). Cette intégration complète de la matrice de rigidité évite l'apparition des modes de membrane et de flexion à énergie nulle et par conséquent aucune matrice de stabilisation des modes d'Hourglass n'est nécessaire. Il est généralement connu qu'une formulation en déplacement pure présente un blocage en cisaillement dans les applications dominées par les déformations de flexion plane. En effet, des déformations de cisaillement parasites (ε_{xy}) peuvent apparaître dans un essai de flexion plane pure [1].
Introduite pour la première fois par Simo [76], la méthode des déformations postulées améliorées ou méthode EAS (Enhanced Assumed Strain method) est adoptée dans notre cas pour équilibrer les déformations de membrane indésirables (parasites). Une amélioration du tenseur des déformations notée $\underline{\underline{\tilde{\varepsilon}}}$ (Enhanced Strain) est introduite et une condition d'orthogonalité entre les déformations améliorées $\underline{\underline{\tilde{\varepsilon}}}$ et le tenseur des contraintes $\underline{\underline{\sigma}}$ doit être vérifiée. De plus, une condensation statique au niveau de chaque élément est utilisée pour déterminer les paramètres des déformations incompatibles (déformations améliorées).
Considérons un solide élastique occupant un volume V de frontière S. Le théorème des travaux virtuels (TTV) peut être écrit dans le cas statique sous cette forme :

$$\int_V \underline{\underline{\sigma}} : \delta\underline{\underline{\varepsilon}}^u \, dV - \int_V \delta\underline{u}^T \cdot \underline{f}^v \, dV - \int_S \delta\underline{u}^T \cdot \underline{T} \, dS = 0 \tag{D.1}$$

avec $\underline{\underline{\varepsilon}}^u$ est le tenseur des déformations *compatibles* donné par : $\underline{\underline{\varepsilon}}^u = \frac{1}{2}\Big(\underline{\underline{grad}}(\underline{u}) + \underline{\underline{grad}}^T(\underline{u})\Big)$, $\underline{f}^v$ est la densité des forces volumiques et $\underline{T}$ est la densité des forces surfaciques appliquées sur S.
La méthode EAS consiste à ajouter un nouveau tenseur de déformations *incompatibles* $\underline{\underline{\tilde{\varepsilon}}}$ pour améliorer le tenseur des déformations compatibles $\underline{\underline{\varepsilon}}^u$. Nous aurons donc un nouveau tenseur de déformations totales $\overset{\star}{\underline{\underline{\varepsilon}}}$ donné par :

$$\overset{\star}{\underline{\underline{\varepsilon}}} = \underline{\underline{\varepsilon}}^u + \underline{\underline{\tilde{\varepsilon}}} \tag{D.2}$$

En imposant une condition d'orthogonalité entre $\underline{\underline{\tilde{\varepsilon}}}$ et le tenseur des contraintes $\underline{\underline{\sigma}}$,

$$\int_V \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\tilde{\varepsilon}}}\, dV = \int_V \underline{\underline{\sigma}} : \delta\underline{\underline{\tilde{\varepsilon}}}\, dV = 0 \tag{D.3}$$

le théorème des travaux virtuels (D.1) changé peut être écrit sous cette forme :

$$\int_V \underline{\underline{\sigma}}(\underline{\underline{\tilde{\varepsilon}}}^{\star}) : \delta\underline{\underline{\tilde{\varepsilon}}}^{\star}\, dV - \int_V \delta\underline{u}^T \cdot \underline{f}^v\, dV - \int_S \delta\underline{u}^T \cdot \underline{T}\, dS = 0 \tag{D.4}$$

En ajoutant les déformations $\underline{\underline{\tilde{\varepsilon}}}$, quelques conditions doivent être vérifiées :

1. la stabilité de l'élément doit être assurée en vérifiant que l'amélioration du tenseur des déformations n'induit pas des modes d'Hourglass ;
2. la condition d'orthogonalité entre la contrainte mécanique et le tenseur des déformations améliorées doit être aussi vérifiée.

La première condition est assurée si les modes de déformations améliorées sont linéairement indépendants des modes de déformations compatibles (ceux de $\underline{\underline{\varepsilon}}^u$). Pour la deuxième condition d'orthogonalité, l'exigence minimale du tenseur des contraintes est l'hypothèse d'un état de contraintes constant (pour vérifier les patchs tests). Si le tenseur des contraintes est considéré constant, la condition d'orthogonalité (D.3) devient donc :

$$\int_{V^e} \underline{\underline{\tilde{\varepsilon}}}\, dV = \int_{V^e} \delta\underline{\underline{\tilde{\varepsilon}}}\, dV = 0 \tag{D.5}$$

Approximation des déformations de membrane curvilignes incompatibles

Comme proposé dans [8, 85], une possibilité de tenir compte des conditions à respecter lors de l'ajout des déformations améliorées est de considérer les déformations curvilignes incompatibles suivantes au sein de l'élément coque :

$$\underbrace{\begin{Bmatrix} \tilde{\varepsilon}_{xx} \\ \tilde{\varepsilon}_{yy} \\ \tilde{\gamma}_{xy} \\ \tilde{\gamma}_{xz} = 0 \\ \tilde{\gamma}_{yz} = 0 \end{Bmatrix}}_{\underline{\tilde{\varepsilon}}} = \underbrace{\frac{\mathrm{detJ}_0}{\mathrm{detJ}}\,[T_0]\underbrace{\begin{bmatrix} \xi & 0 & 0 & 0 & \xi\eta & 0 & 0 \\ 0 & \eta & 0 & 0 & 0 & \xi\eta & 0 \\ 0 & 0 & \xi & \eta & 0 & 0 & \xi\eta \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}}_{[M]}}_{[\tilde{M}]} \underbrace{\begin{Bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \\ \vdots \\ \alpha_7 \end{Bmatrix}}_{\underline{\alpha}} \tag{D.6}$$

où detJ est le jacobien de la transformation géométrique entre les coordonnées cartésiennes et les coordonnées paramétriques (detJ_0 est le jacobien de la transformation calculé au centre de l'élément), $[T_0]$ est la matrice de passage entre les déformations curvilignes et les déformations naturelles (covariantes) évaluée au centre de l'élément et $\underline{\alpha}$ est le vecteur contenant les sept paramètres pour la distribution des déformations incompatibles à l'intérieur de l'élément. La matrice

$[M]$ contient les fonctions d'interpolation des déformations incompatibles et nous pouvons vérifier que ses colonnes sont linéairement indépendantes pour éviter les modes à énergie de déformation nulle. Le facteur detJ/detJ$_0$ est introduit pour renforcer la condition d'orthogonalité. En effet, si nous considérons un état de contraintes constant, la relation (D.5) peut être écrite sous cette forme en utilisant l'Equation (D.6) :

$$\int_V [\tilde{M}(\xi,\eta,\zeta)]\ dV = \int_V [\tilde{M}(\xi,\eta,\zeta)]\ \mathrm{detJ} d\xi d\eta d\zeta = \mathrm{detJ}_0\ [T_0] \int_V [M(\xi,\eta,\zeta)]\ d\xi d\eta d\zeta = 0 \quad \text{(D.7)}$$

La matrice $[T(\xi,\eta,\zeta)]$ qui lie le vecteur des déformations curvilignes au vecteur des déformations covariantes s'exprime en fonction des composantes de la matrice $[C_z]$ utilisée dans l'Equation (3.17)

$$[T(\xi,\eta,\zeta)] = \begin{bmatrix} C_{z11}^2 & C_{z21}^2 & C_{z11}\,C_{z21} & 0 & 0 \\ C_{z12}^2 & C_{z22}^2 & C_{z12}\,C_{z22} & 0 & 0 \\ 2\,C_{z11}C_{z12} & 2\,C_{z21}C_{z22} & C_{z11}\,C_{z22} + C_{z12}\,C_{z21} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{z11} & C_{z21} \\ 0 & 0 & 0 & C_{z12} & C_{z22} \end{bmatrix} \quad \text{(D.8)}$$

Détermination des paramètres α_i par condensation statique

Le théorème des travaux virtuels changé (D.4) peut s'écrire sous cette forme au niveau de chaque élément coque :

$$\int_{V^e} \{\delta\tilde{\varepsilon}^\star\}^T \{\sigma\}\ dV - \int_{V^e} \{\delta u\}^T \{f^v\}\ dV - \int_S \{\delta u\}^T \{T\}\ dS + \delta W_z^e = 0 \quad \text{(D.9)}$$

avec δW_z^e le travail fictif de la rotation θ_3 (Equation (3.39)). En notant

$$\{u_l^e\} = \{\dots |\ U_i\ V_i\ W_i \vdots \theta_1^{(i)}\ \theta_2^{(i)}\ \theta_3^{(i)} \vdots\ | \dots\ i = 1,2,3,4\}^T$$

le vecteur des degrés de liberté mécaniques local de l'élément coque et en utilisant les relations suivantes dans le cas d'un problème linéaire élastique

$$\underbrace{\{\varepsilon^u\}}_{5\times1} = \underbrace{[B]}_{5\times24}\underbrace{\{u_l^e\}}_{24\times1} \quad ; \quad \underbrace{\{\tilde{\varepsilon}\}}_{5\times1} = \underbrace{[\tilde{M}]}_{5\times7}\underbrace{\{\alpha\}}_{7\times1} \quad ; \quad \underbrace{\{u\}}_{3\times1} = \underbrace{[N]}_{3\times24}\underbrace{\{u_l^e\}}_{24\times1} \quad ; \quad \underbrace{\{\sigma\}}_{5\times1} = \underbrace{[C]}_{5\times5}\underbrace{\{\tilde{\varepsilon}^\star\}}_{5\times1} \quad \text{(D.10)}$$

nous pouvons déduire la nouvelle expression du TTV (D.9) :

$$\begin{aligned} &\int_{V^e} \Big(\{\delta u_l^e\}^T[B]^T + \{\delta\alpha^T\}[\tilde{M}]^T\Big)[C]\Big([B]\{u_l^e\} + [M]\{\alpha\}\Big)\ dV \\ &- \int_{V^e}\{\delta u_l^e\}^T[N]^T\{f^v\}\ dV - \int_S \{\delta u_l^e\}^T[N]^T\{T\}\ dS \\ &+\beta H\ \int_{A^e}\{\delta u_l^e\}^T\Big(\{N_{1\theta}\}\{N_{1\theta}\}^T + \{N_{2\theta}\}\{N_{2\theta}\}^T\Big)\{u_l^e\}\ dA = 0 \end{aligned} \quad \text{(D.11)}$$

avec $\{N_{1\theta}\}$ et $\{N_{2\theta}\}$ sont définies dans l'Equation (3.42) et $\beta = 10^{-6}$. En regroupant les termes en fonction de $\{\delta u_l^e\}$ et $\{\delta\alpha\}$, nous obtenons :

$$\begin{aligned}
&\{\delta u_l^e\}^T \Bigg[\Big(\underbrace{\int_{V^e} [B]^T[C][B]\, dV + \beta H \int_{A^e} (\{N_{1\theta}\}\{N_{1\theta}\}^T + \{N_{2\theta}\}\{N_{2\theta}\}^T) dA}_{[k_l^e]} \Big) \{u_l^e\} \\
&+ \underbrace{\int_{V^e} [B]^T[C][M]\, dV}_{[L]^T} \{\alpha\} \Bigg] \\
&+ \{\delta\alpha\}^T \Bigg[\underbrace{\int_{V^e} [M]^T[C][B]\, dV}_{[L]} \{u_l^e\} + \underbrace{\int_{V^e} [M]^T[C][M]\, dV}_{[D]} \{\alpha\} \Bigg] \\
&= \{\delta u_l^e\}^T \Bigg[\underbrace{\int_{V^e} [N]^T\{f^v\}\, dV + \int_S [N]^T\{T\}\, dS}_{\{f_l^e\}} \Bigg]
\end{aligned} \tag{D.12}$$

En identifiant, nous aurons donc le système suivant :

$$\begin{cases} [k_l^e]\{u_l^e\} & +[L]^T\{\alpha\} & = & \{f_l^e\} \\ [L]\{u_l^e\} & +[D]\{\alpha\} & = & \{0\} \end{cases} \tag{D.13}$$

Les paramètres internes α_i peuvent être éliminés au sein de l'élément par une condensation statique. La deuxième relation du système (D.13) donne l'expression du vecteur $\underline{\alpha}$:

$$\{\alpha\} = -[D]^{-1}[L]\{u_l^e\} \tag{D.14}$$

La première relation du système (D.13) devient donc en remplaçant $\underline{\alpha}$ par son expression (D.14) :

$$\Big(\underbrace{[k_l^e] - [L]^T[D]^{-1}[L]}_{[k_l^{e\star}]} \Big) \{u_l^e\} = \{f_l^e\} \tag{D.15}$$

Nous retrouvons dans l'Equation (D.15) la matrice de rigidité d'une approche en déplacement pure $[k_l^e]$ de laquelle nous retranchons la matrice $[L]^T[D]^{-1}[L]$. Le fait qu'une nouvelle matrice est soustraite de la matrice de rigidité initiale $[k_l^e]$ rend l'élément coque plus flexible et évite ainsi le verrouillage.

Annexe E

Détermination du potentiel électrique quadratique

L'expression linéaire du potentiel électrique (Equation (3.36)) est enrichie en utilisant le concept des fonctions bulles [3] comme suit :

$$\varphi^e(\xi,\eta,\zeta) = \frac{1-\zeta}{2}\sum_{i=1}^{4} N_i(\xi,\eta)\varphi_b^{(i)} + \frac{1+\zeta}{2}\sum_{i=1}^{4} N_i(\xi,\eta)\varphi_t^{(i)} + g(\zeta)\ \varphi_0^e \tag{E.1}$$

où $g(\zeta) = \frac{1-\zeta^2}{4}$ est la fonction bulle $\Big(\ g(\zeta = \pm 1) = 0\ \Big)$ permettant de vérifier les conditions aux limites électriques et φ_0^e est un paramètre constant. La troisième composante curviligne du champ électrique devient donc :

$$E_z = E_3 = -\frac{1}{h}\sum_{i=1}^{4} N_i(\xi,\eta)\Big(\varphi_t^{(i)} - \varphi_b^{(i)}\Big) - \frac{2}{h}\frac{dg}{d\zeta}\varphi_0^e \tag{E.2}$$

Au niveau de l'élément, un nouveau vecteur de degrés de liberté électromécaniques locaux est défini par :

$$\underbrace{\{d_l^{e\,\star}\}}_{33\times 1} = \{\{d_l^e\} \vdots \varphi_0^e\} = \{\dots |\ U_i\ V_i\ W_i \vdots \theta_1^{(i)}\ \theta_2^{(i)}\ \theta_3^{(i)} \vdots \varphi_b^{(i)}\ \varphi_t^{(i)}\ |\dots\ \varphi_0^e\}^T \tag{E.3}$$

Le vecteur des déformations curvilignes généralisé $\{\Gamma\}$ est lié au nouveau vecteur $\{d_l^{e\,\star}\}$ par une nouvelle matrice $[B^\star]$ de taille (6×33) définie par :

$$[B^\star] = \begin{bmatrix} & 0 \\ & 0 \\ \underbrace{[B_m]}_{5\times 32} & 0 \\ & 0 \\ & 0 \\ \cdots & \cdots \\ \{B_e\}^T & -\dfrac{2}{h}\dfrac{dg}{d\zeta} \end{bmatrix} \tag{E.4}$$

où $[B_m]$ est une matrice reliant le vecteur des déformations curvilignes mécaniques

$$\{\varepsilon_m\} = \{\varepsilon_{11}\ \varepsilon_{22}\ 2\varepsilon_{12}\ 2\varepsilon_{13}\ 2\varepsilon_{23}\}^T$$

à $\{d_l^e\}$ et $\{B_e\}$ est un vecteur liant E_z à $\{d_l^e\}$.
La nouvelle matrice de rigidité locale $[k_l^{e\,\star}]$ est donnée par :

$$\underbrace{[k_l^{e\,\star}]}_{33\times 33} = \int_{V^e} \underbrace{[B^\star]^T}_{33\times 6}\underbrace{[L]}_{6\times 6}\underbrace{[B^\star]}_{6\times 33} dV \quad ; \quad [L] = \begin{bmatrix} [C^E] & -\{e\} \\ \cdots & \cdots \\ \{e\}^T & \epsilon_{33}^{\varepsilon\,\star} \end{bmatrix} \tag{E.5}$$

avec

$$\{e\} = \{e_{31} - e_{33}\frac{C_{13}^E}{C_{33}^E} \quad e_{31} - e_{33}\frac{C_{13}^E}{C_{33}^E} \quad 0 \quad 0 \quad 0\}^T \quad ; \quad \epsilon_{33}^{\varepsilon\,\star} = \epsilon_{33}^{\varepsilon} + \frac{e_{33}^2}{C_{33}^E} \tag{E.6}$$

$$[C^E] = \begin{bmatrix} Q_{11}^E & Q_{12}^E & 0 & 0 & 0 \\ Q_{12}^E & Q_{11}^E & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & Q_{66}^E & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & Q_{44}^E & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & Q_{44}^E \end{bmatrix} \quad ; \quad \begin{cases} Q_{11}^E &= C_{11}^E - \dfrac{C_{13}^{E\,2}}{C_{33}^E} \\ Q_{12}^E &= C_{12}^E - \dfrac{C_{13}^{E\,2}}{C_{33}^E} \\ Q_{44}^E &= C_{44}^E + \dfrac{e_{15}^2}{\epsilon_{11}^\varepsilon} \\ Q_{66}^E &= \dfrac{1}{2}(C_{11}^E - C_{12}^E) \end{cases} \tag{E.7}$$

et

$$[B^\star]^T[L][B^\star] = \begin{bmatrix} [B_m]^T\Big([C^E][B_m] - \{e\}\{B_e\}^T\Big) & \vdots & \dfrac{2}{h}\dfrac{dg}{d\zeta}[B_m]^T\{e\} \\ +\{B_e\}\Big(\{e\}^T[B_m] + \epsilon_{33}^{\varepsilon\,\star}\{B_e\}^T\Big) & \vdots & -\dfrac{2}{h}\dfrac{dg}{d\zeta}\epsilon_{33}^{\varepsilon\,\star}\{B_e\} \\ \cdots \quad \cdots & \cdots & \cdots \quad \cdots \quad \cdots \\ -\dfrac{2}{h}\dfrac{dg}{d\zeta}\Big(\{e\}^T[B_m] + \epsilon_{33}^{\varepsilon\,\star}\{B_e\}^T\Big) & \vdots & \dfrac{4}{h^2}\Big(\dfrac{dg}{d\zeta}\Big)^2\epsilon_{33}^{\varepsilon\,\star} \end{bmatrix} \tag{E.8}$$

Pour un problème piézoélectrique linéaire, nous devons résoudre au niveau de l'élément un système de la forme :

$$[k_l^{e\,\star}] \left\{ \begin{array}{c} \{d_l^e\} \\ \varphi_0^e \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{c} \{f_l^e\} \\ 0 \end{array} \right\} \tag{E.9}$$

où $\{f_l^e\}$ est le vecteur des forces nodales local. En se basant sur les relations (E.8) et (E.9), nous pouvons écrire l'équation suivante pour déterminer φ_0^e :

$$\int_{V^e} -\frac{2}{h}\frac{dg}{d\zeta}\Big(\{e\}^T[B_m] + \epsilon_{33}^{\varepsilon\star}\{B_e\}^T\Big)dV \;\; \{d_l^e\} + \int_{V^e} \frac{4}{h^2}\Big(\frac{dg}{d\zeta}\Big)^2 \epsilon_{33}^{\varepsilon\star} dV \;\; \varphi_0^e = 0 \tag{E.10}$$

soit

$$\varphi_0^e = -\Big[\underbrace{\int_{V^e} \frac{4}{h^2}\Big(\frac{dg}{d\zeta}\Big)^2 \epsilon_{33}^{\varepsilon\star} dV}_{Q_2}\Big]^{-1} \times \Big[\underbrace{\int_{V^e} -\frac{2}{h}\frac{dg}{d\zeta}\Big(\{e\}^T[B_m] + \epsilon_{33}^{\varepsilon\star}\{B_e\}^T\Big)dV}_{\{Q_1\}^T} \;\; \{d_l^e\}\Big] \tag{E.11}$$

Finalement, la troisième composante curviligne du champ électrique suivant l'épaisseur s'écrit en fonction de l'expression (E.11) de φ_0^e comme suit :

$$E_z(\xi,\eta,\zeta) = -\frac{1}{h}\sum_{i=1}^{4} N_i(\xi,\eta)\Big(\varphi_t^{(i)} - \varphi_b^{(i)}\Big) - \frac{\zeta}{h}\frac{\{Q_1\}^T}{Q_2}\{d_l^e\} = \{B_e^\star\}^T\{d_l^e\} \tag{E.12}$$

avec $\{Q_1\}$ and Q_2 définis dans l'Equation (E.11) et $\{B_e^\star\}$ est un nouveau vecteur qui lie E_z à $\{d_l^e\}$.

Annexe F

Déformations curvilignes du SFR8P

En notant t_{iX}, t_{iY} et t_{iZ} les composantes du vecteur tangent $\underline{t}_i$ dans la base cartésienne, nous pouvons montrer que les déformations curvilignes de l'élément SFR8P sont données par les expressions suivantes :

$$\begin{aligned}
\varepsilon_{xx} &= \Big(C_{z11}N_{i,\xi} + C_{z21}N_{i,\eta} + C_{z31}N_{i,\zeta}\Big)\underline{t}_1 \cdot \underline{U}_i \\
&+ \left[C_{z11}\Big(Y_{\xi\,i}t_{1Z} - Z_{\xi\,i}t_{1Y}\Big) + C_{z21}\Big(Y_{\eta\,i}t_{1Z} - Z_{\eta\,i}t_{1Y}\Big) + C_{z31}\Big(Y_{\zeta\,i}t_{1Z} - Z_{\zeta\,i}t_{1Y}\Big)\right]\theta_{Xi} \\
&+ \left[C_{z11}\Big(Z_{\xi\,i}t_{1X} - X_{\xi\,i}t_{1Z}\Big) + C_{z21}\Big(Z_{\eta\,i}t_{1X} - X_{\eta\,i}t_{1Z}\Big) + C_{z31}\Big(Z_{\zeta\,i}t_{1X} - X_{\zeta\,i}t_{1Z}\Big)\right]\theta_{Yi} \\
&+ \left[C_{z11}\Big(X_{\xi\,i}t_{1Y} - Y_{\xi\,i}t_{1X}\Big) + C_{z21}\Big(X_{\eta\,i}t_{1Y} - Y_{\eta\,i}t_{1X}\Big) + C_{z31}\Big(X_{\zeta\,i}t_{1Y} - Y_{\zeta\,i}t_{1X}\Big)\right]\theta_{Zi}
\end{aligned} \tag{F.1}$$

$$\begin{aligned}
\varepsilon_{yy} &= \Big(C_{z12}N_{i,\xi} + C_{z22}N_{i,\eta} + C_{z32}N_{i,\zeta}\Big)\underline{t}_2 \cdot \underline{U}_i \\
&+ \left[C_{z12}\Big(Y_{\xi\,i}t_{2Z} - Z_{\xi\,i}t_{2Y}\Big) + C_{z22}\Big(Y_{\eta\,i}t_{2Z} - Z_{\eta\,i}t_{2Y}\Big) + C_{z32}\Big(Y_{\zeta\,i}t_{2Z} - Z_{\zeta\,i}t_{2Y}\Big)\right]\theta_{Xi} \\
&+ \left[C_{z12}\Big(Z_{\xi\,i}t_{2X} - X_{\xi\,i}t_{2Z}\Big) + C_{z22}\Big(Z_{\eta\,i}t_{2X} - X_{\eta\,i}t_{2Z}\Big) + C_{z32}\Big(Z_{\zeta\,i}t_{2X} - X_{\zeta\,i}t_{2Z}\Big)\right]\theta_{Yi} \\
&+ \left[C_{z12}\Big(X_{\xi\,i}t_{2Y} - Y_{\xi\,i}t_{2X}\Big) + C_{z22}\Big(X_{\eta\,i}t_{2Y} - Y_{\eta\,i}t_{2X}\Big) + C_{z32}\Big(X_{\zeta\,i}t_{2Y} - Y_{\zeta\,i}t_{2X}\Big)\right]\theta_{Zi}
\end{aligned} \tag{F.2}$$

$$
\begin{aligned}
\varepsilon_{zz} &= \Big(C_{z13}N_{i,\xi} + C_{z23}N_{i,\eta} + C_{z33}N_{i,\zeta}\Big)\underline{t}_3 \cdot \underline{U}_i \\
&+ \Big[C_{z13}\Big(Y_{\xi\,i}t_{3Z} - Z_{\xi\,i}t_{3Y}\Big) + C_{z23}\Big(Y_{\eta\,i}t_{3Z} - Z_{\eta\,i}t_{3Y}\Big) + C_{z33}\Big(Y_{\zeta\,i}t_{3Z} - Z_{\zeta\,i}t_{3Y}\Big)\Big]\theta_{Xi} \\
&+ \Big[C_{z13}\Big(Z_{\xi\,i}t_{3X} - X_{\xi\,i}t_{3Z}\Big) + C_{z23}\Big(Z_{\eta\,i}t_{3X} - X_{\eta\,i}t_{3Z}\Big) + C_{z33}\Big(Z_{\zeta\,i}t_{3X} - X_{\zeta\,i}t_{3Z}\Big)\Big]\theta_{Yi} \\
&+ \Big[C_{z13}\Big(X_{\xi\,i}t_{3Y} - Y_{\xi\,i}t_{3X}\Big) + C_{z23}\Big(X_{\eta\,i}t_{3Y} - Y_{\eta\,i}t_{3X}\Big) + C_{z33}\Big(X_{\zeta\,i}t_{3Y} - Y_{\zeta\,i}t_{3X}\Big)\Big]\theta_{Zi}
\end{aligned}
\tag{F.3}
$$

$$
\begin{aligned}
\gamma_{xy} &= \Big(C_{z12}N_{i,\xi} + C_{z22}N_{i,\eta} + C_{z32}N_{i,\zeta}\Big)\underline{t}_1 \cdot \underline{U}_i + \Big(C_{z11}N_{i,\xi} + C_{z21}N_{i,\eta} + C_{z31}N_{i,\zeta}\Big)\underline{t}_2 \cdot \underline{U}_i \\
&+ \Big[C_{z12}\Big(Y_{\xi\,i}t_{1Z} - Z_{\xi\,i}t_{1Y}\Big) + C_{z22}\Big(Y_{\eta\,i}t_{1Z} - Z_{\eta\,i}t_{1Y}\Big) + C_{z32}\Big(Y_{\zeta\,i}t_{1Z} - Z_{\zeta\,i}t_{1Y}\Big) \\
&+ C_{z11}\Big(Y_{\xi\,i}t_{2Z} - Z_{\xi\,i}t_{2Y}\Big) + C_{z21}\Big(Y_{\eta\,i}t_{2Z} - Z_{\eta\,i}t_{2Y}\Big) + C_{z31}\Big(Y_{\zeta\,i}t_{2Z} - Z_{\zeta\,i}t_{2Y}\Big)\Big]\theta_{Xi} \\
&+ \Big[C_{z12}\Big(Z_{\xi\,i}t_{1X} - X_{\xi\,i}t_{1Z}\Big) + C_{z22}\Big(Z_{\eta\,i}t_{1X} - X_{\eta\,i}t_{1Z}\Big) + C_{z32}\Big(Z_{\zeta\,i}t_{1X} - X_{\zeta\,i}t_{1Z}\Big) \\
&+ C_{z11}\Big(Z_{\xi\,i}t_{2X} - X_{\xi\,i}t_{2Z}\Big) + C_{z21}\Big(Z_{\eta\,i}t_{2X} - X_{\eta\,i}t_{2Z}\Big) + C_{z31}\Big(Z_{\zeta\,i}t_{2X} - X_{\zeta\,i}t_{2Z}\Big)\Big]\theta_{Yi} \\
&+ \Big[C_{z12}\Big(X_{\xi\,i}t_{1Y} - Y_{\xi\,i}t_{1X}\Big) + C_{z22}\Big(X_{\eta\,i}t_{1Y} - Y_{\eta\,i}t_{1X}\Big) + C_{z32}\Big(X_{\zeta\,i}t_{1Y} - Y_{\zeta\,i}t_{1X}\Big) \\
&+ C_{z11}\Big(X_{\xi\,i}t_{2Y} - Y_{\xi\,i}t_{2X}\Big) + C_{z21}\Big(X_{\eta\,i}t_{2Y} - Y_{\eta\,i}t_{2X}\Big) + C_{z31}\Big(X_{\zeta\,i}t_{2Y} - Y_{\zeta\,i}t_{2X}\Big)\Big]\theta_{Zi}
\end{aligned}
\tag{F.4}
$$

$$
\begin{aligned}
\gamma_{xz} &= \Big(C_{z13}N_{i,\xi} + C_{z23}N_{i,\eta} + C_{z33}N_{i,\zeta}\Big)\underline{t}_1 \cdot \underline{U}_i + \Big(C_{z11}N_{i,\xi} + C_{z21}N_{i,\eta} + C_{z31}N_{i,\zeta}\Big)\underline{t}_3 \cdot \underline{U}_i \\
&+ \Bigg[C_{z13}\Big(Y_{\xi\,i}t_{1Z} - Z_{\xi\,i}t_{1Y}\Big) + C_{z23}\Big(Y_{\eta\,i}t_{1Z} - Z_{\eta\,i}t_{1Y}\Big) + C_{z33}\Big(Y_{\zeta\,i}t_{1Z} - Z_{\zeta\,i}t_{1Y}\Big) \\
&+ C_{z11}\Big(Y_{\xi\,i}t_{3Z} - Z_{\xi\,i}t_{3Y}\Big) + C_{z21}\Big(Y_{\eta\,i}t_{3Z} - Z_{\eta\,i}t_{3Y}\Big) + C_{z31}\Big(Y_{\zeta\,i}t_{3Z} - Z_{\zeta\,i}t_{3Y}\Big)\Bigg]\theta_{Xi} \\
&+ \Bigg[C_{z13}\Big(Z_{\xi\,i}t_{1X} - X_{\xi\,i}t_{1Z}\Big) + C_{z23}\Big(Z_{\eta\,i}t_{1X} - X_{\eta\,i}t_{1Z}\Big) + C_{z33}\Big(Z_{\zeta\,i}t_{1X} - X_{\zeta\,i}t_{1Z}\Big) \\
&+ C_{z11}\Big(Z_{\xi\,i}t_{3X} - X_{\xi\,i}t_{3Z}\Big) + C_{z21}\Big(Z_{\eta\,i}t_{3X} - X_{\eta\,i}t_{3Z}\Big) + C_{z31}\Big(Z_{\zeta\,i}t_{3X} - X_{\zeta\,i}t_{3Z}\Big)\Bigg]\theta_{Yi} \\
&+ \Bigg[C_{z13}\Big(X_{\xi\,i}t_{1Y} - Y_{\xi\,i}t_{1X}\Big) + C_{z23}\Big(X_{\eta\,i}t_{1Y} - Y_{\eta\,i}t_{1X}\Big) + C_{z33}\Big(X_{\zeta\,i}t_{1Y} - Y_{\zeta\,i}t_{1X}\Big) \\
&+ C_{z11}\Big(X_{\xi\,i}t_{3Y} - Y_{\xi\,i}t_{3X}\Big) + C_{z21}\Big(X_{\eta\,i}t_{3Y} - Y_{\eta\,i}t_{3X}\Big) + C_{z31}\Big(X_{\zeta\,i}t_{3Y} - Y_{\zeta\,i}t_{3X}\Big)\Bigg]\theta_{Zi}
\end{aligned}
\tag{F.5}
$$

$$
\begin{aligned}
\gamma_{yz} &= \Big(C_{z13}N_{i,\xi} + C_{z23}N_{i,\eta} + C_{z33}N_{i,\zeta}\Big)\underline{t}_2 \cdot \underline{U}_i + \Big(C_{z12}N_{i,\xi} + C_{z22}N_{i,\eta} + C_{z32}N_{i,\zeta}\Big)\underline{t}_3 \cdot \underline{U}_i \\
&+ \Bigg[C_{z13}\Big(Y_{\xi\,i}t_{2Z} - Z_{\xi\,i}t_{2Y}\Big) + C_{z23}\Big(Y_{\eta\,i}t_{2Z} - Z_{\eta\,i}t_{2Y}\Big) + C_{z33}\Big(Y_{\zeta\,i}t_{2Z} - Z_{\zeta\,i}t_{2Y}\Big) \\
&+ C_{z12}\Big(Y_{\xi\,i}t_{3Z} - Z_{\xi\,i}t_{3Y}\Big) + C_{z22}\Big(Y_{\eta\,i}t_{3Z} - Z_{\eta\,i}t_{3Y}\Big) + C_{z32}\Big(Y_{\zeta\,i}t_{3Z} - Z_{\zeta\,i}t_{3Y}\Big)\Bigg]\theta_{Xi} \\
&+ \Bigg[C_{z13}\Big(Z_{\xi\,i}t_{2X} - X_{\xi\,i}t_{2Z}\Big) + C_{z23}\Big(Z_{\eta\,i}t_{2X} - X_{\eta\,i}t_{2Z}\Big) + C_{z33}\Big(Z_{\zeta\,i}t_{2X} - X_{\zeta\,i}t_{2Z}\Big) \\
&+ C_{z12}\Big(Z_{\xi\,i}t_{3X} - X_{\xi\,i}t_{3Z}\Big) + C_{z22}\Big(Z_{\eta\,i}t_{3X} - X_{\eta\,i}t_{3Z}\Big) + C_{z32}\Big(Z_{\zeta\,i}t_{3X} - X_{\zeta\,i}t_{3Z}\Big)\Bigg]\theta_{Yi} \\
&+ \Bigg[C_{z13}\Big(X_{\xi\,i}t_{2Y} - Y_{\xi\,i}t_{2X}\Big) + C_{z23}\Big(X_{\eta\,i}t_{2Y} - Y_{\eta\,i}t_{2X}\Big) + C_{z33}\Big(X_{\zeta\,i}t_{2Y} - Y_{\zeta\,i}t_{2X}\Big) \\
&+ C_{z12}\Big(X_{\xi\,i}t_{3Y} - Y_{\xi\,i}t_{3X}\Big) + C_{z22}\Big(X_{\eta\,i}t_{3Y} - Y_{\eta\,i}t_{3X}\Big) + C_{z32}\Big(X_{\zeta\,i}t_{3Y} - Y_{\zeta\,i}t_{3X}\Big)\Bigg]\theta_{Zi}
\end{aligned}
\tag{F.6}
$$

Bibliographie

[1] Abaqus Version 6.7. *Analysis User's Manual, volume IV : Elements.*

[2] Abaqus Version 6.7. *Analysis User's Manual, volume VI : User Subroutines and Parametric Studies.*

[3] M. A. Al-Ajmi and A. Benjeddou. Damage indication in smart structures using modal effective electromechanical coupling coefficients. *Smart Materials and Structures*, 17 :35023(15p), 2008.

[4] M. Allahverdi, S.C. Danforth, M. Jafari, and A. Safari. Processing of advanced electroceramic components by fused deposition technique. *Journal of the European Ceramic Society*, 21 :1485–1490, 2001.

[5] M. Allahverdi, A. Hall, R. Brennan, M.E. Ebrahimi, N. Marandian Hagh, and A. Safari. An overview of rapidly prototyped piezoelectric actuators and grain-oriented ceramics. *Journal of Electroceramics*, 8 :129–137, 2002.

[6] H. Allik and T.J.R. Hughes. Finite element method for piezoelectric vibration. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2 :151–157, 1970.

[7] H. Allik, K.M. Webman, and J.T. Hunt. Vibrational response of sonar transducers using piezoelectric finite elements. *Journal of the Acoustical Society of America*, 56 :1782–1791, 1974.

[8] U. Andelfinger and E. Ramm. EAS-elements for two-dimensional, three-dimensional, plate and shell structures and their equivalence to hr-elements. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 36 :1311–1337, 1993.

[9] R. Ayad. A 3d 8-node solid finite element based upon the « space fiber rotation » concept. In *Proceedings of the 16 th French Mechanical Conference*, September 2003.

[10] E. Bassiouny, , A.F. Ghaleb, and G.A. Maugin. Thermomechanical formulation for coupled electromechanical hysteresis effects-I. basic equations, II. poling of ceramics. *International Journal of Engineering Science*, 26 :1279–1306, 1988.

[11] E. Bassiouny and G.A. Maugin. Thermomechanical formulation for coupled electromechanical hysteresis effects-III. parameter identification, IV. combined electromechanical loading. *International Journal of Engineering Science*, 27 :975–1000, 1989.

[12] J.L. Batoz and G. Dhatt. *Modélisation des structures par éléments finis, volume 3 : coques.* Hermes, 1992.

[13] A. Benjeddou. Advances in piezoelectric finite element modeling of adaptive structural elements : a survey. *Computers and Structures*, 76 :347–363, 2000.

[14] M. Bernadou and C. Haenel. Modelization and numerical approximation of piezoelectric thin shells. part II : Approximation by finite element methods and numerical experiments. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 192 :4045–4073, 2003.

[15] H. Cao and A. G. Evans. Nonlinear deformation of ferroelectric ceramics. *Journal of the American Ceramic Society*, 76 :890–896, 1993.

[16] R.G. Carr. Finite element analysis of PZT tube scanner motion for scanning tunnelling microscopy. *Journal of Microscopy*, 152 :379–385, 1988.

[17] S. Chandran, V.D. Kugel, and L.E. Cross. Crescent : a novel piezoelectric bending actuator. *Proc. International Society for Optical Engineering, SPIE, USA*, 3041 :461–469, 1997.

[18] P.M. Chaplya and G.P. Carman. Compression of piezoelectric ceramic at constant electric field : Energy absorption through non-180° domain-wall motion. *Journal of Applied Physics*, 92 :1504–1510, 2002.

[19] C. J. Chen. Electromechanical deflections of piezoelectric tubes with quartered electrodes. *Applied Physics Letters*, 60 :132, 1992.

[20] P.J. Chen. Three dimensional dynamic electromechanical constitutive relations for ferroelectric materials. *International Journal of Solids and Structures*, 16 :1059–1068, 1980.

[21] P.J. Chen and S.T. Mongomery. A Macroscopic Theory for the Existence of the Hysteresis and Butterfly Loops in Ferroelectricity. *Ferroelectrics*, 23 :199–208, 1980.

[22] W. Chen and C.S. Lynch. Multiaxial Constitutive Behavior of Ferroelectric Materials. *Journal of Engineering Materials and Technology*, 123 :169–175, 2001.

[23] Y.H. Chen, T. Li, F.Y.C. Boey, and J. Ma. Electrophoretic deposition and characterization of helical piezoelectric actuator. *Ceramics International*, 34 :1–6, 2008.

[24] A. Cocks. A phenomenological constitutive law for the behaviour of ferroelectric ceramics. *Ferroelectrics*, 228 :219–228, 1999.

[25] D. Damjanovic. *The Science of Hysteresis, Chapter 4 : Hysteresis in Piezoelectric and Ferroelectric Materials*. Elsevier, 2005.

[26] D. Damjanovic and R.E. Newnham. Electrostrictive and piezoelectric materials for actuator applications. *Journal of Intelligent Material Systems and Structures*, 3 :190–208, 1992.

[27] R.C. Devries and J.E. Burke. Microstructure of barium titanate ceramics. *Journal of the American Ceramic Society*, 40 :200–206, 1957.

[28] E.N. Dvorkin and K-J. Bathe. A continuum mechanics based four-node shell element for general non-linear analysis. *Engineering computations*, 1 :77–88, 1984.

[29] M. Elhadrouz. *Modélisation du Comportement de Céramiques Ferroélectriques et Ferroélastiques*. PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Métiers, Centre de Metz, 2004.

[30] M. Elhadrouz, T. Ben Zineb, and E. Patoor. Constitutive law for ferroelastic and ferroelectric piezoceramics. *Journal of Intelligent Material Systems and Structures*, 16 :221–236, 2005.

[31] M. Elhadrouz, T. Ben Zineb, and E. Patoor. Constitutive law for ferroelectric and ferroelastic single crystals : a micromechanical approach. *Computational Materials Science*, 32 :355–359, 2005.

[32] M. Elhadrouz, T. Ben Zineb, and E. Patoor. Finite element analysis of a multilayered piezoelectric actuator taking into account the ferroelectric and ferroelastic behaviors. *International Journal of Engineering Science*, 44 :996–1006, 2006.

[33] T. Fett, S. Müller, D. Munz, and G. Thun. Nonsymmetry in the deformation behaviour of PZT. *Journal of Materials Science Letters*, 17 :261–265, 1998.

[34] T. Fett, D. Munz, and G. Thun. Tensile and bending strength of piezoelectric ceramics. *Journal of Materials Science Letters*, 18 :1899–1902, 1999.

[35] T. Fett and G. Thun. Determination of room-temperature tensile creep of PZT. *Journal of Materials Science Letters*, 17 :1929–1931, 1998.

[36] E. Fukada. *Ferroelectric Polymers : Chemistry, Physics, and Applications*. H.S. Nalwa, Ed., Marcell Dekker, Inc., New York, 1995.

[37] S.K. Ha, C. Keilers, and F.K. Chang. Finite element analysis of composite structures containing distributed piezoceramic sensors and actuators. *AIAA J*, 30 :772–780, 1992.

[38] G. H. Haertling. Ferroelectric ceramics : History and Technology. *Journal of the American Ceramic Society*, 82 :797–818, 1999.

[39] J.E. Huber and N.A. Fleck. Multi-axial electric switching of a ferroelectric : theory versus experiment. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 49 :785–811, 2001.

[40] J.E. Huber, N.A. Fleck, C.M. Landis, and R.M. McMeeking. A constitutive model of ferroelectrics. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 47 :1663–1697, 1999.

[41] S. C. Hwang, C. S. Lynch, and R. M. McMeeking. Ferroelectric/Ferroelastic interactions and a polarization switching model. *Acta Metallurgica et Materialia*, 43 :2073–2084, 1995.

[42] S.C. Hwang and R.M. McMeeking. A finite element model of ferroelastic polycrystals. *International Journal of Solids and Structures*, 36 :1541–1556, 1998.

[43] S.C. Hwang and R.M. McMeeking. A finite element model of ferroelectric polycrystals. *Ferroelectrics*, 211 :177–194, 1998.

[44] S.C. Hwang and R.M. McMeeking. The predictions of switching in polycristalline ferroelectric ceramics. *Ferroelectrics*, 207 :465–495, 1998.

[45] T. Ikeda. *Fundamentals of piezoelectricity*. Oxford University Press, 1996.

[46] B. Jaffe, W.R. Cook, and H. Jaffe. *Piezoelectric Ceramics*. Academic Press, New York, 1971.

[47] M. Kamlah. Review article : Ferroelectric and ferroelastic piezoceramics-modeling of electromechanical hysteresis phenomena. *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, 13 :219–268, 2001.

[48] M. Kamlah and U. Böhle. Finite element analysis of piezoceramic components taking into account ferroelectric hysteresis behavior. *International Journal of Solids and Structures*, 38 :605–633, 2001.

[49] M. Kamlah, A.C. Liskowsky, R.M. McMeeking, and H. Balke. Finite element simulation of a polycrystalline ferroelectric based on a multidomain single crystal switching model. *International Journal of Solids and Structures*, 42 :2949–2964, 2005.

[50] M. Kamlah and C. Tsakmakis. Phenomenological modelling of the non linear electromechanical coupling in ferroelectrics. *International Journal of Solids and Structures*, 36 :669–695, 1999.

[51] H. Kawai. The piezoelectricity of poly(vinylidene fluoride). *Japanese Journal of Applied Physics*, 8 :975–976, 1969.

[52] S. Klinkel. A phenomenological constitutive model for ferroelastic and ferroelectric hysteresis effects in ferroelectric ceramics. *International Journal of Solids and Structures*, 2006.

[53] S. Klinkel and W. Wagner. A piezoelectric solid shell element based on a mixed variational formulation for geometrically linear and nonlinear applications. *Computers and Structures*, 86 :38–46, 2008.

[54] M. Kögl and M. L. Bucalem. Locking-free piezoelectric MITC shell elements. In : K.J. Bathe, Editor. *Computational Fluid and Solid Mechanics, Elsevier*, pages 392–395, 2003.

[55] M. Kögl and M.L. Bucalem. A family of piezoelectric MITC plate elements. *Computers and Structures*, 83 :1277–1297, 2005.

[56] H. H. A. Krueger. Stress Sensitivity of Piezoelectric Ceramics. Part 1 : Sensitivity to Compressive Stress Parallel to the Polar Axis. *Journal of the Acoustical Society of America*, 42 :636–645, 1967.

[57] C. Landis. Fully coupled multi-axial, symmetric constitutive laws for poly crystalline ferroelectric ceramics. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2002.

[58] B. Laskewitz, M. Kamlah, and C. Chen. Investigations of the nonlinear behavior of piezoceramic hollow cylinders. *Journal of Intelligent Material Systems and Structures*, 17 :521–532, 2005.

[59] T. Li, J. Ma, and Y. H. Chen. A piezoelectric tube with a double-layer configuration. *Ceramics International*, 30 :1803–1805, 2004.

[60] M.W. Lin, A.O. Abatan, and C.A. Rogers. Application of commercial finite element codes for the analysis of induced strain-actuated structures. *Journal of intelligent material systems and structures*, 5 :869–875, 1994.

[61] G.M. Lindberg, M.D. Olson, and G.R. Cowper. New developments in the finite element analysis of shells. *National Research Council of Canada*, 4, 1969.

[62] M.E. Lines and A.M. Glass. *Principles and applications of ferroelectrics and related materials*. Oxford : Clarendon Press, 1977.

[63] C. S. Lynch. The effect of uniaxial stress on the electro-mechanical response of 8/65/35 PLZT. *Acta Metallurgica et Materialia*, 44 :4137–4148, 1996.

[64] R. M. McMeeking and C. Landis. A phenomenological multi-axial constitutive law for switching in polycristalline ferroelectric ceramics. *International Journal of Engineering Science*, 40 :1553–1577, 2002.

[65] R.H. MacNeal. A simple quadrilateral shell element. *Computers and Structures*, 8 :175–183, 1978.

[66] R.H. MacNeal and R.L. Harder. A proposed standard set of problems to test finite element accuracy. *Finite Element in Analysis and Design*, 1 :3–20, 1985.

[67] W.P. Masson. *Physical Acoustics and the Properties of Solids*. D. Van Nostrand Company, Inc., New York, 1958.

[68] R.M. McMeeking and S.C. Hwang. On the potential energy of a piezoelectric inclusion and the criterion for ferreoelectric switching. *Ferroelectrics*, 200 :151–173, 1997.

[69] B.Z. Mei, J.I. Schienbeim, and B.A. Newman. The ferroelectric behavior of odd-numbered nylons. *Ferroelectrics*, 144 :51–60, 1993.

[70] T. Michelitsch and W.S. Kreher. A simple model for the nonlinear material behavior of ferroelectrics. *Acta Materialia*, 46 :5085–5094, 1998.

[71] F. Mohammadi, A.L. Kholkin, B. Jadidian, and A. Safari. High-displacement spiral piezoelectric actuators. *Applied Physics Letters*, 75(16) :2488–2490, 1999.

[72] C. Poizat and A. Benjeddou. On analytical and finite element modelling of piezoelectric extension and shear bimorphs. *Computers and Structures*, 84 :1426–1437, 2006.

[73] A.B. Schäufele and K.H. Härdtl. Ferroelastic Properties of Lead Zirconate Titanate Ceramics. *Journal of the American Ceramic Society*, 79 :2637–2640, 1996.

[74] A. Schnell. Nonlinear charge release of piezoelectric ceramics under uniaxial pressure. *Ferroelectrics*, 28 :351–353, 1980.

[75] J. C. Simo and T. J. R. Hughes. *Computational Inelasticity*. Springer, 1998.

[76] J. C. Simo and M. S. Rifai. A class of mixed assumed strain methods and the method of incompatible modes. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 29 :1595–1638, 1990.

[77] J.C. Simo, D.D. Fox, and M.S. Rifai. On a stress resultant geometrically exact shell model. part II : The linear theory–computational aspects. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 73 :53–92, 1989.

[78] R.C. Smith. *Smart Material Systems : Model Development*. Frontiers in Applied Mathematics, 2008.

[79] J. G. Smits, S. I. Dalke, and T. K. Cooney. The constituent equations of piezoelectric bimorphs. *Sensors and Actuators*, 28 :41–61, 1991.

[80] J. Su, J.S. Harrison, and T.St. Clair. Novel polymeric elastomers for actuation. In *ISAF 2000 : Proceedings of the 2000 12th IEEE International Symposium on Applications of Ferroelectrics*, volume 2, pages 811–814, 2000.

[81] Q. Sun and R.A. Wolkow. Three dimensional displacement analysis of a piezoelectric tube scanner through finite element simulations of a tube assembly. *Review of Scientific Instruments*, 77 :113701, 2006.

[82] K. Y. Sze, L. Q. Yao, and S. Yi. A hybrid stress ANS solid-shell element and its generalization for smart structure modelling. Part II - smart structure modelling. *International Journal of Numerical Methods in Engineering*, 48 :565–582, 2000.

[83] V.V. Varadan, Y.H. Lim, and V.K. Varadan. Closed loop finite element modeling of active structural damping in the time domain. *Smart Materials and Structures*, 5 :685–694, 1996.

[84] W. Voigt. *Lehrbuch der Kristallphysik*. B.G. Teubner, Leipzig, Berlin, 1928.

[85] R. Zemicik, R. Rolfes, M. Rose, and J. Tessmer. High-performance 4-node shell element with piezoelectric coupling. *Mechanics of Advanced Materials and Structures*, 13 :393–401, 2006.

Résumé

Les céramiques piézoélectriques, comme le Titatano-Zirconate de Plomb (PZT), peuvent produire une tension électrique quand elles sont soumises à une contrainte mécanique et, inversement, se déforment sous l'effet d'un champ électrique. Ce couplage électromécanique peut être décrit par des équations de comportement linéaires pour des chargements modérés. Cependant, au-delà de certaines valeurs de champ électrique ou de contrainte mécanique, ce couplage devient fortement non linéaire à cause des phénomènes de réorientation de la polarisation électrique. Dans ce travail de thèse, un modèle phénoménologique, qui tient compte des réorientations ferroélectrique (par un champ électrique) et ferroélastique (par une contrainte mécanique) de la polarisation électrique, est proposé. Deux variables internes sont considérées pour décrire l'histoire du chargement et deux surfaces de charges électrique et mécanique sont définies pour déterminer les débuts des écoulements ferroélectrique et ferroélastique. Une version bi-dimensionnelle de ce modèle est développée également pour faire l'étude des structures piézoélectriques minces. Les deux versions 2D et 3D du modèle phénoménologique sont intégrées implicitement en adoptant la méthode de retour radial (prédiction/correction). Deux éléments finis coque et hexaédrique de premier ordre, qui intègrent ce modèle phénoménologique non linéaire, sont ensuite développés et implémentés dans le code de calcul par éléments finis Abaqus® via la routine utilisateur UEL (User ELement).

Mots-clés: piézoélectricité, ferroélectricité, ferroélasticité, méthode des éléments finis.

Abstract

Piezoceramics like lead zirconate titanate or PZT can produce an electric potential when they are subjected to a mechanical stress and deform in the presence of an electric field. This electromechanical coupling can be described by linear constitutive equations for moderate loadings. Nevertheless, this coupling becomes highly non linear when piezoceramics are subjected to high electromechanical loadings due to the electric polarization switching. In this thesis work, a phenomenological material constitutive model that describe the electric polarization ferroelectric switching (by an electric field) and ferroelastic switching (by a mechanical stress) is proposed. To describe the loading history, two internal variables are considered and two electric and mechanical loading surfaces are defined to indicate the onset of domain switchings. A bi-dimensional version of this model is developed to study thin piezoelectric structures. The phenomenological model 2D and 3D versions are implicitly integrated by adopting the return-mapping algorithm. Two shell and hexahedral first-order finite elements are then formulated and implemented into the commercial finite element code Abaqus ® via the user subroutine UEL (User ELement).

Keywords: piezoelectricity, ferroelectricity, ferroelasticity, finite element method.