



HAL
open science

Modélisation de l'orientation de fibres induite par l'écoulement et comportement élastique anisotrope à l'état solide

Houssem Miled

► **To cite this version:**

Houssem Miled. Modélisation de l'orientation de fibres induite par l'écoulement et comportement élastique anisotrope à l'état solide. Mécanique [physics.med-ph]. École Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2010. Français. NNT : 2010ENMP0078 . pastel-00712985

HAL Id: pastel-00712985

<https://pastel.hal.science/pastel-00712985>

Submitted on 28 Jun 2012

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

ÉCOLE NATIONALE SUPÉRIEURE DES MINES DE PARIS
École Doctorale 364 : Sciences Fondamentales et Appliquées

THÈSE

à présenter et soutenir publiquement le 9 Décembre 2010 par

Housseem Eddine MILED

en vue de l'obtention du titre de

DOCTEUR

en

MÉCANIQUE NUMÉRIQUE

**MODÉLISATION DE L'ORIENTATION DE FIBRES
INDUITE PAR L'ÉCOULEMENT ET COMPORTEMENT
THERMO-ELASTIQUE ANISOTROPE A L'ETAT SOLIDE**

Jury

Professeur Arnaud Poitou : Président
Professeur Gilles Regnier: Rapporteur
Professeur Moez Chafra: Rapporteur
Professeur Thierry COUPEZ: Directeur de thèse
Professeur Jean-François AGASSANT: Examineur
Docteur Luisa Silva: Examineur

Remerciements

Avant tout, je tiens à exprimer ma profonde affection à mes parents, qui m'ont donné et n'ont pas cessé de me donner tout type de soutien durant toutes les étapes de mon existence. Je leur dédie ce travail et toute réussite dans ma vie.

Je remercie monsieur Patrick Coels, qui était la première personne avec qui j'ai pris contact à l'Ecole des Mines. Il a toujours été à mon écoute pendant mes trois années de thèse et à contribué au fait que ma thèse se soit déroulée dans de bonnes conditions.

Je remercie la direction de l'Ecole des Mines de Paris de m'avoir permis d'effectuer ce travail de recherche au sein du Centre de Mise en Forme des Matériaux (CEMEF). Je remercie également tous les membres des équipes de recherche CIM (Calculs Intensifs en Mise en forme des matériaux) et EVE (Ecoulements ViscoElastiques) pour leur sympathie et leur coopération.

Je tiens à exprimer ma gratitude envers Luisa Silva, qui m'a encadré et suivi pendant mes travaux de thèse. Elle s'est toujours montrée disponible, et a toujours fais de son mieux pour m'apporter aide et conseil. Elle a fait preuve d'une grande patience. C'est une personne que j'estime beaucoup autant sur le plan professionnel que le plan humain.

Je remercie vivement Thierry Coupez et Jean-François Agassant. Travailler à leurs côtés était un grand honneur, étant donné leur grande réputation dans le monde de la recherche scientifique. Mais également de part l'enthousiasme qu'ils ont éprouvé pour le suivi de mon travail. Ils ont toujours su m'orienter à travers leurs explications et leurs consignes efficaces.

Cette thèse n'aurait pas pu démarrer sans le soutien financier du consortium Rem3D. Je remercie tout ceux qui ont représenté les partenaires industriels présents et qui m'ont permis d'être en contact direct avec le monde industriel.

J'exprime ma profonde reconnaissance aux membres du Jury dont certains sont venus de l'étranger, et d'autres du nord de la France malgré les conditions climatiques difficiles du 9 Décembre.

Une pensée à mes collègues de promotion de thèse et mes collègues de bureau avec qui des liens d'amitiés se sont établi.

Table des matières

1	Introduction	10
1.1	Motivation industrielle	10
1.2	Le procédé d'injection et son impact sur les propriétés finales	11
1.3	Objectifs et plan du manuscrit	15
1.3.1	Cadre des travaux	15
1.3.2	Objectif de l'étude	15
1.3.3	Plan	15
2	Modélisation et simulation de l'orientation de fibres induite par l'écoulement	19
2.1	Le phénomène d'orientation induit par l'écoulement	21
2.1.1	Mécanismes d'orientation	21
2.1.2	Paramètres influençant l'orientation de fibres	23
2.2	Descripteurs de l'orientation	23
2.2.1	Orientation d'une particule seule	23
2.2.2	Fonction de distribution d'orientation	24
2.2.3	Les tenseurs d'orientation	25
2.3	Modélisation de l'orientation de fibres en écoulement	28
2.3.1	Modèle d'évolution d'une fibre seule	28
2.3.2	Modèles d'évolution d'une population de fibres	28
2.4	Couplage rhéologie orientation	31
2.5	Prédiction et simulation numérique de l'orientation de fibres en injection	33
2.5.1	Démarche de résolution numérique en injection et hypothèses .	33
2.5.1.1	Le problème mécanique	35
2.5.1.2	Le problème de capture de surface libre	37
2.5.1.3	Le problème thermique	37
2.5.1.4	Couplage thermo-mécanique	38
2.5.1.5	Bibliographie sur la résolution du problème d'orientation de fibres	39
2.5.1.5.1	Simulation 2D de l'orientation de fibres . . .	39
2.5.1.5.2	Simulation 3D de l'orientation de fibres . . .	40

2.5.2	L'approche continue pour la simulation de l'anisotropie induite par l'écoulement	41
2.5.2.1	Formulation faible du problème d'orientation avec la méthode de Galerkin Standard	41
2.5.2.2	Méthodes de stabilisation pour l'équation d'orientation	45
2.5.2.2.1	La méthode SUPG	45
2.5.2.2.2	La méthode RFB	45
2.5.2.2.3	Exemple d'application	46
2.5.2.3	Normalisation du tenseur d'orientation	49
2.5.2.4	Comparaisons entre formulation continue et formulation discontinue	50
2.5.2.4.1	Précision	50
2.5.2.4.2	Temps de calcul	52
2.6	Conclusion	56
3	Solveurs élastiques	59
3.1	Solveur élastique linéaire isotrope	62
3.1.1	Écriture mixte en élasticité linéaire isotrope	62
3.1.2	Formulation variationnelle du problème mixte en élasticité linéaire isotrope	64
3.1.3	Discrétisation en éléments finis mixte	65
3.1.4	Validation du solveur élastique isotrope mixte : cas de la plaque trouée sollicitée en traction uniforme	67
3.2	Solveur élastique linéaire anisotrope	73
3.2.1	Écriture mixte en élasticité linéaire anisotrope	73
3.2.2	Formulation variationnelle du problème mixte en élasticité linéaire anisotrope	74
3.2.3	Discrétisation en éléments finis	75
3.2.4	Validation du solveur élastique anisotrope : cas de la poutre tridimensionnelle	75
3.3	Conclusion	78
4	Modèles analytiques pour l'homogénéisation des propriétés thermo-élastiques des thermoplastiques chargés de fibres	80
4.1	Intruduction	83
4.2	Identification analytique des propriétés thermo-élastiques unidirectionnelles	84
4.2.1	Matériau élastique isotrope transverse	84
4.2.2	Régimes de concentration des fibres	86
4.2.2.1	Régime dilué	87
4.2.2.2	Régime semi-dilué	87

4.2.2.3	Régime concentré	88
4.2.3	Homogénéisation en élasticité unidirectionnelle	88
4.2.3.1	Les bornes de Voigt et Reuss	89
4.2.3.2	Equations de Halpin-Tsai	89
4.2.3.3	Modèle d'Eshelby	91
4.2.3.3.1	Problème de l'inclusion équivalente	91
4.2.3.3.2	Modèle d'Eshelby en solution diluée	93
4.2.3.4	Modèle de Mori-Tanaka	94
4.2.3.5	Modèle de Tandon et Weng	96
4.2.3.6	Modèle auto-cohérent	97
4.2.3.7	Comparaison entre les différents modèles	98
4.2.4	Homogénéisation en thermo-élasticité unidirectionnelle	100
4.2.4.1	Modèle de Levin	101
4.2.4.2	Modèle de Sharperry	101
4.2.4.3	Modèle de Kakavas et al.	102
4.3	Thermo-élasticité linéaire anisotrope	103
4.3.1	Modèles prenant en compte l'orientation des fibres dans le composite	103
4.3.2	La procédure en deux étapes pour le calcul des propriétés thermo-élastiques anisotropes	104
4.3.2.1	Étape 1 : calcul des paramètres thermo-élastiques pour un état d'orientation unidirectionnel	104
4.3.2.2	Étape 2 : calcul des paramètres thermo-élastiques anisotropes	105
4.3.3	Application	106
4.4	Conclusion	111
5	Homogénéisation numérique des propriétés thermo-élastiques des thermoplastiques chargés de fibres	114
5.1	Définition d'un volume élémentaire représentatif (VER)	117
5.1.1	Génération du volume élémentaire représentatif	117
5.1.2	Définition du domaine	120
5.2	Etude de sensibilité de l'approche numérique	121
5.2.1	Sensibilité au maillage	121
5.2.2	Sensibilité au nombre de fibres	131
5.3	Comparaison entre les résultats de l'homogénéisation numérique et l'homogénéisation analytique en thermo-élasticité unidirectionnelle	132
5.4	Estimation numérique des propriétés élastiques anisotropes	136
5.4.1	Mise en place du système matriciel	136
5.4.2	Applications	139
5.5	Conclusion	141

6 Applications industrielles	144
6.1 Démarche numérique adoptée pour la détermination des propriétés thermo-mécaniques	146
6.2 Application : le cas du seuil d'injection	147
6.2.1 Présentation de la pièce	147
6.2.2 Etude du profil d'orientation	147
6.2.2.1 Conditions d'injection	148
6.2.2.2 Maillage et temps de calcul	148
6.2.2.3 Résultats numériques	149
6.2.3 Comportement thermo-mécanique de la pièce	153
6.2.3.1 Propriétés mécaniques	153
6.2.3.2 Sollicitation de la pièce	154
6.3 Conclusion	156
Conclusion et perspectives	158
A Annexes A	163
A.1 Utilisation de l'équation de Folgar et Tucker pour la résolution du problème d'orientation de chaînes macromoléculaires	163
A.2 Equations de fermeture	165
B Annexes B	168
B.1 Expression du tenseur d'Eshelby dans un milieu isotrope	169
B.2 Expression du tenseur d'Eshelby dans un milieu isotrope transverse	171
Bibliographie	172

Chapitre 1

Introduction

1.1 Motivation industrielle

L'utilisation des matériaux composites dans la réalisation des structures offre aux concepteurs des possibilités nouvelles par rapport aux matériaux traditionnels. Ils apportent de nombreux avantages fonctionnels : légèreté, résistance mécanique et chimique, maintenance réduite, facilité de mise en oeuvre. Ainsi, les besoins de l'industrie dans ces secteurs sont devenus de plus en plus poussés et ont rendu nécessaire la connaissance et la maîtrise des matériaux composites.

Les matériaux composites tels que les thermoplastiques renforcés de fibres, réunissent à la fois les propriétés mécaniques des fibres et celles de la matrice dans laquelle sont immergées. Ces propriétés sont nettement meilleures que celles de la matrice, particulièrement la rigidité et la contrainte à la rupture. Par exemple, un polypropylène vierge ayant un module d'environ 1.4GPa et une contrainte à la rupture d'environ 27MPa, voit ses propriétés augmenter lorsqu'il est chargé : un ajout de 40% en poids de fibres de verre permet presque de tripler à la fois le module d'élasticité et la contrainte à la rupture, qui atteignent respectivement 4GPa et 80MPa [34].

Deux types de composites à matrice thermoplastique se distinguent ; les composites grande diffusion (GD) et les composites haute performance (HP) :

- Les HP, dont les renforts sont des fibres continues, sont principalement utilisés dans l'industrie aéronautique et ont un coût de mise en forme élevé. Le taux de renfort est supérieur à 50%, et les propriétés mécaniques (résistance mécanique et rigidité) sont largement supérieures à celles des métaux.
- Les GD, auxquels nous nous intéresserons dans ce mémoire, sont les composites les plus présents dans l'industrie. Le coût de mise en forme de tels composites est relativement faible, dans la mesure où il est possible d'utiliser les procédés

traditionnels de transformation des polymères thermoplastiques. Ils sont renforcés par des fibres coupées (courtes ou longues) de dimensions négligeables par rapport à celles de la pièce, et dont la concentration n'excède pas les 30% en poids en général. Les renforts peuvent être des fibres courtes rigides en écoulement, ou des fibres longues susceptibles de se déformer sous l'effet du gradient de contraintes le long des fibres.

1.2 Le procédé d'injection et son impact sur les propriétés finales

Le moulage par injection est l'un des procédés les plus utilisés, dans le milieu industriel, pour la mise en forme des matériaux composites chargés de fibres courtes, et qui ont des géométries complexes. La qualité et les propriétés finales des pièces injectées sont fortement liées aux paramètres du procédé ainsi que la géométrie de la pièce et du moule, puisque ces derniers conditionnent la répartition et l'orientation de fibres. Afin d'évaluer les propriétés de la pièce à l'état solide, il est important de comprendre les phénomènes agissant sur la répartition de fibres et de savoir comment celles-ci s'orientent au cours de l'écoulement.

L'hypothèse principale sur laquelle se base ce travail c'est que l'orientation des fibres est figée en fin de cycle d'injection et qu'elle est conservée après refroidissement et solidification du thermoplastique. Nous verrons dans les chapitres 4 et 5 comment relier les propriétés mécaniques à l'état solide à la carte d'orientation de fibres obtenue à la fin du remplissage du moule. Cette répartition génère des propriétés thermo-mécaniques anisotropes à l'état solide. Il sera clair alors que la méthodologie adoptée dans ce travail pour le calcul de ces propriétés s'effectue en deux phases :

- Phase procédé : Étudier les phénomènes susceptibles de modifier l'orientation des fibres en écoulement, et calculer cette orientation.
- Phase post-procédé : récupérer la carte d'orientation obtenue à la fin du remplissage et l'introduire dans les lois de comportement thermo-mécaniques anisotropes.

Les phases du procédé de moulage par injection sont illustrées dans la figure 1.1 :

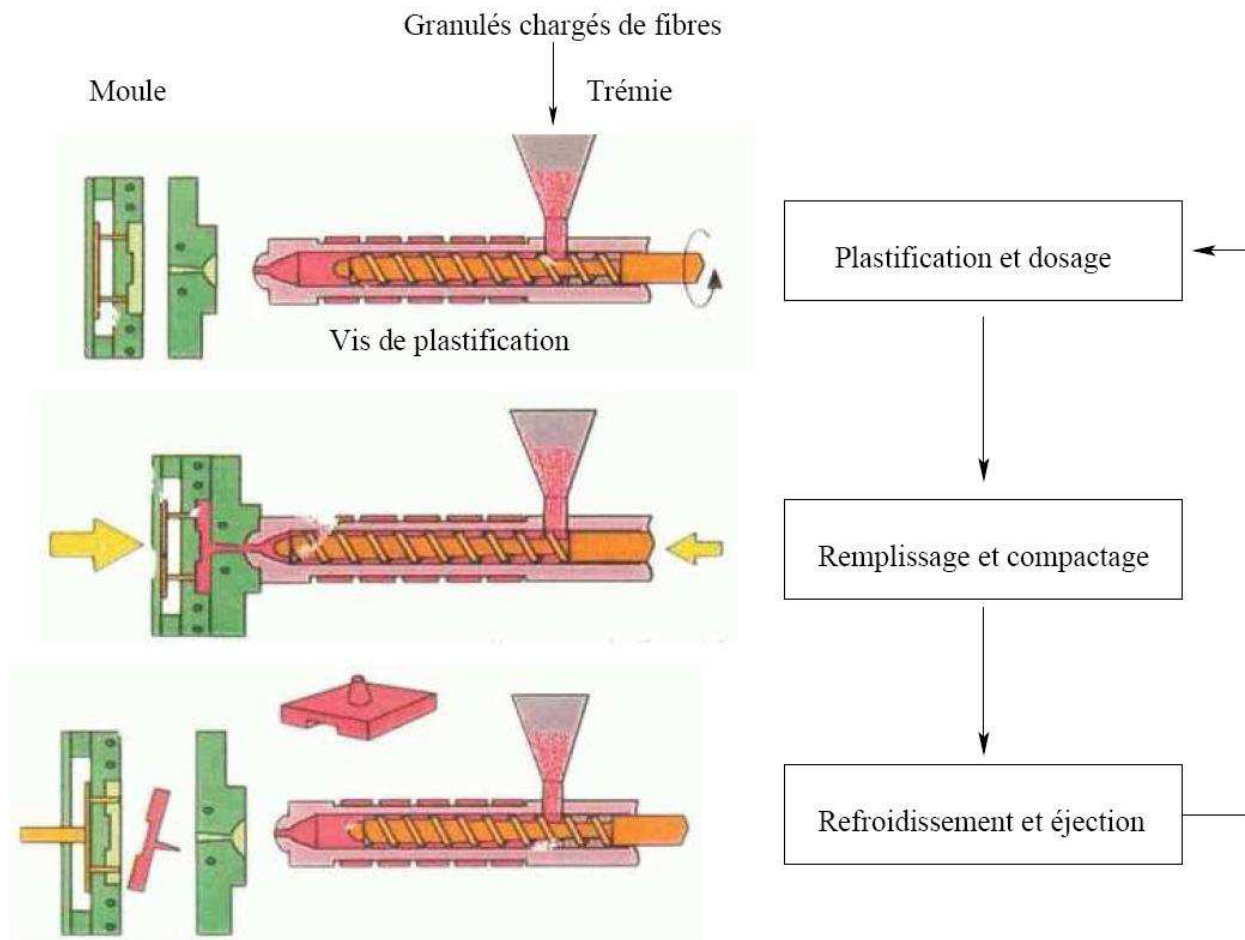


FIGURE 1.1 – Les différentes phases du cycle d'injection (Source : Arkema)

Typiquement, le cycle d'injection commence par la phase de plastification, durant laquelle les granulés sont chauffés, fondus et homogénéisés. Cette phase est l'une des causes de la modification de longueur des fibres qui se cassent avant l'entrée dans le moule.

Dès le remplissage, la différence de température entre la paroi du moule et le polymère en écoulement contribue à la création d'une couche solide de polymère (couche peau); il n'y a pas d'orientation préférentielle au niveau de cette couche [13]. En général, la couche de peau est très mince, à cause des temps d'injection qui sont très courts et des conductivités thermiques très faibles, et son épaisseur dépend principalement de la différence entre la température du moule et la température d'injection [59]. La solidification du polymère au cours du remplissage entraîne donc une réduction de la section d'entrée qui elle-même contribue à une augmentation de la vitesse locale d'écoulement, ce qui donne des contraintes de cisaillement supplé-

mentaires sur le polymère. Au voisinage de cette zone solidifiée les fibres s'orientent parallèlement au sens de l'écoulement. Au niveau de cette deuxième couche, les fibres conservent leur orientation même après solidification. Cette partie de la pièce (là où les fibres sont orientées dans la direction de l'écoulement) sera la plus rigide puisque ces propriétés mécaniques sont les plus proches de celles des fibres dans cette direction. Au coeur, les fibres prennent une orientation transverse par rapport à la direction de l'écoulement [46, 97]. Après solidification, la rigidité de la pièce au niveau de cette couche est la plus faible dans le sens de l'écoulement, mais elle est maximisée dans la direction transverse.

La figure 1.2 montre l'injection d'une plaque de polypropylène d'épaisseur 1,8mm, renforcée à 30% en volume de fibres de verre. Cette image prise au MEB (Microscope Électronique à Balayage) confirme la tendance des fibres à s'orienter dans la direction de l'écoulement (axe 1) au niveau de la couche de peau et dans la direction orthogonale à l'écoulement au coeur.

La phase de remplissage est suivie d'une phase de compactage. Cette phase consiste à l'uniformisation de la pression dans la cavité du moule, en maintenant une pression suffisamment élevée pour compenser le retrait thermique pendant le figeage du reste de la matière.

Le refroidissement du polymère dans le moule fige l'orientation des fibres menant à une anisotropie des propriétés mécaniques de la pièce à l'état solide (figure 1.2).

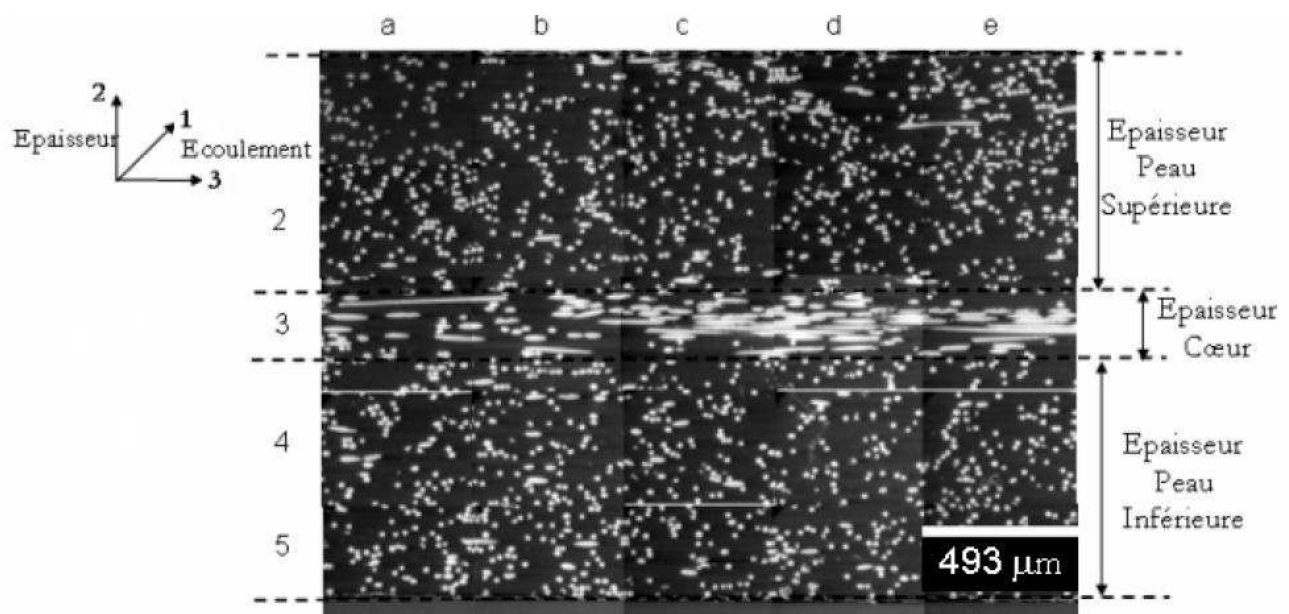


FIGURE 1.2 – Distribution des fibres de verre dans une plaque en polypropylène renforcé à 30% en poids, coupe perpendiculaire à la direction d'écoulement[73]

En revanche, Cette orientation pourra être modifiée au travers des conditions du procédé d'injection (température du moule, vitesse d'injection, ...).

Pour une orientation du type de celle de la figure 1.2, les modules de Young obtenus dans la direction de l'écoulement (module longitudinal) et la direction transversale, sont illustrés à la figure ci-dessous :

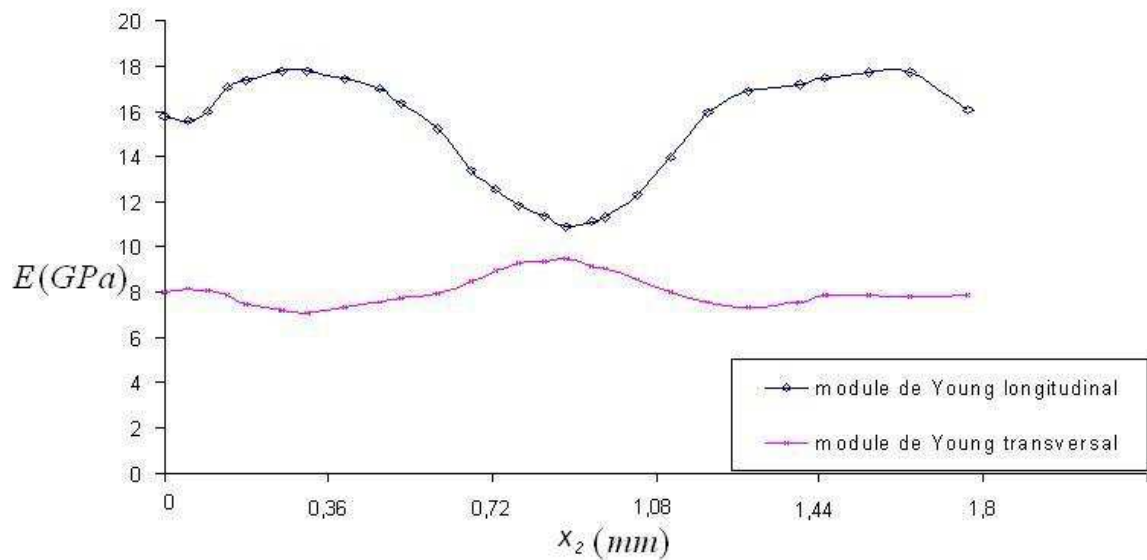


FIGURE 1.3 – Profil du module de Young dans l'épaisseur de la pièce selon un plan de coupe orthogonale à la direction de l'écoulement. Résultat obtenu avec les nouveaux développements introduits dans Rem3D

Dans ce travail, nous considérons que le composite à l'état liquide est un fluide visqueux renforcé de fibres courtes. A l'état solide, nous supposons que le matériau suit une loi de comportement thermo-élastique linéaire anisotrope. Le composite est assimilé à un milieu biphasique (phase matrice + phase fibres) dont chaque phase a un comportement thermo-élastique linéaire. La loi de comportement pour le composite lie directement le tenseur de raideur (resp. de souplesse) aux descripteurs principaux de l'orientation de fibres, qui sont des tenseurs de deuxième et de quatrième ordre. Pour déterminer complètement ce tenseur, des modèles d'homogénéisation qui combinent à la fois les propriétés thermo-mécaniques de la matrice et des fibres, sont utilisés

1.3 Objectifs et plan du manuscrit

1.3.1 Cadre des travaux

Ces travaux sont soutenus et financés par un consortium industriel composé des partenaires suivant :

- *Arkema* : premier chimiste français et grand acteur de la chimie mondiale.
- *Schneider Electric* : Offre des produits et services dans les domaines de la Distribution électrique et des Automatismes.
- *Snecma Propulsion Solide* : Conception, production et commercialisation des moteurs à propergol solide et des matériaux composites pour la défense, l'espace, l'aéronautique et l'industrie.
- *Transvalor* : Commercialisation de logiciels de mise en forme de matériaux, notamment le logiciel Rem3D.
- *Dow Chemicals* : Conception et fabrication de produits chimiques et plastiques.
- *Rhodia* : Leader mondial de produits chimiques de spécialité.
- *Cemef* : Centre de recherche faisant partie de l'Ecole des Mines de Paris, et l'un des principaux centres de recherches européens en mise en forme des matériaux.

1.3.2 Objectif de l'étude

L'objectif global de ce travail consiste à concevoir un outil numérique capable de prédire le comportement thermo-mécanique des composites chargés de fibres et moulés par injection. Il s'agit alors, dans un premier temps, de comprendre et modéliser le phénomène d'orientation de fibres pendant la phase d'injection du thermoplastique. L'orientation des fibres sera calculée numériquement au cours du temps grâce à un nouveau solveur que nous avons implémenté sur la version recherche de Rem3D. La carte d'orientation obtenue à la fin du remplissage sera récupérée et considérée inchangée durant la solidification du polymère. Dans un second temps, nous considérons que le comportement est thermo-élastique linéaire anisotrope. Nous développons aux chapitres 4 et 5 montreront que nous disposons de modèles d'homogénéisation analytiques et numériques en thermo-élasticité reliant le comportement solide à la carte d'orientation.

1.3.3 Plan

En réalité le comportement des thermoplastiques chargés à l'état solide est visco-élastique puisqu'une partie des contraintes est relaxée pendant la phase de refroidissement [69]. L'homogénéisation en viscoélasticité est encore récente et les résultats

montrent encore un écart considérable par rapport à la réalité [15, 63], contrairement au comportement élastique. Nous considérons alors le comportement thermoélastique linéaire anisotrope comme une première approximation du comportement thermomécanique des polymères chargés à l'état solide. Les propriétés thermoélastiques (raideur et coefficients de dilatation thermique) des pièces injectées sont fortement liées à la carte d'orientation et par conséquent au procédé d'injection.

L'objectif de ce travail consiste à développer un outil de calcul de l'orientation de fibres au cours du cycle d'injection et de prédire le comportement élastique à l'état solide en fonction de cette orientation. Le plan s'articule autour de cinq parties.

Dans le premier chapitre, nous listerons les différents modèles existants dans la littérature pour la caractérisation de l'orientation des fibres en écoulement, ainsi que les différentes hypothèses gouvernant le choix de chaque modèle. Ensuite, nous présenterons l'approche numérique que nous avons adoptée et implémentée pour la simulation de l'orientation induite par l'écoulement.

Dans le deuxième chapitre de ce mémoire, nous présenterons les outils numériques nécessaires pour la simulation du comportement thermoélastique des polymères chargés. Nous avons enrichi la bibliothèque cimlib du logiciel Rem3D par 2 types de solveurs élastiques : le solveur isotrope et le solveur anisotrope. Ces solveurs présentent l'originalité de se baser sur des formulations mixtes afin de pouvoir traiter des comportements thermoélastiques notamment incompressibles.

Dans le troisième chapitre, nous aborderons la prédiction du comportement à l'état solide des composites. La littérature suggère une procédure en deux étapes pour la détermination de ces propriétés : considérer premièrement le cas d'un composite isotrope transverse (le cas où toutes les fibres sont orientées selon une direction unique) et calculer les propriétés thermoélastiques, puis utiliser ces propriétés pour la détermination des propriétés anisotropes. Nous présenterons, dans ce chapitre, les différents modèles d'homogénéisation existants dans la littérature pour la détermination des propriétés thermoélastiques unidirectionnelles. Ces modèles assimilent le composite à un matériau biphasique (matrice+fibres) et donnent les propriétés globales en fonction des propriétés thermomécaniques de chaque phase, ainsi que de la fraction volumique et du rapport de forme des fibres. Ensuite, nous évoquerons le cas anisotrope, où les propriétés sont fonction des propriétés unidirectionnelles ainsi que de l'orientation et de la concentration volumique des fibres dans le matériau.

Le quatrième chapitre de ce manuscrit sera dédié à l'homogénéisation numérique des propriétés thermoélastiques. La technique d'homogénéisation fera appel aux solveurs élastiques décrits dans le deuxième chapitre, et elle est basée sur la génération des volumes élémentaires représentatifs (VER) avec une orientation de fibres connue

à l'avance. Nous considérerons dans ces VER que les fibres et la matrice du polymère ont chacune un comportement thermo-élastique linéaire, et nous estimerons à l'aide de plusieurs sollicitations numériques (cisaillement simple, traction simple, ...) les propriétés thermo-élastiques globales du composite. Les résultats obtenus par l'approche numérique seront comparés aux résultats obtenus par les modèles analytiques développés dans le quatrième chapitre.

Enfin, dans la cinquième partie de ce manuscrit, nous traiterons une pièce industrielle ; en particulier nous nous intéressons à ce qui se passe au niveau du seuil d'injection. Sur ce cas, une validation du solveur d'orientation par rapport à des résultats expérimentaux sera effectuée. Ensuite, nous utiliserons les approches analytiques et numériques d'homogénéisation pour l'évaluation des propriétés mécaniques.

Chapitre 2

Modélisation et simulation de l'orientation de fibres induite par l'écoulement

Ce chapitre est dédié à la description du phénomène d'orientation de fibres induit par l'écoulement. Nous établirons un état de l'art sur les différents phénomènes pouvant influencer cette orientation. Ces phénomènes sont principalement liés au procédé d'injection ainsi qu'à la géométrie de la pièce. Nous verrons par la suite des manières différentes de représentation d'un état d'orientation. Les auteurs s'accordent sur deux descripteurs possibles : la probabilité de distribution d'orientation, et les tenseurs d'orientation qui représentent une notation compacte et macroscopique. Nous effectuons un inventaire des équations montrant l'évolution de ces descripteurs au cours du temps. La résolution de ces équations fera appel à des méthodes numériques. Dans la version commerciale actuelle de Rem3D, nous disposons d'une méthode éléments finis basée sur une approche discontinue (affichage de la valeur de l'orientation par élément sur un maillage donné). Dans ce rapport nous présenterons une nouvelle approche basée sur une formulation continue (valeurs par noeuds) dont les performances seront comparées à celles de la méthode discontinue.

Sommaire

2.1	Le phénomène d'orientation induit par l'écoulement	21
2.1.1	Mécanismes d'orientation	21
2.1.1.1	Hétérogénéité et anisotropie induite par l'écoulement dans les pièces injectées	21
2.1.2	Paramètres influençant l'orientation de fibres	23
2.2	Descripteurs de l'orientation	23
2.2.1	Orientation d'une particule seule	23
2.2.2	Fonction de distribution d'orientation	24
2.2.3	Les tenseurs d'orientation	25
2.3	Modélisation de l'orientation de fibres en écoulement	28
2.3.1	Modèle d'évolution d'une fibre seule	28
2.3.2	Modèles d'évolution d'une population de fibres	28
2.4	Couplage rhéologie orientation	31
2.5	Prédiction et simulation numérique de l'orientation de fibres en injection	33
2.5.1	démarche de résolution numérique en injection et hypothèses .	33
2.5.1.1	Le problème mécanique	35
2.5.1.2	Le problème de capture de surface libre	36
2.5.1.3	Le problème thermique	37
2.5.1.4	Couplage thermo-mécanique	38
2.5.1.5	Bibliographique sur la résolution du problème d'orien- tation de fibres	39
2.5.1.5.1	Simulation 2D de l'orientation de fibres . . .	39
2.5.1.5.2	Simulation 3D de l'orientation de fibres . . .	40
2.5.2	L'approche continue pour la simulation de l'anisotropie induite par l'écoulement	41
2.5.2.1	Formulation faible du problème d'orientation avec la méthode de Galerkin Standard	42
2.5.2.2	Méthodes de stabilisation pour l'équation d'orientation	45
2.5.2.2.1	La méthode SUPG	45
2.5.2.2.2	La méthode RFB	46
2.5.2.2.3	Exemple d'application	46
2.5.2.3	Normalisation du tenseur d'orientation	49
2.5.2.4	Comparaisons entre formulation continue et formu- lation discontinue	50
2.5.2.4.1	Précision	50
2.5.2.4.2	Temps de calcul	52
2.6	Conclusion	56

2.1 Le phénomène d'orientation induit par l'écoulement

Dans cette section nous décrivons le mécanisme d'orientation de fibres pendant le remplissage des moules ainsi que les paramètres susceptibles d'avoir un impact sur cette orientation.

2.1.1 Mécanismes d'orientation

Les thermoplastiques injectés présentent une structure globale par couches. Plusieurs auteurs ont analysé cette structure. Kenig [60] l'identifie à une structure anisotrope à 9 couches. Il note une première couche au voisinage de la surface du moule très fine et très pauvre en fibres. Les fibres à ce niveau ne sont pas orientées d'une façon préférentielle. Cette couche de peau doit sa formation à l'effet fontaine (figure 2.1) qui ramène la matière du centre de l'écoulement vers les parois froides du moule. Ensuite, au voisinage de la couche de peau, une alternance de trois couches est constatée, où les fibres sont respectivement orientées parallèlement, transversalement et parallèlement à la direction de l'écoulement. Enfin, il observe une couche centrale avec une orientation transverse à coeur.

Dans le cas général, la carte d'orientation induite par l'écoulement, appelée structure "coeur-peau", se présente sous-forme de cinq couches (figure 2.1) :

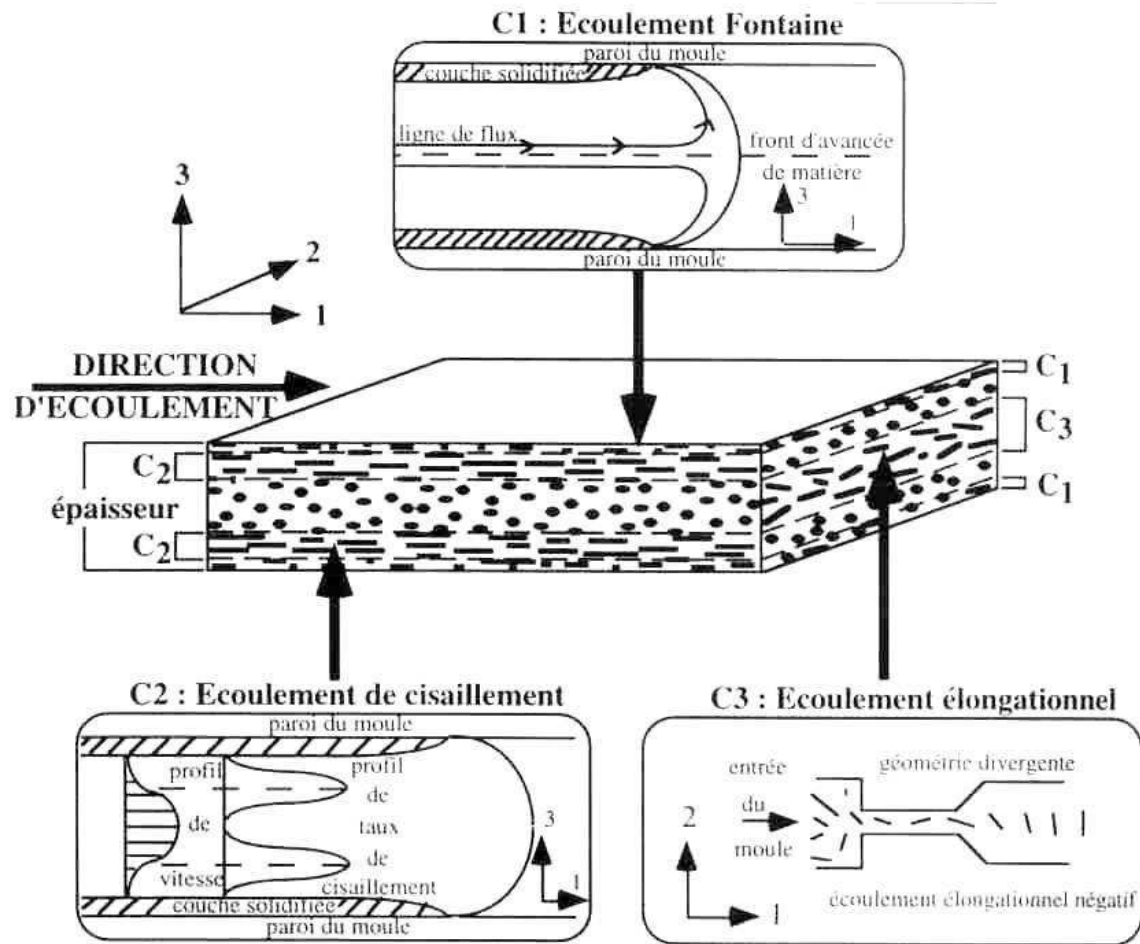


FIGURE 2.1 – Structure à cinq couches de la répartition des fibres induite par l'écoulement [82]

- Couche C1 : couche de peau, c'est une couche très mince et les fibres sont orientées de façon isotrope.
- Couche C2 : présente de part et d'autre du centre. Les contraintes de cisaillement au niveau de cette couche sont très importantes et les fibres sont orientées dans la direction de l'écoulement
- Couche C3 : couche de coeur où l'écoulement est élongationnel divergent. En général, l'écoulement est divergent pour un moule de disque à alimentation centrale ou un moule de plaque à seuil d'alimentation ponctuelle. Au niveau de cette couche, les fibres s'orientent transversalement à l'écoulement à cause

des taux d'élongations négatifs.

Après solidification, la pièce représentera plus de rigidité

2.1.2 Paramètres influençant l'orientation de fibres

Plusieurs facteurs peuvent affecter la structure anisotrope (structure coeur-peau) induite par l'écoulement. Parmi ces facteurs, on peut trouver les paramètres d'injection (vitesse d'injection, température du moule, température d'injection, ...) [19, 20, 97, 46]. Par ailleurs, les propriétés des renforts (longueur, concentration, ..) ont été analysées [73] et ont montré qu'elles peuvent modifier les épaisseurs des couches de la structure coeur-peau et même la faire disparaître pour des concentrations volumiques faibles, comme cela a été montré par Friedrich et al. [42] dans le cas du polypropylène renforcé à 10% de fibres de verre. L'épaisseur de la pièce joue aussi un rôle important dans la formation de la structure coeur-peau. En effet, pour une vitesse d'injection donnée, les taux de cisaillement sont plus importants dans les parties fines de la pièce [45]; la couche de coeur est ainsi limitée et une grande proportion de fibres est orientée dans la direction principale de l'écoulement.

2.2 Descripteurs de l'orientation

La section 2.1 a traité le phénomène d'orientation de fibres et a montré sa complexité et sa dépendance au procédé d'injection. Afin de contrôler et de prédire ce phénomène numériquement, il est indispensable d'avoir des outils mathématiques de description avant de passer à la modélisation.

Nous nous intéressons aux différents descripteurs permettant de décrire l'état d'orientation d'une population de fibres.

2.2.1 Orientation d'une particule seule

Toute fibre seule dans le repère (1,2,3) de l'espace peut être représentée par deux angles θ et φ , et par un vecteur unitaire \underline{p} (figure (2.2)) dont les composantes sont :

$$\begin{cases} p_1 = \sin\theta\cos\varphi \\ p_2 = \cos\theta\cos\varphi \\ p_3 = \sin\varphi \end{cases} \quad (2.1)$$

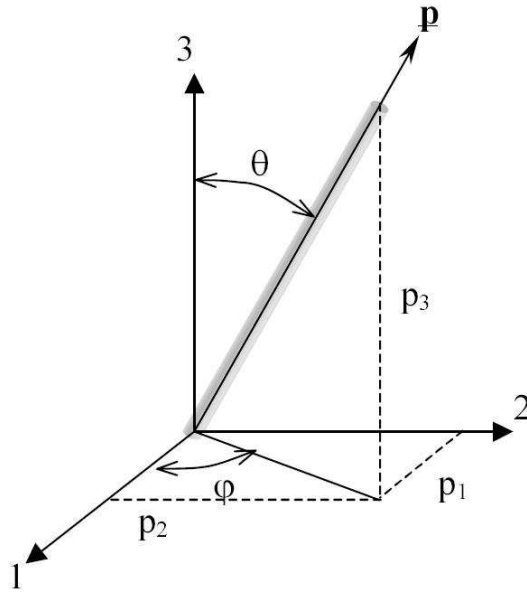


FIGURE 2.2 – Représentation d'une fibre et de son orientation dans l'espace [73]

Le sens du vecteur \underline{p} est purement arbitraire vu qu'on ne différencie pas les extrémités de la particule.

En général, les matériaux composites comportent un très grand nombre de fibres (de l'ordre de quelques dizaines de milliers). Il est donc très difficile de caractériser l'état d'orientation global en considérant l'orientation de chaque fibre. Les deux paragraphes qui suivent illustrent l'utilisation de descripteurs macroscopiques d'un état d'orientation global.

2.2.2 Fonction de distribution d'orientation

La fonction de distribution d'orientation est une façon de décrire l'état d'orientation global dans un matériau renforcé par des fibres longues ou courtes. Cette fonction a été présentée par Prager [83] et elle est notée par $\psi(\theta, \varphi)$ ou $\psi(\underline{p})$, grandeur scalaire qui représente la probabilité de trouver, à l'instant t , une fibre orientée selon la direction \underline{p} . La fonction $\psi(\underline{p})$ possède les propriétés fondamentales suivantes :

- ψ est symétrique

$$\psi(\underline{p}) = \psi(-\underline{p})$$

- ψ vérifie la propriété d'une fonction de distribution de probabilité, c'est à dire que l'intégrale de la fonction de distribution sur toutes les orientations possibles vaut l'unité :

$$\int_{\underline{p}} \psi(\underline{p}) = 1$$

La fonction de distribution d'orientation obéit à une équation du type Fokker-Plank qui peut prendre en compte des interactions de type hydrodynamiques. Si on désigne par $d\underline{p}/dt$ la dérivée matérielle de \underline{p} par rapport au temps, alors l'équation d'évolution de ψ s'écrit :

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \underline{p}} \left(\psi \frac{d\underline{p}}{dt} \right) - D_r \frac{\partial^2 \psi}{\partial \underline{p}^2} = 0 \quad (2.2)$$

D_r étant un coefficient de diffusion Brownien. Cette dernière équation (équation (2.2)) donne une description complète de l'état d'orientation de fibres. Néanmoins, outre la difficulté d'explicitier le terme $d\underline{p}/dt$ en fonction de la vitesse, la résolution de cette équation requiert des ressources informatiques importantes. Pour des applications industrielles, nous sommes amenés le plus souvent à manipuler des tenseurs d'orientation, introduits par Hand [50], vu qu'ils ont une notation plus compacte permettant de décrire d'une façon macroscopique un état d'orientation.

2.2.3 Les tenseurs d'orientation

Ces tenseurs [50] s'expriment en fonction du vecteur d'orientation \underline{p} et de la fonction de distribution d'orientation par :

- tenseur du second ordre :

$$\underline{\underline{a}} = \int \underline{p} \otimes \underline{p} \psi(\underline{p}) d\underline{p} \quad (2.3)$$

- tenseur du quatrième ordre :

$$\underline{\underline{\underline{\underline{a}}}} = \int \underline{p} \otimes \underline{p} \otimes \underline{p} \otimes \underline{p} \psi(\underline{p}) d\underline{p} \quad (2.4)$$

De la même façon nous pouvons aussi définir des tenseurs d'ordre supérieur.

Folgar et Tucker [40] ont montré que la description macroscopique d'un état d'orientation peut se baser sur les tenseurs de second ordre ou les tenseurs de quatrième ordre ou par les deux. Ces tenseurs admettent les propriétés fondamentales suivantes :

- symétrie

$$\begin{cases} \text{pour tout } i, j, k, l \\ a_{ij} = a_{ji} \\ a_{ijkl} = a_{jikl} = a_{kijl} = a_{likj} \end{cases} \quad (2.5)$$

- normalisation

$$\begin{cases} \text{pour tout } i, j \\ \sum_i a_{ii} = 1 \\ \sum_k a_{ijkk} = a_{ij} \end{cases} \quad (2.6)$$

Ces conditions font, qu'en dimension 3, nous avons seulement cinq coefficients indépendants pour le tenseur d'orientation du second ordre, et quatorze coefficients différents pour le tenseur du quatrième ordre.

Avec de telles propriétés, nous sommes toujours capables de déterminer les valeurs propres (qui sont positives) et les vecteurs propres du tenseur d'orientation. Celui-ci peut être décrit par une ellipsoïde en 3D ou par une ellipse en 2D [1]. Les vecteurs propres définissent la direction de chaque axe, tandis que les valeurs propres représentent leurs longueurs (Figure (2.3)).

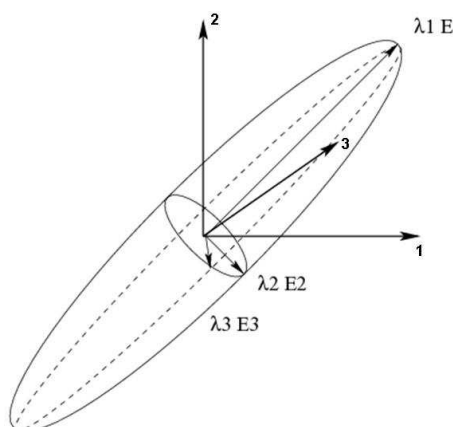


FIGURE 2.3 – Représentation du tenseur orientation en un point par une ellipsoïde[85]

D'un point de vue physique, les valeurs propres du tenseur d'orientation \underline{a} représentent les probabilités de trouver des fibres dont les vecteurs directeurs des axes sont dans la direction des vecteurs propres. La figure (2.4) donne des valeurs qui peuvent être prises par le tenseur d'orientation du second ordre, en dimension 2, pour des situations particulières :

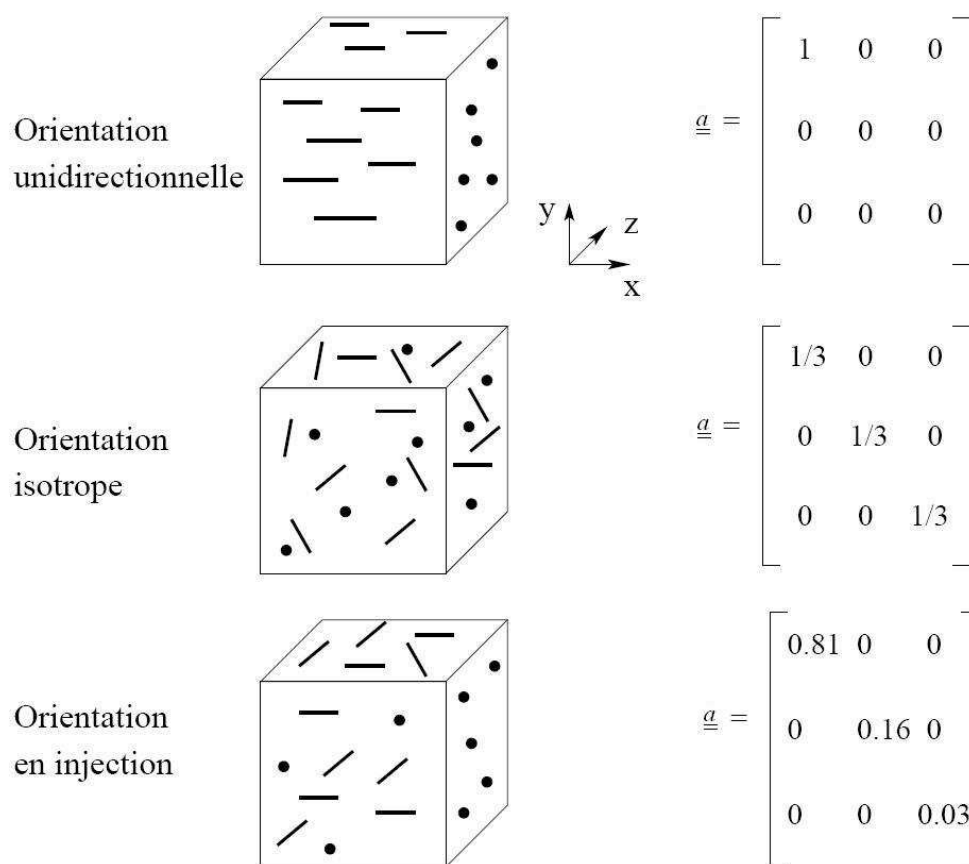


FIGURE 2.4 – Tenseur d'orientation d'ordre deux pour des orientations de fibres particulières [85]

Les composantes a_{ij} ($i \neq j$) du tenseur d'orientation permettent d'avoir une idée sur la distribution des fibres autour des axes i et j .

Dans ce mémoire, le tenseur du second ordre est utilisé comme étant le descripteur principal de l'orientation de fibres. Il est à noter que l'utilisation de ces tenseurs est accompagnée d'une perte d'information par rapport à l'utilisation des fonctions de distribution de probabilité $\psi(\underline{p})$. Néanmoins, cette notation représente l'avantage de donner une description compacte et macroscopique de l'état d'orientation. Aussi, les modèles d'orientation (présentés dans la section 2.3) sont plus faciles à résoudre et requièrent moins de ressources informatiques.

2.3 Modélisation de l'orientation de fibres en écoulement

2.3.1 Modèle d'évolution d'une fibre seule

Jeffrey [55] a calculé le mouvement d'une particule ellipsoïdale seule immergée dans un fluide newtonien. L'hypothèse principale est que les dimensions des particules sont suffisamment petites pour que le champ de vitesse de déformation soit homogène à grande distance, et que les forces d'inertie soient négligées. Le modèle de Jeffrey est ainsi donné par :

$$\frac{\partial \underline{p}}{\partial t} + \underline{v} \cdot \nabla \underline{p} = \underline{\underline{\Omega}}(\underline{v}) \underline{p} + \lambda (\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{v}) \underline{p} - (\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{v}) : \underline{p} \otimes \underline{p}) \underline{p}) \quad (2.7)$$

où \underline{v} est le champ de vitesse local. $\underline{\underline{\Omega}}$ et $\underline{\underline{\varepsilon}}$ sont, respectivement, les tenseurs de rotation et de vitesses de déformation définis par :

$$\underline{\underline{\Omega}}(\underline{v}) = \frac{1}{2}(\nabla \underline{v} - \nabla \underline{v}^t), \quad \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{v}) = \frac{1}{2}(\nabla \underline{v} + \nabla \underline{v}^t)$$

Le paramètre λ est une fonction du rapport de forme des fibres β (rapport entre la longueur moyenne L et le diamètre moyen D des fibres) et est donné par :

$$\lambda = \frac{1 - \beta^2}{1 + \beta^2}; \quad \beta = \frac{L}{D}$$

L'équation de Jeffrey a été modifiée par Hand [50] pour prendre en compte les interactions entre les fibres. L'évolution de l'orientation d'une fibre seule est alors :

$$\frac{\partial \underline{p}}{\partial t} + \underline{v} \cdot \nabla \underline{p} = \underline{\underline{\Omega}}(\underline{v}) \underline{p} + \lambda (\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{v}) \underline{p} - (\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{v}) : \underline{p} \otimes \underline{p}) \underline{p}) - \frac{D_r}{\psi} \frac{\partial \psi}{\partial \underline{p}} \quad (2.8)$$

ψ représente la fonction de distribution d'orientation définie précédemment, et D_r est un coefficient de diffusion brownien.

2.3.2 Modèles d'évolution d'une population de fibres

Pour le calcul d'orientation d'une population de fibres, plusieurs auteurs [102, 70, 39] ont calculé directement le mouvement de chaque fibre dans les thermoplastiques renforcés. Cette méthode s'est avérée très coûteuse et consomme des ressources informatiques importantes. C'est la raison pour laquelle il était plus légitime d'utiliser une notation compacte de l'orientation de fibres (tenseurs d'orientation), et de développer des modèles macroscopiques permettant de suivre l'évolution de ces tenseurs.

Lipscomb et al. [68] ont repris l'équation de Jeffrey pour modéliser l'état d'orientation d'une population de fibres. Cette équation a été homogénéisée en volume et

combinée avec l'équation de Fokker-Plank (équation(2.2)) pour donner une équation d'évolution du tenseur d'orientation du second ordre :

$$\frac{\partial \underline{\underline{a}}}{\partial t} + \underline{v} \cdot \nabla \underline{\underline{a}} = \underline{\underline{\Omega}}(\underline{v}) \underline{\underline{a}} - \underline{\underline{a}} \underline{\underline{\Omega}}(\underline{v}) + \lambda(\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{v}) \underline{\underline{a}} + \underline{\underline{a}} \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{v}) - 2\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{v}) : \underline{\underline{a}}) \quad (2.9)$$

L'équation (2.9) n'est valable que pour des suspensions diluées (les interactions entre fibres sont négligées). La prise en compte de l'interaction entre les fibres, dans des milieux semi-concentrés, est plus complexe. L'évolution de l'orientation dans de tels milieux a fait l'objet de plusieurs études et peu de modèles macroscopiques sont susceptibles de rendre compte de cette évolution au cours de l'écoulement. Le modèle de Folgar et Tucker [40] (équation (2.10)) est l'un des plus utilisés dans la littérature ; il prend en compte l'interaction entre fibres par l'intermédiaire d'un coefficient de diffusion brownien D_r .

$$\frac{\partial \underline{\underline{a}}}{\partial t} + \underline{v} \cdot \nabla \underline{\underline{a}} = \underline{\underline{\Omega}}(\underline{v}) \underline{\underline{a}} - \underline{\underline{a}} \underline{\underline{\Omega}}(\underline{v}) + \lambda(\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{v}) \underline{\underline{a}} + \underline{\underline{a}} \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{v}) - 2\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{v}) : \underline{\underline{a}}) + 2D_r(\underline{\underline{1}} - d \cdot \underline{\underline{a}}) \quad (2.10)$$

d étant la dimension de l'espace.

Le coefficient de diffusion brownien proposé par ces auteurs est :

$$D_r = C_I \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}} \quad (2.11)$$

Dans cette équation, $\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}$ désigne le deuxième invariant du tenseur des vitesses de déformations et C_I est une constante qui représente l'interaction entre fibres. La difficulté majeure dans ce modèle réside dans la détermination de ce coefficient d'interaction. Le choix de ce coefficient a un impact important sur le profil d'orientation [85]. Plusieurs auteurs [12, 78] ont établi des modèles pour le coefficient d'interaction en le reliant au rapport de forme des fibres ainsi qu'à leur concentration volumique. D'autres auteurs [14, 103] ont eu recours à des simulations numériques et déterminent le coefficient d'interaction à l'aide de la méthode des moindres carrés.

Dans le cas général, il est suggéré [13, 40] de prendre une valeur du coefficient d'interaction comprise entre 10^{-3} et 10^{-2} , pour avoir une bonne concordance avec l'expérience.

Chung et al. [26] ont remplacé dans l'équation de Jeffrey modifiée (équation(2.8)) le coefficient de diffusion brownien D_r par un tenseur de diffusion $\underline{\underline{D}}_r$, et aboutissent à une équation tensorielle en la combinant avec l'équation de Fokker-Plank :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \underline{\underline{a}}}{\partial t} + \underline{v} \cdot \nabla \underline{\underline{a}} = & \underline{\underline{\Omega}}(\underline{v}) \underline{\underline{a}} - \underline{\underline{a}} \underline{\underline{\Omega}}(\underline{v}) + \lambda(\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{v}) \underline{\underline{a}} + \underline{\underline{a}} \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{v}) - 2\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{v}) : \underline{\underline{a}}) + \\ & 2(\underline{\underline{D}}_r - tr(\underline{\underline{D}}_r) \underline{\underline{a}}) - 3(\underline{\underline{D}}_r \underline{\underline{a}} + \underline{\underline{a}} \underline{\underline{D}}_r) + 6\underline{\underline{D}}_r : \underline{\underline{a}} \end{aligned} \quad (2.12)$$

Pour la détermination du tenseur de diffusion brownien, aucune étude complète n'a été élaborée jusqu'à aujourd'hui. Néanmoins, l'estimation numérique permet d'établir la valeur de ce tenseur. Par exemple, dans les travaux de Beaume [14], le tenseur de diffusion brownien a été estimé à partir de Volumes Élémentaires représentatifs (échantillons pris dans le polymère renforcé) dans lesquels le polymère renforcé de fibres est soumis à un écoulement en cisaillement, les fibres étant initialement orientées orthogonalement à l'écoulement (figure(2.5))

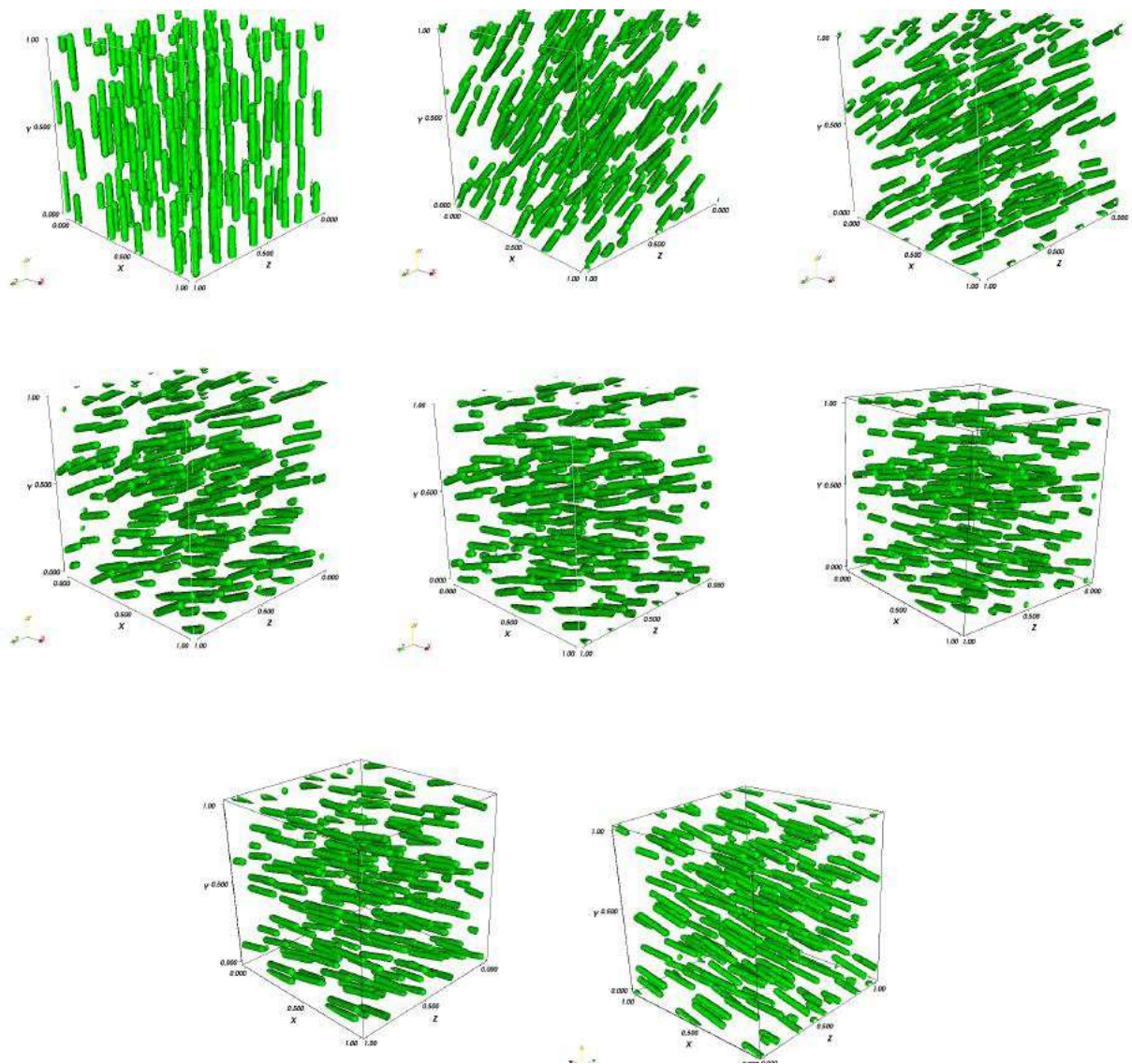


FIGURE 2.5 – Evolution d'une population de fibres dans un écoulement de cisaillement à $t=0$ s, 0.8s et 1.6s (première ligne de gauche à droite), 2.4 s, 3.2 s et 4 s (seconde ligne), 4.8 s et 5.5 s (dernière ligne) [14]

Le tenseur $\underline{\underline{D_r}}$ est estimé à partir de plusieurs simulations par une méthode de type moindres carrés. L'approche numérique utilisée par Beaume est aussi valable pour déterminer simplement le coefficient d'interaction C_I .

Dans les équations d'évolution macroscopique du tenseur d'orientation du second ordre (équations (2.9), (2.10) et (2.12)), nous remarquons la présence du tenseur d'orientation d'ordre 4. Ce tenseur est à son tour solution d'une équation d'évolution dans laquelle intervient un tenseur d'ordre 6 et ainsi de suite [1]. Afin de fermer le problème et de ne pas être amenés à résoudre l'équation de Fokker-Plank (équation(2.2)), il est nécessaire de faire appel à une équation de fermeture qui consiste à approcher le tenseur d'ordre 4 en fonction du tenseur d'ordre 2, et de substituer le résultat dans l'équation d'orientation. Plusieurs études [2, 27, 51, 35, 67] ont été menées dans le but d'établir une relation de fermeture adéquate (annexe A.2). Les différentes approximations ont été étudiées et comparées dans [85]. Le choix entre l'une ou l'autre de ces approximations dépend de la nature de l'écoulement, de l'ordre de grandeur des taux de cisaillement et de l'orientation des fibres.

Dans le cadre de cette thèse, nous optons pour la loi quadratique du fait qu'elle donne une relation compacte entre le tenseur $\underline{\underline{a}}$ et $\underline{\underline{a}}$. Parallèlement, l'utilisation de cette loi facilite l'implémentation de l'équation d'orientation dans le code de calcul de Rem3D. Du point de vue optimisation du logiciel, l'utilisation de l'approximation quadratique, rend équivalente l'équation de Folgar et Tucker à l'équation d'orientation des chaînes macromoléculaires pour les polymères viscoélastiques selon le modèle Pom-Pom [72](voir annexe A.1).

2.4 Couplage rhéologie orientation

Le comportement rhéologique des thermoplastiques renforcés de fibres a fait l'objet de plusieurs travaux. La plupart de ces études supposent que :

- le matériau composite à l'état fondu est une suspension diluée ou semi-concentrée (les composites commerciaux ont généralement une forte concentration volumique en fibres) ;
- La matrice polymère est newtonienne (les matrices polymères ont en général un comportement complexe non-newtonien) ;
- Les dimensions des fibres sont négligeables devant les dimensions de l'écoulement (dans des procédés particuliers, la longueur de la fibre peut avoir le même ordre de grandeur que l'épaisseur d'une pièce) ;
- Le rapport de forme des fibres est considéré constant ;
- La diffusion brownienne due à l'interaction des fibres est négligée ;

– Les forces d’inertie sont négligées.

Dans le cas d’un milieu incompressible, le tenseur de contraintes pourra être exprimé comme étant la somme d’un tenseur d’extra-contraintes et d’un tenseur sphérique associé à une pression p .

$$\underline{\underline{\sigma}} = -p\underline{\underline{1}} + \underline{\underline{\tau}} \quad (2.13)$$

Le schéma qui permet d’établir une équation constitutive passe tout d’abord par le calcul du champ de contraintes autour d’une particule seule ayant un mouvement de translation et un mouvement de rotation arbitraires. La contrainte au niveau de la surface de la particule est utilisée pour évaluer sa contribution au champ de contraintes global. Finalement, les contributions de toutes les particules sont homogénéisées. Toutes les théories utilisant cette démarche, donnent un tenseur d’extra-contraintes ayant la forme suivante :

$$\underline{\underline{\tau}} = 2\eta_s \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{v}}) + 2V_f \eta_s (A \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{v}}) : \underline{\underline{a}} + B(\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{v}})\underline{\underline{a}} + \underline{\underline{a}}\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{v}})) + 2C \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{v}}) + 2F D_r \underline{\underline{a}}) \quad (2.14)$$

V_f étant la concentration volumique des fibres, η_s est la viscosité dynamique et A , B , C , et F sont des paramètres rhéologiques intrinsèques au matériau. De nombreuses théories établissent la même forme (donnée par l’équation (2.14)) du tenseur d’extra-contraintes, mais diffèrent sur les expressions des constantes A , B , C et F . Plusieurs d’entre elles [94] considèrent que le coefficient F est nul, ce qui mène à une autre forme d’équation générique du tenseur de contraintes :

$$\underline{\underline{\sigma}} = -p\underline{\underline{1}} + 2\eta_I(\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{v}}) + N_p \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{v}}) : \underline{\underline{a}} + N_s(\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{v}})\underline{\underline{a}} + \underline{\underline{a}}\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{v}}))) \quad (2.15)$$

η_I est une viscosité due à la fois aux contributions de la matrice et des fibres. Et N_p et N_s sont des quantités adimensionnelles permettant de quantifier l’anisotropie due à l’orientation de fibres.

Les paramètres η_I , N_p et N_s dépendent de la viscosité de la matrice du polymère, du rapport de forme de fibres ainsi que de leur concentration volumique.

Plusieurs études [9, 31, 10, 32, 25, 50, 44] ont été menées dans le but de prédire les paramètres N_p et N_s et d’autres études ont analysé l’effet de ces paramètres sur le comportement mécanique des thermoplastiques renforcés en injection. Dans le cadre de cette thèse, nous ne prenons pas en compte le couplage rhéologie orientation, ce qui revient à considérer que les paramètres N_p et N_s sont nuls.

2.5 Prédiction et simulation numérique de l'orientation de fibres en injection

L'objectif de cette section est de simuler numériquement l'évolution de l'état d'orientation de fibres en injection. Le descripteur d'orientation choisi est le tenseur d'orientation d'ordre 2, et l'équation d'évolution est l'équation de Folgar et Tucker (équation(2.10)), avec une approximation de fermeture quadratique. Cette équation a la forme d'une équation de convection-diffusion tensorielle et donne une évaluation macroscopique de la répartition des fibres. La littérature [3, 5, 57, 56, 71, 75, 6, 85, 87] fournit plusieurs méthodes numériques permet la résolution numérique de telles équations.

L'équation d'évolution de l'état d'orientation montre une dépendance de cet état en fonction du champs de vitesse du polymère fondu en écoulement. Il est nécessaire donc d'intégrer un schéma de résolution numérique dans lequel sont résolus successivement le problème mécanique, le problème de capture de surface libre (permettant de connaître l'évolution de l'avancée du polymère dans le moule), le problème thermique et finalement le problème d'orientation. En revanche, l'incidence de l'orientation sur la rhéologie n'est pas prise en compte.

2.5.1 Démarche de résolution numérique en injection et hypothèses

Les hypothèses principales, sur lesquelles se base le calcul d'orientation, consistent à supposer que cette orientation se développe pendant l'écoulement du polymère. A la fin du remplissage, l'orientation est supposée figée.

Pendant l'écoulement, l'intervalle de temps est partagé en sous intervalles de mesure Δt (Δt étant le pas de temps). Les différentes variables numériques étant dépendantes du temps, la logique de résolution sur Rem3D est d'établir un schéma de résolution qui sera exécuté tout les Δt (figure(2.6)).

à $t = 0$,

\underline{v} , T , α et \underline{a} sont connus

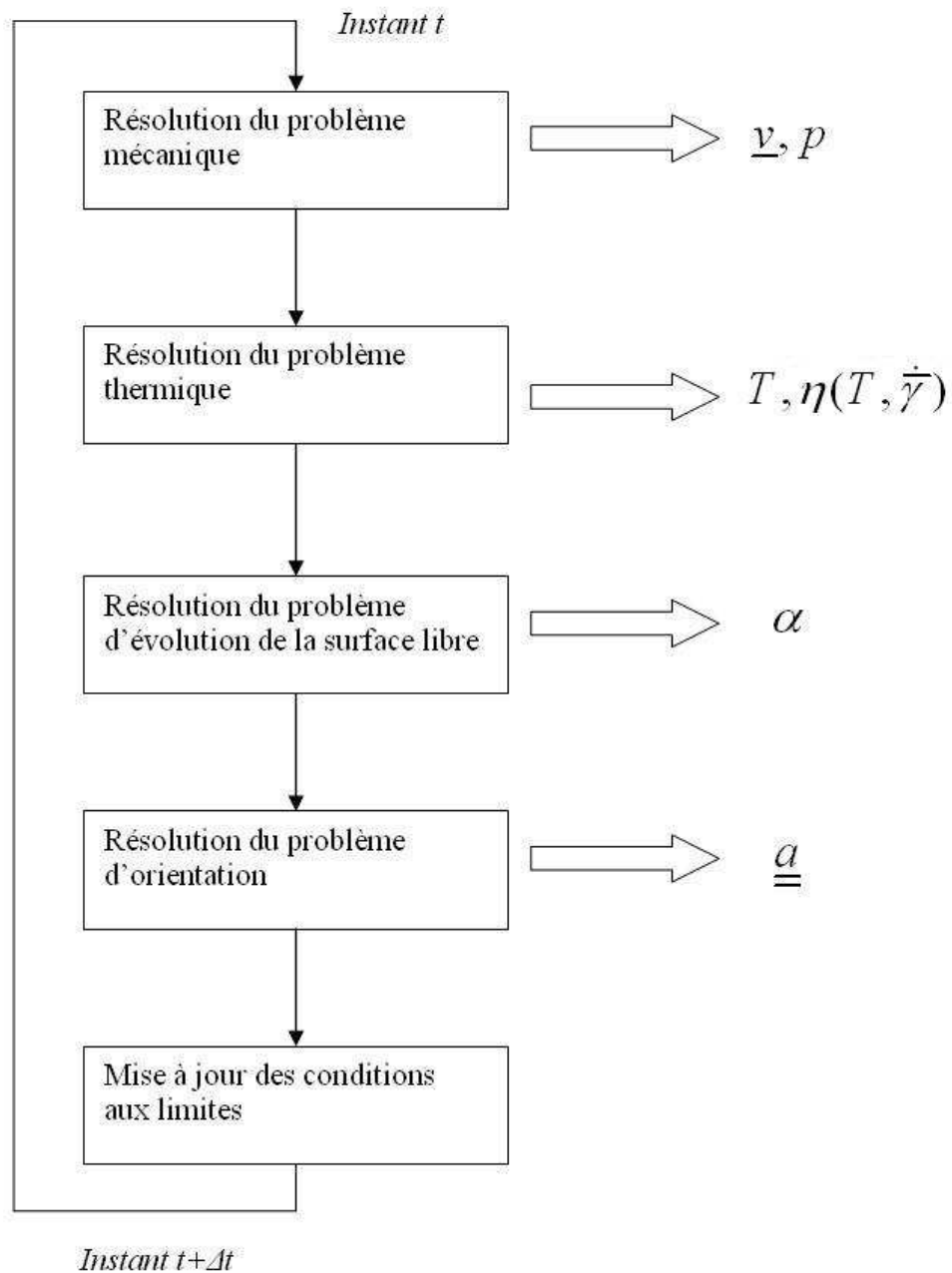


FIGURE 2.6 – Schéma de résolution numérique sur Rem3D à chaque incrément de temps

L'organigramme de la figure (2.6) montre qu'à un instant t , le schéma numérique commence par la résolution du problème mécanique afin de connaître la répartition de la vitesse locale \underline{v} dans tout le domaine; la méthode de résolution est la méthode des éléments finis mixtes en vitesse-pression avec une interpolation $P_1 + /P_1$. La deuxième étape de cette démarche consiste à résoudre le problème thermique qui se présente sous une forme d'équation de convection-diffusion, la résolution de cette équation nécessite la connaissance du champs de vitesse (déjà calculé à l'étape précédente) et permet de calculer la viscosité thermo-dépendante à partir de lois rhéologiques (du type Carreau-Yasuda, Cross-WLF, ...). Ces lois rhéologiques dépendent en général, en plus de la température, de la vitesse de déformation, et par conséquent du champs de vitesse ce qui rend le problème mécanique non-linéaire. La troisième étape consiste à calculer une fonction α , appelée fonction distance, qui permet de détecter l'évolution de la surface libre du polymère fondu; le calcul de cette fonction distance se fait à l'aide d'une méthode de type LevelSet. A la fin, le tenseur d'orientation est calculé, et on recommence le même schéma numérique à l'instant $t + \Delta t$.

Comme nous l'avons indiqué précédemment, le calcul se fera sans couplage rhéologique. Les équations des problèmes mis en jeu ainsi que les méthodes de résolution sont détaillées dans les paragraphes qui suivent.

2.5.1.1 Le problème mécanique

Un milieu continu est soumis aux lois de conservation suivantes :

Conservation de la masse (ou equation de continuité)

$$\frac{d\rho}{dt} + \rho \nabla \cdot \underline{v} = 0 \quad (2.16)$$

ρ étant la masse volumique et \underline{v} est le champs de vitesses.

Conservation de la quantité de mouvement

$$\nabla \cdot \underline{\underline{\sigma}} + \rho \underline{g} = \rho \frac{d\underline{v}}{dt} \quad (2.17)$$

$\underline{\underline{\sigma}}$ est le tenseur de contraintes de Cauchy, \underline{g} est l'accélération de pesanteur et $(d\underline{v}/dt)$ est la dérivée matérielle de la vitesse locale.

Conservation de l'énergie

$$\rho \frac{de}{dt} = -\nabla \underline{q} + \underline{\sigma} : \underline{\epsilon}(\underline{v}) + Q \quad (2.18)$$

e représente l'énergie interne massique, \underline{q} est le flux de chaleur, $\underline{\epsilon}(\underline{v})$ est le tenseur de vitesses de déformations et Q est une quantité de chaleur dégagée sous l'effet de changement de phase.

Nous écrivons les équations en considérant le thermoplastique chargé de fibres comme un fluide incompressible. Le problème mécanique s'écrit alors :

$$\begin{cases} \rho \frac{d\underline{v}}{dt} = \nabla \cdot \underline{\sigma} + \rho \underline{g} \\ \nabla \cdot \underline{v} = 0 \end{cases} \quad (2.19)$$

Le couplage rhéologie-orientation n'étant pas pris en compte, le problème (2.19) devient :

$$\begin{cases} \rho \frac{d\underline{v}}{dt} - \nabla \cdot (2\eta(\underline{\epsilon}\underline{v})) + \nabla p - \rho \underline{g} = 0 \\ \nabla \cdot \underline{v} = 0 \end{cases} \quad (2.20)$$

Notons que le problème mécanique est résolu en biphasique (phase air + phase polymère). La viscosité et la masse volumique sont alors issues de lois de mélange :

$$\begin{cases} \rho = \rho_{polym} 1_{polym} + \rho_{air} 1_{air} \\ \eta = \eta_{polym} 1_{polym} + \eta_{air} 1_{air} \end{cases} \quad (2.21)$$

ρ_{polym} et ρ_{air} étant respectivement les masses volumiques du polymère fondu et de l'air, η_{polym} et η_{air} sont les viscosités du polymère et de l'air, et 1_{polym} et 1_{air} sont les fonctions caractéristiques des deux domaines. Ces fonctions caractéristiques sont calculées à chaque incrément de temps, à l'aide de la fonction LevelSet α qui permet de déterminer l'interface entre les 2 domaines (section 2.5.1.2).

Le problème 2.20 est résolu, à chaque instant t , par la méthode des éléments finis mixtes en (\underline{v}, p) [17]. Les viscosités et masses volumiques sont calculées à l'instant $t - \Delta t$, ce qui permet de linéariser les équations mises en jeu à l'instant t . Ainsi, à chaque incrément de temps le problème est considéré comme newtonien, et les équation à résoudre sont les équations de Navier-Stokes.

2.5.1.2 Le problème de capture de surface libre

La capture de l'évolution de la surface libre se fait à l'aide d'une méthode Level-set [81]. La fonction LevelSet est un champ scalaire dont l'isovaleur zéro représente l'interface fluide-air. Cette fonction est la distance signée α à une interface Γ entre deux domaines. Le domaine global dans ce cas est :

$$\Omega_{tot} = \Omega_{polym} \cup \Omega_{air}$$

Cette distance est par définition positive dans le domaine "polymère", négative dans le domaine "air" et nulle sur l'interface des deux domaines. Pour une particule de coordonnées $\underline{x}(t)$ animée d'un mouvement de vitesse $\underline{v}(t)$ et se déplaçant sur l'interface $\Gamma(t)$, la dérivée matérielle de la fonction level-set est nulle :

$$\frac{d\alpha(\underline{x}, t)}{dt} = 0 \quad (2.22)$$

La fonction Level-set, puisque c'est une fonction distance, est une grandeur scalaire qui a la propriété d'avoir un gradient borné ($|\nabla\alpha| \simeq 1$). Cependant, la conservation de cette propriété n'est pas garantie par l'équation (2.22)). Afin de garantir un gradient borné de la fonction Level-set, Coupez et al. [29] ont modifié la méthode (2.22) et ont abouti à l'équation suivante qui combine convection et réinitialisation :

$$\frac{\partial\alpha}{\partial t} + \underline{U} \cdot \nabla\alpha = \frac{h}{\Delta t} S(\alpha) \quad (2.23)$$

où S est la fonction signe et h est la taille de maille locale. Le champ vectoriel \underline{U} est donné par :

$$\underline{U} = \underline{v} + \frac{h}{\Delta t} S(\alpha) \frac{\nabla\alpha}{|\nabla\alpha|} \quad (2.24)$$

2.5.1.3 Le problème thermique

En tout \underline{x} donné, la température évolue en fonction du temps. Cette évolution se présente sous la forme d'une équation de convection-diffusion scalaire donnée par :

$$\rho C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \underline{v} \cdot \nabla T \right) - \nabla \cdot (k \nabla T) = \dot{w} \quad (2.25)$$

où C_p est la capacité calorifique du polymère, k est sa conductivité thermique et \dot{w} est un terme source.

Tout comme le problème mécanique, le problème thermique est résolu en bi-phasique. En plus de la masse volumique, la capacité calorifique et la conductivité

thermique du milieu sont issues de lois de mélanges :

$$\begin{cases} Cp = Cp_{polym}1_{polym} + Cp_{air}1_{air} \\ k = k_{polym}1_{polym} + k_{air}1_{air} \end{cases} \quad (2.26)$$

La résolution numérique de l'équation de la chaleur a été effectuée en utilisant une formulation continue basée sur une méthode de type Galerkin Standard stabilisée [18, 21].

2.5.1.4 Couplage thermo-mécanique

Le couplage thermo-mécanique se fait grâce à la dissipation dans l'équation de la chaleur, et aussi à travers des lois rhéologiques pour la viscosité. La plupart des modèles rhéologiques présentent cette viscosité thermo-dépendante sous la forme suivante :

$$\eta(T, \dot{\gamma}) = f(\eta_0(T), \dot{\gamma}) \quad (2.27)$$

$\eta_0(T)$ étant une viscosité dépendant seulement de la température et f est une fonction régulière. Les lois auxquelles nous avons fait appel dans le cadre de cette thèse sont :

Loi de Carreau-Yasuda

$$\eta(T, \dot{\gamma}) = \eta_\infty + (\eta_0(T) - \eta_\infty)[1 + (\lambda_s \dot{\gamma})^a]^{(\frac{m-1}{a})} \quad (2.28)$$

η_∞ étant la viscosité pour un taux de cisaillement infini, λ_s est un temps caractéristique, m est l'indice de pseudo-plasticité et a est un paramètre adimensionnel.

Loi de Cross

$$\eta(T, \dot{\gamma}) = \frac{\eta_0(T)}{1 + (\frac{\eta_0(T)\dot{\gamma}}{\tau_*})^{(1-m)}} \quad (2.29)$$

τ_* étant une cission critique de la transition newtonienne/pseudo-plastique.

Les lois reliant la rhéologie à la température sont :

Loi d'Arrhenius

$$\eta_0(T) = \eta_0(T_{ref})exp\left[\frac{E}{R}\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{ref}}\right)\right] \quad (2.30)$$

E est l'énergie d'activation, R est la constante des gaz parfaits et T_{ref} est la température de référence.

La loi d'Arrhenius est en général valable pour des polymères semi-cristallins au dessus de la température de cristallisation ou de fusion. Pour les polymères amorphes, aux alentours de la température de transition vitreuse T_g , il est préférable d'utiliser la loi WLF.

Loi WLF

La loi WLF prend en compte les variations rapides de la viscosité d'un polymère amorphe entre T_g et $T_g + 100$. Cette loi est donnée par :

$$\log\left(\frac{\eta_0(T)}{\eta_0(T_g)}\right) = -\frac{C_1^g(T - T_g)}{T - T_g + C_2^g} \quad (2.31)$$

C_1^g et C_2^g étant deux paramètres caractéristiques du matériau.

2.5.1.5 Bibliographie sur la résolution du problème d'orientation de fibres

2.5.1.5.1 Simulation 2D de l'orientation de fibres

Papanastasiou et al. [6] ont considéré des écoulements en extrusion isotherme et ont calculé numériquement la fonction distribution d'orientation suivant des lignes de courant spécifiques à partir de l'équation (2.2). Le calcul bidimensionnel de l'orientation a été effectué par la méthode des éléments finis et a été couplé au calcul du champ de vitesse par un algorithme de Newton. Le principal résultat est la forte diminution du gonflement en sortie de filière avec l'augmentation du rapport de forme des fibres et de leur concentration volumique. Ahmed et Alexandrou [3] ont également résolu l'équation (2.2), par la méthode des éléments finis, en couplant la rhéologie au calcul de distribution d'orientation.

Pour Rosenberg et al.[87], l'état d'orientation est décrit par le tenseur $\underline{\underline{a}}$ et son évolution est régie par l'équation (2.9). Cette équation est résolue, en régime d'écoulement stationnaire isotherme, par la méthode des éléments finis. Le maillage est construit à partir des lignes de courant et le tenseur d'orientation est calculé aux noeuds et suivant ces lignes de courant. Comme précédemment, les travaux ont été appliqués à l'écoulement d'extrusion en filière. Le régime est supposé dilué. La simulation de l'extrusion en filière plate montre une grande dépendance du gonflement en sortie avec la concentration de fibres et leur rapport de forme. L'algorithme ne converge plus lorsque le régime devient semi-dilué.

Altan et al. [5] ont décrit l'état d'orientation à la fois par les tenseurs du second et du quatrième ordre. Les équations de Folgar et Tucker ont été résolues dans des conduites de section rectangulaire, et le tenseur d'ordre 6 a été exprimé en fonction du tenseur d'ordre 4 à travers une équation de fermeture. Les auteurs ont comparé les résultats numériques à des résultats analytiques et ont constaté un accord quantitatif. Cependant, du point de vue expérimental l'écart est considérable et par conséquent la prédiction est peu précise en ce qui concerne le comportement des suspensions de fibres.

Martinez et al. [71] ont utilisé une description Lagrangienne pour l'équation qui régit l'orientation de fibres. L'équation d'orientation a été résolue par la méthode des caractéristiques, avec une équation de fermeture de type quadratique pour le tenseur d'ordre quatre. Les auteurs ont noté que la convergence et la stabilité de cette méthode nécessite la définition d'un pas de temps suffisamment faible.

2.5.1.5.2 Simulation 3D de l'orientation de fibres

Kabanemi et Héту [57, 56] ont été les précurseurs pour la simulation numérique tridimensionnelle de l'orientation des fibres en écoulement, et ont résolu l'équation de Folgar et Tucker par une méthode de Runge-Kutta d'ordre 4. Cette méthode a été appliquée pour l'injection d'une plaque tridimensionnelle et pour l'extrusion dans une cavité rectangulaire.

Monton [75] a employé dans ses travaux une technique de Taylor Galerkin discontinue explicite pour la résolution de l'équation de Lipscomb et al.[67](équation 2.9).

Recemment, Redjeb [85] présente des résultats sur la simulation numérique de l'orientation de fibres en injection. L'orientation évolue selon l'équation de Folgar et Tucker, avec une équation de fermeture de type quadratique. L'approche numérique de résolution de cette équation a été la technique ST/GD (Space Time/ Galerkin Discontinu). La méthode implémentée utilise une interpolation P_0 en espace et P_n en temps.

Redjeb [85] a montré que l'approche discontinue pour la résolution de l'équation de Folgar et Tucker est fiable en 2D et en 3D et donne des résultats numériques proches de l'expérience. Néanmoins, cette méthode reste très diffusive et la finesse des résultats est très dépendante de la finesse du maillage. Dans le cas où le maillage n'est pas très fin, la couche d'orientation à coeur peut disparaître à partir d'une certaine distance du point d'injection.

2.5.2 L'approche continue pour la simulation de l'anisotropie induite par l'écoulement

L'approche discontinue [85] donne une solution interpolée P_0 en espace (une solution par élément) ce qui fait que, pour un maillage tridimensionnel de 100 000 noeuds ($\sim 500\,000$ éléments), le nombre d'inconnues pour le tenseur est de $500\,000 \times 6$ (puisque le tenseur d'orientation est symétrique) soit 3 millions d'inconnues.

Notre idée est d'introduire une méthode de résolution qui donne une solution par noeud (interpolation P_1 en espace). Une telle méthode, outre le gain en précision, permet d'avoir un gain en espace mémoire. En effet, si on considère le maillage précédent, le nombre d'inconnues passe de 3 millions à 600 000 inconnues et par conséquent la taille du système linéaire à résoudre diminue (gain en temps de calcul).

Dans cette section, nous présentons une formulation continue basée sur la méthode de Galerkin Standard, pour la résolution de l'équation de Folgar et Tucker. La méthode de Galerkin continue sera aussi couplée à des méthodes de stabilisation (de type SUPG, RFB, ...). En utilisant l'approximation quadratique, on peut réécrire l'équation de Folgar et Tucker (équation (2.10)) comme suit :

$$\frac{\partial \underline{\underline{a}}}{\partial t} + \underline{v} \cdot \nabla \underline{\underline{a}} + \underline{\underline{B}}_1 \cdot \underline{\underline{a}} + \underline{\underline{a}} \cdot \underline{\underline{B}}_2 + 2\lambda(\underline{\underline{a}} : \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{v})) \cdot \underline{\underline{a}} + \frac{1}{\theta} \left(\underline{\underline{a}} - \frac{1}{d} \underline{\underline{1}} \right) = 0 \quad \text{sur } \Omega \times]0, \tau[\quad (2.32)$$

τ étant le temps du cycle d'injection. Pour la résolution de cette équation, on devra disposer des tenseurs $\underline{\underline{B}}_1$, $\underline{\underline{B}}_2$ et de la variable θ :

$$\begin{cases} \underline{\underline{B}}_1 = -\underline{\underline{\Omega}}(\underline{v}) - \lambda \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{v}) \\ \underline{\underline{B}}_2 = \underline{\underline{\Omega}}(\underline{v}) - \lambda \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{v}) \\ \theta = \frac{1}{2dC_I \bar{\varepsilon}} \end{cases} \quad (2.33)$$

Cette écriture générique de l'équation de Folgar et Tucker (expression (2.32)) est très avantageuse vu qu'elle permet aussi de traiter d'autres problèmes physiques, comme par exemple le calcul d'orientation des chaînes macromoléculaires pour un fluide viscoélastique (voir Annexe A.1).

Dans ce qui suit, nous détaillerons la formulation continue pour la résolution de l'équation de Folgar et Tucker (équation (2.32)).

2.5.2.1 Formulation faible du problème d'orientation avec la méthode de Galerkin Standard

Pour établir la formulation faible du problème d'orientation, il est nécessaire de définir les espaces fonctionnels de travail. Pour cela on définit 2 espaces P_S et V_S de

la manière suivante :

$$\begin{aligned} P_S &= \{\text{Espace des tenseurs symétriques à composantes dans } L^2(\Omega)\} \\ V_S &= \{\text{Espace des tenseurs symétriques à composantes dans } H^1(\Omega)\} \end{aligned}$$

Pour le terme temporel de l'équation d'orientation, on utilisera un schéma d'Euler implicite :

$$\frac{\partial \underline{a}}{\partial t} \simeq \frac{\underline{a}^t}{\Delta t} - \frac{\underline{a}^{t-\Delta t}}{\Delta t}$$

\underline{a}^t désigne le tenseur d'orientation calculé à l'instant t , et $\underline{a}^{t-\Delta t}$ est le tenseur d'orientation calculé à l'instant précédent.

Ainsi, à chaque instant t , le terme quadratique dans l'équation d'orientation pourra être linéarisé de la façon suivante :

$$(\underline{a} : \underline{\varepsilon}(v)) \cdot \underline{a} \simeq (\underline{a}^{t-\Delta t} : \underline{\varepsilon}(v)) \cdot \underline{a}^t$$

Les deux approximations précédentes, nous permettent de résoudre, à tout instant t , le problème fort présenté par le système qui suit :

$$\left\{ \begin{array}{l} \underbrace{\frac{\underline{a}^t}{\Delta t} + v \cdot \nabla \underline{a}^t}_{\text{terme de transport}} + \underbrace{\underline{B}_1 \cdot \underline{a}^t + \underline{a}^t \cdot \underline{B}_2}_{\text{terme de rotation}} + \underbrace{(2\lambda(\underline{a}^{t-\Delta t} : \underline{\varepsilon}(v)) + \frac{1}{\theta}) \cdot \underline{a}^t}_{\text{terme de diffusion}} = \underbrace{\frac{1}{\theta d} + \frac{\underline{a}^{t-\Delta t}}{\Delta t}}_{\text{second membre}} \text{ sur } \Omega \\ \underline{a}(x, t = 0) = \underline{F}(x) \\ \underline{a} \text{ est connu sur } \partial\Omega^l \subset \partial\Omega \end{array} \right. \quad (2.34)$$

d étant la dimension spatiale.

Nous multiplions les différents membres intervenant dans l'équation du problème fort (2.34) par un tenseur test \underline{a}^* choisie dans l'espace V_S et on effectue une intégration sur tout le domaine Ω . La formulation faible s'écrit alors :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Trouver } \underline{a}^t \in V_S \text{ tel que :} \\ A(\underline{a}, \underline{a}^*) = l(\underline{a}^*) \text{ pour tout } \underline{a}^* \in V_S \end{array} \right. \quad (2.35)$$

Avec,

$$\left\{ \begin{array}{l} A(\underline{a}, \underline{a}^*) = \int_{\Omega} \left(\frac{\underline{a}^t \cdot \underline{a}^*}{\Delta t} + v \cdot \nabla \underline{a}^t \cdot \underline{a}^* + \underline{B}_1 \cdot \underline{a}^t \cdot \underline{a}^* + \underline{a}^t \cdot \underline{B}_2 \cdot \underline{a}^* + (2\lambda(\underline{a}^{t-\Delta t} : \underline{\varepsilon}(v)) + \frac{1}{\theta}) \cdot \underline{a}^t \cdot \underline{a}^* \right) \\ l(\underline{a}^*) = \int_{\Omega} \left(\frac{\text{tr}(\underline{a}^*)}{\theta d} + \frac{\underline{a}^{t-\Delta t} \cdot \underline{a}^*}{\Delta t} \right) \end{array} \right. \quad (2.36)$$

L'utilisation de la méthode de Galerkin Standard consiste à approcher l'espace des fonctions tests V_S par un espace V_S^h , qui représente l'espace de polynômes d'interpolation d'ordre 1 des éléments de V_S . Le problème faible se réduit à :

$$\begin{cases} \text{Trouver } \underline{a}_h \in V_S^h \text{ tels que :} \\ A(\underline{a}_h, \underline{a}^*) = l(\underline{a}^*) \text{ pour tout } \underline{a}^* \in V_S^h \end{cases} \quad (2.37)$$

Sur chaque élément K du maillage, la fonction \underline{a}_h s'écrit :

$$\underline{a}_h = \sum_{j=1}^{N_{Noeuds}} \underline{a}_j N_j(\underline{x})$$

Les fonctions N_j sont les polynômes d'interpolation de degré 1.

L'implémentation de la formulation continue du problème d'orientation fait appel à une étape supplémentaire pour l'optimisation de l'espace mémoire. En effet, la symétrie du tenseur d'orientation permet, lors de son implémentation, un passage d'une notation tensorielle (ou vectorielle) avec $(d \times d)$ composantes à une notation vectorielle avec $(d \times (d + 1)/2)$ composantes.

La matrice A associée au système linéaire de la formulation faible (2.37) est la somme de trois contributions :

Terme de transport :

La contribution du terme de transport s'écrit comme une matrice de taille $N_{Noeuds} \times N_{Noeuds}$ blocs dont chaque bloc, noté A_{tran}^{ij} , est de taille $(d \times (d + 1)/2) \times (d \times (d + 1)/2)$.

$$A_{tran} = \begin{pmatrix} (A_{11}) & (A_{12}) & \dots & (A_{1N_{Noeuds}}) \\ (A_{21}) & (A_{22}) & \dots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ (A_{N_{Noeuds}1}) & \dots & \dots & (A_{N_{Noeuds}N_{Noeuds}}) \end{pmatrix}$$

chaque bloc A_{ij} est une matrice diagonale et est donnée par :

$$(A_{ij}) = \begin{pmatrix} \int_K \frac{1}{\Delta t} N_i N_j + N_i \underline{v} \cdot \nabla N_j & & & 0 \\ & \ddots & & \\ 0 & & & \int_K \frac{1}{\Delta t} N_i N_j + N_i \underline{v} \cdot \nabla N_j \end{pmatrix}$$

Terme de rotation :

On désigne par (Bp_1) et (Bp_2) les matrices associées aux applications linéaires $\underline{a}_v \mapsto \underline{B}_1 \cdot \underline{a}$ et $\underline{a}_v \mapsto \underline{a} \cdot \underline{B}_2$.
 \underline{a}_v désigne l'écriture vectorielle du tenseur symétrique \underline{a} . Nous pouvons écrire :

$$Bp_1 \cdot \underline{a}_v = \underline{B}_1 \cdot \underline{a}$$

et,

$$Bp_2 \cdot \underline{a}_v = \underline{a} \cdot \underline{B}_2$$

La matrice associée au terme de rotation s'écrit alors :

$$A_{rot} = \begin{pmatrix} \int_K ((Bp_1) + (Bp_2)) N_1 N_1 & \dots & \int_K ((Bp_1) + (Bp_2)) N_1 N_{N_{Noeuds}} \\ & \ddots & \\ \int_K ((Bp_1) + (Bp_2)) N_1 N_{N_{Noeuds}} & \dots & \int_K ((Bp_1) + (Bp_2)) N_{N_{Noeuds}} N_{N_{Noeuds}} \end{pmatrix}$$

Terme de diffusion :

La matrice locale associée au terme de diffusion est une matrice diagonale par blocs :

$$A_{diffu} = (2\lambda(\underline{a}^{t-\Delta t} : \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{v})) + \frac{1}{\theta}) \begin{pmatrix} (A_{11}^{diffu}) & (A_{12}^{diffu}) & \dots & (A_{1N_{Noeuds}}^{diffu}) \\ (A_{21}^{diffu}) & (A_{22}^{diffu}) & \dots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ (A_{ij}^{diffu}) & \dots & \dots & (A_{N_{Noeuds}N_{Noeuds}}^{diffu}) \end{pmatrix}$$

où chaque bloc (A_{ij}^{diffu}) s'écrit :

$$(A_{ij}^{diffu}) = \begin{pmatrix} \int_K N_i N_j & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \int_K N_i N_j \end{pmatrix}$$

Vecteur second membre :

$$L = \begin{pmatrix} L_1 \\ \vdots \\ L_{N_{Noeuds}} \end{pmatrix}$$

L_i ($i = 1, \dots, N_{Noeuds}$) est un vecteur de taille $(d \times (d + 1)/2)$:

$$L_i = \begin{pmatrix} \int_K \frac{1}{\Delta t} + 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} N_i$$

2.5.2.2 Méthodes de stabilisation pour l'équation d'orientation

Pour la résolution du problème d'orientation avec la formulation continue, nous avons implémenté deux méthodes de stabilisation que nous avons associées à la méthode de Galerkin Standard.

2.5.2.2.1 La méthode SUPG

L'idée de base de cette méthode [21] est de perturber les fonctions tests \underline{a}^* par les fonctions $\tilde{\underline{a}}^*$ définies par :

$$\tilde{\underline{a}}^* = \underline{a}^* + \sigma \underline{v} \cdot \nabla \underline{a}^* \quad (2.38)$$

Cette perturbation a pour objectif de diminuer l'effet de convection dominant, principale cause des oscillations de la solution donnée par la méthode de Galerkin standard. Quand nous remplaçons dans le système (2.37) la fonction test \underline{a}^* par $\tilde{\underline{a}}^*$ et que l'on développe la forme bilinéaire $A(.,.)$ ainsi que le second membre, on constate qu'il y a de nouveaux termes qui apparaissent par rapport à l'approche Galerkin standard.

Afin d'assurer la consistance de la méthode, Brooks et Hughes [21] ont considéré que le coefficient σ_K , sur chaque maille, est donné par la relation locale suivante :

$$\sigma_K = \frac{h_K}{2 \|\underline{v}_K\|_{\text{moy}}} \quad (2.39)$$

h_K étant la taille de la maille K , et $\|\underline{v}_K\|_{\text{moy}}$ la moyenne des vitesses calculées sur les noeuds de la même maille.

2.5.2.2.2 La méthode RFB

La méthode RFB ("Residual Free Bubbles") est inspirée des méthodes multi-échelles [18]. Cette méthode consiste à enrichir l'espace fini V_S^h avec un espace V_S^B appelé espace de fonctions bulles. L'espace de travail est la somme directe de ces deux espaces. Il est noté V^{RFB} et il est donné par :

$$V^{RFB} = V_S^h \oplus V_S^B \quad (2.40)$$

Ainsi, tout élément \underline{a}_h de V^{RFB} s'écrit comme la somme d'une partie linéaire $\underline{a}_L \in V_S^h$ et d'une partie bulle $\underline{a}_B \in V_S^B$.

$$\underline{a}_h = \underline{a}_L + \underline{a}_B \quad (2.41)$$

Pour des problèmes de convection pure, Franca et al. [41] ont montré, qu'en condensant la bulle, la méthode RFB et la méthode SUPG sont équivalentes. En effet, l'utilisation de la méthode RFB revient à utiliser la méthode SUPG avec un coefficient σ_h défini localement par :

$$\sigma_K = \frac{h_K}{3\|\underline{v}_K\|_{moy}} \quad (2.42)$$

2.5.2.2.3 Exemple d'application

Comme exemple d'illustration, nous considérons dans le repère (1,2,3), un écoulement isotherme bidimensionnel de Poiseuille entre deux plaques parallèles de dimensions infinies selon la direction 3 (figure(2.7)). Cet écoulement est considéré bidimensionnel, il suffit alors de l'étudier dans le plan (1,2). L'orientation est supposée initialement isotrope dans tout le domaine, et le tenseur d'orientation est aussi imposé isotrope à l'entrée. La viscosité du polymère est supposée constante et égale à 1000 Pa.s et le rapport de forme β est pris égal à 10 (ce qui signifie que le coefficient λ dans l'équation de Folgar et Tucker est à peu près égal à un).

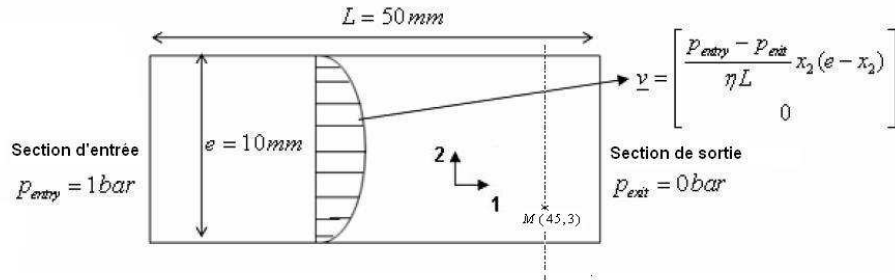


FIGURE 2.7 – Écoulement de Poiseuille entre deux plaques de dimensions infinies

Sur un maillage isotrope à 1700 noeuds et 3400 éléments, nous calculons le tenseur d'orientation avec la formulation continue basée sur la méthode de Galerkin Standard (section 2.5.2.1). La figure 2.8 montre la distribution de la première composante du tenseur d'orientation a_{11} aux instants 0.02 s, 0.06 s et 0.2 s. Au delà de l'instant 0.2 s, l'orientation atteint le régime stationnaire.

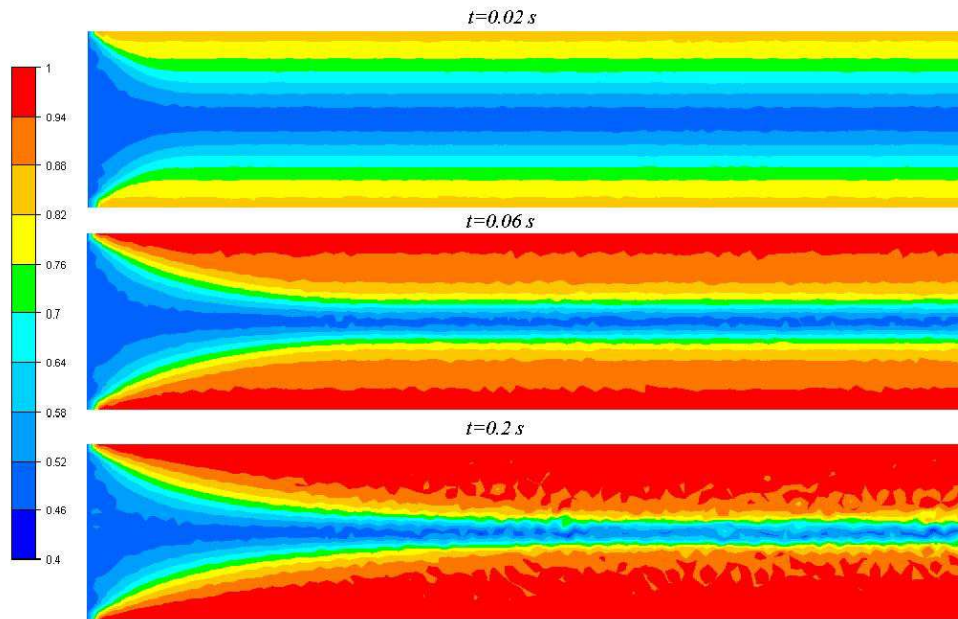


FIGURE 2.8 – Distribution de la première composante a_{11} , déterminée en utilisant la méthode de Galerkin Standard

Le profil obtenu rejoint les observations expérimentales. En effet, nous voyons que l'orientation est importante au voisinage de la paroi (zone où les taux de cisaillements sont les plus élevés), alors qu'elle est faible à coeur. Néanmoins, cette solution numérique montre des oscillations erronées qui relèvent du caractère hyperbolique dominant de l'équation de Folgar et Tucker. Dans certaines zones, la solution est donc peu exacte, ce qui mène, comme dans le cas des équations hyperboliques scalaires, à utiliser des méthodes de stabilisation. La figure 2.9 montre la distribution de la première composante du tenseur d'orientation obtenue avec et sans stabilisation :

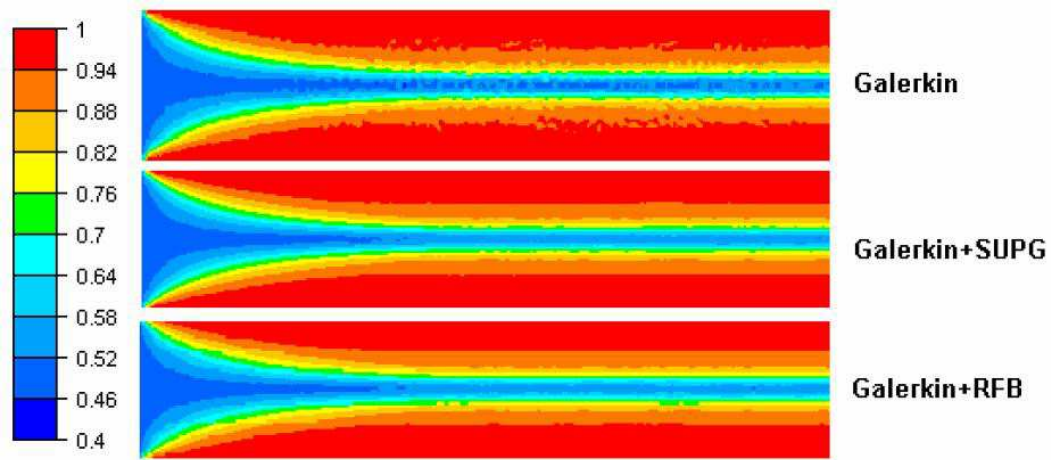


FIGURE 2.9 – Distribution de la composante a_{11} du tenseur d'orientation en utilisant la méthode de Galerkin Standard, Galerkin associée à SUPG et Galerkin associée à RFB

Nous constatons que les profils de a_{11} obtenus avec l'approche de Galerkin Standard, SUPG et RFB sont très similaires. Cependant, l'utilisation des méthodes de stabilisation réduit les oscillations observées, et donne un profil plus net de la solution numérique tout en conservant sa consistance.

Par la suite, nous comparons le profil obtenu numériquement (avec et sans stabilisation) par rapport à la solution analytique.

En régime stationnaire, l'équation de Folgar et Tucker en 2D est équivalente à un système dynamique d'ordre 1 qui donnera l'évolution des composantes du tenseur d'orientation en fonction de la coordonnée spatiale x_2 . La résolution d'un tel système par la méthode de Runge-Kutta d'ordre quatre, donne une solution très proche de la solution analytique. Nous considérons alors que la solution analytique pour la composante a_{11} est la solution obtenue par la méthode de Runge Kutta.

La figure 2.10 montre le profil de la composante du a_{11} du tenseur d'orientation, en régime stationnaire, sur une coupe de normale selon l'axe 1, à l'abscisse $x_1 = 40mm$.

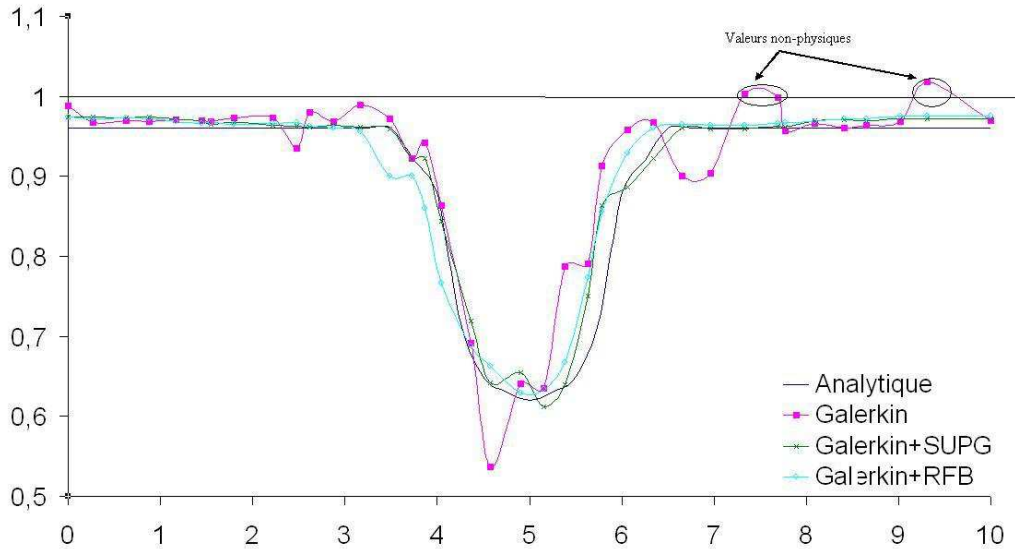


FIGURE 2.10 – La composante a_{11} du tenseur d'orientation sur une coupe de normale 1 à l'abscisse $x_1 = 40mm$

Nous remarquons que le profil obtenu par la méthode de Galerkin Standard présente beaucoup plus d'oscillations que les profils obtenus par les méthodes de stabilisation, et peut donner des valeurs non physiques (valeur supérieure à un dans le graphe ci dessus). La définition du tenseur d'orientation fait que les valeurs diagonales sont comprises entre zero et un, ce qui peut ne pas être le cas avec l'utilisation de la méthode de Galerkin Standard sans stabilisation, comme le montre la figure ci-dessus.

2.5.2.3 Normalisation du tenseur d'orientation

Dans la section précédente, nous avons vu que l'approche continue peut donner parfois des valeurs non physiques du tenseur d'orientation (valeur d'une composante diagonale supérieure à un) et ceci est du aux oscillations que génère l'utilisation de cette approche. Ces oscillations sont réduites avec les méthodes de stabilisation, mais ne sont pas inévitables. Ces oscillations peuvent s'accumuler au cours du calcul, puisqu'à chaque itération le calcul du tenseur d'orientation fait appel à la valeur du tenseur calculée à l'itération précédente (cf. expression (2.36)). Dans certains cas, les oscillations accumulées et le non respect des propriétés du tenseur peuvent amener à une divergence du calcul du tenseur orientation. Pour s'assurer que celui-ci a une

trace unitaire, que les composantes diagonales restent encadrées entre zéro et un, et que les composantes extra-diagonales restent bornées, on procède à une étape de normalisation du tenseur à la fin de chaque résolution de l'équation de Folgar et Tucker. Le solveur qui effectue cette étape est présenté par la figure (2.11) :

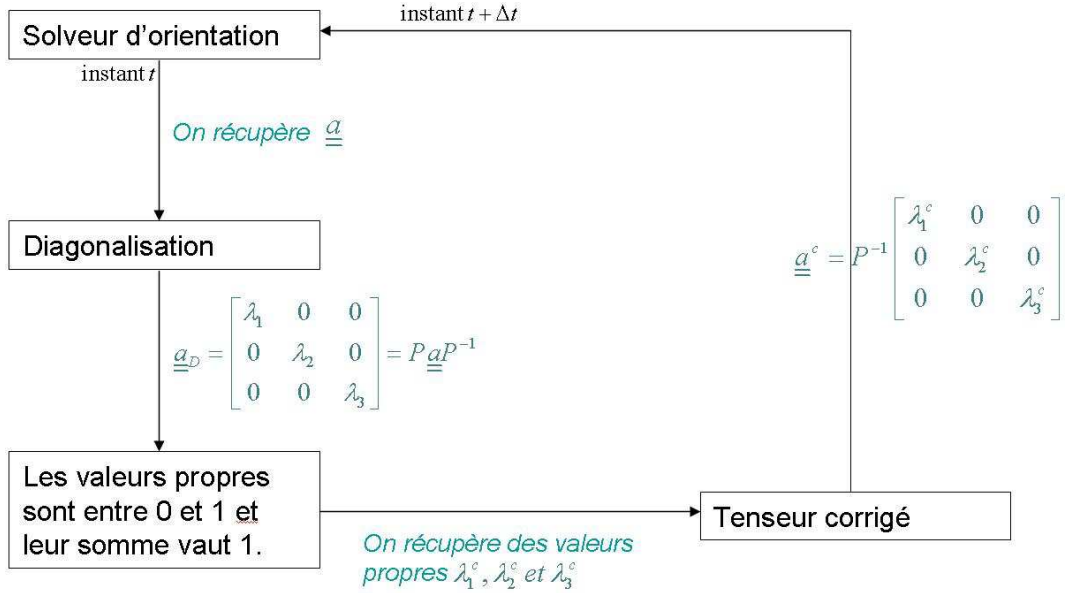


FIGURE 2.11 – Solveur de normalisation du tenseur d'orientation à la fin de chaque itération du solveur d'orientation

A la fin de la résolution correspondante à l'instant t , on récupère un tenseur \underline{a} . Celui-ci est diagonalisé, et les propriétés du tenseur d'orientation sont appliquées aux valeurs propres (chaque valeur propre est tronquée entre zéro et un et on impose que la somme des trois valeurs est l'unité). Le tenseur d'orientation corrigé \underline{a}^c est alors reconstruit et respecte les conditions de normalisation. Le tenseur normalisé correspond, pour le solveur d'orientation, au tenseur calculé à l'instant t et permet ainsi le calcul du tenseur à l'instant $t + \Delta t$.

2.5.2.4 Comparaisons entre formulation continue et formulation discontinue

2.5.2.4.1 Précision

Nous considérons une nouvelle fois le cas de l'écoulement entre plaques parallèles de largeur infinie (figure (2.7)). Loin de l'entrée, une fois l'écoulement établi, l'équation de Folgar et Tucker en 2D peut être résolue par un système dynamique d'ordre 1, qui donnera l'évolution des composantes du tenseur dans l'épaisseur (selon

la coordonnée spatiale x_2).

$$\begin{cases} \frac{\partial a_{11}}{\partial t} + 2 \frac{p_{entry} - p_{exit}}{\eta L} \left(\frac{e}{2} - x_2 \right) a_{12} (a_{11} - 1) + \frac{1}{\theta} (a_{11} - \frac{1}{2}) = 0 \\ \frac{\partial a_{12}}{\partial t} + 2 \frac{p_{entry} - p_{exit}}{\eta L} \left(\frac{e}{2} - x_2 \right) a_{12} a_{12} - \frac{p_{entry} - p_{exit}}{\eta L} \left(\frac{e}{2} - x_2 \right) a_{22} + \frac{1}{\theta} a_{12} = 0 \\ \frac{\partial a_{22}}{\partial t} + 2 \frac{p_{entry} - p_{exit}}{\eta L} \left(\frac{e}{2} - x_2 \right) a_{12} a_{22} + \frac{1}{\theta} (a_{22} - \frac{1}{2}) = 0 \end{cases} \quad (2.43)$$

La résolution de ce système par la méthode de Runge-Kutta d'ordre 4 donne une solution très proche de la solution exacte. Nous comparons cette solution avec l'approche continue développée ci-dessus (implémentée sur la version recherche du logiciel de mise en forme Rem3D) et l'approche discontinue employée par Redjeb [85] (approche implémentée sur la version commerciale du logiciel Rem3D). Les figures (2.12), (2.13) et (2.14) montrent l'évolution des différentes composantes du tenseur d'orientation, au point M de coordonnées $x_1 = 45$ et $x_2 = 3$ (figure 2.7), calculées analytiquement et numériquement avec les approches continue stabilisée par la méthode SUPG et discontinue.

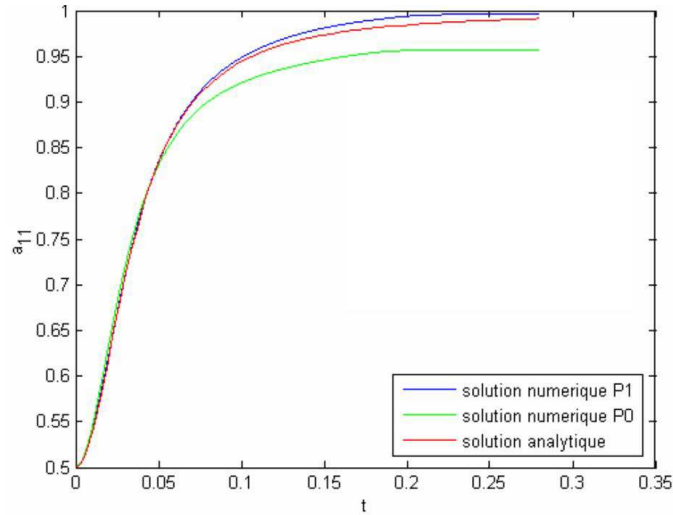


FIGURE 2.12 – Evolution, au point $M(45,3)$, de la composante a_{11} en fonction du temps : solution analytique, solution obtenue par l'approche discontinue et solution obtenue par l'approche continue

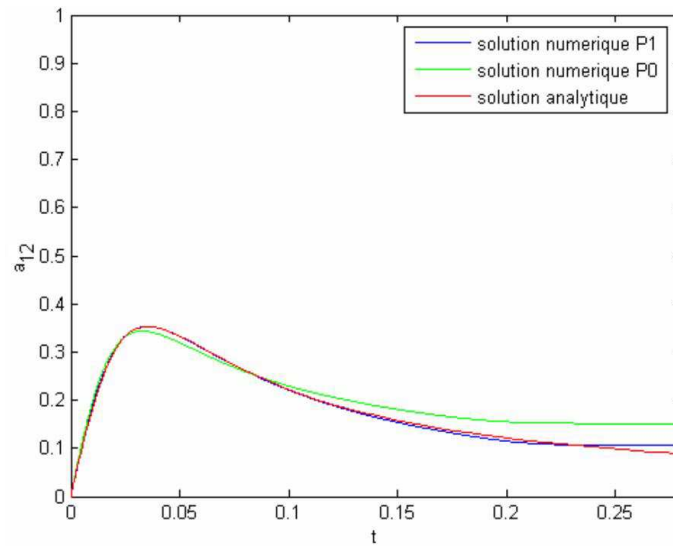


FIGURE 2.13 – Evolution, au point M(45,3), de la composante a_{12} en fonction du temps : solution analytique, solution obtenue par l'approche discontinue et solution obtenue par l'approche continue

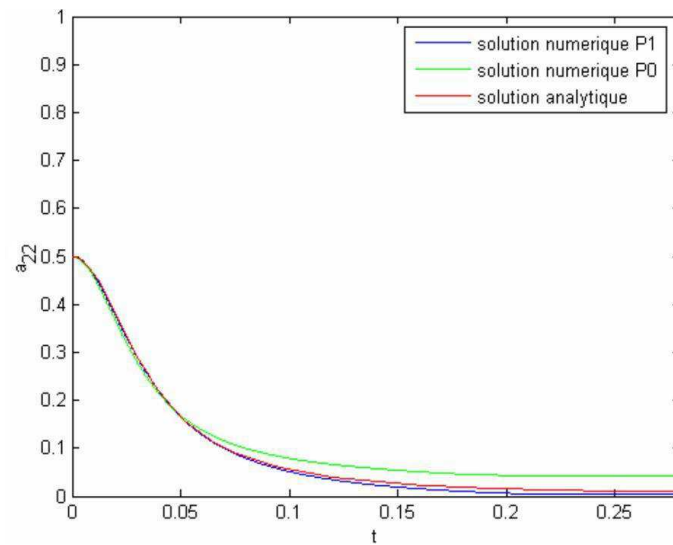


FIGURE 2.14 – Evolution, au point M(45,3), de la composante a_{22} en fonction du temps : solution analytique, solution obtenue par l'approche discontinue et solution obtenue par l'approche continue

Les figures précédentes montrent nettement, sur un maillage grossier, qu'on gagne en précision en utilisant l'approche continue.

2.5.2.4.2 Temps de calcul

Dans cette section le temps de calcul sera évalué pour les approches continue et discontinue sur un écoulement de Poiseuille dans un tube cylindrique de rayon $5mm$

et de longueur 50mm . La pression est cette fois-ci imposée à 1 bar à l'entrée et est nulle à la sortie du tube.

Le calcul d'orientation est effectué sur quatre maillages :

- Maillage 1 : 11 000 noeuds et 47 000 éléments ;
- Maillage 2 : 49 000 noeuds et 268 000 éléments ;
- Maillage 3 : 104 000 noeuds et 573 000 éléments ;
- Maillage 4 : 212 000 noeuds et 1 136 000 éléments ;

Les calculs ont été lancés, simultanément, pour 10 incréments de temps, sur 1, 4, 8 et 16 processeurs. Chaque processeur a 2.4 GHz de fréquence et 2 Gb de RAM.

	Maillage 1	Maillage 2	Maillage 3	Maillage 4
Temps de résolution en discontinu (s)	21.6	98.49	295.47	875.38
Temps de résolution en continu (s)	6.85	38.24	72.65	165.48
Temps d'assemblage en discontinu (s)	2.4	12.12	31.27	170.22
Temps d'assemblage en continu (s)	9.8	69.83	127.45	364.78
Temps de calcul en discontinu (s)	24	110.61	326.74	1045.6
Temps de calcul en continu (s)	16.65	98.07	200.1	530.26
accélération en discontinu	1	1	1	1
accélération en continu	1	1	1	1

TABLE 2.1 – Calculs effectués sur 1 processeur

	Maillage 1	Maillage 2	Maillage 3	Maillage 4
Temps de résolution en discontinu (s)	7.12	43.2	122.8	258.3
Temps de résolution en continu (s)	2.18	15.13	28.65	41.53
Temps d'assemblage en discontinu (s)	0.74	3.55	20.96	107.66
Temps d'assemblage en continu (s)	2.7	24.02	49.38	112.24
Temps de calcul en discontinu (s)	7.86	46.75	143.76	365.96
Temps de calcul en continu (s)	4.88	39.15	78.03	153.77
accélération en discontinu	3.125	2.38	2.27	2.85
accélération en continu	5	2.5	2.56	3.45

TABLE 2.2 – Calculs effectués sur 4 processeurs

	Maillage 1	Maillage 2	Maillage 3	Maillage 4
Temps de résolution en discontinu (s)	3.63	25.3	87.41	212.66
Temps de résolution en continu (s)	1.22	7.26	12.18	23.32
Temps d'assemblage en discontinu (s)	0.42	2.1	13.88	80.1
Temps d'assemblage en continu (s)	1.35	9.94	25.82	93.33
Temps de calcul en discontinu (s)	4.04	27.4	101.29	292.76
Temps de calcul en continu (s)	2.57	17.2	38	116.65
accélération en discontinu	5.88	4.16	3.22	3.57
accélération en continu	6.66	5.88	5.26	4.16

TABLE 2.3 – Calculs effectués 8 processeurs

	Maillage 1	Maillage 2	Maillage 3	Maillage 4
Temps de résolution en discontinu (s)	2.8	13.1	52.13	140.01
Temps de résolution en continu (s)	1.15	3.83	6.5	11.7
Temps d'assemblage en discontinu (s)	0.18	1.04	6.68	37.74
Temps d'assemblage en continu (s)	0.84	4.72	11.5	41.32
Temps de calcul en discontinu (s)	2.98	14.14	58.81	177.75
Temps de calcul en continu (s)	1.99	8.55	18	53.02
accélération en discontinu	7.7	8.33	5.55	5.88
accélération en continu	8.33	12.5	11.11	8.33

TABLE 2.4 – Calculs effectués sur 16 processeurs

Le temps de calcul est la somme du temps d'assemblage et du temps de résolution et l'accélération est définie comme suit :

$$Acceleration(n) = \frac{\text{temps de calcul sur 1 processeur}}{\text{temps de calcul sur n processeurs}} \quad (2.44)$$

Les résultats ci-dessus montrent un temps de résolution trois fois inférieur avec l'approche continue par rapport à l'approche discontinue. Mais le temps d'assemblage reste important avec la formulation P1, ce qui est prévisible avec les maillages utilisés. Afin d'expliquer cette différence, nous considérons une maille tétraédrique en 3D :

- Pour la formulation P_0 (formulation discontinue), on résout un problème à six inconnues par élément, donc la matrice locale a une taille 6×6 . Le calcul des composantes de cette matrice sera effectué avec un seul point d'intégration ; les fonctions de base sont évaluées sur un seul point de Gauss. De plus, l'assemblage du terme de transport est effectué seulement pour les flux entrants [85] afin d'optimiser cette étape du calcul.

- Pour la formulation P_1 , nous avons six inconnues par noeud, ce qui fera une matrice locale de taille $6 \times 4 \times 6 \times 4$. Les fonctions de base sont évaluées sur quatre points de Gauss. Le temps d'assemblage comporte aussi les opérations supplémentaires sur les matrices et vecteurs ajoutés par les méthodes de stabilisation.

Pour des maillages relativement grossiers, le temps d'assemblage est important par rapport au temps de résolution. Le temps de calcul est minimisé en utilisant l'approche continue, et devient moins important quand le maillage est raffiné.

En résumé, pour des maillages fins, quand on est amenés à lancer des calculs sur un grand nombre de processeurs, nous arrivons à réduire d'une façon considérable le temps de calcul ainsi que l'espace mémoire avec la formulation continue.

2.6 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons décrit le phénomène d'orientation de fibres lors de l'écoulement des thermoplastiques renforcés. Ce phénomène est régi par des mécanismes qui induisent une orientation par couches des fibres dans le produit injecté, selon des directions privilégiées. Cette structure est influencée par la géométrie des pièces injectées, les conditions d'injection ainsi que les propriétés des fibres et de la matrice. La plupart des auteurs s'accordent sur la formation de trois couches principales : une couche de peau qui se forme au voisinage de la paroi du moule avec une orientation aléatoire des fibres, une couche de cisaillement avec des fibres orientées dans le sens de l'écoulement et une couche de coeur où les fibres sont orientées transversalement à l'écoulement.

La deuxième partie de ce chapitre a été dédiée à la description d'un état d'orientation. Cet état peut être décrit par le biais de variables macroscopiques qui sont les tenseurs d'orientation (d'ordre 2, 4, ...). Ce descripteur présente l'avantage de donner une description macroscopique de l'orientation de fibres et une certaine facilité pour la manipuler numériquement, contrairement à d'autres variables comme la probabilité de distribution.

La troisième partie a été consacrée à l'énumération de modèles macroscopiques pour l'évolution des fibres. Ces modèles sont issus d'approches différentes et se présentent sous forme d'une équation d'advection-diffusion tensorielle. Le modèle représentant le mieux cette évolution est le modèle de Folgar et Tucker puisqu'il a l'avantage de prendre en compte l'interaction entre fibres. Cette interaction se manifeste par un coefficient C_I qui est déterminé à partir d'ajustements avec des valeurs expérimentales. Le principal inconvénient de ce modèle réside dans l'existence d'un tenseur d'ordre 4 dans l'équation d'évolution du tenseur d'ordre 2. Pour décrire l'état

d'orientation avec seulement le tenseur de second ordre, un passage par l'équation de fermeture est obligatoire mais induit encore une perte de précision vu que les équations de fermeture ne donnent pas une relation exacte entre le tenseur d'ordre 4 et le tenseur d'ordre 2.

La quatrième partie a été dédiée à la résolution numérique de l'équation de Folgar et Tucker. L'approche existante sur la version commerciale de Rem3D est une approche discontinue basée sur une formulation espace temps avec une méthode Galerkin discontinu en espace. L'approche discontinue consiste, pour un maillage donné, à donner une valeur du tenseur d'orientation par élément et présente l'inconvénient d'être diffuse et peu précise lorsque les maillages sont relativement grossiers. Dans ce travail, nous avons présenté une approche continue. Cette approche consiste à fournir, pour un maillage donné, une solution par noeud et elle est basée sur la méthode de Galerkin Standard. Comme pour le cas des équations d'convection-diffusion scalaires, la méthode de Galerkin Standard est instable et présente un profil erroné de la solution, c'est la raison pour laquelle cette méthode est associée à des méthodes de stabilisation comme SUPG et RFB.

L'approche continue est avantageuse sur tous les plans par rapport à l'approche discontinue. En effet, outre le gain en précision, il y a un gain en espace mémoire (du au stockage des noeuds au lieu des éléments) et un gain en temps de calcul qui sont essentiellement dus à la diminution du nombre de variables grâce au passage du calcul de solution par élément au calcul par noeud.

Chapitre 3

Solveurs élastiques

Comme il a été mentionné précédemment, l'objectif de ce mémoire est de prédire et simuler, via le logiciel de mise en forme Rem3D, le comportement mécanique des composites chargés de fibres à l'état solide. Ce comportement est supposé thermo-élastique. L'étude faite dans ce chapitre représente un enrichissement de la plateforme logicielle de Rem3D et plus particulièrement des modules de calcul de structure.

Dans la suite de cette thèse, nous nous sommes intéressés à des fibres de verre immergées dans des matrices ayant un comportement élastique linéaire isotrope à l'état solide. Le comportement des fibres étant aussi linéaire isotrope. Le comportement d'un tel matériau peut être vu de deux manières :

- Comportement hétérogène : on dispose d'un module de Young et d'un coefficient de poisson définis par zone. C'est-à-dire que les propriétés mécaniques sont celles des fibres si on est placé au niveau des fibres, et sont celles de la matrice si on se place au niveau de la matrice.
- Comportement homogène : le comportement dans sa globalité est linéaire anisotrope. Dans ce cas les propriétés mécaniques sont homogénéisées sur tout le matériau, et pour la simulation numérique on devra disposer du tenseur de raideur élastique anisotrope.

En général on ne dispose que des propriétés mécaniques des renforts et celle de la matrice, les propriétés anisotropes n'étant pas triviales (cf. chapitre 4). Il est alors parfois préférable, au niveau de la simulation, de considérer un comportement élastique linéaire hétérogène.

La première partie de ce chapitre sera dédiée à la présentation du solveur élastique isotrope. Pour donner la réponse du matériau face à des sollicitations mécaniques,

ce solveur aura besoin des données du module de Young et du coefficient de Poisson ainsi que des conditions aux limites. La résolution numérique est effectuée avec la méthode des éléments finies mixtes et 2 types d'éléments seront testés : l'élément $P1/P1$ et l'élément $P1 + /P1$.

La deuxième partie de ce chapitre traitera du solveur élastique anisotrope. Dans cette partie, nous supposons connue la donnée du tenseur de raideur. Tout comme le solveur isotrope, ce solveur est basé sur la méthode des éléments finies mixtes avec les éléments $P1/P1$ et $P1 + /P1$

Sommaire

3.1	Solveur élastique linéaire isotrope	61
3.1.1	Écriture mixte en élasticité linéaire isotrope	61
3.1.2	Formulation variationnelle du problème mixte en élasticité linéaire isotrope	63
3.1.3	Discrétisation en éléments finis mixte	64
3.1.4	validation du solveur élastique isotrope mixte : cas de la plaque trouée sollicitée en traction uniforme	66
3.2	Solveur élastique linéaire anisotrope	72
3.2.1	Écriture mixte en élasticité linéaire anisotrope	72
3.2.2	Formulation variationnelle du problème mixte en élasticité linéaire anisotrope	73
3.2.3	Discrétisation en éléments finis	74
3.2.4	Validation du solveur élastique anisotrope : cas de la poutre tridimensionnelle	74
3.3	Conclusion	77

3.1 Solveur élastique linéaire isotrope

L'objectif de cette section est la mise en place d'un solveur linéaire élastique isotrope sous forme mixte. Le comportement d'un matériau élastique linéaire isotrope, selon la loi de Hooke en petites perturbations s'écrit :

$$\underline{\underline{\sigma}} = 2\mu\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{u}) + \lambda(\nabla \cdot \underline{u})\underline{\underline{1}} \quad (3.1)$$

λ et μ étant les coefficients de Lamé qui peuvent être exprimés en fonction du module de Young E et du coefficient de poisson ν du matériau :

$$\mu = \frac{E}{2(1 + \nu)}; \lambda = \frac{E\nu}{(1 + \nu)(1 - 2\nu)}$$

La simulation d'un tel comportement nécessite la connaissance de E et de ν . Le coefficient ν détermine le niveau de compressibilité dans le matériau, et peut poser des difficultés numérique en régime incompressible (c'est à dire à une valeur très proche de 0.5). L'appel à des formulations mixtes permet de pallier à ce problème et de traiter tous les régimes élastiques possibles.

3.1.1 Écriture mixte en élasticité linéaire isotrope

On définit la pression hydrostatique de la manière suivante :

$$p = -\frac{1}{d} \text{tr} \underline{\underline{\sigma}} \quad (3.2)$$

d étant la dimension de l'espace.

En combinant les équations (3.1) et (3.2), la pression hydrostatique s'exprime en fonction du déplacement :

$$p = -K(\nabla \cdot \underline{u}) \quad (3.3)$$

où K est le coefficient de compressibilité donné par :

$$K = \frac{d\lambda + 2\mu}{d}$$

ou encore

$$\lambda - K = -2\frac{\mu}{d}$$

La loi de Hooke peut être alors réécrite de la manière suivante :

$$\underline{\underline{\sigma}} = 2\mu\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{u}) - 2\frac{\mu}{d}\nabla \cdot \underline{u} \cdot \underline{\underline{1}} - p \cdot \underline{\underline{1}} \quad (3.4)$$

Si nous considérons le problème comme stationnaire, et que en plus les efforts de pesanteur sont négligés, alors l'équation de conservation de la quantité de mouvement est donnée par :

$$\nabla \cdot \underline{\underline{\sigma}} = 0 \quad (3.5)$$

En faisant intervenir les équations (3.3) et (3.4), le problème mécanique s'écrit sous forme mixte en déplacement/pression [61] :

$$\begin{cases} \nabla \cdot (2\mu \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{u}) - 2\frac{\mu}{d}(\nabla \cdot \underline{u})\underline{\underline{1}}) - \nabla p = 0 \\ -\nabla \cdot \underline{u} - \frac{1}{K}p = 0 \end{cases} \quad (3.6)$$

L'équation (3.6) représente un système mixte dont la résolution conduit à la solution (\underline{u}, p) . Cette formulation a été utilisée [62] afin de pouvoir traiter le cas où le comportement mécanique est incompressible ($\nu \sim 0.5$).

La formulation mixte en élasticité isotrope peut aussi être plus flexible. En effet, soit ξ un paramètre constant et q un champs scalaire tel que :

$$q + \xi(\nabla \cdot \underline{u}) = 0 \quad (3.7)$$

Alors la loi de Hooke (équation (3.1)) peut s'écrire de la manière suivante :

$$\underline{\underline{\sigma}} = 2\mu \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{u}) + \lambda(\nabla \cdot \underline{u})\underline{\underline{1}} - (q + \xi(\nabla \cdot \underline{u}))\underline{\underline{1}} \quad (3.8)$$

En combinant les équations (3.7) et (3.8), le problème mixte sera :

$$\begin{cases} \nabla \cdot (2\mu \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{u}) + (\lambda - \xi)(\nabla \cdot \underline{u})\underline{\underline{1}}) - \nabla q = 0 \\ -\nabla \cdot \underline{u} - \frac{1}{\xi}q = 0 \end{cases} \quad (3.9)$$

Dans cette écriture, nous pouvons facilement constater que le choix du coefficient ξ , qu'on appellera dorénavant coefficient test, n'a aucun effet sur la solution principale \underline{u} , par contre le champ scalaire q dépendra du choix de ce coefficient. Cette flexibilité sur le choix du coefficient test, permet de traiter plusieurs situations, par exemple :

- si $\xi \simeq 0$: on résoud la problème mécanique en formulation directe (c'est à dire en déplacement seulement), puisque $q = 0$;
- si $\xi = K$: on résoud le problème mécanique en formulation mixte mais le champ scalaire q est la pression hydrostatique p ;

- si $\xi = \lambda$: cette valeur de ξ permet de traiter l'incompressibilité (q est toujours la pression hydrostatique). Lorsque ν est très proche de 0.5, par conséquent $\lambda \rightarrow \infty$. Le problème mixte à résoudre est ainsi :

$$\begin{cases} \nabla \cdot (2\mu \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{u})) - \nabla q = 0 \\ \nabla \cdot \underline{u} = 0 \end{cases} \quad (3.10)$$

3.1.2 Formulation variationnelle du problème mixte en élasticité linéaire isotrope

Le problème d'élasticité donné par l'équation (3.9) est résolu numériquement en utilisant la méthode des éléments finis mixtes. Pour cela nous définissons deux espaces fonctionnels P et V comme suit :

$$\begin{aligned} P &= L^2(\Omega) = \{r, \int_{\Omega} r^2 d\Omega < \infty\} \\ V &= (H^1(\Omega))^d = \{\underline{v}, \nabla \underline{v} \in P^{d \times d}\} \end{aligned}$$

Nous supposons que $H^1(\Omega)$ est dense dans $L^2(\Omega)$. Soit q^* un champ test choisi dans l'espace fonctionnel P et \underline{u}^* un champ test appartenant à l'espace V . Dans le système d'équations (3.9), les membres seront multipliés par \underline{u}^* dans la première équation et par q^* dans la seconde équation. Nous intégrons les équations sur tout le domaine Ω , pour obtenir :

$$\begin{cases} \int_{\Omega} (2\mu \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{u}) : \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{u}^*) + (\lambda - \xi)(\nabla \cdot \underline{u})(\nabla \cdot \underline{u}^*)) d\Omega - \int_{\Omega} (q \nabla \cdot \underline{u}^*) d\Omega = \\ \int_{\Gamma} ((\underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{n}) \cdot \underline{u}^*) d\Gamma, \underline{u}^* \in V \\ - \int_{\Omega} q^* \nabla \cdot \underline{u} - \int_{\Omega} (\frac{1}{\xi} q q^*) d\Omega = 0, q^* \in P \end{cases} \quad (3.11)$$

où \underline{n} est la normale sortante à la surface Γ , Γ représente le contour du domaine Ω .

La formulation faible du problème d'élasticité mixte est donc :

$$\begin{cases} \text{Trouver } (\underline{u}, q) \in (V \times P) \text{ tel que :} \\ a(\underline{u}, \underline{u}^*) + b(q, \underline{u}^*) = f(\underline{u}^*), \quad \forall \underline{u}^* \in V \\ b(\underline{u}, q^*) - c(q, q^*) = 0, \quad \forall q^* \in P \end{cases} \quad (3.12)$$

avec

$$\begin{aligned} a(\underline{u}, \underline{u}^*) &= \int_{\Omega} (2\mu \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{u}) : \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{u}^*) + (\lambda - \xi)(\nabla \cdot \underline{u})(\nabla \cdot \underline{u}^*)) d\Omega \\ b(q, \underline{u}^*) &= - \int_{\Omega} (q \nabla \cdot \underline{u}^*) d\Omega \\ c(q, q^*) &= \int_{\Omega} (\frac{1}{\xi} q q^*) d\Omega \\ f(\underline{u}^*) &= \int_{\Gamma} ((\underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{n}) \cdot \underline{u}^*) d\Gamma \end{aligned} \quad (3.13)$$

Si le comportement du matériau est thermo-élastique isotrope, l'expression (3.1) devient :

$$\underline{\underline{\sigma}} = 2\mu\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{u}) + \lambda(\nabla.\underline{u})\underline{\underline{1}} - (2\mu + d.\lambda)\alpha\Delta T.\underline{\underline{1}} \quad (3.14)$$

Le second membre de la première équation du système (3.12) devient :

$$f(\underline{u}^*) = \int_{\Gamma} ((\underline{\underline{\sigma}}.\underline{n}).\underline{u}^*) - \int_{\Omega} (\nabla.((2\mu + d.\lambda)\alpha\Delta T.\underline{\underline{1}}).\underline{u}^*)d\Omega \quad (3.15)$$

α étant le coefficient de dilatation thermique.

Les conditions aux limites pour ce type de problème mixte, peuvent être appliquées sur le déplacement et/ou la contrainte surfacique.

L'existence et l'unicité de la solution du problème mixte (système (3.12)) sont obtenues sous les conditions suivantes [17] :

- La forme bilinéaire $a(.,.)$ doit être coercive sur V :

$$\exists k > 0, \text{ tel que } \forall \underline{v} \in V \ a(\underline{v}, \underline{v}) \geq k \|\underline{v}\|_V^2$$

- La forme bilinéaire $b(.,.)$ doit vérifier la condition inf-sup sur $V \times P$:

$$\exists \beta > 0, \text{ tel que } \forall (\underline{v}, r) \in V \times P \ \inf_{r \in P} \sup_{\underline{v} \in V} \frac{b(\underline{v}, r)}{\|\underline{v}\|_V \|r\|_P}$$

- la forme bilinéaire $c(.,.)$ doit posséder une borne inférieure en norme sur l'espace P :

$$\exists \gamma > 0, \text{ tel que } c(r, r) \geq \gamma \|r\|_P^2, \forall r \in P$$

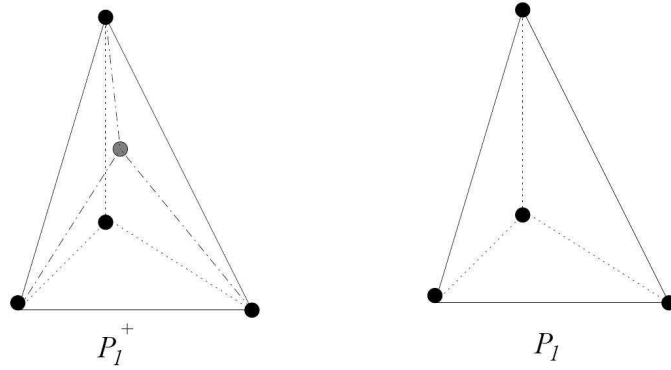
Ces conditions sont bien vérifiées (cf : démonstration dans [17])

Lorsque $\xi = \lambda$ et que le régime est incompressible, le problème mixte devient identique au problème de Stokes ; dans ce cas γ peut avoir une valeur nulle.

3.1.3 Discrétisation en éléments finis mixte

La discrétisation en éléments finis du système (3.12) passe par la discrétisation du domaine Ω en simplexes (qui sont des tétraèdres en 3D et des triangles en 2D). Notons Ω_h l'ensemble de ces simplexes. Par la suite nous cherchons une solution approchée (\underline{u}_h, q_h) de la solution (\underline{u}, q) . Les champs \underline{u}_h et q_h seront trouvés, respectivement dans les espaces V_h et P_h .

Nous utiliserons pour la résolution l'élément fini $P_1 + /P_1$ [7] (figure (3.1)), P_1/P_1 et P_1 :

FIGURE 3.1 – Élément fini mixte $P_1 + /P_1$

Il est à noter que la résolution fera appel seulement à l'élément P_1 lorsque $\xi = 0$.

Le degré d'interpolation est donc choisi égal à 1. Pour l'élément $P_1 + /P_1$, l'espace d'interpolation des déplacements est enrichi par des fonctions bulles nulles sur les frontières des éléments et affines par morceaux sur les quatre sous tétraèdres internes aux éléments. La solution en déplacement se construit alors comme étant la somme d'une contribution linéaire et d'une contribution non-linéaire appelée fonction bulle.

Notons B_h l'espace des fonctions bulles. Le problème discret associé au problème d'élasticité mixte est alors :

$$\begin{aligned} & \text{Trouver } (u_h, u_b, q_h) \in V_h \times B_h \times P_h \text{ tel que } \forall (u^*_h, u^*_b, q^*_h) \in V_h \times B_h \times P_h : \\ & \begin{cases} a(\underline{u}_h, \underline{u}^*_h) + b(q_h, \underline{u}^*_h) = \langle \underline{\sigma}_h \cdot \underline{n}_h, u^*_h \rangle \\ a(\underline{u}_b, \underline{u}^*_b) + b(q_h, \underline{u}^*_b) = 0 \\ b(\underline{u}_h, q^*_h) + b(\underline{u}^*_b, q^*_h) - c(q_h, q^*_h) = 0 \end{cases} \end{aligned} \quad (3.16)$$

Le problème discret provenant de la formulation faible pourra s'écrire sous la forme algébrique suivante :

$$\begin{pmatrix} A_{uu} & 0 & B_{uq} \\ 0 & A_{bb} & B_{bq} \\ B_{uq}^T & B_{bq}^T & -C_{qq} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U \\ U_b \\ Q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (3.17)$$

où :

- U désigne le vecteur contenant les composantes du déplacement en chaque noeud des tétraèdres ;
- U_b désigne le vecteur contenant les composantes du déplacement en chaque barycentre des tétraèdres ;
- Q est le vecteur contenant les valeurs du champs scalaire q en chaque noeud des tétraèdres ;

- F est le vecteur second membre associé aux conditions aux limites ;
- A_{uu} est la matrice associée à la forme linéaire définie sur $V_h \times V_h$ et qui à $(\underline{u}_h, \underline{u}_h^*)$ associe $a(\underline{u}_h, \underline{u}_h^*)$;
- A_{bb} est la matrice associée à la forme linéaire définie sur $B_h \times B_h$ et qui à $(\underline{u}_b, \underline{u}_b^*) \mapsto a(\underline{u}_b, \underline{u}_b^*)$;
- B_{uq} est la matrice associée à la forme linéaire définie sur $V_h \times P_h$ et qui à $(\underline{u}_h, \underline{q}_h) \mapsto b(\underline{u}_h, \underline{q}_h)$;
- B_{bq} est la matrice associée à la forme linéaire définie sur $V_h \times P_h$ et qui à $(\underline{u}_b, \underline{q}_h) \mapsto b(\underline{u}_b, \underline{q}_h)$;
- C_{qq} est la matrice associée à la forme linéaire définie sur $P_h \times P_h$ et qui à $(\underline{q}_h, \underline{q}_h^*) \mapsto c(\underline{q}_h, \underline{q}_h^*)$.

Sur chaque élément K , les fonctions bulles possèdent les propriétés remarquables suivantes [28] :

$$\int_K q_h \nabla \cdot \underline{u}_b = \int_K \nabla q_h \cdot \underline{u}_b$$

$$\int_K \underline{C} : \nabla \underline{u}_b = 0 \text{ pour tout tenseur constant } \underline{C}$$

En utilisant ces propriétés, les matrices associées au terme bulle dans le système (3.17) sont éliminées grâce à la relation de condensation suivante [30] :

$$A_{bb}U_b + B_{bq}P = 0 \Rightarrow U_b = -A_{bb}^{-1}B_{bq}P \quad (3.18)$$

en posant $D_{qq} = B_{bq}^T A_{bb}^{-1} B_{bq}$, le système(3.17) est équivalent à :

$$\begin{pmatrix} A_{uu} & B_{uq} \\ B_{uq}^T & -C_{qq} - D_{qq} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U \\ Q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (3.19)$$

Il est aussi important de noter que l'élément P_1/P_1 est stable en formulation mixte si on est loin du régime incompressible. L'utilisation de cet élément revient à supposer que $D_{qq} = 0$ dans l'équation (3.19).

La résolution numérique de l'équation (3.9) a été implémentée sur la version recherche du logiciel de mise en forme *Rem3D*[®], développé au Cemef. L'utilisateur a la possibilité d'employer l'un ou l'autre des deux éléments géométriques $P_1 + /P_1$ et P_1/P_1 ou encore la formulation directe P_1 .

3.1.4 Validation du solveur élastique isotrope mixte : cas de la plaque trouée sollicitée en traction uniforme

Afin de valider notre solveur nous considérons une plaque mince trouée sollicitée en traction uniaxiale uniforme $\sigma = 1MPa$. La plaque est de forme carrée de côté

$L = 100mm$ et d'épaisseur $t = 3mm$, et le trou est circulaire de rayon $a = 5mm$. (figure (3.2)).

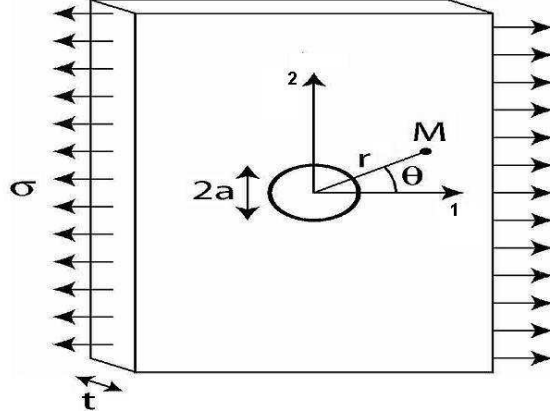


FIGURE 3.2 – Plaque mince trouée, soumise à une contrainte uniforme σ

Le matériau formant la plaque est linéaire élastique isotrope de module de Young $E = 1MPa$.

Les solutions analytiques en contraintes et en déplacement peuvent être exprimées en coordonnées cylindriques :

$$\begin{cases} \sigma_{rr} = -\frac{a^2}{r^2} \left(\frac{3}{2} \cos(2\theta) + \cos(4\theta) \right) + \frac{3a^4}{2r^4} \cos(4\theta) \\ \sigma_{\theta\theta} = -\frac{a^2}{r^2} \left(\frac{1}{2} \cos(2\theta) - \cos(4\theta) \right) - \frac{3a^4}{2r^4} \cos(4\theta) \\ \sigma_{r\theta} = -\frac{a^2}{r^2} \left(\frac{1}{2} \sin(2\theta) + \sin(4\theta) \right) + \frac{3a^4}{2r^4} \sin(4\theta) \end{cases} \quad (3.20)$$

$$\begin{cases} u_r = \frac{8(1+\nu)}{E} \left(r(1 - 2\nu + \cos(2\theta)) + \frac{a^2}{r^2} (1 + 4(1 - \nu) \cos(2\theta)) - \frac{a^4}{r^3} \cos(2\theta) \right) \\ u_\theta = \frac{8(1+\nu)}{E} \left(2(2\nu - 1) \frac{a^2}{r} - r - \frac{a^4}{r^3} \right) \sin(2\theta) \end{cases} \quad (3.21)$$

La plaque présente deux plans de symétrie dont les normales sont portées respectivement par les axes 1 et 2. Le calcul numérique sera donc effectué sur un quart de la plaque et sera exécuté sur les maillages représentés par la figure 3.3.

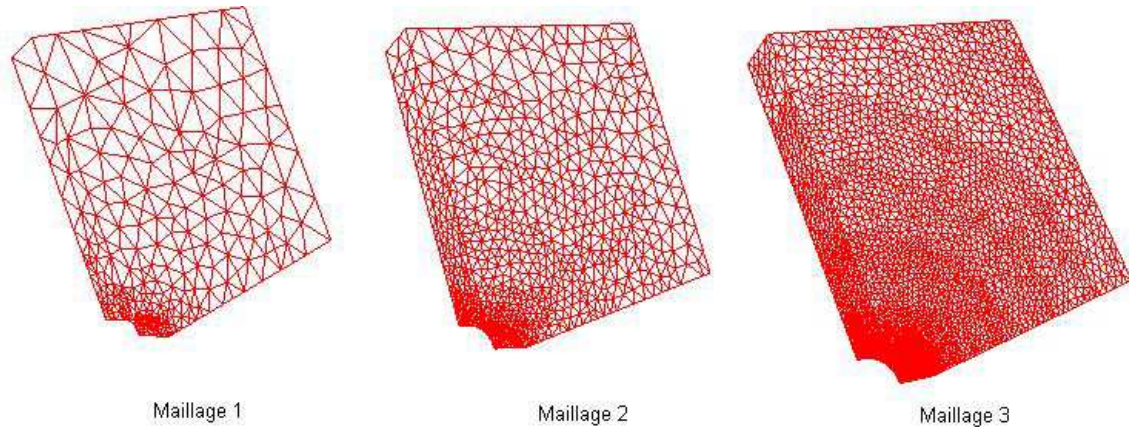


FIGURE 3.3 – Maillages irréguliers utilisés pour la simulation de la sollicitation mécanique sur une plaque trouée

- Maillage M1 : 1 065 noeuds, 5 220 éléments
- Maillage M2 : 4 130 noeuds, 22 240 éléments
- Maillage M3 : 21 150 noeuds, 120 000 éléments

La solution numérique est calculée avec le solveur élastique isotrope mixte en utilisant les éléments P_1/P_1 et $P_1 + /P_1$ et comparée avec la solution analytique. Il est à noter que l'utilisation de la formulation directe (résolution avec l'élément P_1) est équivalente à l'utilisation de la formulation P_1/P_1 avec un coefficient ξ très proche de zéro. Dans ce cas, la solution P_1 et la solution P_1/P_1 sont confondues.

Selon le coefficient de poisson, trois régimes sont étudiés. Nous comparons les résultats numériques et analytiques sur la première composante du déplacement et la première composante du tenseur de contraintes, sur les trois maillages.

✓ *Régime très compressible* : $\nu = 0.05$

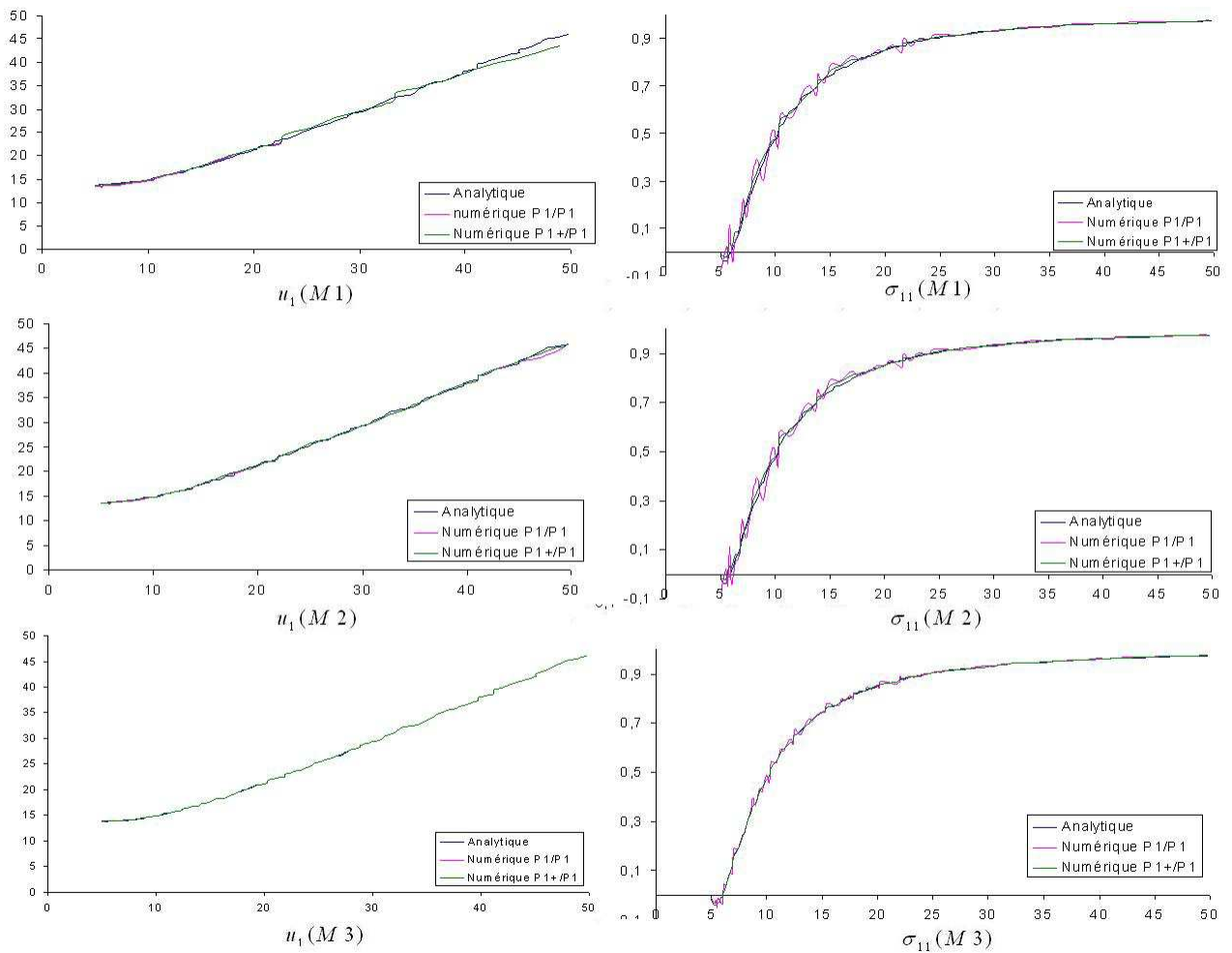


FIGURE 3.4 – Valeur numérique ($P_1 + /P_1$ et P_1/P_1) et analytique de u_1 et σ_{11} , sur le plan de symétrie horizontal, en régime très compressible

✓ Régime faiblement compressible : $\nu = 0.3$

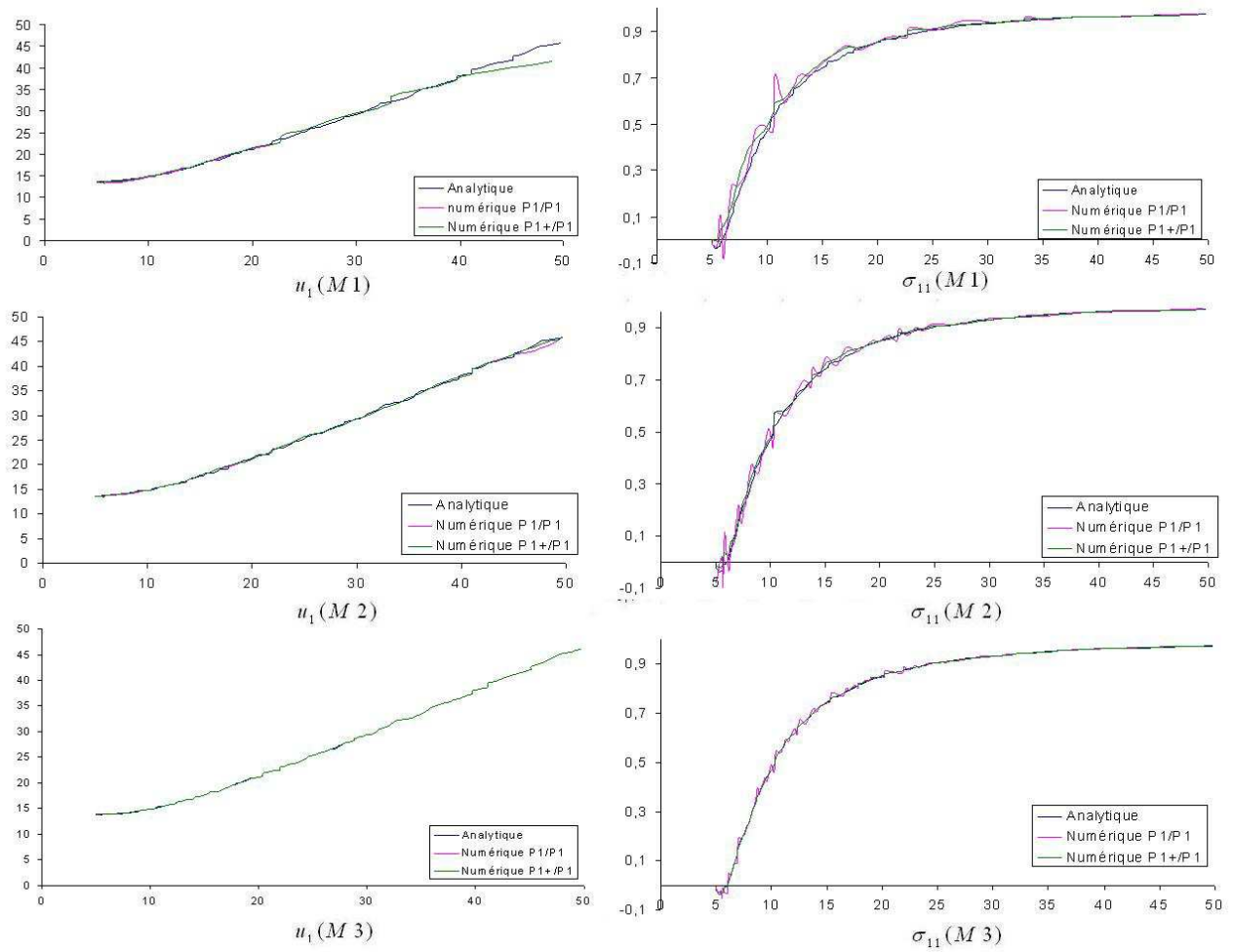


FIGURE 3.5 – Valeur numérique ($P_1 + /P_1$ et P_1/P_1) et analytique de u_1 et σ_{11} , sur le plan de symétrie horizontal, en régime faiblement compressible

✓ *Régime incompressible* : $\nu = 0.5$

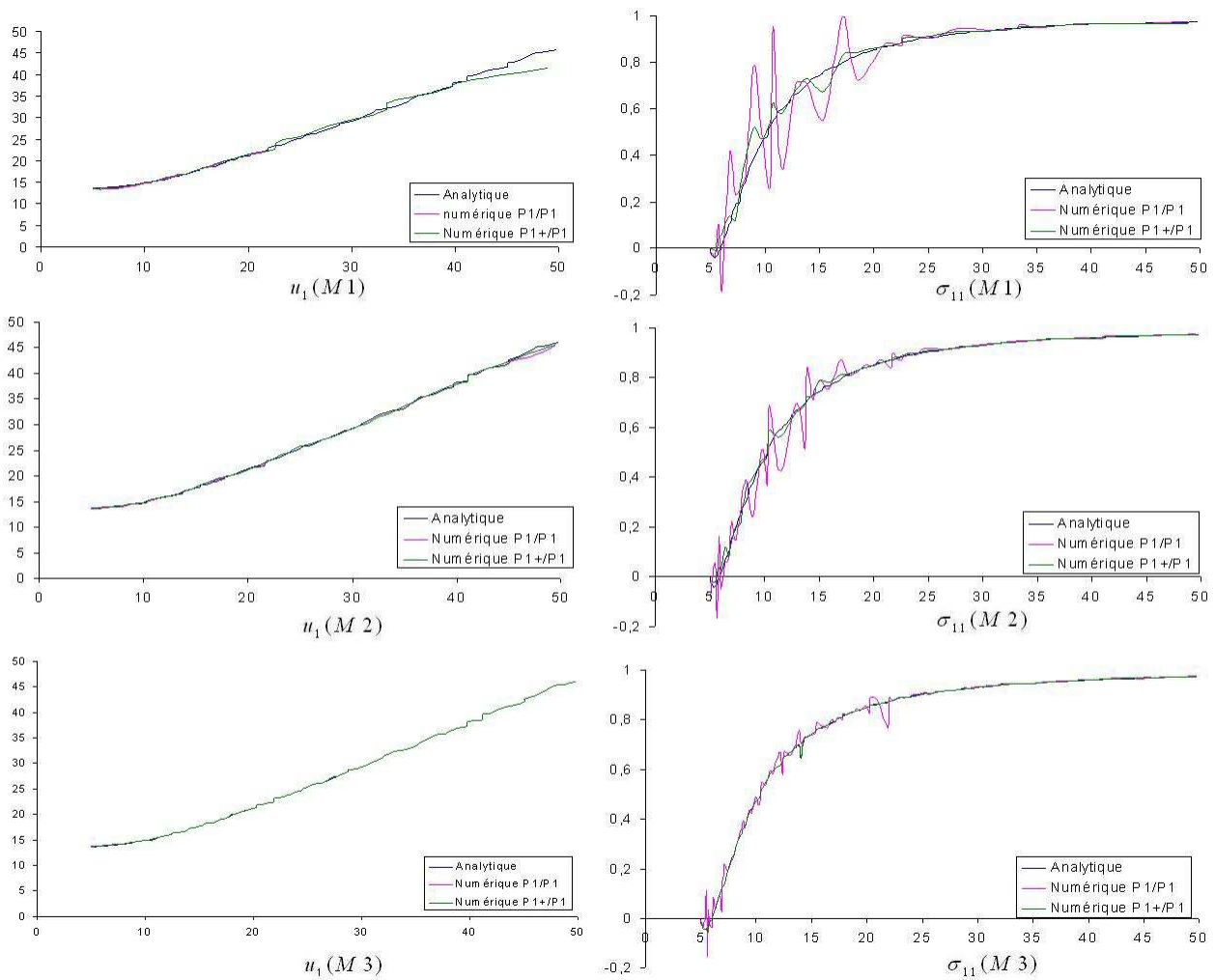


FIGURE 3.6 – Valeur numérique ($P_1 + /P_1$ et P_1/P_1) et analytique de u_1 et σ_{11} , sur le plan de symétrie horizontal, en régime incompressible

Ces calculs ont été lancés sur un seul processeur ayant 4GHz de fréquence et 512 Mo de RAM. Le temps CPU est donné par le tableau 3.1 :

	Maillage M1	Maillage M2	Maillage M3
Temps CPU en P_1/P_1 (s)	2.1	8.36	37.88
Temps CPU en $P_1 + /P_1$ (s)	2.66	11.11	45.87

TABLE 3.1 – Temps CPU obtenu avec les différentes formulations

Les figures 3.4, 3.5 et 3.6 montrent que les solutions numériques sont très proches

de la solution analytique. Les instabilités au niveau de la solution (surtout au niveau de la contrainte) apparaissent sous forme d'oscillations autour de la solution analytique, en régime faiblement compressible. Ces instabilités sont plus prononcées avec l'élément P_1/P_1 , et sont encore plus accentuées en régime incompressible. Ces oscillations peuvent diminuer en raffinant le maillage. L'utilisation de l'élément géométrique $P_1 + /P_1$ permet de réduire les oscillations et de donner une solution plus stable ; néanmoins le temps CPU est plus important avec cet élément et ceci est dû à l'assemblage du terme supplémentaire lié à la matrice D_{qq} dans l'équation (3.19).

On conclut que l'utilisation de l'élément $P_1 + /P_1$ est nécessaire en régime incompressible. Sinon, pour les autres régimes, l'utilisation de l'élément P_1/P_1 (ou seulement le P_1) est suffisante et permet de gagner en temps CPU par rapport au $P_1 + /P_1$ (moins de temps d'assemblage).

3.2 Solveur élastique linéaire anisotrope

3.2.1 Écriture mixte en élasticité linéaire anisotrope

La loi de comportement présentée et traitée dans la section 3.1 n'est qu'un cas particulier du comportement élastique linéaire. En général, le comportement élastique peut s'exprimer comme suit :

$$\underline{\underline{\underline{\sigma}}} = \underline{\underline{\underline{C}}} : \underline{\underline{\underline{\varepsilon}}}(\underline{u}) \quad (3.22)$$

$\underline{\underline{\underline{C}}}$ est un tenseur d'ordre quatre appelé tenseur de raideur qui est un tenseur symétrique. Les propriétés élastiques peuvent varier avec la direction et les coordonnées. Dans ce cas, le comportement est dit anisotrope.

L'équation (3.22) est équivalente à :

$$\underline{\underline{\underline{\varepsilon}}}(\underline{u}) = \underline{\underline{\underline{S}}} : \underline{\underline{\underline{\sigma}}} \quad (3.23)$$

Le tenseur $\underline{\underline{\underline{S}}}$ est dit tenseur de souplesse.

En considérant l'équation (3.7), la loi de comportement peut se réécrire :

$$\underline{\underline{\underline{\sigma}}} = \underline{\underline{\underline{C}}} : \underline{\underline{\underline{\varepsilon}}}(\underline{u}) - (q + \xi(\nabla \cdot \underline{u})) \underline{\underline{\underline{1}}} \quad (3.24)$$

En combinant cette équation avec l'équation d'équilibre (3.5), nous obtenons :

$$\begin{cases} \nabla \cdot (\underline{\underline{\underline{C}}} : \underline{\underline{\underline{\varepsilon}}}(\underline{u}) + \xi \nabla \cdot \underline{u} \underline{\underline{\underline{1}}}) - \nabla q = 0 \\ -\nabla \cdot \underline{u} - \frac{1}{\xi} q = 0 \end{cases} \quad (3.25)$$

3.2.2 Formulation variationnelle du problème mixte en élasticité linéaire anisotrope

Nous considérons encore une fois les espaces fonctionnels P et V définis dans la section 3.1.2.

Nous choisissons un couple de champs tests (\underline{u}^*, q^*) dans $V \times P$. Nous multiplions la première équation du système (3.25) par \underline{u}^* , et la seconde équation par q^* . La formulation variationnelle du problème mixte est obtenue en intégrant l'ensemble sur le domaine Ω :

$$\begin{cases} \int_{\Omega} (\underline{\underline{C}} : \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{u}) : \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{u}^*) + \xi(\nabla.\underline{u}).\nabla.\underline{u}^*)d\Omega - \int_{\Omega} (q\nabla.\underline{u}^*)d\Omega = \\ \int_{\Gamma} ((\underline{\underline{\sigma}}.\underline{n}).\underline{u}^*), \underline{u}^* \in V \\ - \int_{\Omega} q^* \nabla.\underline{u} - \int_{\Omega} (\frac{1}{\xi}qq^*)d\Omega = 0, q^* \in P \end{cases} \quad (3.26)$$

La formulation faible du problème d'élasticité mixte s'exprime alors comme suit :

$$\begin{cases} \text{Trouver}(\underline{u}, q) \in (V \times P) \text{ tels que :} \\ a_{an}(\underline{u}, \underline{u}^*) + b(q, \underline{u}^*) = f_{an}(\underline{u}^*), \quad \forall \underline{u}^* \in V \\ b(\underline{u}, q^*) - c(q, q^*) = 0, \quad \forall q^* \in P \end{cases} \quad (3.27)$$

avec

$$\begin{cases} a_{an}(\underline{u}, \underline{u}^*) = \int_{\Omega} (\underline{\underline{C}} : \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{u}) : \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{u}^*) + \xi(\nabla.\underline{u}).\nabla.\underline{u}^*)d\Omega \\ b(q, \underline{u}^*) = - \int_{\Omega} (q\nabla.\underline{u}^*)d\Omega \\ c(q, q^*) = \int_{\Omega} (\frac{1}{\xi}qq^*)d\Omega \\ f_{an}(\underline{u}^*) = \int_{\Gamma} ((\underline{\underline{\sigma}}.\underline{n}).\underline{u}^*)d\Gamma \end{cases} \quad (3.28)$$

Au cas où le comportement est thermo-élastique linéaire anisotrope, le tenseur de contraintes s'écrit :

$$\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{C}} : (\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{u}) - \underline{\underline{\alpha}}\Delta T) - (q - \xi\nabla.\underline{u})\underline{\underline{1}} \quad (3.29)$$

$\underline{\underline{\alpha}}$ étant le tenseur de dilatations thermiques, et ΔT est la différence entre la distribution de température initiale et la distribution finale. Pour la formulation variationnelle, seule l'expression du second membre change. En effet, l'expression de f devient :

$$f_{an}(\underline{u}^*) = \int_{\Gamma} ((\underline{\underline{\sigma}}.\underline{n}).\underline{u}^*) + \int_{\Omega} (\nabla.(\underline{\underline{C}} : \underline{\underline{\alpha}}\Delta T.\underline{\underline{1}}))d\Omega \quad (3.30)$$

3.2.3 Discrétisation en éléments finis

Tout comme le solveur élastique isotrope (cf. section 3.1.3), les éléments $P_1 + /P_1$ et P_1/P_1 seront utilisés pour la résolution numérique du problème élastique.

3.2.4 Validation du solveur élastique anisotrope : cas de la poutre tridimensionnelle

L'objectif de cette section est de valider le solveur anisotrope sur des géométries simples. Le principe est de comparer la solution obtenue numériquement à une solution analytique. Il est difficile de trouver une solution analytique pour un comportement anisotrope quelconque. Pour cela, et afin de valider ce module pour le code de calcul Rem3D, nous avons choisi des lois de comportement simples, avec des tenseurs de raideurs qui nous permettent de remonter facilement à la solution analytique.

Nous considérons le cas d'une poutre tridimensionnelle de section carrée (figure (3.7)). La poutre est encastree au plan $x_1 = 0$ (déplacement nul), et soumise à une traction simple uniforme d'amplitude $\sigma_{imp} = 10GPa$.

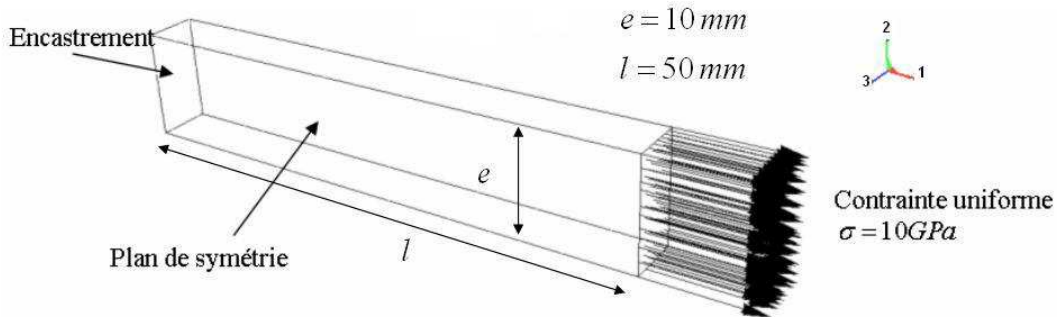


FIGURE 3.7 – Géométrie utilisée pour la validation du solveur anisotrope

Cette poutre est supposée avoir un comportement élastique isotrope transverse (toutes les fibres sont alignées selon une direction unique) avec deux modules de Young élastiques E_1 (dans la direction , parallèle aux fibres) et E_2 (dans la direction transverse), deux coefficients de Poisson ν_{12} et ν_{23} dans les plans (1,2) et (2,3)($\nu_{13}=\nu_{12}$), et un module de cisaillement G_{12} dans le plan (1,2). La matrice de raideur d'un tel comportement élastique s'écrit :

$$\underline{\underline{C}} = \begin{pmatrix} \frac{1}{E_1} & 0 & 0 & 0 & \frac{-\nu_{12}}{E_1} & 0 & 0 & 0 & \frac{-\nu_{12}}{E_1} \\ 0 & \frac{1}{2G_{12}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2G_{12}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2G_{12}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{-\nu_{12}}{E_1} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{E_2} & 0 & 0 & 0 & \frac{-\nu_{12}}{E_1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1+\nu_{23}}{E_2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2G_{12}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1+\nu_{23}}{E_2} & 0 \\ \frac{-\nu_{12}}{E_1} & 0 & 0 & 0 & \frac{-\nu_{12}}{E_1} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{E_2} \end{pmatrix}^{-1}$$

Nous fixons les paramètres élastiques suivants :

$$\begin{aligned} E_1 &= 20GPa \\ E_2 &= 5GPa \\ \nu_{12} &= 0.4 \\ \nu_{23} &= 0.5 \\ G_{12} &= 0.5GPa \end{aligned}$$

La solution analytique pour les deux premières composantes du vecteur déplacement est donnée par :

$$\begin{cases} u_1 = \frac{\sigma_{imp}}{E_1} x_1 \\ u_2 = \frac{-\nu_{12}\sigma_{imp}}{E_1} \left(x_2 - \frac{e}{2}\right) \end{cases}$$

La donnée du tenseur de raideur ainsi que les conditions aux limites permet d'avoir une solution numérique à l'aide du solveur élastique anisotrope. Le maillage considéré est de 6600 noeuds et 37000 éléments.

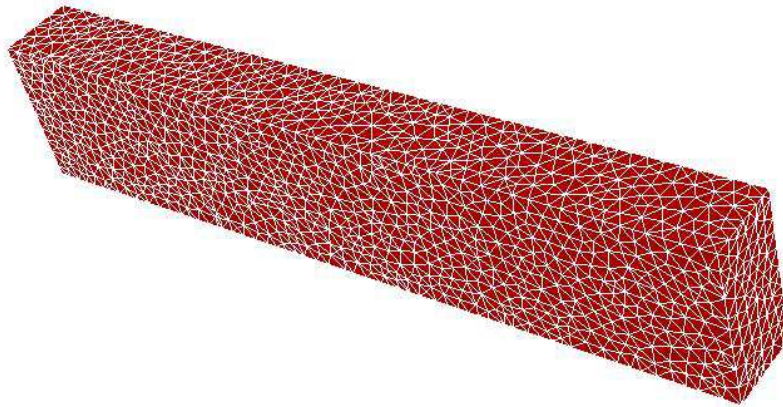


FIGURE 3.8 – poutre de section carrée sollicitée en traction simple

Les figures 3.9 et 3.10 montrent les profils de la solution analytique et la solution numérique calculée avec l'élément fini P_1/P_1 (les solutions numériques P_1/P_1 et $P_1 + /P_1$) sont très similaires.

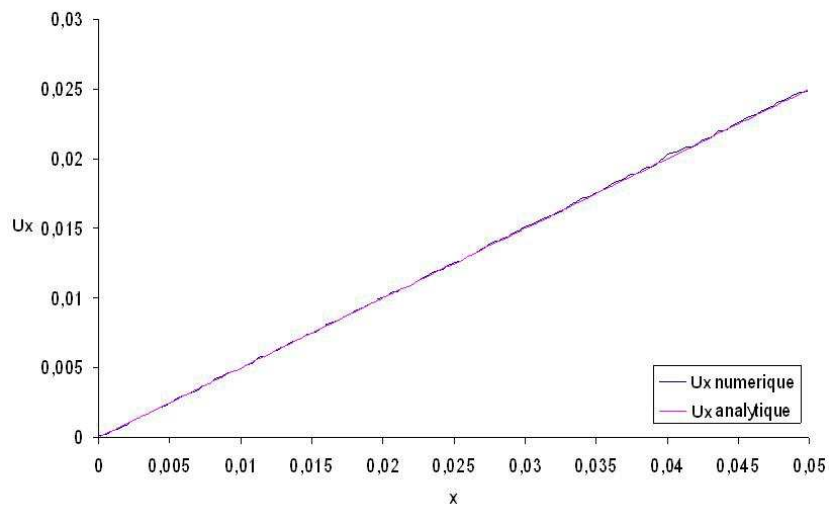


FIGURE 3.9 – Variation de la première composante du déplacement

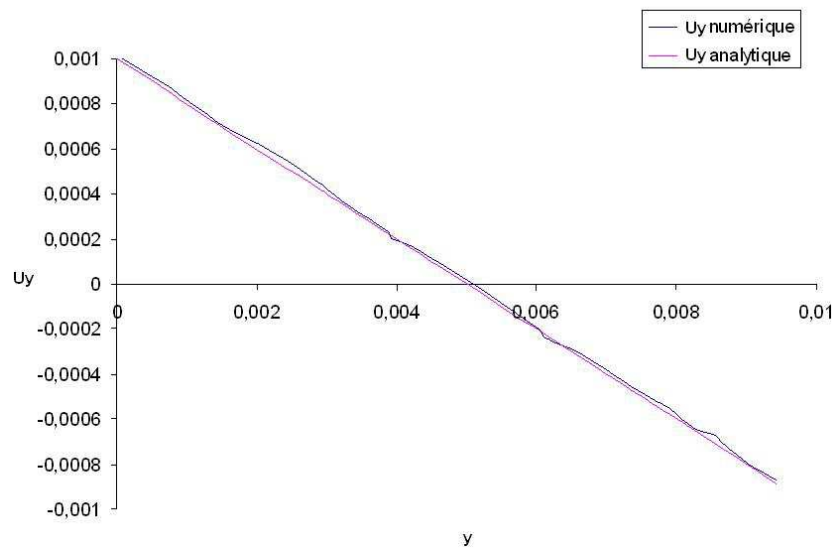


FIGURE 3.10 – Variation de la deuxième composante du déplacement

Les deux figures ci-dessus montrent que la solution numérique concorde, d'un

point de vue quantitatif, à la solution analytique.

3.3 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons traité deux types de solveurs élastiques linéaires :

- ✓ Le solveur isotrope : qui nécessite la donnée de deux coefficients de Lamé (ou un module de Young et un coefficient de poisson)
- ✓ Le solveur anisotrope : qui nécessite la donnée d'un tenseur de raideur (de taille 9×9 en dimension trois).

Ces solveurs ont été validés sur des géométries simples et ont été intégrés par la suite dans le code de calcul Rem3D.

L'implémentation du solveur élastique isotrope est très utile vu que c'est le comportement qui régit, en petites perturbations, la plupart des matériaux plastiques non renforcés (exemple la résine), tout comme certains types de renforts (comme les fibres de verre). Les matériaux isotropes peuvent aussi être simulés avec le solveur élastique anisotrope, mais l'inconvénient de l'utilisation de ce solveur, dans ce cas, sera l'augmentation de l'espace mémoire puisqu'on va stocker un tenseur à 9×9 composantes, à la place de deux paramètres seulement (module de Young et coefficient de poisson), et aussi le temps de calcul qui devient plus important à cause de la multiplication d'un tenseur d'ordre quatre par un tenseur d'ordre deux).

L'avantage de l'utilisation du solveur élastique anisotrope se manifeste surtout pour la simulation du comportement élastiques de matériaux renforcés de fibres. En effet, même si le comportement de la matrice thermoplastique est purement élastique linéaire isotrope, et que le comportement des fibres, distribuées d'une façon anisotrope, est aussi élastique linéaire isotrope, le matériau composite global aura des propriétés mécaniques différentes dans toutes les directions, donc un comportement élastique linéaire anisotrope.

Les deux chapitres qui suivent montreront qu'il est possible de décomposer un thermoplastique renforcé en deux phases, les fibres et la matrice. La connaissance du comportement élastique de chaque phase, ainsi que de l'orientation des fibres dans le matériau, permettra la détermination du comportement thermo-élastique anisotrope et de le simuler via le solveur anisotrope.

Chapitre 4

Modèles analytiques pour l'homogénéisation des propriétés thermo-élastiques des thermoplastiques chargés de fibres

Dans ce chapitre, nous aborderons la prédiction des propriétés thermo-élastiques des thermoplastiques renforcés. La littérature nous fournit plusieurs modèles d'homogénéisation qui, partant des propriétés des fibres et de la matrice, sont capables de déterminer le comportement thermo-élastique global du matériau. Les propriétés anisotropes résultantes de la mise en forme par injection, seront déterminées par le biais d'une procédure en deux étapes : tout d'abord nous considérons un cas où toutes les fibres sont orientées selon une direction unique, par la suite ces propriétés, dites unidirectionnelles, seront introduits dans les modèles thermo-élastiques anisotropes où la loi de comportement dépend, outre de ces propriétés, de l'orientation des fibres dans le matériau.

La première partie de ce chapitre est une étude des différents modèles d'homogénéisation des propriétés unidirectionnelles des thermoplastiques chargés. Le domaine de validité de ces modèles dépend principalement de la concentration volumique des fibres dans le matériau. Nous comparerons ces modèles par rapport à des résultats expérimentaux et pour différentes plages de concentration volumique des fibres.

La deuxième partie de ce chapitre traitera de la détermination des propriétés anisotropes des thermoplastiques chargés. A ce niveau, il est nécessaire connaître la valeur du tenseur d'orientation en chaque point du matériau, ainsi que les proprié-

tés unidirectionnelles. La connaissance de ces deux données, permet de déterminer complètement le comportement thermo-élastique anisotrope.

Sommaire

4.1	Intruduction	81
4.2	Identification analytique des propriétés thermo-élastiques unidirectionnelles	82
4.2.1	Matériau élastique isotrope transverse	82
4.2.2	Régimes de concentration des fibres	84
4.2.2.1	Régime dilué	85
4.2.2.2	Régime semi-dilué	85
4.2.2.3	Régime concentré	86
4.2.3	Homogénéisation en élasticité unidirectionnelle	86
4.2.3.1	Les bornes de Voigt et Reuss	87
4.2.3.2	Equations de Halpin-Tsai	87
4.2.3.3	Modèle d'Eshelby	89
4.2.3.3.1	Problème de l'inclusion équivalente	89
4.2.3.3.2	Modèle d'Eshelby en solution diluée	91
4.2.3.4	Modèle de Mori-Tanaka	92
4.2.3.5	Modèle de Tandon et Weng	94
4.2.3.6	Modèle auto-cohérent	95
4.2.3.7	Comparaison entre les différents modèles	96
4.2.4	Homogénéisation en thermo-élasticité unidirectionnelle	98
4.2.4.1	Modèle de Levin	99
4.2.4.2	Modèle de Sharperry	99
4.2.4.3	Modèle de Kakavas et al.	99
4.3	Thermo-élasticité linéaire anisotrope	101
4.3.1	Modèles prenant en compte l'orientation des fibres dans le composite	101
4.3.2	La procédure en deux étapes pour le calcul des propriétés thermo-élastiques anisotropes	102
4.3.2.1	Étape 1 : calcul des paramètres thermo-élastiques pour un état d'orientation unidirectionnel	102
4.3.2.2	Étape 2 : calcul des paramètres thermo-élastiques anisotropes	103
4.4	Conclusion	104

4.1 Intruduction

La détermination des propriétés thermo-élastiques d'un matériau fait appel, jusqu'à présent, essentiellement à des techniques expérimentales. Par ailleurs, ces propriétés peuvent être prédites par des modèles analytiques dits modèles d'homogénéisation. La plupart de ces modèles se basent sur l'hypothèse que le composite est un matériau biphasique (phase matrice et phase fibres), chaque phase ayant un comportement linéaire élastique [36, 37]. Plusieurs études ont été menées dans le but de pouvoir déterminer théoriquement ces propriétés [37, 47, 76, 91]. Partant des propriétés intrinsèques des constituants du composite, vont homogénéiser ces propriétés pour prédire le comportement global du matériau.

Les composites que nous traitons ici sont des thermoplastiques renforcés de fibres et moulés par injection. L'orientation des fibres influence les propriétés du matériau. La plupart des travaux se sont intéressés au comportement isotrope transverse (propriétés unidirectionnelles).

La détermination du comportement élastique isotrope transverse d'un matériau composite revient à déterminer cinq constantes mécaniques (2 modules de Young, deux coefficients de Poisson et un module de cisaillement) et deux constantes thermiques. Voigt [101, 100] et Reuss [86] ont donné respectivement une borne inférieure et une borne supérieure des propriétés isotropes transverses du composite. Ces propriétés ont été directement évaluées par le modèle de Halpin-Tsai [47, 48], qui suppose que le comportement de la matrice et des fibres est élastique linéaire isotrope et exprime directement les cinq constantes élastiques en fonction des propriétés mécaniques de la matrice ainsi que de la concentration volumique et les propriétés mécaniques des fibres. Cependant, pour la détermination de certaines constantes, le rapport de forme des fibres n'est pas pris en compte. Eshelby [36, 37] a développé un modèle pour des milieux dilués renforcés d'inclusions qui ont des propriétés (mécaniques, thermiques, ...) différentes de celles du milieu dans lequel elles sont immergées. Mori et Tanaka [76] ont amélioré le modèle d'Eshelby pour tenir compte des fortes concentrations volumiques de fibres ; les expériences ont montré en général que ce modèle donne de bonnes prédictions pour des concentrations volumiques allant jusqu'à 30%. Le modèle de Tandon et Weng [91] explicite les cinq paramètres élastiques du composite isotrope transverse à partir du modèle de Mori-Tanaka.

En réalité, la répartition des fibres dans le composite est anisotrope, ce qui signifie le besoin d'avoir des modèles prenant en compte cette répartition. Plusieurs auteurs [1, 46, 51] proposent la détermination de ces propriétés avec une procédure en deux étapes, qui passe tout d'abord par l'évaluation des propriétés unidirectionnelles des fibres puis l'intégration de ces propriétés sur toutes les orientations possibles dans le matériau. Afin de minimiser l'écart entre les valeurs théoriques et réelles des proprié-

tés thermo-élastiques, il est nécessaire de faire un choix de modèle d'homogénéisation unidirectionnelle convenable.

4.2 Identification analytique des propriétés thermo-élastiques unidirectionnelles

4.2.1 Matériau élastique isotrope transverse

Un matériau élastique possède comme loi de comportement :

$$\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{\varepsilon}} \quad (4.1)$$

Cette loi est équivalente à :

$$\underline{\underline{\varepsilon}} = \underline{\underline{S}} : \underline{\underline{\sigma}} \quad (4.2)$$

où $\underline{\underline{C}}$ est le tenseur de raideur et $\underline{\underline{S}}$ est le tenseur de souplesse.

On se place dans le cadre de petites déformations. Les tenseurs de contraintes et de déformations étant symétriques, nous pouvons utiliser la notation contractée de Voigt et qui est donnée par :

$$\sigma = \begin{bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{31} \\ \sigma_{12} \end{bmatrix}; \varepsilon = \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ 2\varepsilon_{23} \\ 2\varepsilon_{31} \\ 2\varepsilon_{12} \end{bmatrix}$$

Considérons le cas d'un matériau où toutes les fibres sont alignées dans une seule direction, soit l'axe 1. Cet axe est donc privilégié et tout plan passant par cet axe est un plan de symétrie. Le matériau est dit isotrope transverse et son tenseur de raideur s'écrit :

$$\underline{\underline{C}}^{IT} = \begin{bmatrix} C_{1111}^{IT} & C_{1122}^{IT} & C_{1122}^{IT} & 0 & 0 & 0 \\ C_{1122}^{IT} & C_{2222}^{IT} & C_{2233}^{IT} & 0 & 0 & 0 \\ C_{1122}^{IT} & C_{2233}^{IT} & C_{2222}^{IT} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & (C_{2222}^{IT} - C_{2233}^{IT})/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{1212}^{IT} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{1212}^{IT} \end{bmatrix} \quad (4.3)$$

$\underline{\underline{C}}^{IT}$ étant la forme contractée du tenseur de raideur $\underline{\underline{C}}$.

Les coefficients C_{ijkl} et S_{ijkl} peuvent être déterminés en fonction des paramètres matériau.

Pour construire le tenseur de souplesse, pour un matériau élastique isotrope transverse, nous soumettons successivement le matériau à des tractions simples dans les directions i ($i=1,2,3$). Les modules de Young dans les différents directions sont définis par :

$$E_i = \frac{\sigma_{ii}}{\varepsilon_{ii}} = \frac{1}{S_{iiii}} \quad (4.4)$$

Cependant, il faut mentionner que dans les directions 2 et 3 nous avons la même valeur du module de Young appelée module de Young transversal.

Les coefficients de Poisson sont donnés par :

$$\begin{aligned} \nu_{12} = -\frac{\varepsilon_{22}}{\varepsilon_{11}} = -\frac{\varepsilon_{33}}{\varepsilon_{11}} = \nu_{13} = \frac{S_{1122}}{S_{1111}} = \frac{S_{1133}}{S_{1111}} \\ \nu_{31}E_1 = \nu_{13}E_2; \quad \nu_{21}E_1 = \nu_{12}E_2; \quad \nu_{32} = \nu_{23} \end{aligned} \quad (4.5)$$

Les modules de cisaillement sont obtenus en imposant successivement des essais de cisaillement simple σ_{12} , σ_{13} , σ_{23} , ce qui donne :

$$G_{12} = G_{13} = \frac{\sigma_{12}}{2\varepsilon_{12}} = \frac{1}{S_{1212}}; \quad G_{23} = \frac{\sigma_{23}}{2\varepsilon_{23}} = \frac{1}{S_{2323}} \quad (4.6)$$

Le module de cisaillement G_{23} vérifie aussi :

$$G_{23} = \frac{E_2}{2(1 + \nu_{23})} \quad (4.7)$$

Si nous adoptons la notation de Voigt pour les tenseurs de déformation et de contraintes, la forme contractée du tenseur de souplesse peut être donné par :

$$\underline{\underline{S}}^{IT} = \begin{bmatrix} \frac{1}{E_1} & -\frac{\nu_{12}}{E_1} & -\frac{\nu_{12}}{E_1} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\nu_{12}}{E_1} & \frac{1}{E_2} & -\frac{\nu_{23}}{E_2} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\nu_{12}}{E_1} & -\frac{\nu_{12}}{E_1} & \frac{1}{E_2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{23}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{12}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{12}} \end{bmatrix} \quad (4.8)$$

Si nous appliquons au matériau une déformation plane de la forme :

$$\underline{\underline{\varepsilon}} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon \end{bmatrix}$$

Cette déformation produit un tenseur de contraintes diagonal donné par :

$$\underline{\underline{\sigma}} = \begin{bmatrix} 2C_{1122}^{IT}\varepsilon & 0 & 0 \\ 0 & (C_{2222}^{IT} + C_{2233}^{IT})\varepsilon & 0 \\ 0 & 0 & (C_{2222}^{IT} + C_{2233}^{IT})\varepsilon \end{bmatrix}$$

On définit ainsi le module K_{23} par :

$$K_{23} = \frac{\sigma_{22}}{2\varepsilon} = \frac{1}{2}(C_{2222}^{IT} + C_{2233}^{IT}) = \frac{E_2}{2(1 - \nu_{23} - 2\nu_{12}^2)} \quad (4.9)$$

K_{23} est dit module de compressibilité en déformations planes.

Finalement, on obtient les différentes constantes du tenseur de raideur isotrope transverse :

$$\begin{aligned} C_{1111}^{IT} &= E_1 + 4\nu_{12}^2 K_{23} \\ C_{2222}^{IT} &= G_{23} + K_{23} \\ C_{1122}^{IT} &= 2K_{23}\nu_{12} \\ C_{2233}^{IT} &= K_{23} - G_{23} \\ C_{1212} &= G_{12} \end{aligned} \quad (4.10)$$

Généralement, nous ne disposons pas des caractéristiques unidirectionnelles du matériau, et leur détermination expérimentale n'est pas simple en pratique vue la difficulté de concevoir un matériau avec des fibres parfaitement alignées. Nous avons ainsi recours à des modèles d'homogénéisation qui consistent à déterminer les constantes élastiques d'un matériau isotrope en fonction des propriétés des fibres, leur concentration dans le matériau, ainsi que les propriétés de la matrice dans laquelle elles sont immergées. Plusieurs travaux [101, 76, 100, 49, 36, 37] ont été effectués dans l'optique de relier l'échelle microscopique (relative aux hétérogénéités du matériau) et l'échelle macroscopique (échelle de la structure unidirectionnelle étudiée).

4.2.2 Régimes de concentration des fibres

Avant d'aborder les modèles d'homogénéisation, il est important d'étudier le régime de concentration de fibres afin de définir des domaine de validité pour ces modèles.

Selon la concentration volumique en fibres V_f et leur rapport de forme β , une suspension présente différents régimes de concentration. Comme le montre la figure 4.1, on distingue 3 différents régimes :

- ✓ Le régime dilué ;
- ✓ Le régime semi-dilué ;
- ✓ Le régime concentré.

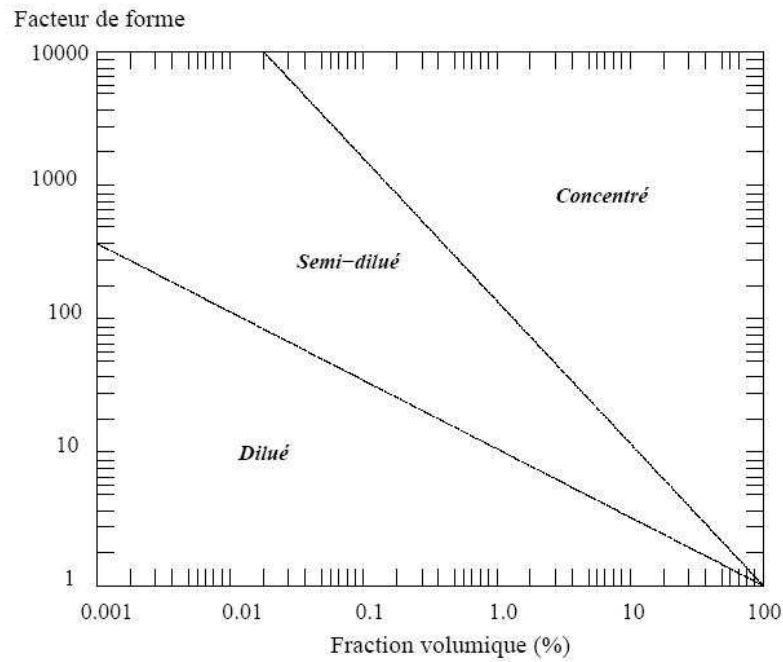


FIGURE 4.1 – Régime de concentration des fibres [32]

4.2.2.1 Régime dilué

Dans une suspension diluée, chaque fibre est libre d'effectuer tout mouvement de rotation sans qu'il y ait d'interaction avec des fibres voisines. Ceci signifie que la distance entre une fibre et sa voisine la plus proche est d'au moins la longueur de la fibre. La fraction volumique des fibres satisfait l'inégalité :

$$V_f \leq \beta^2 \quad (4.11)$$

4.2.2.2 Régime semi-dilué

Pour un régime semi-dilué, la distance entre une fibre et sa voisine la plus proche varie entre la longueur et le diamètre de celle-ci. Concrètement, le mouvement des fibres est permis en translation selon leurs axes de révolution, mais se verront bloquées par les fibres avoisinantes en rotation. On a alors :

$$\beta^2 \leq V_f \leq \beta \quad (4.12)$$

4.2.2.3 Régime concentré

En régime concentré, la concentration des fibres satisfait l'inégalité :

$$V_f > \beta \tag{4.13}$$

Cela veut dire que la distance moyenne entre fibres est plus petite que le diamètre des fibres. Dans cette situation, les fibres tendent à s'organiser parallèlement les unes aux autres, et l'orientation par conséquent devient unidirectionnelle.

4.2.3 Homogénéisation en élasticité unidirectionnelle

La détermination du tenseur de raideur est équivalente à la détermination de cinq constantes élastiques : respectivement le module de Young longitudinal E_1 , le module de Young transversal E_2 , le module de cisaillement G_{12} dans le plan (1,2) et les coefficients de Poisson ν_{12} et ν_{23} .

La prédiction des propriétés unidirectionnelles fait appel à des modèles micro-mécaniques dits d'homogénéisation. On supposera que toutes les fibres sont des inclusions ellipsoïdales (figure 4.2) parfaitement alignées dans la direction 1.

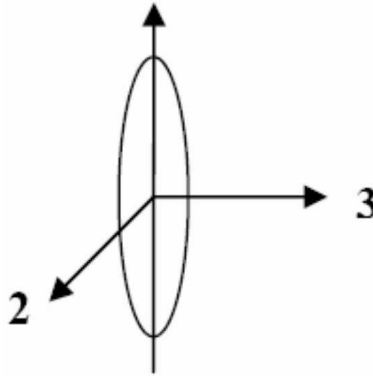


FIGURE 4.2 – Une fibre peut être assimilée à une inclusion ellipsoïdale

Les paramètres des axes de l'ellipsoïde sont respectivement s_1 , s_2 et s_3 tels que $s_3 = s_2 \leq s_1$. Le facteur de forme des fibres est donc $\beta = \frac{s_1}{s_3}$.

Plusieurs modèles, existants dans la littérature, sont basés sur cette représentation de la fibre[23, 36, 37, 51, 76].

Dans ce qui suit, nous décrivons les différents modèles, basés sur cette représentation des fibres, qui calculent les propriétés unidirectionnelles des matériaux chargés

4.2.3.1 Les bornes de Voigt et Reuss

Les bornes de Voigt [101, 100] et Reuss [86] ont pour objectif d'encadrer les propriétés élastiques du matériau. L'approche de Voigt repose sur l'hypothèse que la matrice et les fibres subissent la même déformation globale que le composite, ce qui revient à écrire le tenseur de raideur de Voigt comme suit :

$$\underline{\underline{C}}_{\text{Voigt}} = V_m \underline{\underline{C}}_m + V_f \underline{\underline{C}}_f \quad (4.14)$$

Les indices m et f dénotent la phase matrice et la phase fibres. V et $\underline{\underline{C}}$ sont, respectivement, la fraction volumique et le tenseur de raideur élastique.

Parallèlement à l'approche de Voigt, l'approche de Reuss [86] suppose que la contrainte globale est la même pour la matrice et les fibres, ce qui se traduit par une relation sur les tenseur de souplesse :

$$\underline{\underline{S}}_{\text{Reuss}} = V_m \underline{\underline{S}}_m + V_f \underline{\underline{S}}_f \quad (4.15)$$

$\underline{\underline{S}}_m$ et $\underline{\underline{S}}_f$ sont les tenseurs de souplesse pour la phase matrice et la phase fibres, et $\underline{\underline{S}}_{\text{Reuss}}$ est le tenseur de souplesse de Reuss.

Hill[52] a démontré que les relations (4.14) et (4.15) constituent, respectivement, une borne supérieure et une borne inférieure des propriétés élastiques du composite.

Il faut signaler que, si les propriétés de la matrice et des fibres sont très éloignées l'une de l'autre, les bornes de Voigt et Reuss sont très éloignées et ne permettent pas d'évaluer, avec une précision raisonnable, les propriétés élastiques unidirectionnelles du composite. Afin d'obtenir une meilleure estimation de ces propriétés, nous considérons des modèles semi-empiriques tel que le modèle d'Eshelby [36], le modèle de Halpin-Tsai [47], le modèle auto-corrérent [51, 23] et le modèle de Mori-Tanaka[76].

4.2.3.2 Equations de Halpin-Tsai

La loi de Halpin-Tsai [47, 48] s'énonce pour une propriété M de la manière suivante :

$$\frac{M}{M_m} = \frac{1 + \zeta \cdot \eta \cdot V_f}{1 - \eta \cdot V_f}; \text{ avec } \eta = \frac{M_r - 1}{M_r + \zeta} \quad (4.16)$$

où $M_r = \frac{M_f}{M_m}$ et ζ est un paramètre empirique dont la valeur est donnée par le tableau 4.1.

M	M_f	M_m	ζ
E_1	E_f	E_m	2β
E_2	E_f	E_m	2
G_{12}	G_f	G_m	1
G_{23}	G_f	G_m	$\frac{K_m}{G_m} / (\frac{K_m}{G_m} + 2)$

TABLE 4.1 – Propriété M (équation(4.16)) du matériau et son paramètre empirique correspondant

E_1 et E_2 sont les modules de Young longitudinal et transversal, G_{12} et G_{23} sont les modules de cisaillement dans les plans (1,2) et (1,3).

D'après l'équation 4.16 et le tableau 4.1, on constate que si $\zeta \rightarrow \infty$ les équations de Halpin-Tsai deviennent une loi de mélange correspondant à la borne supérieure de Voigt (expression (4.14)) et ainsi la propriété M s'écrit :

$$M = V_m M_m + V_f M_f \quad (4.17)$$

La loi de mélange s'applique aussi pour calculer le coefficient de Poisson longitudinal :

$$\nu = V_m \nu_m + V_f \nu_f \quad (4.18)$$

Halpin et al. [48] ont comparé le module de Young longitudinal obtenu par leur à la valeur expérimentale pour différents rapports de forme des fibres (Figure 4.3) :

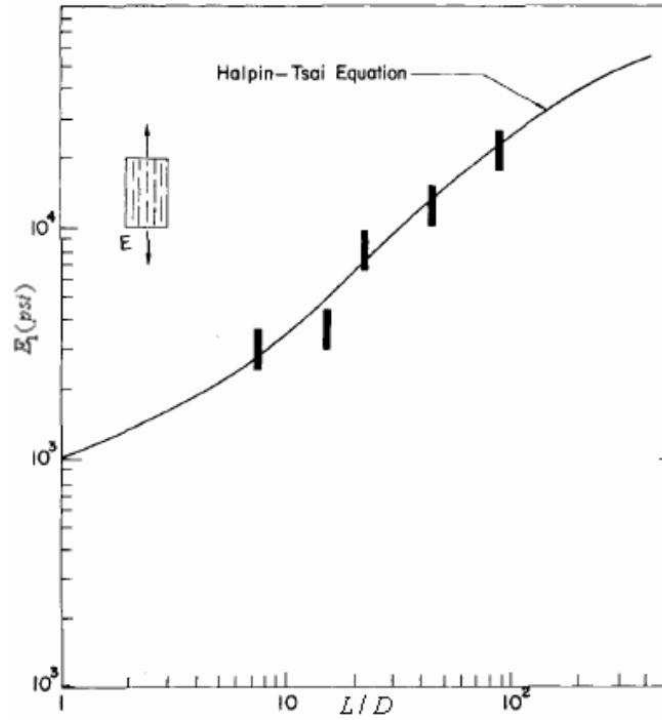


FIGURE 4.3 – Variation du module de Young longitudinal avec le rapport de forme des fibres : comparaison entre le modèle de Halpin-Tsai et l’expérience [48]

La comparaison entre la valeur expérimentale (représentée par les barres) et la valeur théorique du module de Young montre la validité du modèle pour le calcul du module de Young longitudinal. Ceci n’est pas toujours le cas pour les quatre autres constantes puisqu’elles n’ont pas de dépendance avec le rapport de forme de fibres.

4.2.3.3 Modèle d’Eshelby

4.2.3.3.1 Problème de l’inclusion équivalente

Eshelby [36, 37] assimile les hétérogénéités dans un matériau à des inclusions ellipsoïdales immergées dans une matrice.

La matrice est un milieu élastique linéaire infini de tenseur de rigidité $\underline{\underline{C}}_m$ et l’hétérogénéité est un milieu élastique de tenseur de rigidité $\underline{\underline{C}}_f$. L’inclusion a tendance à se déformer mais son mouvement se trouvera gêné par la matrice et ainsi se crée dans le matériau un champ de déformations complexe $\underline{\underline{\varepsilon}}^C$, qui dépend de sa forme avant la transformation. La contrainte dans la matrice s’écrit :

$$\underline{\underline{\sigma}}_m = \underline{\underline{C}}_m : \underline{\underline{\varepsilon}}^C \tag{4.19}$$

Si l'inclusion était isolée, elle subirait une déformation $\underline{\underline{\varepsilon}}^T$ libre de contraintes qui peut être acquise avec un changement de température ou un changement de phase. Eshelby montre que cette déformation est uniforme et ne contribue pas à la contrainte dans l'inclusion. Cette dernière est alors donnée par :

$$\underline{\underline{\sigma}}^i = \underline{\underline{C}}_{\underline{\underline{m}}} : (\underline{\underline{\varepsilon}}^C - \underline{\underline{\varepsilon}}^T) \quad (4.20)$$

$\underline{\underline{\varepsilon}}^C$ est reliée à $\underline{\underline{\varepsilon}}^T$ par la relation suivante [36] :

$$\underline{\underline{\varepsilon}}^C = \underline{\underline{E}} : \underline{\underline{\varepsilon}}^T \quad (4.21)$$

$\underline{\underline{E}}$ est le tenseur d'Eshelby qui dépend du rapport de forme de l'inclusion ainsi que des propriétés élastiques de la matrice [22, 77]. Les expressions du tenseur d'Eshelby pour une matrice isotrope et les différents rapport de forme de l'inclusion sont données dans l'annexe B.1.

Par la suite, Eshelby montre qu'une inclusion hétérogène de raideur $\underline{\underline{C}}_{\underline{\underline{f}}}$ qui ne subit pas la déformation $\underline{\underline{\varepsilon}}^T$ est équivalente à une inclusion homogène de raideur égale à celle de la matrice dans laquelle elle est immergée (figure 4.4).

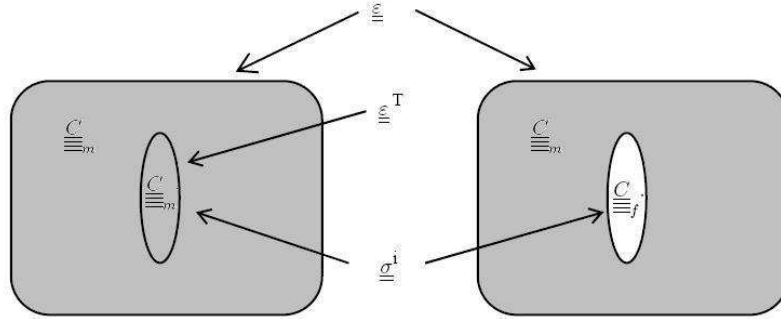


FIGURE 4.4 – Problème d'inclusion équivalente d'Eshelby [34]

Si on désigne par $\underline{\underline{\varepsilon}}$ la déformation globale dans le milieu, le tenseur de contraintes dans l'inclusion est alors donné par :

$$\underline{\underline{\sigma}}^i = \underline{\underline{C}}_{\underline{\underline{m}}} : (\underline{\underline{\varepsilon}} + \underline{\underline{\varepsilon}}^C - \underline{\underline{\varepsilon}}^T) = \underline{\underline{C}}_{\underline{\underline{f}}} : (\underline{\underline{\varepsilon}} + \underline{\underline{\varepsilon}}^C) \quad (4.22)$$

Les équations 4.21 et 4.22 donnent alors :

$$\left(\underline{\underline{C}}_{\underline{\underline{m}}} + \left(\underline{\underline{C}}_{\underline{\underline{f}}} - \underline{\underline{C}}_{\underline{\underline{m}}} \right) \cdot \underline{\underline{E}} \right) : \underline{\underline{\varepsilon}}^T = \left(\underline{\underline{C}}_{\underline{\underline{f}}} - \underline{\underline{C}}_{\underline{\underline{m}}} \right) : \underline{\underline{\varepsilon}} \quad (4.23)$$

4.2.3.3.2 Modèle d'Eshelby en solution diluée

Le tenseur de localisation de déformation est un tenseur $\underline{\underline{A}}$ reliant la déformation moyenne dans le composite $\underline{\underline{\varepsilon}}$ à la déformation moyenne dans les fibres $\underline{\underline{\varepsilon}}_f$. Ce tenseur a été introduit la première fois par Hill [52] et est donné par :

$$\underline{\underline{\varepsilon}}_f = \underline{\underline{A}} : \underline{\underline{\varepsilon}} \quad (4.24)$$

L'inverse du tenseur $\underline{\underline{A}}$ est un tenseur $\underline{\underline{B}}$ appelé tenseur de localisation de contrainte et intervient dans la relation entre les contraintes dans les renforts et les contraintes dans le composite :

$$\underline{\underline{\sigma}}_f = \underline{\underline{B}} : \underline{\underline{\sigma}} \quad (4.25)$$

$\underline{\underline{A}}$ et $\underline{\underline{B}}$ vérifient :

$$\begin{aligned} \langle \underline{\underline{A}} \rangle &= \underline{\underline{1}} \\ \langle \underline{\underline{B}} \rangle &= \underline{\underline{1}} \end{aligned} \quad (4.26)$$

où l'opérateur $\langle \rangle$ désigne l'opérateur moyenne sur l'espace.

La déformation dans le composite en fonction de la déformation dans l'hétérogénéité et la matrice s'écrit :

$$\underline{\underline{\varepsilon}} = V_m \underline{\underline{\varepsilon}}_m + V_f \underline{\underline{\varepsilon}}_f \quad (4.27)$$

D'après l'équation (4.27), la déformation dans la matrice en fonction de la déformation globale et du tenseur de localisation de déformations est :

$$\underline{\underline{\varepsilon}}_m = \left(\frac{\underline{\underline{1}} - V_f \underline{\underline{A}}}{V_m} \right) : \underline{\underline{\varepsilon}} \quad (4.28)$$

De la même manière, le tenseur de contraintes du milieu s'écrit :

$$\underline{\underline{\sigma}} = V_m \underline{\underline{\sigma}}_m + V_f \underline{\underline{\sigma}}_f \quad (4.29)$$

Les comportements de la matrice et des fibres étant élastique linéaire, l'équation (4.29) devient :

$$\underline{\underline{\sigma}} = V_m (\underline{\underline{C}}_m : \underline{\underline{\varepsilon}}_m) + V_f (\underline{\underline{C}}_f : \underline{\underline{\varepsilon}}_f) \quad (4.30)$$

Ainsi, en utilisant les équations(4.24), (4.28), (4.29) et la relation ($\underline{\underline{\bar{\sigma}}} = \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{\bar{\varepsilon}}}$), le tenseur de raideur est :

$$\underline{\underline{C}} = \underline{\underline{C}}_{\underline{\underline{m}}} + V_f(\underline{\underline{C}}_{\underline{\underline{f}}} - \underline{\underline{C}}_{\underline{\underline{m}}})\underline{\underline{A}} \quad (4.31)$$

Le modèle d'Eshelby est basé sur l'hypothèse que les renforts que les renforts sont suffisamment éloignés les uns des autres pour ne pas interagir entre eux. Selon Eshelby, la déformation moyenne dans une fibre est uniforme et vaut :

$$\underline{\underline{\bar{\varepsilon}}}^f = \underline{\underline{\bar{\varepsilon}}} + \underline{\underline{\bar{\varepsilon}}}^C \quad (4.32)$$

Cette dernière équation combinée avec l'équation 4.23 donnent :

$$[1 + \underline{\underline{E}} \cdot \underline{\underline{S}}_{\underline{\underline{m}}} (\underline{\underline{C}}_{\underline{\underline{f}}} - \underline{\underline{C}}_{\underline{\underline{m}}})]\underline{\underline{\bar{\varepsilon}}}^f = \underline{\underline{\bar{\varepsilon}}} \quad (4.33)$$

$\underline{\underline{S}}_{\underline{\underline{m}}}$ est le tenseur de souplesse de la matrice.

Le tenseur de localisation de déformations d'Eshelby est déduit par l'équation(4.33) et vaut :

$$\underline{\underline{A}}^{Eshelby} = [\underline{\underline{1}} + \underline{\underline{E}} \cdot \underline{\underline{S}}_{\underline{\underline{m}}} (\underline{\underline{C}}_{\underline{\underline{f}}} - \underline{\underline{C}}_{\underline{\underline{m}}})]^{-1} \quad (4.34)$$

En se basant sur l'expression (4.31), le tenseur de raideur, selon le modèle d'Eshelby, est :

$$\underline{\underline{C}} = \underline{\underline{C}}_{\underline{\underline{m}}} + V_f(\underline{\underline{C}}_{\underline{\underline{f}}} - \underline{\underline{C}}_{\underline{\underline{m}}})\underline{\underline{A}}^{Eshelby} \quad (4.35)$$

4.2.3.4 Modèle de Mori-Tanaka

Ce modèle a été développé par Mori et Tanaka en 1973 [76]. Tout comme le modèle d'Eshelby, le modèle de Mori-Tanaka exprime le tenseur de localisation de déformations et l'injecte dans l'expression (4.31) pour avoir le tenseur de raideur élastique. Ce tenseur s'exprime en fonction du tenseur de localisations de déformation d'Eshelby, et est donné par :

$$\underline{\underline{A}}^{MT} = \underline{\underline{A}}^{Eshelby} [V_m \underline{\underline{1}} + V_f \underline{\underline{A}}^{Eshelby}]^{-1} \quad (4.36)$$

Rupnowski et al [88] ont prédit les propriétés élastiques unidirectionnelles par le modèle de Mori-Tanaka sur un composite formé d'une matrice de polyimide renforcé à 55% en volume de fibres de graphite et ont montré, dans un intervalle de température entre 25°C et 315°C, que les modules de Young longitudinal et transversal

prédits sont très proches de l'expérience alors que les modules de cisaillement et les coefficients de Poisson prédits par le même modèle le sont moins (Figures 4.5).

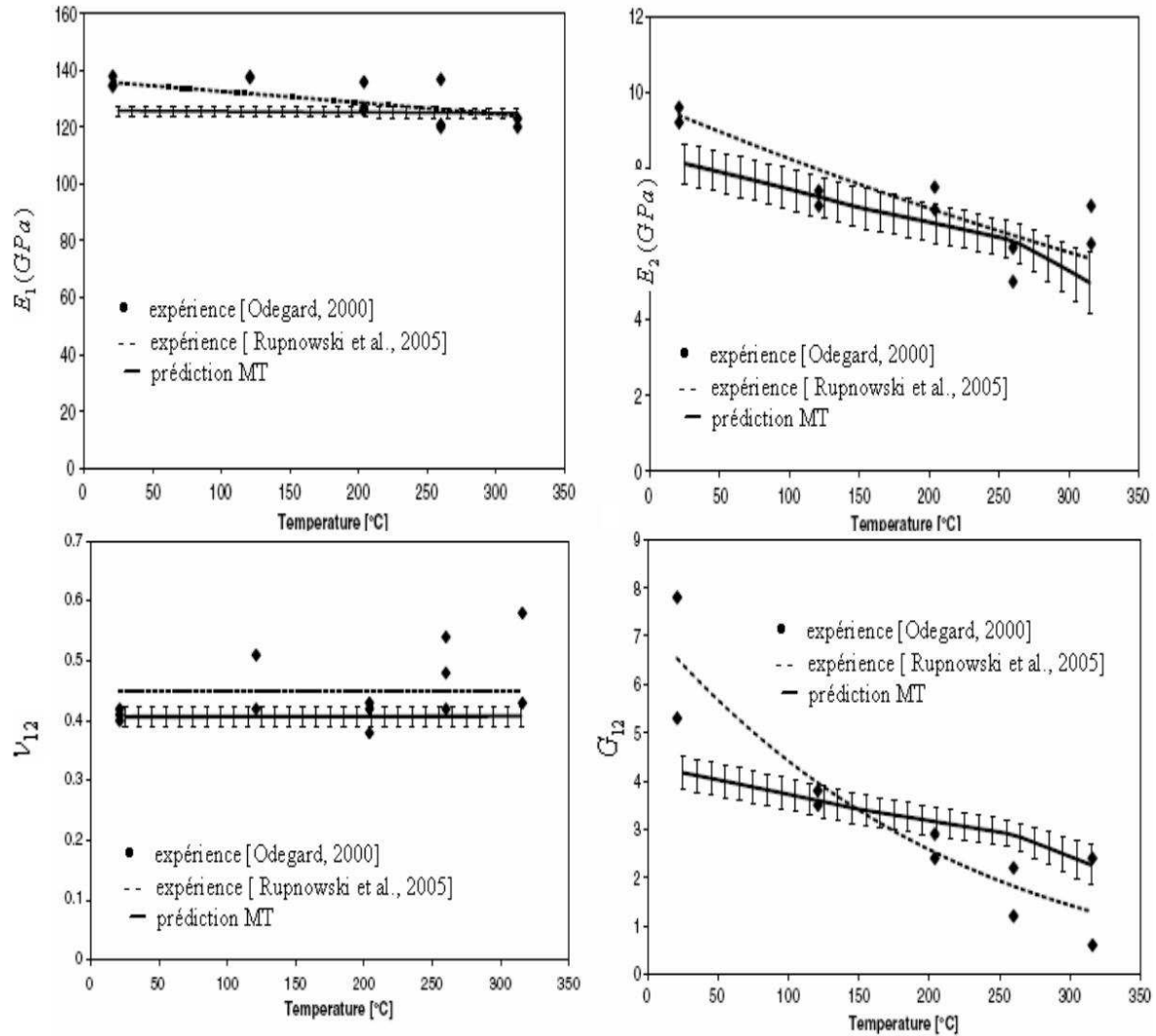


FIGURE 4.5 – Comparaison entre propriétés élastiques prédites par le modèle de Mori-Tanaka et celles mesurées expérimentalement [88]

Sur la figure 4.5, la prédiction analytique est comparée aux résultats expérimentaux de Rupnowski et al. [88] aussi que ceux de Odegard et al [79].

Tucker et Liang [54] et O'Regan et al. [80] ont comparé les modèles micro-mécaniques les plus connus et ont montré que le modèle de Mori-Tanaka est le mieux adapté pour les thermoplastiques chargés de fibres courtes et qu'il donne des résultats très satisfaisants par rapport aux simulations numériques par éléments finis

et pour des concentrations de renforts allant jusqu'à 30%. La différence alors montrée sur la figure 4.5 entre l'expérience et la prédiction analytique peut être expliquée par la concentration volumique élevée des fibres.

4.2.3.5 Modèle de Tandon et Weng

Le modèle de Tandon et Weng [91] est basé sur la solution d'Eshelby pour une inclusion ellipsoïdale dans une matrice infinie. Ce modèle a été conçu initialement pour des inclusions isotropes et a été étendu par la suite [84] pour des inclusions isotropes transverses.

Tout comme les modèles présentés précédemment, le modèle de Tandon et Weng est un modèle d'homogénéisation qui détermine les constantes élastiques d'un matériau isotrope transverse. Ces constantes sont données par :

$$\frac{E_1}{E_m} = \frac{1}{1 + V_f \frac{(A_1 + 2V_m A_2)}{A_6}} \quad (4.37)$$

$$\frac{E_2}{E_m} = \frac{1}{1 + V_f \frac{(-2V_m A_3 + (1 - V_m)A_4 + (1 + V_m)A_5 A_6)}{2A_6}} \quad (4.38)$$

$$\frac{G_{12}}{G_m} = 1 + \frac{V_f}{2V_m E_{1212} + \frac{\mu_m}{\mu_f - \mu_m}} \quad (4.39)$$

$$\frac{G_{23}}{G_m} = 1 + \frac{V_f}{2V_m E_{2323} + \frac{\mu_m}{\mu_f - \mu_m}} \quad (4.40)$$

$$\nu_{12} = \frac{V_m A_6 - V_f (A_3 - V_m A_4)}{A_6 + V_f (A_1 + 2V_m A_2)} \quad (4.41)$$

$$\frac{K_{23}}{K_m} = \frac{(1 + V_m)(1 - 2V_m)}{1 - V_m(1 + 2\nu_{12}) + V_f \frac{2(\nu_{12} - \nu_m)A_3[1 - \nu_m(1 + 2\nu_{12})]A_4}{A_6}} \quad (4.42)$$

Seule l'équation (4.41) a été établie par Tucker et al. [54]. L'expression de ν_{12} , selon Tandon et Weng, peut être déduite à partir de l'équation (4.39). De la même manière le coefficient de poisson ν_{23} pourra être déduit à partir des équations (4.9) et (4.42).

Les paramètres $A_1, \dots, A_6, B_1, \dots, B_5, D_1, \dots, D_3$ sont définis comme suit :

$$\begin{aligned} A_1 &= D_1(B_4 + B_5) - 2(B_2) \\ A_2 &= (1 + D_1)B_2 - (B_4 + B_5) \\ A_3 &= B_1 - D_1 B_3 A_4 = (1 + D_1)B_1 - 2B_3 \\ A_5 &= \frac{1 - D_1}{B_4 - B_5} \\ A_6 &= 2B_2 B_3 - B_1(B_4 + B_5) \end{aligned} \quad (4.43)$$

$$\begin{aligned}
 B_1 &= V_f D_1 + D_2 + V_m (D_1 E_{1111} + 2E_{2211}) \\
 B_2 &= V_f + D_3 + V_m (D_1 E_{1122} + E_{2222} + E_{2233}) \\
 B_3 &= V_f + D_3 + V_m (D_1 E_{1111} + (1 + D_1) E_{2211}) \\
 B_4 &= V_f D_1 + D_2 + V_m (E_{1122} + D_1 E_{2222} + E_{2233}) \\
 B_5 &= V_f + D_3 + V_m (E_{1122} + E_{2222} + D_1 E_{2233})
 \end{aligned} \tag{4.44}$$

$$\begin{aligned}
 D_1 &= 1 + 2 \frac{\mu_f - \mu_m}{\lambda_f - \lambda_m} \\
 D_2 &= \frac{\lambda_m + 2\mu_m}{\lambda_f - \lambda_m} \\
 D_3 &= \frac{\lambda_f}{\lambda_f - \lambda_m}
 \end{aligned} \tag{4.45}$$

λ_m , μ_m et λ_f , μ_f sont les coefficients de Lamé de la phase matrice et de la phase fibres. (E_{ijkl}) étant le tenseur d'Eshelby, dépendant des propriétés élastiques de la matrice et du rapport de forme des fibres.

Tandon et Weng montrent que leur solution est confondue avec celle de Mori Tanaka, pour des renforts et une matrice isotropes [91].

4.2.3.6 Modèle auto-cohérent

Ce modèle est adapté à des composites où la fraction volumique des renforts est importante. Tout comme le modèle de Mori-Tanaka, le modèle auto-cohérent [51, 23] est basé sur la solution d'Eshelby pour les milieux dilués, et se résume à la détermination du tenseur de localisation des déformations.

Le tenseur de localisation des déformations $\underline{\underline{A}}^{SC}$ est le résultat de convergence d'un algorithme itératif énoncé comme suit :

$$\begin{aligned}
 \underline{\underline{A}}^{(1)} &= [\underline{\underline{1}} + \underline{\underline{E}} \cdot \underline{\underline{S}} \cdot (\underline{\underline{C}}_f - \underline{\underline{C}}_m)]^{-1} \\
 &\text{tantque } (\|\underline{\underline{A}}^{(n)} - \underline{\underline{A}}^{(n-1)}\| > e); e \ll 1 \\
 &\text{faire} \\
 \underline{\underline{C}}^{(n)} &= \underline{\underline{C}}_m + V_f (\underline{\underline{C}}_f - \underline{\underline{C}}_m) \underline{\underline{A}}^{(n-1)} \\
 &\text{calcul de } \underline{\underline{E}}^{(n)}
 \end{aligned} \tag{4.46}$$

$$\underline{\underline{A}}^{(n)} = [\underline{\underline{1}} + \underline{\underline{E}}^{(n)} \cdot \underline{\underline{S}}^{(n)} \cdot (\underline{\underline{C}}_f - \underline{\underline{C}}^{(n)})]^{-1}$$

$$n = n + 1$$

fin

Pour le calcul du tenseur d'Eshelby à l'itération n , le modèle auto-cohérent suppose que le tenseur de raideur du composite calculé à l'itération n devient le tenseur de raideur de la matrice, $\underline{\underline{E}}^{(n)}$ en fonction de ce tenseur. Cependant il faut noter que le milieu est supposé isotrope transverse et non isotrope comme le cas des modèles précédents. En effet, dans un tel milieu élastique (anisotrope dans le cas le plus général), chaque composante du tenseur d'Eshelby s'écrit :

$$E_{ijkl} = \frac{1}{8\pi} C_{pqmn} (\overline{G}_{ipjq} + \overline{G}_{jpiq}) \quad (4.47)$$

où $\underline{\underline{C}}$ est la matrice de raideur du milieu et le tenseur $\overline{\underline{\underline{G}}}$ est calculé à partir des intégrales de Green. L'expression du tenseur $\overline{\underline{\underline{G}}}$ est donnée dans l'annexe B.2.

La procédure de calcul du tenseur de localisation de déformations (donnée par l'expression (4.46)) s'avère coûteuse vu le temps que prend le processus en général pour converger et l'espace mémoire consommé pour le calcul des différents tenseurs d'ordre quatre à chaque itération.

4.2.3.7 Comparaison entre les différents modèles

La comparaison entre les différents modèles d'homogénéisation se fait en considérant des cas réels sur lesquels une détermination des valeurs expérimentales des constantes élastiques a été établie. Pour cela on considère un composite renforcé par des particules sphériques ($\beta = 1$). Le module de Young longitudinal a été déterminé par Smith [90] pour ce composite dont les modules de Young et les coefficients de Poisson de la matrice et des inclusions sont :

$$\begin{aligned} E_m &= 3GPa \\ E_f &= 76GPa \\ \nu_m &= 0.4 \\ \nu_f &= 0.23 \end{aligned}$$

La figure 4.6 montre l'évolution du module de Young en fonction de la concentration volumique des inclusions :

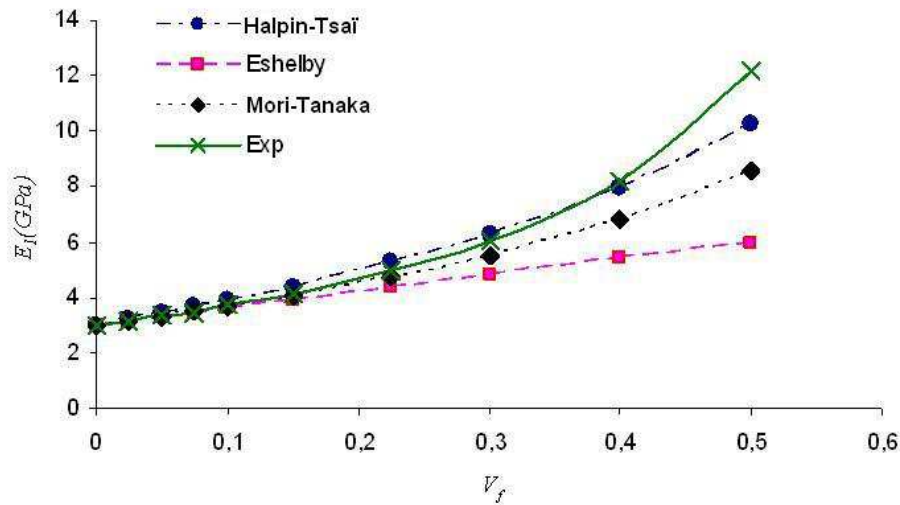


FIGURE 4.6 – Module de Young déterminé expérimentalement et par les modèles d'homogénéisation pour des inclusions sphériques

La figure ci-dessus montre que pour une gamme de concentration entre 20% et 30%, les modèles de Mori-Tanaka et de Halpin-Tsai donnent les meilleures prédictions. Cependant, le modèle de Mori-Tanaka représente l'avantage d'estimer toutes les propriétés mécaniques en fonction du rapport de forme des fibres, contrairement au modèle de Halpin-Tsai.

Une autre comparaison a été faite sur le polyethylene (HDPE) réenforcé par des des fibres de verre dont le rapport de forme est égale à 16 (particules ellipsoïdales). Les modules de Young et coefficients de Poisson des différentes phases du composites sont :

$$\begin{aligned}
 E_m &= 1.04 \text{ GPa} \\
 E_f &= 72.5 \text{ GPa} \\
 \nu_m &= 0.34 \\
 \nu_f &= 0.2
 \end{aligned}$$

La figure 4.7 compare le module de Young longitudinal analytique (obtenu par les modèles d'homogénéisation) au module de Young longitudinal déterminé expérimentalement par Facca et al. [38]

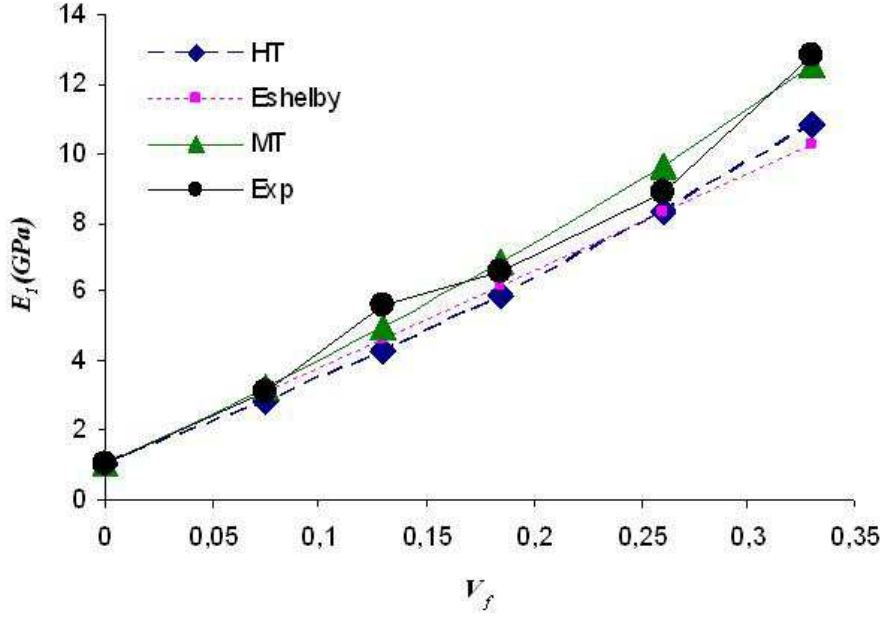


FIGURE 4.7 – Module de Young longitudinal déterminé expérimentalement et par les modèles d'homogénéisation pour des inclusions ellipsoïdales

On constate que la meilleure prédiction est donnée par le modèle de Mori-Tanaka. Par conséquent, pour la suite de ce travail, ce modèle sera considéré comme référence pour la détermination des propriétés mécaniques unidirectionnelles des thermoplastiques renforcés.

4.2.4 Homogénéisation en thermo-élasticité unidirectionnelle

Dans un matériau thermo-élastique, la loi de comportement est donnée par :

$$\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{\varepsilon}} - \underline{\underline{\kappa}} \Delta T \quad (4.48)$$

$\underline{\underline{\kappa}}$ étant le tenseur de contraintes thermiques et ΔT est la différence entre une distribution de température initiale et une distribution finale.

L'équation(4.48) s'écrit sous une seconde forme :

$$\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{C}} : (\underline{\underline{\varepsilon}} - \underline{\underline{\alpha}} \Delta T) \quad (4.49)$$

où $\underline{\underline{\alpha}}$ est le tenseur des dilatations thermiques, lié à $\underline{\underline{\kappa}}$ par la relation :

$$\underline{\underline{\kappa}} = \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{\alpha}}$$

Tout comme les tenseurs des déformations et des contraintes, les tenseurs des dilatations et des contraintes thermiques sont symétriques. L'objectif de ce paragraphe consiste à prédire $\underline{\underline{\kappa}}$ (ou $\underline{\underline{\alpha}}$).

La détermination d'un tenseur de dilatations thermiques unidirectionnel est équivalente au calcul d'un coefficient de dilation thermique longitudinal α_1 et un coefficient de dilatation thermique transversal α_2 .

4.2.4.1 Modèle de Levin

Levin [64] a montré que, pour un matériau biphasé, chargé par des renforts isotropes, le tenseur de contraintes thermique s'écrit :

$$\underline{\underline{\kappa}} = \left(\begin{smallmatrix} \underline{\underline{C}} & - & \underline{\underline{C}} \\ \underline{\underline{\equiv}}_f & & \underline{\underline{\equiv}}_m \end{smallmatrix} \right) \left(\begin{smallmatrix} \underline{\underline{C}} & - & \underline{\underline{C}} \\ \underline{\underline{\equiv}}_f & & \underline{\underline{\equiv}}_m \end{smallmatrix} \right)^{-1} : \underline{\underline{\kappa}}_m + \left(\begin{smallmatrix} \underline{\underline{C}} & - & \underline{\underline{C}} \\ \underline{\underline{\equiv}}_m & & \underline{\underline{\equiv}}_f \end{smallmatrix} \right) \left(\begin{smallmatrix} \underline{\underline{C}} & - & \underline{\underline{C}} \\ \underline{\underline{\equiv}}_m & & \underline{\underline{\equiv}}_f \end{smallmatrix} \right)^{-1} : \underline{\underline{\kappa}}_f \quad (4.50)$$

$\underline{\underline{\kappa}}_m$ et $\underline{\underline{\kappa}}_f$ sont respectivement les tenseurs de contraintes thermiques de la matrice et des fibres.

De même le tenseur de dilatations thermiques s'écrit :

$$\underline{\underline{\alpha}} = \left(\begin{smallmatrix} \underline{\underline{S}} & - & \underline{\underline{S}} \\ \underline{\underline{\equiv}}_f & & \underline{\underline{\equiv}}_m \end{smallmatrix} \right) \left(\begin{smallmatrix} \underline{\underline{S}} & - & \underline{\underline{S}} \\ \underline{\underline{\equiv}}_f & & \underline{\underline{\equiv}}_m \end{smallmatrix} \right)^{-1} : \underline{\underline{\alpha}}_m + \left(\begin{smallmatrix} \underline{\underline{S}} & - & \underline{\underline{S}} \\ \underline{\underline{\equiv}}_m & & \underline{\underline{\equiv}}_f \end{smallmatrix} \right) \left(\begin{smallmatrix} \underline{\underline{S}} & - & \underline{\underline{S}} \\ \underline{\underline{\equiv}}_m & & \underline{\underline{\equiv}}_f \end{smallmatrix} \right)^{-1} : \underline{\underline{\alpha}}_f \quad (4.51)$$

$\underline{\underline{\alpha}}_m$ et $\underline{\underline{\alpha}}_f$ sont respectivement les tenseurs de dilatations thermiques de la matrice et des fibres.

Les expressions (4.50) et (4.51) sont valables pour tout comportement élastique linéaire tant que le tenseur de raideur du composite est connu.

4.2.4.2 Modèle de Sharperry

Sharperry [89] propose des expressions pour les coefficients de dilatations thermiques longitudinal et transversal, notés α_1 et α_2 . Il se base sur les hypothèses de matrice et fibres ayant des comportements élastiques linéaires isotropes.

$$\begin{cases} \alpha_1 = \frac{E_f \alpha_f V_f + E_m \alpha_m (1 - V_f)}{E_f V_f + E_m (1 - V_f)} \\ \alpha_2 = (1 + \nu_m) \alpha_m (1 - V_f) + (1 + \nu_f) \alpha_f V_f + \alpha_1 \nu_{12} \end{cases} \quad (4.52)$$

4.2.4.3 Modèle de Kakavas et al.

Kakavas et al. [58] ont développé un modèle qui prend en compte l'interphase entre la matrice et les fibres. La figure 4.8 montre le volume élémentaire représentatif sur lequel les coefficients thermo-élastiques sont calculés.

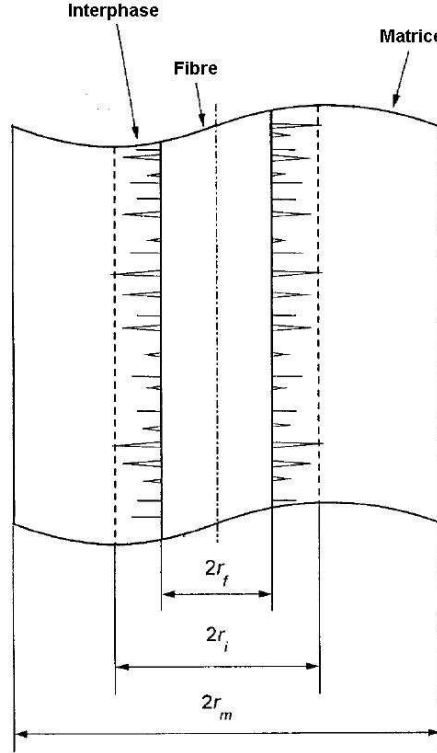


FIGURE 4.8 – interphase matrice-fibre [58]

La matrice est supposée avoir un comportement élastique linéaire isotrope alors que les fibres ont un comportement linéaire isotrope transverse. Si l'interphase a un comportement élastique isotrope transverse, les coefficients thermo-élastiques pour une orientation unidirectionnelle sont donnés par :

$$\begin{aligned}
 \alpha_1 &= \frac{\alpha_f E_{f1} V_f + \alpha_m E_m (1 - V_f) + \frac{2}{r_m^2} \int_{r_f}^{r_i} \alpha_{i1}(r) E_{i1}(r) r dr}{E_f V_f + E_m (1 - V_f) + \int_{r_f}^{r_i} E_{i1}(r) r dr} \\
 \alpha_2 &= (1 + \nu_m) \alpha_m (1 - V_f) + (1 + \nu_{f2}) \alpha_f V_f + \\
 &\quad \frac{2}{r_m^2} \int_{r_f}^{r_i} [1 + \nu_{i2}(r)] \alpha_{i2}(r) r dr - \\
 &\quad \alpha_1 [\nu_{f1} V_f + \nu_m (1 - V_f) + \frac{2}{r_m^2} \int_{r_f}^{r_i} \nu_{i1}(r) r dr]
 \end{aligned} \tag{4.53}$$

E_{i1} et E_{i2} désignent les modules de Young longitudinal et transversal de l'interphase, α_{i1} et α_{i2} sont respectivement les coefficients thermo-élastiques longitudinal

et transversal, et ν_{i1} et ν_{i2} sont les coefficients de Poisson dans le plan d'isotropie transverse de l'interphase et un plan orthogonal.

4.3 Thermo-élasticité linéaire anisotrope

Dans cette section nous modélisons le comportement thermo-élastique des composites dont l'orientation des fibres est donnée par un tenseur \underline{a} . L'orientation des fibres au cours de l'écoulement et son figeage à la fin du cycle d'injection font que, à l'état solide, le comportement thermo-élastique est anisotrope. Nous présenterons alors le modèle d'*Advani et Tucker* qui lie ce comportement directement au tenseur d'orientation d'ordre 2 ainsi qu'aux propriétés unidirectionnelles du matériau. Le calcul des propriétés anisotropes suppose que l'orientation des fibres est connue (carte obtenue à la fin du cycle d'injection). Nous utiliserons dans ce chapitre une approche numérique pour l'estimation directe des propriétés anisotropes et nous présenterons le solveur élastique anisotrope.

4.3.1 Modèles prenant en compte l'orientation des fibres dans le composite

Les thermoplastiques renforcés ont, en général, un comportement mécanique anisotrope qui est du à la distribution des fibres dans la matrice. Il est nécessaire donc de relier le comportement thermo-mécanique à cette orientation induite par le procédé.

Bien que la littérature soit très riche sur la prédiction analytique des propriétés unidirectionnelles, peu de travaux prennent en compte l'orientation des renforts. [16, 24, 91, 92, 8, 93, 43] utilisent la théorie des stratifiés pour prédire les propriétés mécaniques des composites avec une distribution d'orientation bi-dimensionnelle. D'autres [1, 46, 51] suggèrent l'utilisation d'une procédure en deux étapes qui consiste à déterminer, dans un premier temps, les propriétés unidirectionnelles (isotropes transverses) du composite et, dans un deuxième temps, les pondérer par la fonction de densité de probabilité de distribution des fibres et de les moyenner sur tout le domaine. Cette méthode a été appliquée par Huang [53], Lielens et al. [65] et Mlekush [74] mais nécessite, néanmoins, la connaissance de cette densité de probabilité de distribution. Advani et Tucker [1] ont formulé une extension de la théorie des stratifiés [49] qui donne directement l'expression du tenseur de raideur en fonction des propriétés unidirectionnelles du composite et du tenseur d'orientation des fibres. Advani et Tucker [1] proposent également la procédure en deux étapes afin de définir complètement le comportement du matériau composite. Pour la première étape, toutes les théories évoquées dans la section 4.2 peuvent être utilisées; Pour la deuxième étape, la carte d'orientation dans le composite doit être connue.

4.3.2 La procédure en deux étapes pour le calcul des propriétés thermo-élastiques anisotropes

4.3.2.1 Étape 1 : calcul des paramètres thermo-élastiques pour un état d'orientation unidirectionnel

La première étape consiste à prendre un matériau avec une orientation unidirectionnelle (selon l'axe 1) et de calculer le tenseur de raideur $\underline{\underline{C}}^{IT}$, avec l'un des modèles explicités dans la section 4.2 on a vu différentes façons (homogénéisation par des modèles analytiques, homogénéisation numérique) de détermination des propriétés thermo-mécaniques unidirectionnelles. Les propriétés unidirectionnelles seront ensuite calculées pour une direction \underline{p} des fibres en appliquant un opérateur de rotation sur le tenseur $\underline{\underline{C}}^{IT}$. Chaque composante $C_{ijkl}^{IT}(\underline{p})$ du tenseur de raideur isotrope transverse s'écrit, selon Advani et Tucker[1], de la manière suivante :

$$C_{ijkl}^{IT}(\underline{p}) = b_1 p_i p_j p_k p_l + b_2 (p_i p_j \delta_{kl} + p_k p_l \delta_{ij}) + b_3 (p_i p_k \delta_{jl} + p_i p_l \delta_{jk} + p_j p_k \delta_{il} + p_j p_l \delta_{ik}) + b_4 (\delta_{ij} \delta_{kl}) + b_5 (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) \quad (4.54)$$

δ_{ij} étant le symbole de Kronecker.

Les constantes b_1, \dots, b_5 dépendent d'un état isotrope transverse où toutes les fibres sont alignées selon une seule direction, celle de l'axe 1 ($\underline{p} = (1, 0, 0)$)

$$\begin{aligned} b_1 &= C_{1111}^{IT} - 2C_{1122}^{IT} - 4C_{1212}^{IT} + C_{2222}^{IT} \\ b_2 &= C_{1122}^{IT} - C_{2233}^{IT} \\ b_3 &= C_{1212}^{IT} - \frac{1}{2}(C_{2222}^{IT} - C_{2233}^{IT}) \\ b_4 &= C_{2233}^{IT} \\ b_5 &= \frac{1}{2}(C_{2222}^{IT} - C_{2233}^{IT}) \end{aligned} \quad (4.55)$$

Advani et Tucker [1] expriment aussi le tenseur des dilatations thermiques pour une orientation unidirectionnelle dans une direction \underline{p} :

$$\underline{\underline{\alpha}}^{IT}(\underline{p}) = P_1 \underline{p} \otimes \underline{p} + P_2 \underline{\underline{1}} \quad (4.56)$$

P_1 et P_2 sont deux constantes qu'on pourra exprimer en fonction des dilatations thermiques longitudinale et transversale α_1 et α_2 . En effet, pour un état d'orientation isotrope transverse, ces constantes sont données par :

$$\begin{aligned} P_1 &= \alpha_1 - \alpha_2 \\ P_2 &= \alpha_2 \end{aligned} \quad (4.57)$$

4.3.2.2 Étape 2 : calcul des paramètres thermo-élastiques anisotropes

Si ψ indique la fonction de distribution d'orientation, le tenseur de raideur anisotrope est alors :

$$\underline{\underline{C}} = \int \underline{\underline{C}}^{IT}(\underline{p})\psi(\underline{p})d\underline{p} \quad (4.58)$$

Cette approche de calcul du tenseur de raideur anisotrope nécessite la donnée de la fonction de distribution de probabilité. Etant donné la difficulté de la détermination de cette fonction, une écriture faisant intervenir les tenseurs d'orientation de fibres d'ordre 2 et d'ordre 4 a été établie par Advani et Tucker :

$$\begin{aligned} C_{ijkl} = & b_1 a_{ijkl} + b_2 (a_{ij} \delta_{kl} + a_{kl} \delta_{ij}) + b_3 (a_{ik} \delta_{jl} + a_{il} \delta_{jk} \\ & + a_{jk} \delta_{il} + a_{jl} \delta_{ik}) + b_4 (\delta_{ij} \delta_{kl}) + b_5 (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) \end{aligned} \quad (4.59)$$

(a_{ijkl}) et (a_{ij}) étant respectivement les tenseurs d'orientation de fibres d'ordre 2 et d'ordre 4.

De la même façon, le tenseur de souplesse anisotrope s'écrit en fonction des tenseurs d'orientation :

$$\begin{aligned} S_{ijkl} = & m_1 a_{ijkl} + m_2 (a_{ij} \delta_{kl} + a_{kl} \delta_{ij}) + m_3 (a_{ik} \delta_{jl} + a_{il} \delta_{jk} \\ & + a_{jk} \delta_{il} + a_{jl} \delta_{ik}) + m_4 (\delta_{ij} \delta_{kl}) + m_5 (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) \end{aligned} \quad (4.60)$$

m_1, \dots, m_5 sont des constantes qui dépendent des propriétés unidirectionnelles du composite.

Bien que les tenseurs des propriétés unidirectionnelles $\underline{\underline{C}}^{IT}(\underline{p})$ et $\underline{\underline{S}}^{IT}(\underline{p})$ soient inverses l'un de l'autre, les tenseurs de raideur et souplesse anisotrope ne le sont pas. Ceci est une des limites de la procédure en deux étapes. Plusieurs auteurs [1, 46, 74] recommandent l'utilisation de l'expression (4.59) pour le calcul des propriétés mécaniques du composite.

Une fois le tenseur de raideur anisotrope établi, le tenseur de dilatations thermiques peut être déterminé avec l'équation de Levin [64] (expression(4.51)).

Cependant, pour déterminer les tenseurs des dilatations et contraintes thermiques unidirectionnels, les expressions (4.50) et (4.51) sont équivalentes. Alors que pour les tenseurs anisotropes, on peut obtenir 2 évaluations différentes de $\underline{\underline{\alpha}}$. En effet, les tenseurs de souplesse et de raideur anisotropes ne sont pas inverses l'un de l'autre ce qui donne $\underline{\underline{\alpha}} \neq \underline{\underline{C}}^{-1} \underline{\underline{\kappa}}$.

Une autre façon de déterminer le tenseur des dilatations était de se baser sur le même principe que l'élasticité anisotrope. Ce tenseur peut s'écrire :

$$\underline{\underline{\alpha}} = \int \underline{\underline{\alpha}}^{IT}(\underline{p}) \psi(\underline{p}) d\underline{p} \quad (4.61)$$

En utilisant l'expression 4.56, l'expression du tenseur de dilatations thermiques anisotrope devient :

$$\underline{\underline{\alpha}} = P_1 \underline{a} + P_2 \underline{1} \quad (4.62)$$

4.3.3 Application

On considère le cas du peigne (figure 4.9) :

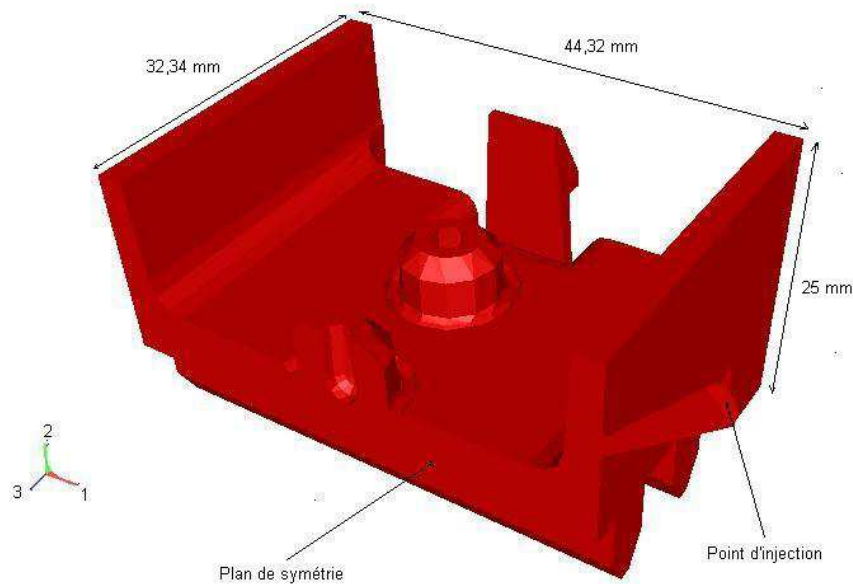


FIGURE 4.9 – Géométrie du peigne

Le maillage de cette pièce étant anisotrope afin de mieux représenter la distribution de tenseur d'orientation ainsi que des propriétés mécaniques en épaisseur. Ce maillage contient 80 000 noeuds et 457 000 éléments, et est donné par la figure 4.10 :

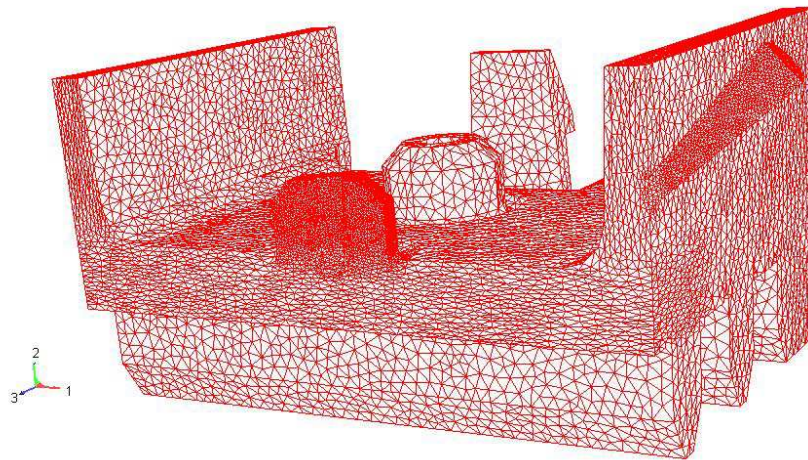


FIGURE 4.10 – Maillage anisotrope du peigne

Pour cette géométrie, nous disposons du tenseur d'orientation obtenu en fin de cycle d'injection. Nous représentons dans la figure 4.11 les composantes diagonales de ce tenseur :

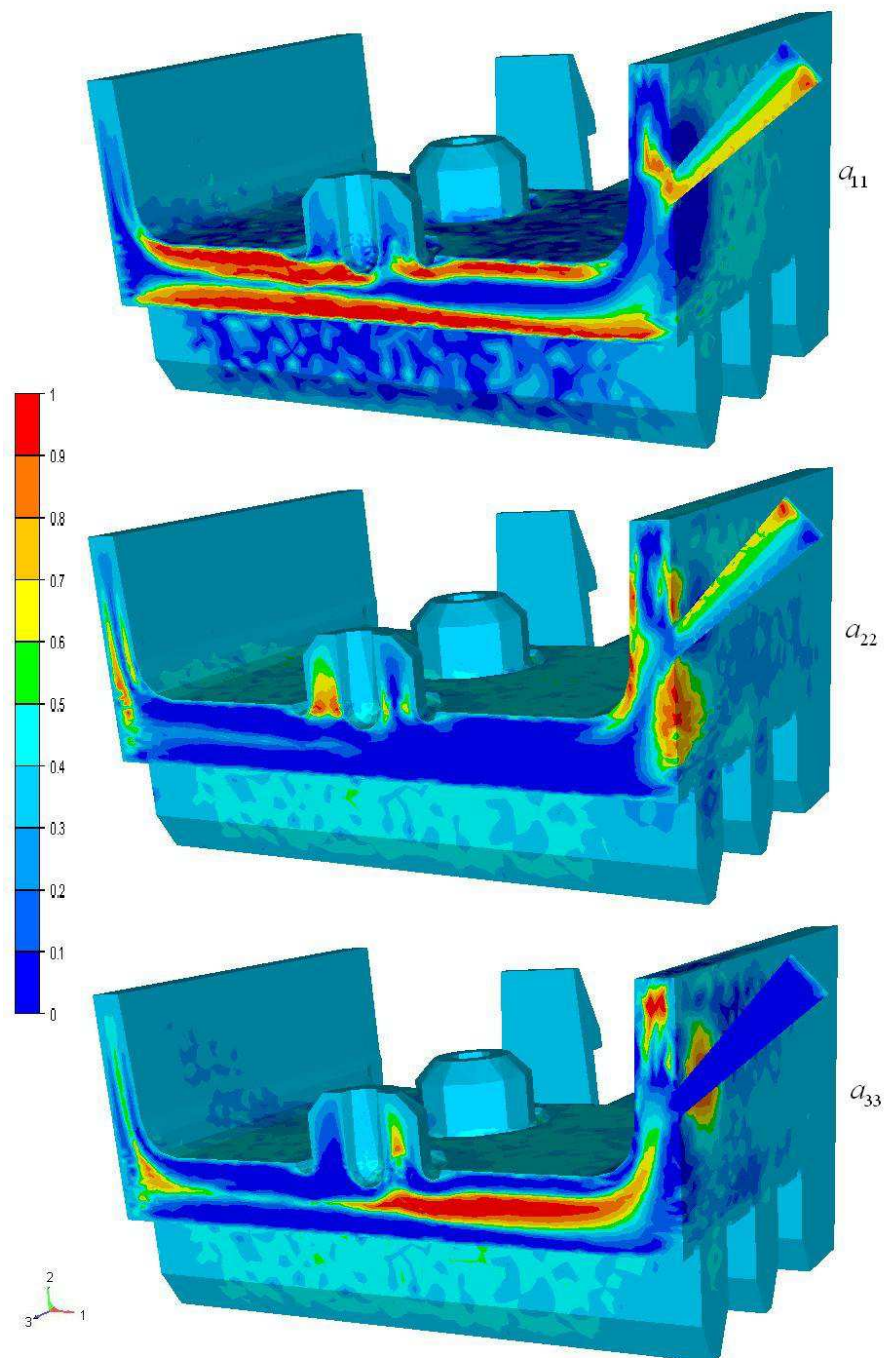


FIGURE 4.11 – Composantes diagonales du tenseur d'orientation

Dans le modèle d'Advani et Tucker, nous utilisons une équation de fermeture quadratique afin d'exprimer le tenseur du quatrième ordre en fonction du tenseur du

deuxième ordre. Connaissant la distribution du tenseur d'orientation, on se propose de calculer les propriétés mécaniques de la pièce à l'aide du modèle d'Advani et Tucker. A température ambiante, les modules de Young et coefficients de Poisson de la matrice et des fibres sont respectivement $E_m = 4GPa$, $E_f = 74GPa$, $\nu_m = 0.36$ et $\nu_f = 0.35$. Pour un renforcement en fibres à 30 % en volume, les cinq constantes mécaniques unidirectionnelles prédites par le modèle de Mori-Tanaka sont : $E_1 = 21.6GPa$, $E_2 = 7.04GPa$, $\nu_{12} = 0.32$, $\nu_{23} = 0.47$ et $G_{12} = 3.42GPa$. Grâce à ces données, le tenseur de raideur est calculé $\underline{\underline{C}}$, et on pourra alors en déduire le tenseur de souplesse $\underline{\underline{S}}^c$ (en inversant le tenseur de raideur). Nous définissons les modules de Young anisotropes dans les 3 directions ainsi que le module de cisaillement anisotrope dans le plan (12) :

$$\begin{aligned} E_{11}^a &= \frac{1}{S_{1111}^c} \\ E_{22}^a &= \frac{1}{S_{2222}^c} \\ E_{33}^a &= \frac{1}{S_{3333}^c} \\ G_{12}^a &= \frac{1}{S_{1212}^c} \end{aligned} \quad (4.63)$$

E_{ii} étant le module de Young anisotrope dans la direction i , $i = 1, 2, 3$. Ces modules sont représentés par la figure 4.12 :

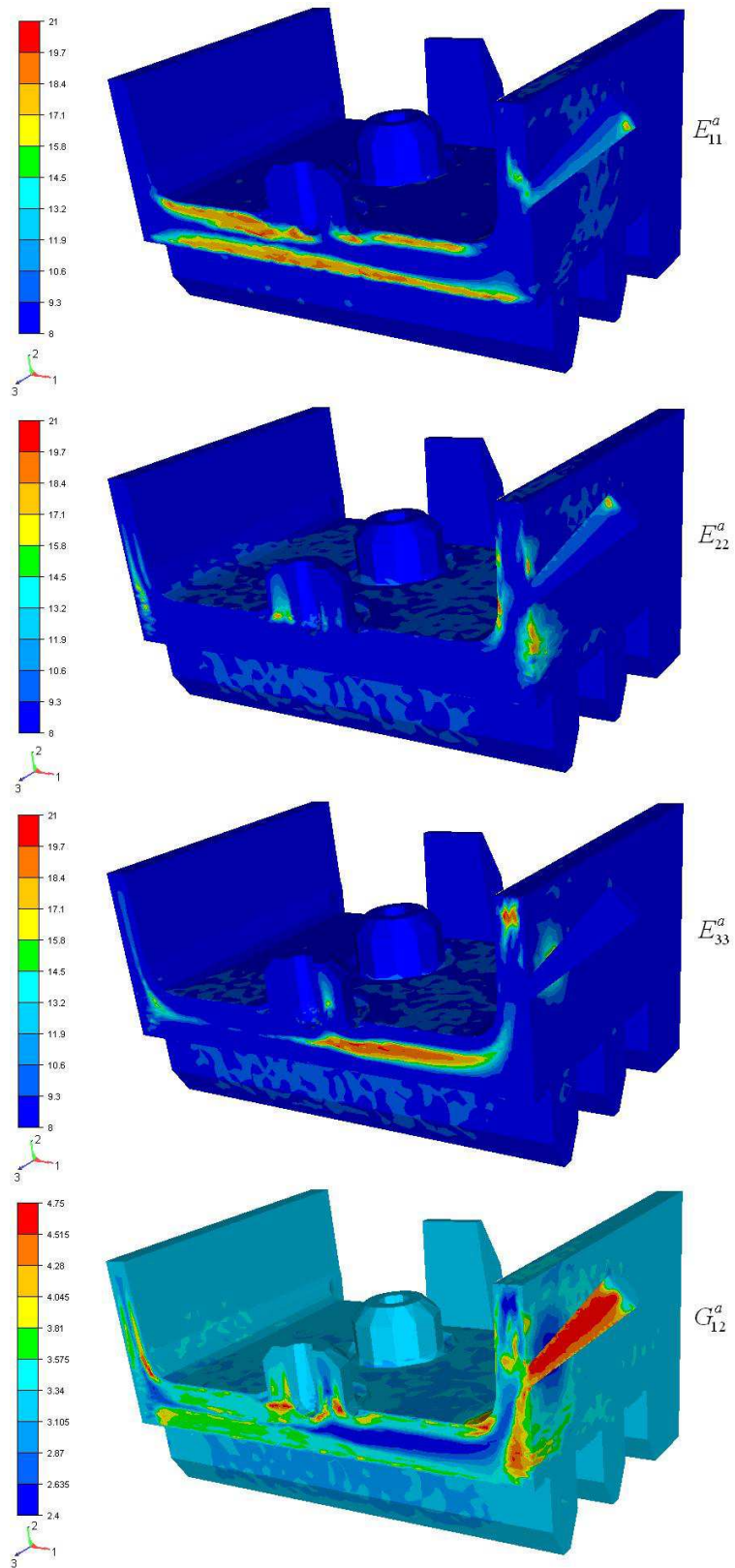


FIGURE 4.12 – Distributions des constantes mécaniques anisotropes

A partir de cette figure nous constatons que la distribution de chacun des module de Young anisotrope E_{ii} ($i = 1, 2, 3$) est très similaire à la distribution de la composante diagonale a_{ii} . La pièce est plus rigide là où il y a le maximum d'orientation.

4.4 Conclusion

Tout au long de ce chapitre nous avons étudié les différents modèles d'homogénéisation des propriétés thermo-élastiques des thermoplastiques renforcés. Pour une orientation de fibre aléatoire dans le matériau, la littérature montre qu'on peut adopter une démarche en deux étapes pour la détermination de ces propriétés.

La première étape consiste à considérer que le composite est un matériau biphasique (une phase fibres et une phase matrice). Chaque phase est supposée avoir un comportement thermo-élastique. Et les fibres sont considérées alignées selon une direction unique. La littérature a fourni plusieurs modèles d'homogénéisation dont les plus utilisés ont été listés dans ce chapitre. Tous ces modèles nécessitent la connaissance des propriétés thermo-élastiques de la matrice et des fibres, ainsi que la concentration volumique et le rapport de forme des fibres. Nous avons par la suite comparé ces modèles à des résultats expérimentaux, et nous avons confirmé le résultat prouvé par plusieurs travaux, à savoir que le modèle de Mori-Tanaka donne les meilleures prédictions des propriétés élastiques pour des concentrations volumiques en fibres allant jusqu'à 30%. Pour la suite, nous avons choisi ce modèle pour la détermination analytique des propriétés unidirectionnelles.

La deuxième étape, consiste à utiliser le modèle d'Advani et Tucker. Ce modèle relie les propriétés thermo-élastiques (tenseur de raideur et tenseur de dilatations thermiques) à l'orientation de fibres dans le matériau. Cette orientation est caractérisée par la grandeur macroscopique \underline{a} . Ce modèle fait intervenir sept paramètres thermo-élastiques qui sont $b_1, \dots, b_5, \bar{P}_1, P_2$ et nous avons vu que ces paramètres peuvent être exprimés directement en fonction des propriétés unidirectionnelles. Pour cela, nous avons montré sur un cas industriel, l'utilité de l'approche d'Advani et Tucker du moment où on dispose du tenseur d'orientation.

Nous constatons alors qu'au stade de la détermination des propriétés thermo-élastiques anisotropes, on doit connaître déjà l'état d'orientation des fibres ainsi que les propriétés thermo-élastiques unidirectionnelles. Il est donc nécessaire d'avoir des méthodes efficaces de calcul d'orientation qui donnent les résultats les plus proches possibles de l'expérience, et ainsi une bonne prédiction des sept paramètres intervenant dans le calcul des tenseurs de raideur et de dilatations de thermiques selon le

modèle d'Advani et Tucker. Dans le chapitre 2 nous avons justifié un choix de modèle d'orientation (le modèle de Folgar et Tucker) ainsi que la méthode numérique de résolution.

L'objectif de la suite de ce travail consiste à présenter une méthodologie permettant de bien estimer les propriétés thermo-élastiques sans avoir des soucis quant à la concentration des fibres qui est une variable essentielle jugeant la validité des modèles d'homogénéisation cités précédemment. Cette méthodologie sera basée sur une approche numérique pour l'estimation des constantes b_1, \dots, b_5, P_1 et P_2 du modèle d'Advani et Tucker, et sera validée par rapport à l'approche de Mori-Tanaka.

Chapitre 5

Homogénéisation numérique des propriétés thermo-élastiques des thermoplastiques chargés de fibres

Dans ce chapitre, nous présenterons une procédure numérique pour l'estimation des propriétés thermo-élastiques des thermoplastiques chargés de fibres. Cette procédure est basée sur une description discrète de la microstructure, il s'agit de la génération d'un VER (Volume Élémentaire Représentatif). Dans ce VER, nous connaissons le nombre, les dimensions ainsi que les orientations de toutes fibres faisant partie du domaine. La connaissance des lois de comportements des fibres et de la matrice du VER, et sa sollicitation numériquement (en cisaillement simple, traction simple, ...) permet de déduire les paramètres mécaniques du matériau.

Dans la première partie de ce chapitre, nous décrirons brièvement l'outil de génération de VER ainsi présenté dans la thèse de Gregory Beaume [14], ensuite les principes de base de l'homogénéisation numérique.

Dans la deuxième partie, nous nous intéresserons aux choix d'un VER optimal pour effectuer l'homogénéisation. Ce choix sera effectué à partir d'une étude de sensibilité sur le maillage.

Dans la troisième partie, nous déterminerons les propriétés unidirectionnelles. La détermination de ces propriétés nous permettra d'évaluer l'efficacité de l'approche numérique en prenant comme résultats de référence ceux donnés par l'approche analytique. Dans ce contexte, nous comparerons les résultats obtenus par rapport aux résultats donnés par le modèle analytique de Mori-Tanaka.

Dans la quatrième partie de ce chapitre, nous utiliserons notre démarche numérique pour l'évaluation directe des propriétés anisotropes (tenseur de raideur et

tenseur de dilatations thermiques).

Sommaire

5.1	Définition d'un volume élémentaire représentatif (VER)	107
5.1.1	Génération du volume élémentaire représentatif	107
5.1.2	Décomposition du domaine	110
5.2	Etude de sensibilité de l'approche numérique	111
5.2.1	Sensibilité au maillage	111
5.2.2	Sensibilité au nombre de fibres	118
5.3	Comparaison entre les résultats de l'homogénéisation numérique et l'homogénéisation analytique en thermo-élasticité unidirectionnelle . .	119
5.4	Estimation numérique des propriétés thermo-élastiques anisotropes .	123
5.4.1	Mise en place du système matriciel	123
5.4.2	Applications	126
5.5	Conclusion	128

5.1 Définition d'un volume élémentaire représentatif (VER)

L'objectif de ce chapitre consiste à déterminer numériquement les propriétés thermo-élastiques des composites. Pour cela des volumes élémentaires représentatifs (volumes cubiques égales à l'unité) chargés de fibres seront générés. La phase fibres ainsi que la phase matrice sont supposées avoir chacune un comportement élastique linéaire isotrope. Dans le paragraphe 3.1 nous avons présenté le solveur élastique isotrope. En sollicitant numériquement le VER (traction simple, cisaillement, ...), ce solveur aidera à définir le comportement et la réponse du matériau en chaque point de son domaine. Par conséquent, à l'aide de cette homogénéisation numérique, nous déterminerons le comportement élastique anisotrope du matériau.

5.1.1 Génération du volume élémentaire représentatif

Beaume [14] a décrit dans sa thèse un algorithme de génération de VER avec des particules cylindriques (qui sont les fibres) et/ou sphériques. Cet algorithme nécessite les données suivantes :

1. Indication du type de renforts : sphères et/ou fibres ;
2. Concentration volumique des renforts ;
3. Dimensions des renforts ;
4. En cas de fibre, on indique l'orientation moyenne dans le VER, et en cas de sphères la granulométrie (sphères identiques, ou mélange bimodal de sphères ou mélange de plusieurs sphères de rayons quelconques) ;
5. Choix d'une méthode d'ajustement : ajustement en dimensions et/ou en concentration. L'ajustement sert à redonner les valeurs, les plus proches possibles, de la concentration et/ou des dimensions de celles renseignées par l'utilisateur, de telle façon que le nombre de particules (qui est le rapport entre la concentration volumique des renforts et le volume de chaque particule) soit un entier naturel.
6. Distance minimale entre les particules ;
7. La présence ou non d'une paroi : cette donnée est nécessaire quand le VER représente une cellule périodique du matériau.

La phase de génération de l'échantillon souhaité se déroule de la manière suivante :

1. Ajustement des paramètres renseignés selon la méthode choisie (c'est à dire ajustement en concentration et/ou en dimensions) ;
2. Génération d'un réseau régulier dans lequel les particules seront placés.
3. Génération d'un VER initial avec un positionnement initial des renforts ;
4. Premier positionnement des particules sur le réseau, avec une distribution aléatoire ;
5. Première correction des position selon l'orientation requise par l'utilisateur ;
6. Execution d'un algorithme élémentaire de correction des positions des particules. La condition d'arrêt de cette algorithme est lorsque la distance entre chaque particule et ses voisines soit supérieure ou égale à la distance minimale introduite par l'utilisateur. Si cette condition n'est pas satisfaite, la position de cette particule est corrigée.

La figure 5.1 montre quelques exemples de VER obtenus avec l'algorithme de Beaume.

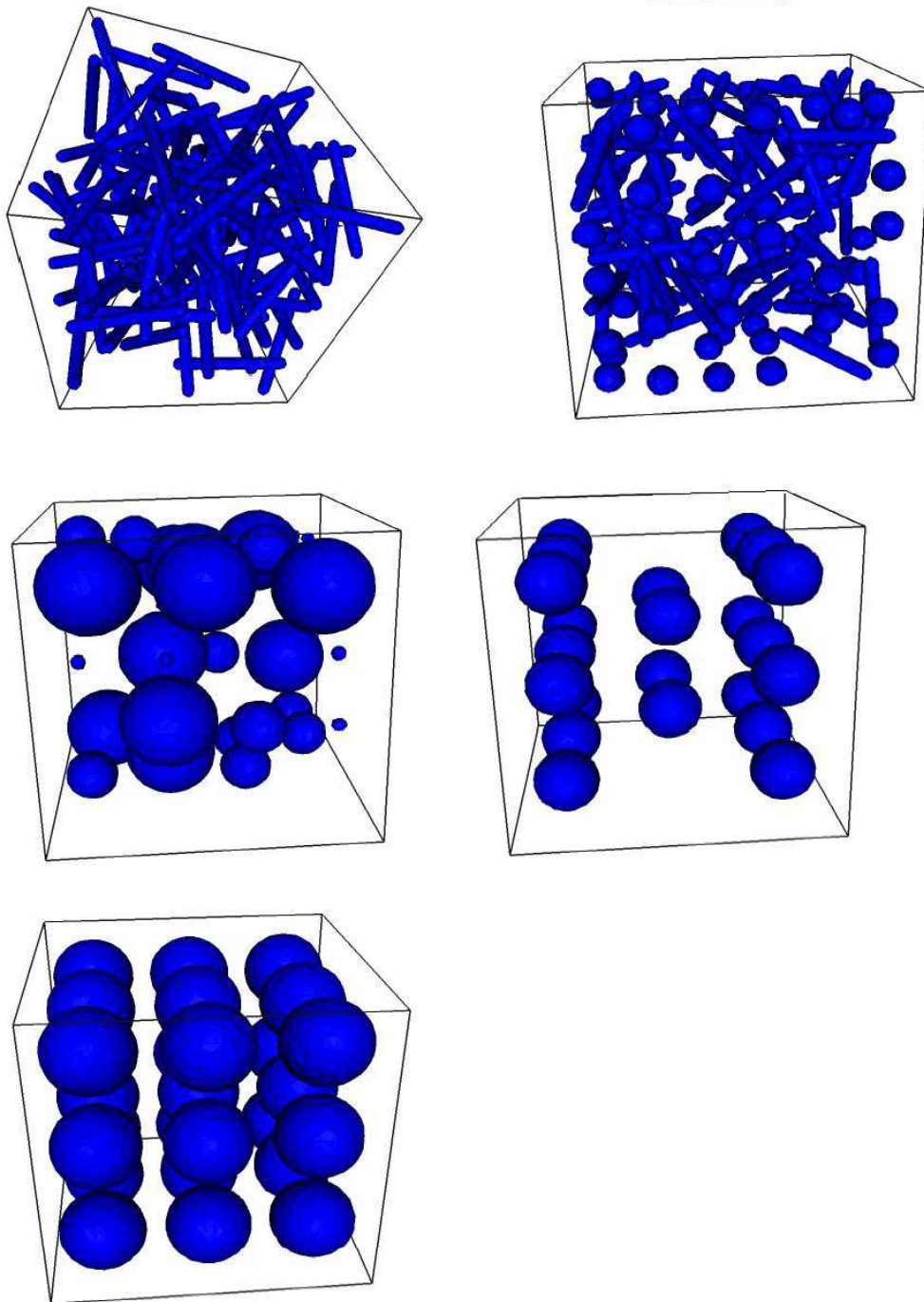


FIGURE 5.1 – Quelques exemples de VER pouvant être générés par l'algorithme de Beaume [14]

Nous avons utilisé cet algorithme pour la génération de VER où les renforts sont seulement des fibres.

5.1.2 Définition du domaine

Tout comme les approches analytiques, notre approche numérique fera appel à une décomposition du domaine du VER. Ce domaine est considéré comme étant l'union du domaine occupé par les fibres et celui occupé par la matrice.

Soient :

- $D_f = \{\text{ensemble des coordonnées des noeuds appartenant au domaine compris dans les fibres}\}$
- $D_m = \{\text{ensemble des coordonnées des noeuds appartenant au domaine compris dans la matrice du VER}\}$

Nous supposons que la matrice ainsi que les fibres, ont chacun un comportement thermo-mécanique linéaire isotrope. Il est possible donc de définir un module de Young et un coefficient de poisson (dépendants de l'espace) pour tout le mélange :

$$\begin{cases} E_{mel}(\underline{x}) = E_f 1_{D_f}(\underline{x}) + E_m 1_{D_m}(\underline{x}) \\ \nu_{mel}(\underline{x}) = \nu_f 1_{D_f}(\underline{x}) + \nu_m 1_{D_m}(\underline{x}) \end{cases} \quad (5.1)$$

De la même façon le coefficient de dilatations thermiques du mélange peut s'écrire :

$$\alpha_{mel}(\underline{x}) = \alpha_f 1_{D_f}(\underline{x}) + \alpha_m 1_{D_m}(\underline{x}) \quad (5.2)$$

avec,

$$1_{D_m}(\underline{x}) = 1 - 1_{D_f}(\underline{x}) \quad \forall(\underline{x}) \in \Omega_{VER}$$

Le comportement mécanique du VER pourra ainsi être donné par le système (3.9). L'objectif de cette partie est de déterminer les propriétés thermo-élastiques homogénéisées, c'est à dire qu'on cherchera à déterminer des tenseurs $\underline{\underline{C}}^h$ et $\underline{\underline{\alpha}}^h$ (les tenseur de raideur et de dilatations thermiques homogénéisés) qui interviennent dans la loi de comportement :

$$\langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle = \underline{\underline{C}}^h : (\langle \underline{\underline{\epsilon}} \rangle - \underline{\underline{\alpha}}^h \Delta T) \quad (5.3)$$

$\langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle$ et $\langle \underline{\underline{\epsilon}} \rangle$ étant les moyennes spatiales des tenseurs de contraintes et de déformations et qui sont définies par :

$$\begin{aligned} \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle &= \frac{1}{\Omega_{VER}} \int_{\Omega_{VER}} \underline{\underline{\sigma}}(\underline{x}) d\underline{x} \\ \langle \underline{\underline{\epsilon}} \rangle &= \frac{1}{\Omega_{VER}} \int_{\Omega_{VER}} \underline{\underline{\epsilon}}(\underline{x}) d\underline{x} \end{aligned} \quad (5.4)$$

5.2 Etude de sensibilité de l'approche numérique

Avant d'estimer les propriétés thermo-élastiques, il faut choisir un VER. Ce choix est lié principalement au maillage et au nombre de fibres. Un grand nombre de fibres (environ 100 ou plus) peut donner de bonnes estimations, mais peut se retrouver affecté par le maillage ; la taille de maille devra être suffisamment faible pour bien représenter les fibres, afin d'éviter des phénomènes numériques (comme le recollement de fibres) pouvant influencer les estimations. D'autre part, l'utilisation de maillages fins est coûteuse en terme d'espace mémoire et en terme de temps de calcul.

Nous appellerons VER optimal, le volume représentatif où l'on a le nombre de fibres minimal pouvant donner les résultats les plus proches des résultats analytiques. Ce nombre de fibres nous permettra de définir la taille de maille minimale qui leur permettra d'être bien représentées. Pour cela nous étudierons la sensibilité de l'approche numérique au maillage et au nombre de fibres.

5.2.1 Sensibilité au maillage

Dans ce paragraphe, nous étudier l'effet du maillage sur la valeur numérique des propriétés mécaniques. Pour cela, et afin de se placer par rapport à la solution analytique, nous considérons un VER de dimension l'unité où toutes les fibres sont orientées dans la direction 1.

Les tests sont effectués sur les maillages (avec une taille de maille isotrope) suivants :

- M1 : 4 000 noeuds, 22 400 éléments
- M2 : 16 200 noeuds, 92 500 éléments
- M3 : 47 000 noeuds, 250 000 éléments
- M4 : 120 000 noeuds, 656 000 éléments
- M5 : 275 000 noeuds, 1 519 000 éléments

Les propriétés mécaniques (élastiques isotropes) des deux phases du composite sont respectivement $E_m = 3GPa, E_f = 70GPa, \nu_m = 0.35$ et $\nu_f = 0.2$.

Pour tous les maillages testés, les fibres ont une longueur constante de 0.7 et un diamètre constant de 0.07, soit un rapport de forme $\beta = 10$. Nous considérons des concentrations volumiques de 15%, 25% et 30%. Pour chaque concentration volumique, nous allons définir un maillage optimal pour l'estimation des paramètres mécaniques.

Pour $V_f = 15\%$:

Pour cette concentration, le VER généré contient 55 fibres. La solution analytique (Mori-Tanaka) est donnée par :

$$\begin{aligned}E_1 &= 8.42GPa \\E_2 &= 4.05GPa \\ \nu_{12} &= 0.335 \\ \nu_{23} &= 0.437 \\ G_{12} &= 1.79GPa\end{aligned}$$

L'estimation numérique pour les différents maillages est représentée par les figures ci-dessous :

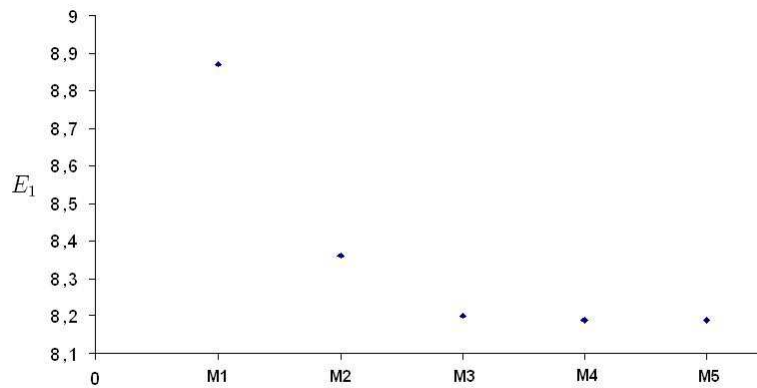


FIGURE 5.2 – Sensibilité du module de Young E_1 par rapport au maillage pour une fraction volumique de 15%

En raffiant le maillage, le module de Young longitudinal numérique converge vers $8.2GPa$. Cette valeur étant proche de celle estimée par le modèle de Mori-Tanaka, le maillage M3 est alors convenable pour l'estimation de ce module.

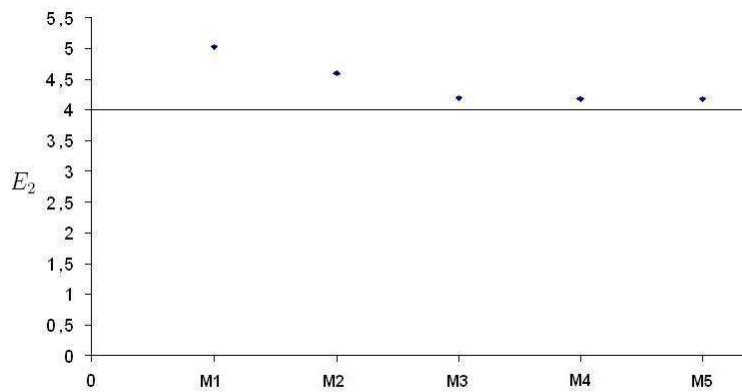


FIGURE 5.3 – Sensibilité du module de Young E_2 par rapport au maillage pour une fraction volumique de 15%

Le module de Young longitudinal transversal converge vers $4.1GPa$. Cette valeur étant proche de celle estimée par le modèle de Mori-Tanaka, le maillage M3 est alors convenable pour l'estimation de ce module.

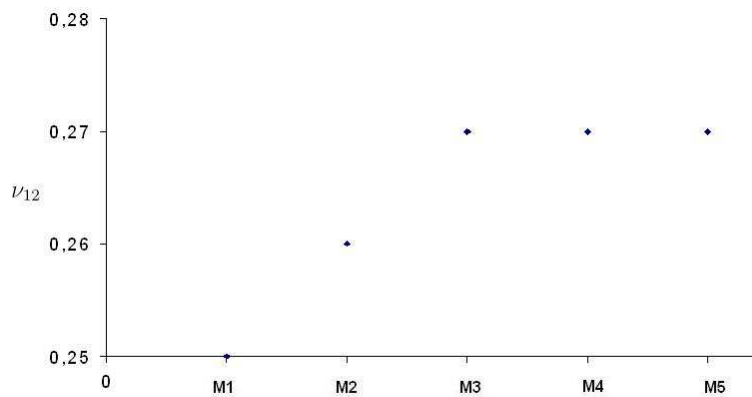


FIGURE 5.4 – Sensibilité du coefficient de poisson ν_{12} par rapport au maillage pour une fraction volumique de 15%

Le coefficient de Poisson ν_{12} estimé numériquement converge vers 0.27. Le maillage M3 est convenable pour l'estimation de cette valeur, même si celle-ci reste différente de la valeur estimée par le modèle de Mori-Tanaka.

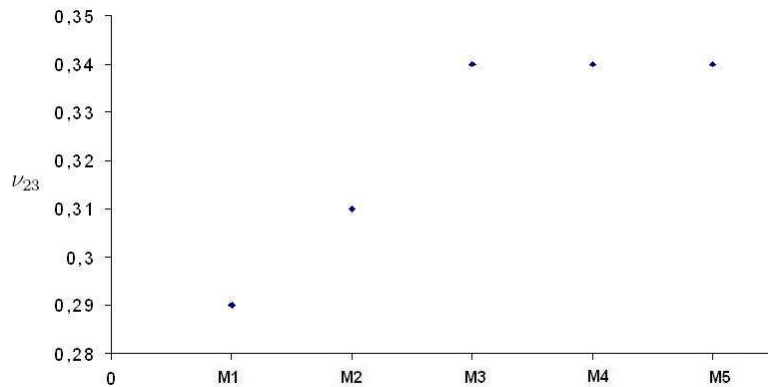


FIGURE 5.5 – Sensibilité du coefficient de poisson ν_{23} par rapport au maillage pour une fraction volumique de 15%

Le coefficient de Poisson ν_{23} estimé numériquement converge vers 0.34. Le maillage M3 est convenable pour l'estimation de cette valeur, même si celle-ci reste différente de la valeur estimée par le modèle de Mori-Tanaka.

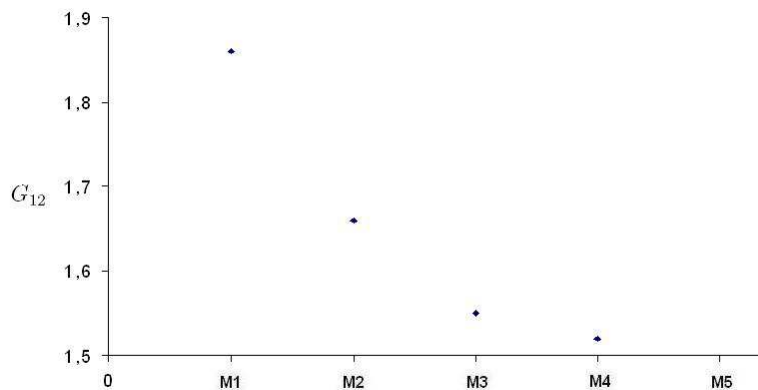


FIGURE 5.6 – Sensibilité du coefficient de cisaillement G_{12} par rapport au maillage pour une fraction volumique de 15%

Le module de cisaillement G_{12} converge vers 1.5 GPa. Pour le maillage M3 cette valeur est d'environ 1.54 GPa qui reste aussi proche de la valeur estimée sur le maillage M5.

En conclusion, pour une concentration volumique de 15%, l'utilisation du maillage M3 donne une bonne estimation des propriétés unidirectionnelles.

Pour $V_f = 25\%$:

Pour cette concentration, nous avons généré un VER contenant 93 fibres. La solution analytique (Mori-Tanaka) est donnée par :

$$E_1 = 12.56GPa$$

$$E_2 = 4.83GPa$$

$$\nu_{12} = 0.325$$

$$\nu_{23} = 0.445$$

$$G_{12} = 2.36GPa$$

L'estimation numérique pour les différents maillages est représentée par les figures ci-dessous :

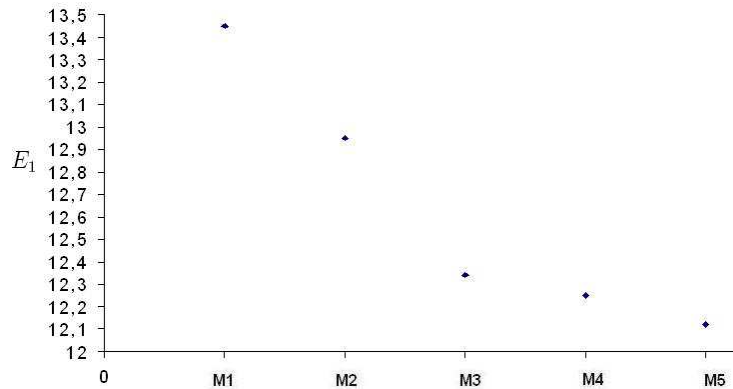


FIGURE 5.7 – Sensibilité du module de Young E_1 par rapport au maillage pour une fraction volumique de 25%

La valeur estimée numériquement du module de Young longitudinal diminue avec la taille de maille. Par rapport à la valeur analytique de E_1 , on constate que les maillages M3, M4 et M5 sont convenables pour l'estimation numérique de cette valeur.

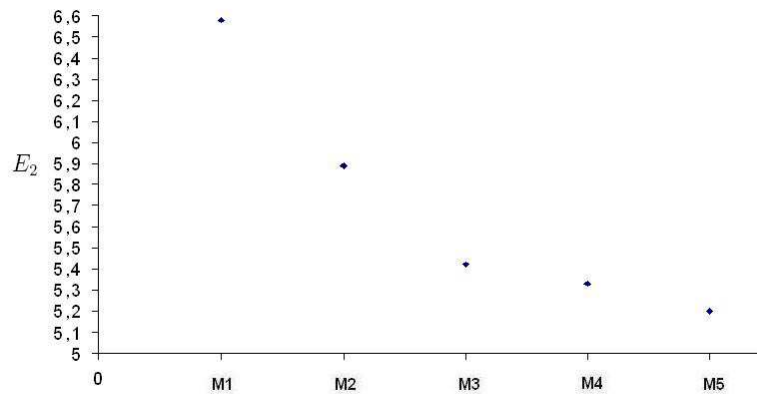


FIGURE 5.8 – Sensibilité du module de Young E_2 par rapport au maillage pour une fraction volumique de 25%

La valeur numérique du module de Young transversale diminue aussi avec la taille de maille. La meilleure estimation est donnée par le maillage M5.

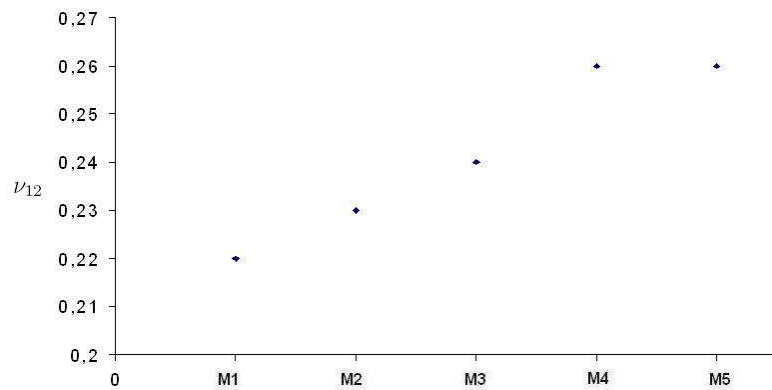


FIGURE 5.9 – Sensibilité du coefficient de poisson ν_{12} par rapport au maillage pour une fraction volumique de 25%

Les estimations sur les maillages M4 et M5 donnent les meilleures valeurs du coefficient de Poisson ν_{12} .

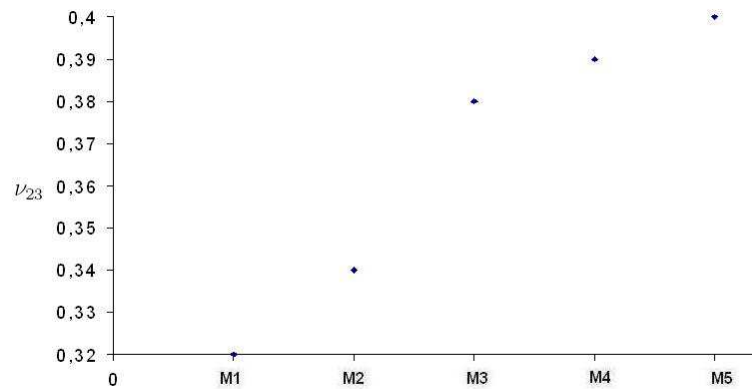


FIGURE 5.10 – Sensibilité du coefficient de poisson ν_{23} par rapport au maillage pour une fraction volumique de 25%

La meilleure valeur du coefficient de Poisson ν_{23} est obtenue sur le maillage M5, celle-ci vaut 0.4. Le maillage M4 est aussi convenable puisque, sur ce maillage, la valeur numérique est évaluée à 0.39.

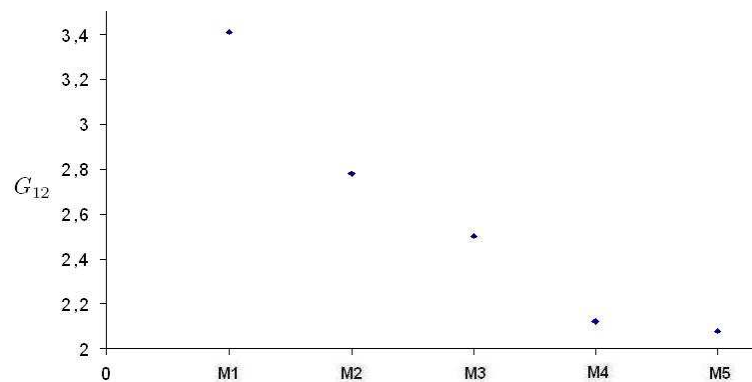


FIGURE 5.11 – Sensibilité du coefficient de cisaillement G_{12} par rapport au maillage pour une fraction volumique de 25%

La figure ci-dessus montre que les maillages M3, M4 et M5 sont convenables pour l'estimation du module de cisaillement G_{12} .

En conclusion, pour une concentration de 25%, le maillage M4 peut être un maillage optimal.

Pour $V_f = 30\%$:

Pour cette concentration, nous avons généré un VER avec 112 fibres. La solution analytique (Mori-Tanaka) est donnée par :

$$E_1 = 14.81GPa$$

$$E_2 = 5.28GPa$$

$$\nu_{12} = 0.32$$

$$\nu_{23} = 0.446$$

$$G_{12} = 2.7GPa$$

L'estimation numérique pour les différents maillages est représentée par les figures ci-dessous :

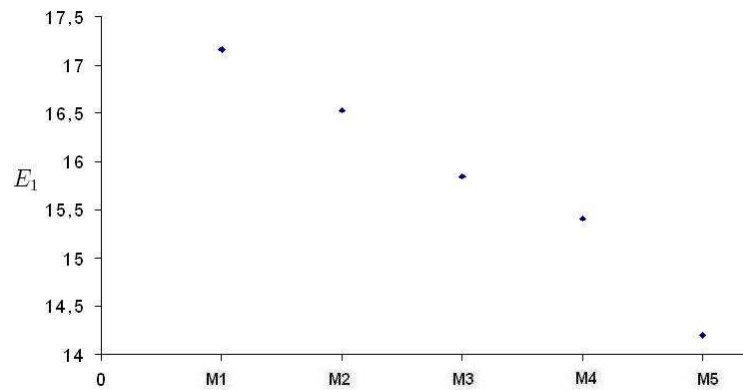


FIGURE 5.12 – Sensibilité du module de Young E_1 par rapport au maillage pour une fraction volumique de 30%

Les meilleures valeurs numériques du module de Young longitudinal sont estimés sur les maillages M4 et M5.

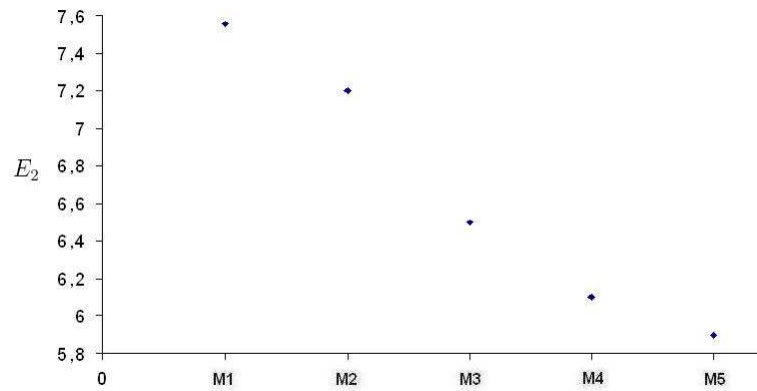


FIGURE 5.13 – Sensibilité du module de Young E_2 par rapport au maillage pour une fraction volumique de 30%

La meilleure estimation du module de Young transversal est obtenue sur le maillage M5.

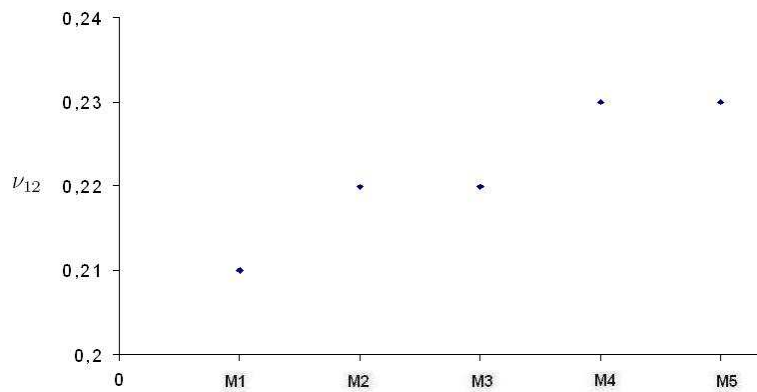


FIGURE 5.14 – Sensibilité du coefficient de poisson ν_{12} par rapport au maillage pour une fraction volumique de 30%

Les maillages M4 et M5 sont convenables pour l'estimation du coefficient de Poisson ν_{12}

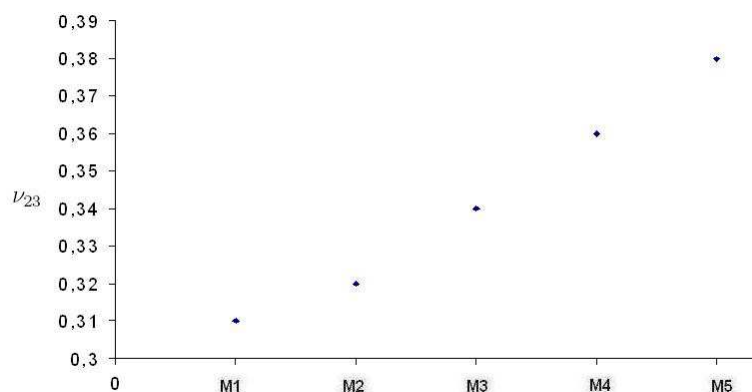


FIGURE 5.15 – Sensibilité du coefficient de poisson ν_{23} par rapport au maillage pour une fraction volumique de 30%

Le figure ci-dessus, montre que la meilleure estimation du coefficient ν_{23} est donnée par le maillage M5.

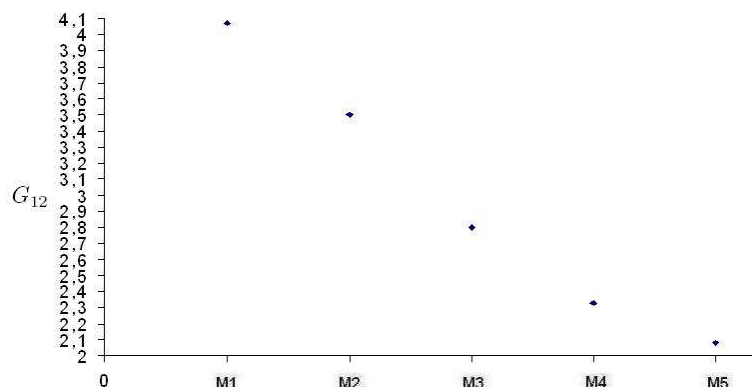


FIGURE 5.16 – Sensibilité du coefficient de cisaillement G_{12} par rapport au maillage pour une fraction volumique de 30%

La valeur numérique du module de cisaillement diminue avec la taille de maille. Même si la meilleure estimation est obtenue pour le maillage M3, nous retiendrons que la valeur estimée numériquement celle obtenue sur le maillage M5 (égale à $2.05GPa$), puisque les meilleures estimations des quatre autre paramètres mécaniques ont été données sur ce maillage.

On constate que le maillage a un effet non négligeable sur la valeur numérique des propriétés élastiques. En effet, pour un maillage grossier les fibres sont sur-

représentées ce qui induit, numériquement, une rigidité sur le VER traduite par des valeurs importantes des modules de Young longitudinal et transversal. Cette rigidité diminue en raffinant le maillage, et certaines propriétés mécaniques (tel que les modules de Young) tendent à une valeur proche de la valeur analytique.

La sur-évaluation, pour des maillages non raffinés, des propriétés mécaniques augmente avec la concentration volumique des fibres (ou le nombre des fibres) dans le VER. En effet, l'augmentation de la concentration des fibres engendre un recollement entre celles-ci (figure 5.17).

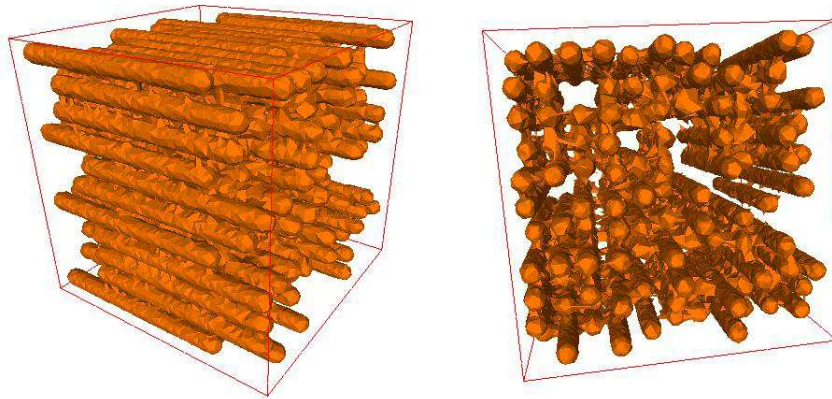


FIGURE 5.17 – Apparition de phénomène de recollement entre fibres pour le maillage M3 pour une concentration volumique de 30%

Ce phénomène est évitable pour des faibles concentrations puisque'on peut imposer que les fibres soient suffisamment éloignées pour qu'il n'y ait pas recollement (cf. figure 5.19).

5.2.2 Sensibilité au nombre de fibres

La détermination des paramètres mécaniques est sensible aussi au nombre de fibres dans l'échantillon. En effet si on considère encore une fois que les propriétés de la phase fibres et la phase matrice sont données par le tableau 5.1, mais que la concentration volumique et le rapport de forme des fibres sont respectivement maintenus à $V_f = 10\%$ et $\beta = 10$. On utilisera des volumes élémentaires qui contiennent respectivement 2, 8, 11, 22, 51, 78, 104 et 179 fibres (figure 5.18).

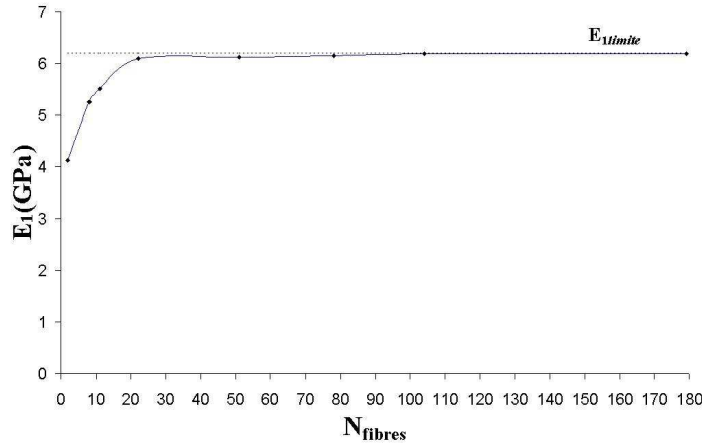


FIGURE 5.18 – Prediction du module de Young longitudinal pour des échantillons avec des fibres ayant une concentration volumique de 10% et un rapport de forme de 10.

Pour ces valeurs le modèle micro-mécanique de Mori-Tanaka prédit une valeur de E_1 égale à 6.21 GPa .

La figure 5.18 montre que E_1 croît avec le nombre de fibres et se stabilise à une valeur égale à 6.19 GPa . Mais on pourra néanmoins constater qu'un échantillon contenant 22 fibres pourra être un VER optimum car il permet à la fois d'avoir une valeur de E_1 proche de la valeur analytique, et d'avoir moins de soucis quant à l'effet du maillage sur les valeurs des paramètres élastiques (moins de remaillage au niveau de l'interface de chaque fibre ce qui implique un maillage moins lourd, etc...).

5.3 Comparaison entre les résultats de l'homogénéisation numérique et l'homogénéisation analytique en thermo-élasticité unidirectionnelle

Considérons le VER avec une population de fibres toutes alignées selon la direction de l'axe 1 (Figure(5.19)).

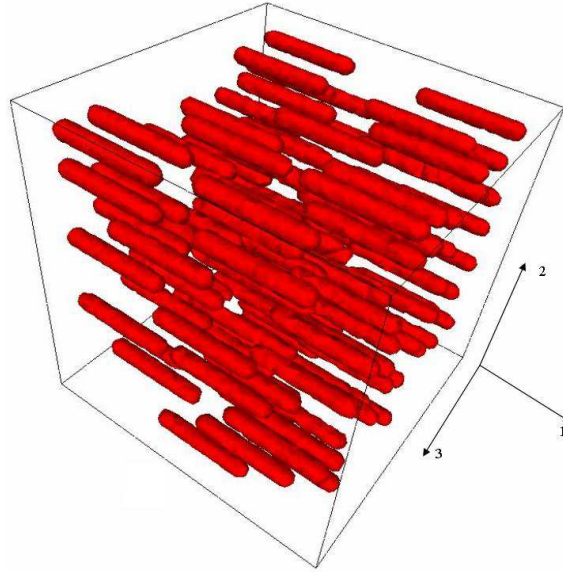


FIGURE 5.19 – VER avec une orientation unidirectionnelle des fibres

Le maillage de l'échantillon contient 245000 noeuds et 1340000 éléments.

Tout comme dans la section 4.2 l'objectif ici sera de déterminer les propriétés unidirectionnelles du VER. Pour le calcul des propriétés mécaniques, nous travaillerons à température ambiante et nous soumettrons l'échantillon à trois essais numériques de traction simple et deux essais de cisaillement simple.

Les propriétés des fibres et de la matrice sont données par le tableau suivant :

	<i>Matrice</i>	<i>Fibres</i>
$E(GPa)$	3	70
ν	0.35	0.2
$\alpha(10^{-6}K)$	108.3	4.9

TABLE 5.1 – Propriétés thermo-mécaniques des fibres et de la matrice

Nous supposons que les fibres ont un rapport de forme $\beta = 25$. Nous testerons des fractions volumiques de fibres de 10%, 15% et 20%. Pour ces trois concentrations, nous avons choisi un nombre de fibres qui varie entre 35 et 45.

Les résultats numériques sont comparés à une solution analytique calculée par le modèle de Mori-Tanaka (tableau 5.2).

	$V_f = 10\%$	$V_f = 15\%$	$V_f = 20\%$
E_1 Numérique	8.29	10.91	14.12
E_1 Mori-Tanaka	8.49	11.32	14.21
E_2 Numérique	4.16	5.57	6.76
E_2 Mori-Tanaka	3.76	4.11	4.48
ν_{12} Numérique	0.324	0.301	0.28
ν_{12} Mori-Tanaka	0.335	0.327	0.32
ν_{23} Numérique	0.366	0.391	0.41
ν_{23} Mori-Tanaka	0.45	0.46	0.464
G_{12} Numérique	1.16	1.46	1.64
G_{12} Mori-Tanaka	1.53	1.77	2.04

TABLE 5.2 – Comparaisons entre les valeurs déterminées numériquement et analytiquement des propriétés mécaniques unidirectionnelles pour un rapport de forme des fibres égal à 25

Le tableau ci-dessus montre une bonne prédiction du module de Young longitudinal contrairement aux autres coefficients mécaniques qui sont plus sensibles au maillage.

Une fois les paramètres mécaniques unidirectionnels déterminés, on pourra procéder à la prédiction numérique des coefficients de dilatation thermique longitudinal et transversal. L'échantillon, initialement à température ambiante ($T_0=20^\circ\text{C}$), est soumis à une hausse de température $\Delta T = (T - T_0)$. En même temps, une sollicitation mécanique est appliquée. Cette sollicitation, couplée à l'augmentation de température engendre un champ de déformations $\underline{\underline{\varepsilon}}_1$ et un champ de contraintes $\underline{\underline{\sigma}}_1$ dans le VER.

Rappelons la loi qui $\underline{\underline{\sigma}}_1$ à $\underline{\underline{\varepsilon}}_1$:

$$\underline{\underline{\sigma}}_1 = \underline{\underline{C}} : (\underline{\underline{\varepsilon}}_1 - \underline{\underline{\alpha}}\Delta T) \quad (5.5)$$

Le tenseur des dilatations thermiques est ainsi donné par :

$$\underline{\underline{\alpha}} = \frac{1}{\Delta T} (\underline{\underline{\varepsilon}}_1 - \underline{\underline{S}} : \underline{\underline{\sigma}}_1) \quad (5.6)$$

Pour différentes concentrations volumiques en fibres, la démarche décrite ci-dessus est utilisée pour déterminer numériquement le tenseur des dilatations thermiques unidirectionnel. Les figures 5.20 et 5.21 montrent les variations des coefficients de dilatation thermique longitudinal et transversal donnés par les prédictions analytique et numérique.

Comparaison entre les résultats de l'homogénéisation numérique et l'homogénéisation analytique en t

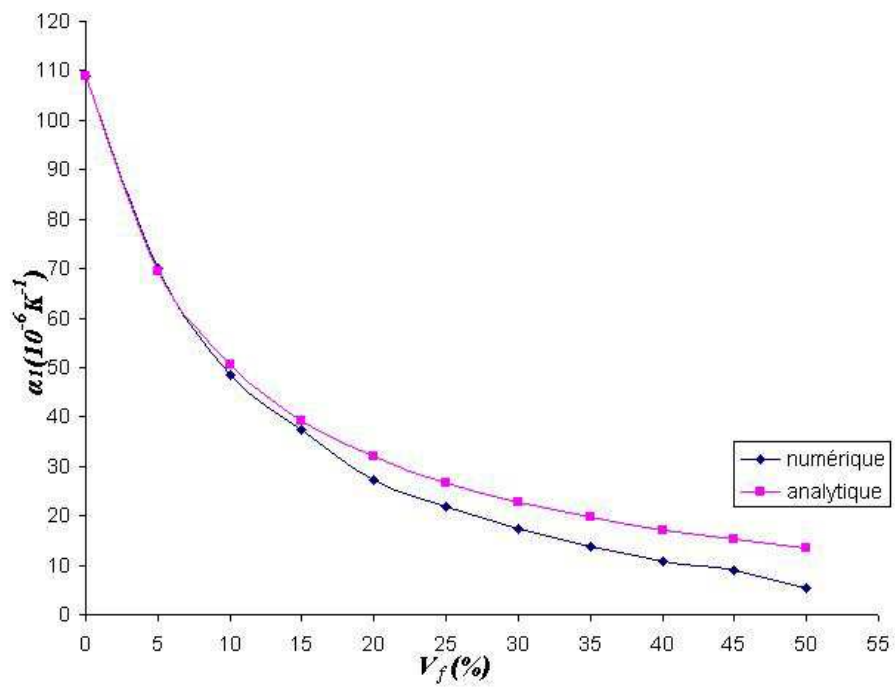


FIGURE 5.20 – variation du coefficient de dilatation thermique longitudinal avec la concentration volumique en fibres

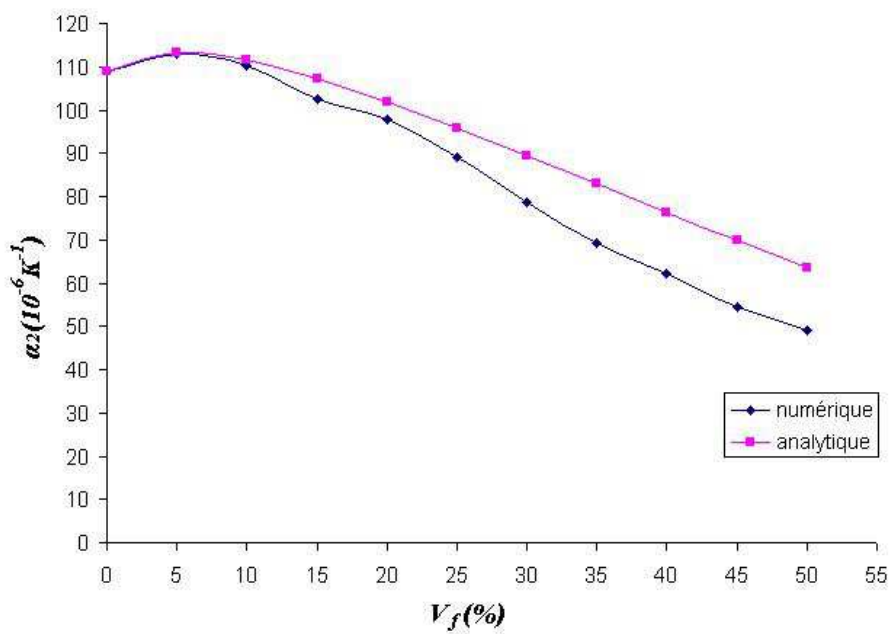


FIGURE 5.21 – variation du coefficient de dilatation thermique transversal avec la concentration volumique en fibres

La solution analytique pour les coefficients de dilatation thermique a été calculée avec le modèle de Levin (équation (4.51)).

Pour le calcul numérique, les dimensions des fibres sont changées (diamètre et longueur restent inférieures à l'unité) de façon à garder le même rapport de forme (égal à 10) et un nombre de fibres entre 35 et 45 dans le VER.

On constate que les prédictions numériques et analytiques sont presque confondues pour des faibles concentrations volumiques, et que l'écart est assez considérable pour des concentrations importantes. Cet écart pourra témoigner de la validité du modèle de Levin pour les faibles concentrations volumiques.

5.4 Estimation numérique des propriétés élastiques anisotropes

L'objectif de ce paragraphe consiste à donner une approche numérique de l'estimation des propriétés élastiques linéaires anisotropes. Nous considérons que le comportement mécanique du composite est régi par le modèle d'Advani et Tucker (équation (4.59)), et nous estimerons les cinq constantes élastiques b_1, \dots, b_5 . Nous avons vu dans la section précédente qu'on est capables d'estimer numériquement les paramètres unidirectionnels. Les cinq paramètres élastiques peuvent être déduits à partir de la relation (4.55). Nous verrons dans les paragraphes suivants qu'il est possible d'estimer directement les paramètres b_1, \dots, b_5, P_1 et P_2 à partir de la sollicitation thermo-mécanique du VER.

5.4.1 Mise en place du système matriciel

Cette partie est dédiée à la prédiction numérique directe des cinq constantes b_1, \dots, b_5 intervenant dans le modèle d'Advani et Tucker (équation(4.59)). Pour cela nous génèrons un VER "p" ($p = 1, \dots, n$) avec une orientation aléatoire (Figure 5.22).

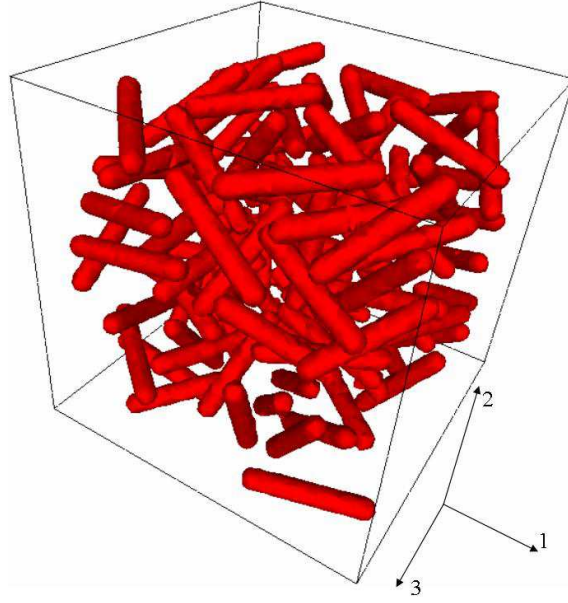


FIGURE 5.22 – Orientation aléatoire des fibres dans un VER

On définit cinq tenseurs d'ordre quatre, $\underline{\underline{A}}^{1,p}$, $\underline{\underline{A}}^{2,p}$, $\underline{\underline{A}}^{3,p}$, $\underline{\underline{A}}^{4,p}$ et $\underline{\underline{A}}^{5,p}$ dont chaque composante s'écrit de la manière suivante :

$$\begin{cases} A_{ijkl}^{1,p} = a_{ijkl}^p \\ A_{ijkl}^{2,p} = a_{ij}^p \delta_{kl} + a_{kl}^p \delta_{ij} \\ A_{ijkl}^{3,p} = a_{ik}^p \delta_{jl} + a_{il}^p \delta_{jk} + a_{jk}^p \delta_{il} + a_{jl}^p \delta_{ik} \\ A_{ijkl}^{4,p} = \delta_{ij} \delta_{kl} \\ A_{ijkl}^{5,p} = \delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk} \end{cases} \quad (5.7)$$

Le tenseur de raideur, selon le modèle d'Advani et Tucker, sur l'échantillon p s'écrit alors :

$$\underline{\underline{C}}^p = b_1 \underline{\underline{A}}^{1,p} + b_2 \underline{\underline{A}}^{2,p} + b_3 \underline{\underline{A}}^{3,p} + b_4 \underline{\underline{A}}^{4,p} + b_5 \underline{\underline{A}}^{5,p} \quad (5.8)$$

Cette dernière équation n'est qu'une réécriture de l'équation d'Advani et Tucker (4.59)).

Afin de déterminer les paramètres b_1, \dots, b_5 , on soumet le VER à toutes les sollicitations mécaniques possibles. Le problème étant symétrique, donc il n'y a que six sollicitations possibles : trois essais de traction simple et trois essais de cisaillement simple. Nous notons ces essais comme suit :

m=1 : essai de traction simple selon la direction 1

- m=2 : essai de traction simple selon la direction 2
- m=3 : essai de traction simple selon la direction 3
- m=4 : essai de cisaillement simple dans le plan (1,2)
- m=5 : essai de cisaillement simple dans le plan (1,3)
- m=6 : essai de cisaillement simple dans le plan (2,3)

La relation entre le champs de déformation et le champ de contrainte sur l'échantillon p , s'écrit :

$$\underline{\underline{\sigma}}^p = \underline{\underline{C}}^p : \underline{\underline{\varepsilon}}^p + \underline{\underline{e}}^p \quad (5.9)$$

où $\underline{\underline{e}}^p$ est un terme de bruit (ou erreur tensorielle) numérique qui varie avec l'observation (c'est à dire la sollicitation appliquée sur le VER). Pour chaque essai m , ce terme s'écrit :

$$\underline{\underline{e}}_m^p = \underline{\underline{\sigma}}_m^p - \underline{\underline{C}}^p : \underline{\underline{\varepsilon}}_m^p \quad (5.10)$$

En utilisant l'équation(5.8), le terme de bruit s'exprime alors de la manière suivante :

$$\begin{aligned} \underline{\underline{e}}_m^p = & \underline{\underline{\sigma}}_m^p - b_1 \underline{\underline{A}}_{\underline{\underline{1}}}^{1,p} : \underline{\underline{\varepsilon}}_m^p - b_2 \underline{\underline{A}}_{\underline{\underline{2}}}^{2,p} : \underline{\underline{\varepsilon}}_m^p - b_3 \underline{\underline{A}}_{\underline{\underline{3}}}^{3,p} : \underline{\underline{\varepsilon}}_m^p - \\ & b_4 \underline{\underline{A}}_{\underline{\underline{4}}}^{4,p} : \underline{\underline{\varepsilon}}_m^p - b_5 \underline{\underline{A}}_{\underline{\underline{5}}}^{5,p} : \underline{\underline{\varepsilon}}_m^p \end{aligned} \quad (5.11)$$

L'ajustement des paramètres du modèle d'Advani et Tucker est effectué par la méthode des moindres carrés ordinaire qui consiste à minimiser l'erreur quadratique pour les six essais. Autrement dit, les paramètres ajustés seront la solution d'un problème d'optimisation sans contraintes :

$$\min_{b_1, \dots, b_5} f(b_1, \dots, b_5); \quad f(b_1, \dots, b_5) = \sum_{m=1}^6 \underline{\underline{e}}_m^p : \underline{\underline{e}}_m^p \quad (5.12)$$

les paramètres b_1, \dots, b_5 vérifient alors :

$$\frac{\partial f}{\partial b_1} = \frac{\partial f}{\partial b_2} = \dots = \frac{\partial f}{\partial b_5} = 0 \quad (5.13)$$

Ce qui conduit au système matriciel suivant :

$$(M_b).B = (S_b) \quad (5.14)$$

où :

- (M_b) est une matrice de taille 5×5 dont le terme principal est :

$$(M_b)_{ij} = \sum_{m=1}^6 \langle \underline{\underline{A}}^{i,p} : \underline{\underline{\varepsilon}}_m^p, \underline{\underline{A}}^{j,p} : \underline{\underline{\varepsilon}}_m^p \rangle \quad (5.15)$$

l'opérateur \langle, \rangle étant le produit scalaire euclidien.

- (S_b) est le vecteur second membre du système matriciel dont le terme principal est donné par :

$$(S_b)_j = \sum_{m=1}^6 \langle \underline{\underline{A}}^{j,p} : \underline{\underline{\varepsilon}}_m^p, \underline{\underline{\sigma}}_m^p \rangle \quad (5.16)$$

- B est le vecteur des inconnues :

$$B = \begin{pmatrix} \widehat{b}_1 \\ \widehat{b}_2 \\ \widehat{b}_3 \\ \widehat{b}_4 \\ \widehat{b}_5 \end{pmatrix}$$

$\widehat{b}_1, \dots, \widehat{b}_5$ étant les estimations des paramètres b_1, \dots, b_5 .

5.4.2 Applications

On considère différents échantillons dont les propriétés de la matrice et des fibres sont données par le tableau 5.1. On prendra une concentration volumique en fibres de 15% et un rapport de forme de 20.

- ▷ Echantillon1 : Orientation unidirectionnelle

$$\underline{\underline{a}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow B = \begin{pmatrix} 5.0065 \\ -0.7719 \\ 0.1161 \\ 3.9611 \\ 1.7339 \end{pmatrix}$$

- ▷ Echantillon2 : Orientation aléatoire

$$\underline{\underline{a}} = \begin{pmatrix} 0.66 & -0.025 & -0.027 \\ -0.025 & 0.18 & 0.023 \\ -0.027 & 0.023 & 0.16 \end{pmatrix} \Rightarrow B = \begin{pmatrix} 3.8625 \\ -0.3669 \\ 0.0106 \\ 2.6732 \\ 1.9394 \end{pmatrix}$$

▷ Echantillon3 : Orientation aléatoire

$$\underline{\underline{a}} = \begin{pmatrix} 0.47 & -0.0799225 & 0.06 \\ -0.0799225 & 0.19 & 0.013 \\ 0.06 & 0.013 & 0.34 \end{pmatrix} \Rightarrow B = \begin{pmatrix} 3.4553 \\ -0.3550 \\ 0.0115 \\ 2.6485 \\ 1.9385 \end{pmatrix}$$

▷ Echantillon4 : Orientation aléatoire

$$\underline{\underline{a}} = \begin{pmatrix} 0.26 & -0.1 & -0.015 \\ -0.1 & 0.34 & -0.014 \\ -0.015 & -0.014 & 0.4 \end{pmatrix} \Rightarrow B = \begin{pmatrix} 4.3801 \\ -0.5116 \\ 0.1568 \\ 2.8836 \\ 1.7132 \end{pmatrix}$$

▷ Echantillon5 : Orientation aléatoire

$$\underline{\underline{a}} = \begin{pmatrix} 0.05 & 0.1 & 0.15 \\ 0.1 & 0.9 & 0.1 \\ 0.15 & 0.1 & 0.05 \end{pmatrix} \Rightarrow B = \begin{pmatrix} 4.8204 \\ -0.6634 \\ 0.0931 \\ 3.0941 \\ 1.7122 \end{pmatrix}$$

▷ Echantillon6 : Orientation aléatoire

$$\underline{\underline{a}} = \begin{pmatrix} 0.55 & 0 & -0.025 \\ 0 & 0.40 & 0.022 \\ -0.025 & 0.022 & 0.05 \end{pmatrix} \Rightarrow B = \begin{pmatrix} 4.2291 \\ -0.4912 \\ 0.0833 \\ 2.9839 \\ 1.8271 \end{pmatrix}$$

On pourra alors en déduire une valeur moyenne sur tous les échantillons du vecteur inconnue B

$$\hat{B} = \begin{pmatrix} 4.2923 \\ -0.5266 \\ 0.0786 \\ 3.0407 \\ 1.8107 \end{pmatrix}$$

La valeur analytique du vecteur B est :

$$B_{ana} = \begin{pmatrix} 5.23122 \\ -0.104525 \\ 0.344747 \\ 3.01825 \\ 1.38767 \end{pmatrix}$$

On constate que l'estimation numérique des paramètres du modèle d'Advani et Tucker varie avec l'échantillon et donc avec l'orientation. Cependant les valeurs les plus proches de l'estimation analytique restent celles calculées sur un état unidirectionnel (échantillon 1) et un état proche de l'état unidirectionnel (échantillon 5). Ceci confirme bien que le modèle d'Advani et Tucker est validé sur des états d'orientation isotropes transverses.

Une façon de vérifier la concordance des estimations numériques avec la valeur analytique est de recalculer les paramètres mécaniques unidirectionnels. Ceci revient à injecter les paramètres estimés b_1, \dots, b_5 dans le modèle d'Advani et Tucker et de prendre un tenseur d'orientation unidirectionnel. Le tableau ci-dessous donne l'estimation des constantes mécaniques unidirectionnelles sur chacun des échantillon ainsi que la valeur analytique :

	$E_1(GPa)$	$E_2(GPa)$	ν_{12}	ν_{23}	$G_{12}(GPa)$
Échantillon 1	9.57	4.9	0.28	0.413	1.85
Échantillon 2	8.57	5.25	0.25	0.354	1.95
Échantillon 3	8.17	5.23	0.25	0.35	1.95
Échantillon 4	9.06	4.81	0.26	0.405	1.86
Échantillon 5	9.28	5.02	0.25	0.41	1.86
Échantillon 6	8.92	5.1	0.26	0.39	1.91
analytique	10.26	4.04	0.33	0.455	1.732

TABLE 5.3 – propriétés thermo-mécaniques des fibres et de la matrice

Globalement la meilleure estimation des paramètres unidirectionnels est obtenue avec une orientation unidirectionnelle des fibres ce qui semble tout à fait légitime comme le modèle d'Advani et Tucker est identifié pour des matériaux isotropes transverses.

5.5 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons présenté une approche numérique pour la détermination des propriétés thermo-mécaniques des composites renforcés de fibres. L'idée principale est de considérer que le composite est l'union d'une phase fibre et d'une phase matrice.

Pour cela, nous avons généré des VER et nous avons supposé que le comportement de chaque phase est thermo-élastique linéaire isotrope. D'autre part, l'orientation ainsi que la rapport de forme et la fraction volumique des fibres sont connues.

Les tenseurs de raideur et de dilatations thermique sont déterminés en sollicitant le VER.

En première étape, nous avons considéré un VER avec une orientation unidirectionnelle nous avons évalué les paramètres thermo-mécaniques à partir desquels on est capable de connaître les valeurs des paramètres b_1, \dots, b_5, P_1 et P_2 du modèle d'Advani et Tucker. Le but de cette partie était de se placer par rapport au calcul analytique de ces propriétés et de valider l'approche numérique. La comparaison a donné des résultats suffisamment proches.

En deuxième étape, nous avons considéré des VER avec des orientations aléatoires, et nous avons effectué toutes les sollicitations mécanique possible afin d'estimer directement les paramètres b_1, \dots, b_5 à l'aide d'une méthode du type moindres carrés, sans passer par l'estimation des propriétés unidirectionnelles. Cette estimation a confirmé la validité de l'approche numérique, même si la ré-évaluation des propriétés unidirectionnelles est moins bonne en utilisant des VER avec une orientation aléatoire que des VER avec une orientation unidirectionnelle. Ce-ci nous a permis de constater que le modèle d'Advani et Tucker est un modèle qui a été identifié sur des orientation unidirectionnelles et qu'il est moins performant pour des orientations aléatoires.

L'approche numérique nous montre, néanmoins, qu'elle est sensible à deux facteurs : le maillage et le nombre de fibres. Il faut s'assurer que le maillage est suffisamment fin pour bien représenter les fibres et ne pas induire de phénomène de recollement. Quant au nombre de fibres, Il faut générer un VER avec le nombre de fibres minimal pouvant assurer la bonne prédiction du comportement thermo-mécanique.

Chapitre 6

Applications industrielles

Nous présentons dans ce chapitre des applications industrielles sur lesquelles nous avons effectué la prédiction du comportement thermo-mécanique à l'état solide, en passant par l'application du module d'orientation présenté dans le chapitre 2. Tous les résultats des chapitres précédents ainsi que les solveurs mis en place (solveur d'orientation et solveurs élastiques) seront utilisés pour la détermination de ces propriétés.

Pour cela, nous avons traité, comme application, le cas du seuil d'injection pour lequel nous disposons d'une comparaison entre les résultats numériques et les résultats expérimentaux en ce qui concerne l'orientation des fibres. Nous verrons par la suite l'impact de ce profil d'orientation sur le comportement mécanique.

Sommaire

6.1	Démarche numérique adoptée pour la détermination des propriétés thermo-mécaniques	131
6.2	Application : le cas du seuil d'injection	132
6.2.1	Présentation de la pièce	132
6.2.2	Etude du profil d'orientation	132
6.2.2.1	Conditions d'injection	133
6.2.2.2	Maillage et temps de calcul	133
6.2.2.3	Résultats numériques	134
6.2.3	État solide de la pièce	138
6.2.3.1	Propriétés mécaniques	138
6.2.3.2	Sollicitation de la pièce	139
6.3	Conclusion	141

6.1 Démarche numérique adoptée pour la détermination des propriétés thermo-mécaniques

Dans ce paragraphe, nous rappelons le schéma adopté et qui est résumé par la figure 6.1 :

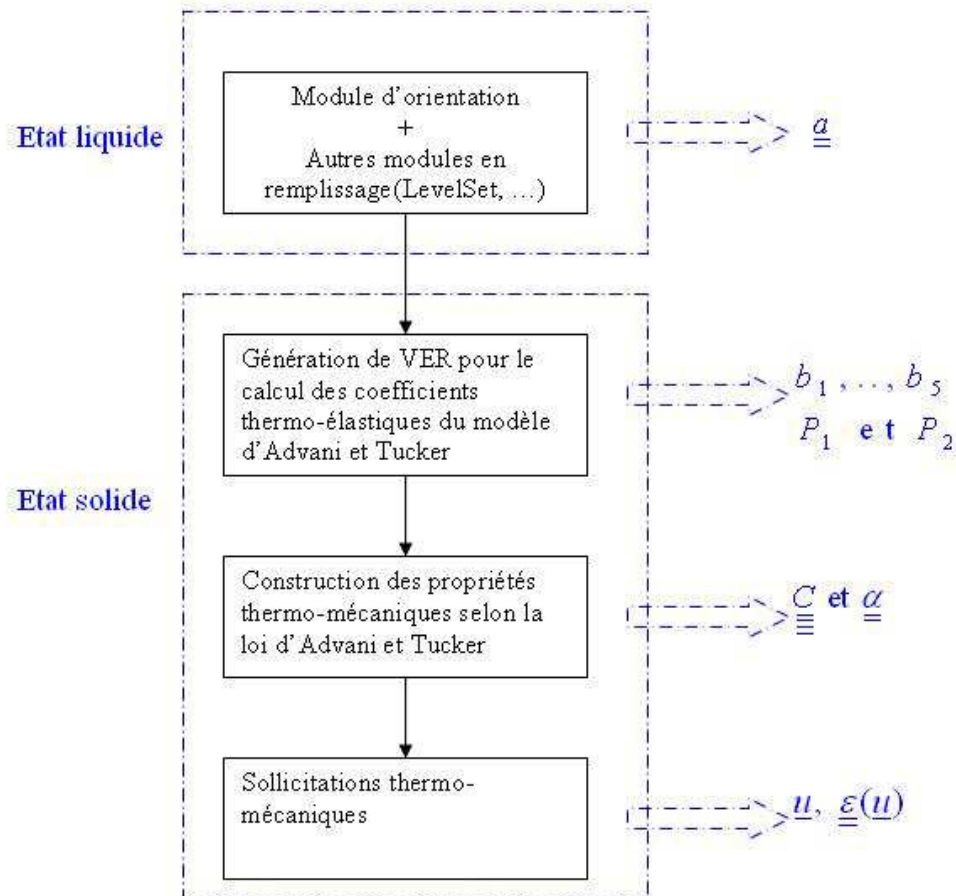


FIGURE 6.1 – Schéma de prédiction des propriétés thermo-élastiques du thermoplastique renforcé

Ce schéma consiste principalement en 2 phases :

Dans la première phase nous considérons le thermoplastique dans son état fondu. Le matériau est alors moulé par injection, et l'orientation des fibres évolue pendant le remplissage du moule. Cette orientation suit l'équation de Folgar et Tucker, qui est résolue numériquement par notre approche continue établie dans la section 2.5. A la fin du remplissage, nous connaissons la distribution du tenseur d'orientation \underline{a}

et nous supposons qu'il reste figé jusqu'à la solidification du polymère, c'est à dire en particulier pendant la phase de compactage.

Dans la deuxième phase, nous déterminons les propriétés thermo-élastiques du composite qui est déjà à l'état solide. Nous supposons que la loi du comportement est régie par le modèle d'Advani et Tucker et nous procédons à une procédure à 2 étapes : tout d'abord nous générons plusieurs VER avec différentes orientations aléatoires afin d'estimer les constantes b_1, \dots, b_5, P_1 et P_2 . Ensuite, nous injectons ces paramètres ainsi que le tenseur d'orientation déterminé dans la première phase pour construire complètement la loi thermo-élastique anisotrope. Une fois cette loi déterminée, la réponse du matériau est entièrement connue face à des sollicitations thermo-mécaniques macroscopiques données.

6.2 Application : le cas du seuil d'injection

6.2.1 Présentation de la pièce

Nous considérons le cas d'un seuil d'injection en nappe d'une plaque tridimensionnelle. L'étude de ce cas s'inscrit dans le cadre des travaux expérimentaux de Vincent et al. [98]. Les dimensions du moule sont représentées par la figure (6.2). Seulement la moitié de la plaque a été considérée, compte tenu de la symétrie de la géométrie.

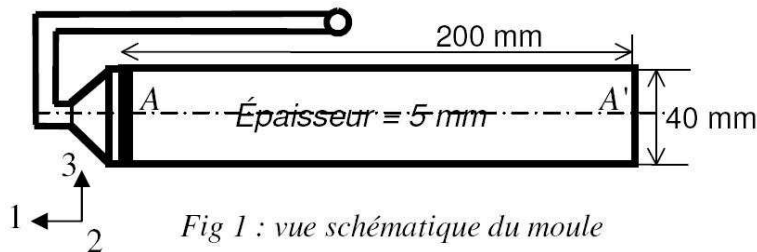


FIGURE 6.2 – Vue schématique du moule

Le polymère est un polyacrylamide (Solvay Ixef 1022) renforcé à 50% en poids par des fibres de verres (à peu près 30% en volume), dont le rapport de forme est de 10.

6.2.2 Etude du profil d'orientation

Dans cette partie, nous validons le solveur d'orientation implémenté sur le cas du seuil d'injection sur lequel des valeurs expérimentales du tenseur d'orientation

ont été mesurées.

6.2.2.1 Conditions d'injection

L'injection se fait à un débit de $15\text{cm}^3/\text{s}$ et une température de 270°C . La température du moule est maintenue à 130°C . Le temps de remplissage est estimé à 1.4s .

Nous supposons que le matériau est incompressible. Nous supposons également que la viscosité du polymère suit une loi de Carreau-Yasuda en rhéologie (équation(6.1)) et une loi d'Arrhénius en thermo-dépendance (équation(6.2)).

$$\eta(\dot{\varepsilon}, T) = \eta_0(T) \left[1 + \left(\eta_0(T) \frac{\dot{\varepsilon}}{\tau_s} \right)^\alpha \right]^{\frac{m-1}{\alpha}} \quad (6.1)$$

$$\eta_0(T) = \eta_0(T_{ref}) \exp\left[\beta \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{ref}} \right)\right] \quad (6.2)$$

Les différentes constantes intervenant dans les équations (6.1) et (6.2) ainsi que dans l'équation de la chaleur (équation (2.25)), sont données dans le tableau 6.1.

τ_s	0.00818MPa
T_{ref}	549°K
$\eta_0(T_{ref})$	270 Pa.s
α	0.55
m	0.4
β	7764
k	0.3 W/m°C
C_p	1766 J/Kg°C
ρ	1522K/m ³

TABLE 6.1 – Paramètres adoptés pour le problème de la plaque tridimensionnelle

Nous imposons une orientation isotrope à l'entrée du moule. Le coefficient d'interaction entre fibres C_I est supposé constant et égal à 10^{-2} [99].

6.2.2.2 Maillage et temps de calcul

Les calculs sont effectués sur un maillage anisotrope comprenant 165000 noeuds et 902000 éléments (figure(6.3)).

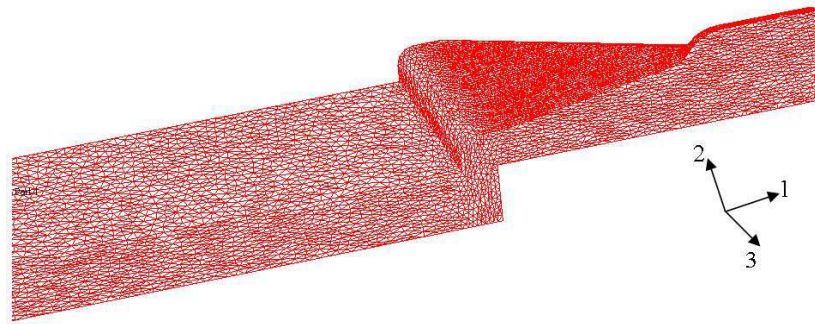


FIGURE 6.3 – Maillage anisotrope de la plaque tridimensionnelle et du seuil d'injection

Les calculs ont été lancés sur 12 processeurs, chacun avec 2.4 GHz de fréquence et 2 Gb de Ram, et un pas de temps de $10^{-4}s$. Les temps résolution, d'assemblage et de calcul pour l'approche continue et discontinue sont donnés par le tableau suivant :

	Temps d'assemblage	Temps de résolution	Temps de calcul
Approche continue	1 jour, 1 heures, 23 minutes	14 heures, 22 minutes	1 jour, 15 heures 45 minutes
Approche discontinue	8 heures, 29 minutes	3 jours, 5 heures, 15 minutes	3 jours, 13 heures, 44 minutes

TABLE 6.2 – Temps de calcul du tenseur d'orientation avec l'approche continue et l'approche discontinue

Le tableau (6.2) confirme les résultats de la section(2.5.2.4.2) sur le gain en temps de calcul en utilisant l'approche continue. L'écart en temps de calcul, entre l'approche continue et l'approche discontinue, se creuse d'avantage en raffinant le maillage et/ou en augmentant le nombre de processeurs pour le calcul parallèle.

6.2.2.3 Résultats numériques

La figure(6.4) montre l'évolution des composantes diagonales du tenseur d'orientation. Le profil $V_{p_{max}}$ indique l'évolution de la valeur propre maximale du tenseur d'orientation. Cette valeur $V_{p_{max}}$ est indépendante du repère du travail et donne une description de l'évolution de l'état d'orientation par rapport à l'état isotrope.

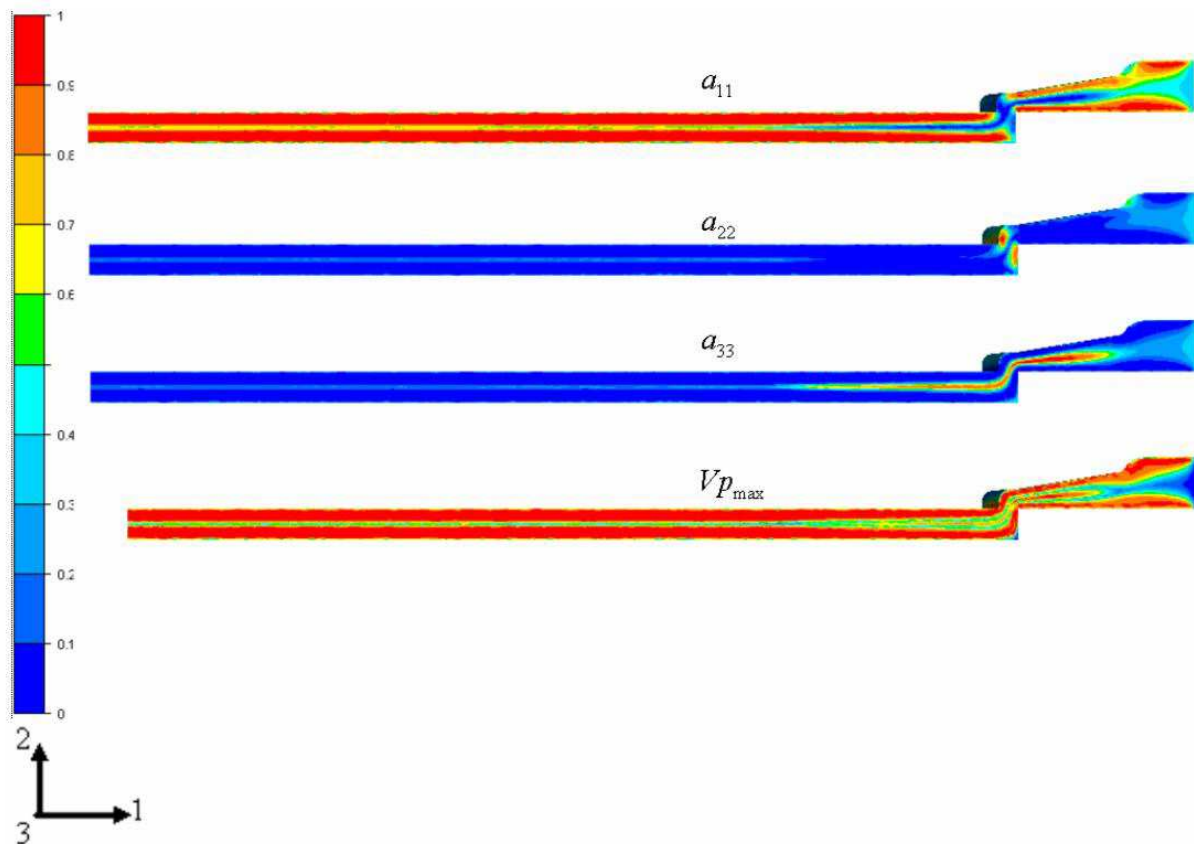


FIGURE 6.4 – Profil, calculé par l'approche continue, des composantes diagonales du tenseur d'orientation sur la plaque tridimensionnelle et le seuil d'injection

Le profil d'orientation rejoint les constatations expérimentales. En effet, on note dans la plaque l'existence d'une structure par couches avec une couche de cisaillement, où une large gamme de fibre est orientée dans le sens de l'écoulement (valeur de la composante a_{11} du tenseur d'orientation proche de 1), et une couche coeur où les fibres sont orientées transversalement à l'écoulement. Parallèlement, on observe que plus l'écoulement progresse, plus les fibres au niveau de la couche de coeur s'orientent petit à petit dans la direction de l'écoulement, et la valeur de la composante a_{11} se stabilise entre 0.5 et 0.6.

Le calcul numérique de l'état d'orientation est comparé aux résultats expérimentaux mesurés sur 3 capteurs (figure(6.5)), placés respectivement à une distance de 15mm , 25mm et 34mm de l'entrée du seuil d'injection.

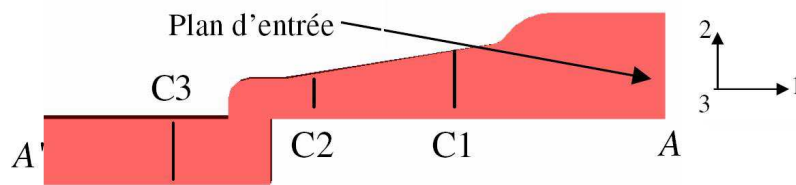


FIGURE 6.5 – Capteurs sur le plan de symétrie du seuil d'injection

Les figures (6.6), (6.7) et (6.8) montrent l'évolution de la composante a_{11} du tenseur d'orientation dans les trois plans de coupe C_1 , C_2 et C_3 :

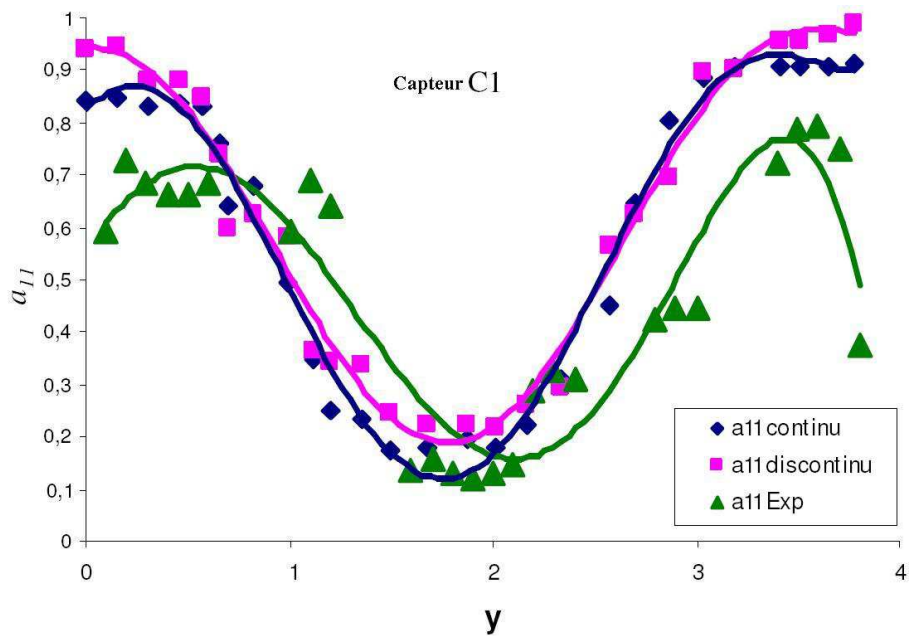


FIGURE 6.6 – Comparaisons effectuées sur le capteur C_1

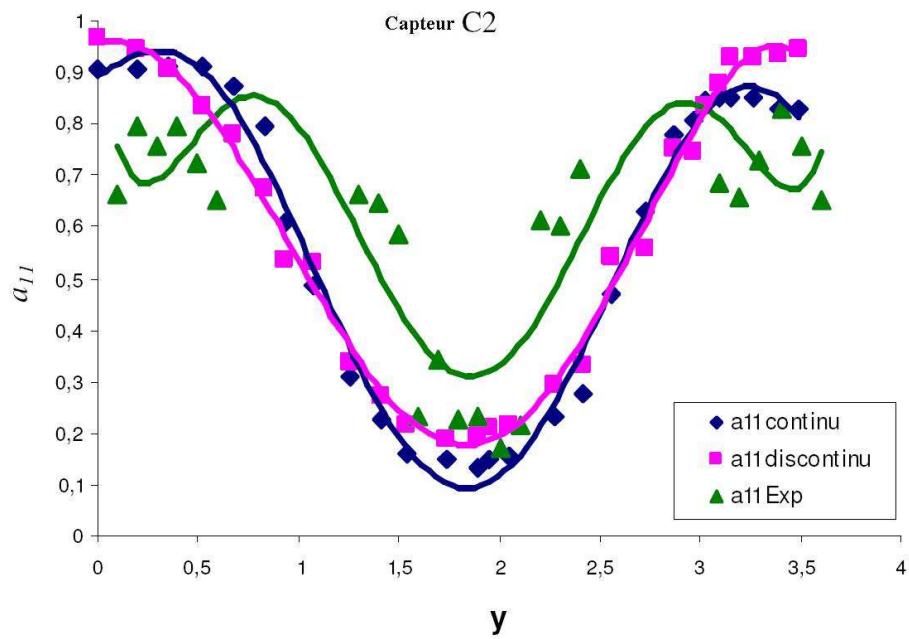


FIGURE 6.7 – Comparaisons effectuées sur le capteur C_2

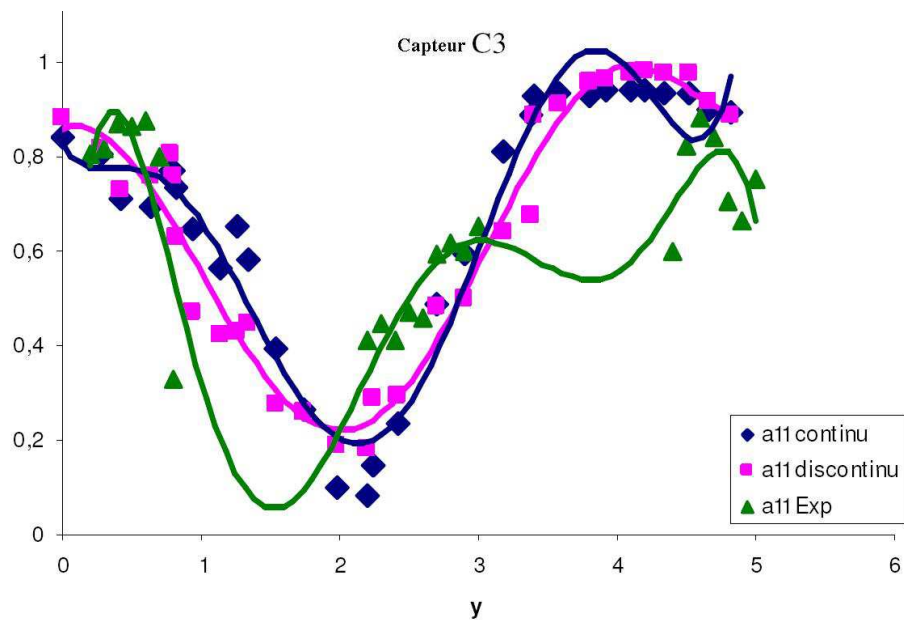


FIGURE 6.8 – Comparaisons effectuées sur le capteur C_3

La comparaison entre les 2 approches numériques montre que le profil d'orientation est mieux capturé à coeur avec l'approche continue qu'avec l'approche discontinue.

Les allures des profils d'orientation numériques et expérimentales sont très similaires et assez proches mais l'écart entre les 2 résultats est non négligeable. Une explication possible réside dans le choix des conditions initiales en orientation et du terme d'interaction C_I . Une autre explication résulte du choix de l'approximation de fermeture : En effet, cette approximation n'est pas exacte puisqu'il y a des fibres, plus particulièrement vers le centre du moule, qui ne sont pas alignées dans le sens de l'écoulement. Enfin, le couplage entre la rhéologie et l'orientation n'a pas été pris en compte.

6.2.3 Comportement thermo-mécanique de la pièce

6.2.3.1 Propriétés mécaniques

Nous considérons que la pièce avec seuil est à l'état solide. Tout comme dans la section 5.4.2, nous déterminons les paramètres b_1, \dots, b_5 en générant 6 VER à 245 000 noeuds et 1340 000 éléments. Les échantillons ont des orientations aléatoires. La moyenne des paramètres du modèle d'Advani et Tucker sur tous les échantillons, donne :

$$\begin{aligned} b_1 &= 12.12 \\ b_2 &= -1.25 \\ b_3 &= 0.43 \\ b_4 &= 6.51 \\ b_5 &= 2.89 \end{aligned}$$

Moyennant ces paramètres on peut redéfinir les constantes élastiques unidirectionnelles, grâce aux relations (4.10) (4.55). Ces constantes sont ainsi :

$$\begin{aligned} E_1 &= 20.68 \\ E_2 &= 8.15 \\ \nu_{12} &= 0.28 \\ \nu_{23} &= 0.41 \\ G_{12} &= 3.32 \end{aligned}$$

A l'aide des paramètres b_1, \dots, b_5 , et connaissant le tenseur d'orientation de fibres dans tout le matériau, on peut calculer le tenseur de raideur anisotrope. En inversant ce tenseur, on obtient le tenseur de souplesse $\underline{\underline{S}}$.

On définit les modules de Young anisotropes par :

$$\begin{aligned} E_{11} &= \frac{1}{S_{1111}} \\ E_{22} &= \frac{1}{S_{2222}} \\ E_{33} &= \frac{1}{S_{3333}} \end{aligned} \tag{6.3}$$

E_{ii} étant le module de Young anisotrope dans la direction i , $i = 1, 2, 3$.

Ainsi, la figure 6.9 donne la distribution des ces grandeurs mécaniques dans toute la pièce.

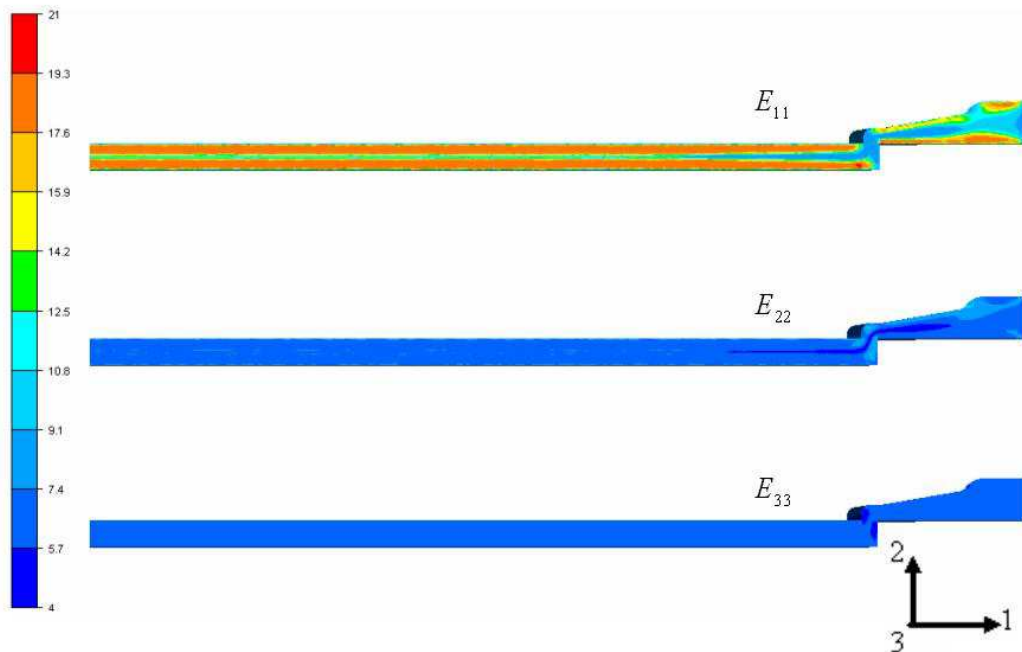


FIGURE 6.9 – distribution des modules de Young anisotropes en GPa

Au voisinage des parois du moule, les fibres sont orientées dans la direction de l'écoulement (direction 1), cette orientation induit une valeur maximale du module de Young E_{11} , qui est proche de la valeur du module de Young longitudinal E_1 (module de Young longitudinal dans le cas d'un composite isotrope transverse) est qui est d'environ $20GPa$. La valeur minimale de E_{11} est atteinte dans le centre du moule, lieu de fortes orientations transverses (ou valeur faible de a_{11}). Nous constatons donc, que la rigidité de la plaque tridimensionnelle, dans la direction 1, est plus importante aux voisinage des parois de la pièce que vers son centre. Les modules de Young E_{22} et E_{33} sont faibles par rapport à E_{11} , ce qui signifie que la plaque est plus rigide dans la direction 1 que dans les autres directions.

6.2.3.2 Sollicitation de la pièce

La plaque est maintenant soumise à une traction simple uniforme dans la direction 1, comme le montre la figure 6.10. La plaque encastrée près du seuil d'injection.

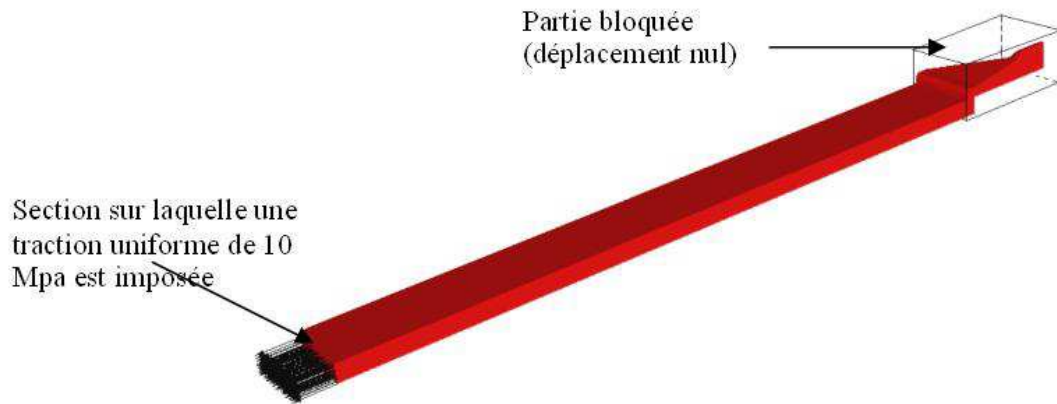


FIGURE 6.10 – Conditions aux limites imposées sur la plaque tridimensionnelle pour un test de déformation statique

La réponse mécanique de la pièce est obtenue en faisant appel au solveur élastique anisotrope. Le déplacement calculé est comparé à celui obtenu pour un renforcement isotrope. La figure 6.11 montre la distribution de la première composante du déplacement, u_1 , mesurée au long de l'axe 1 au plan de symétrie de la pièce :

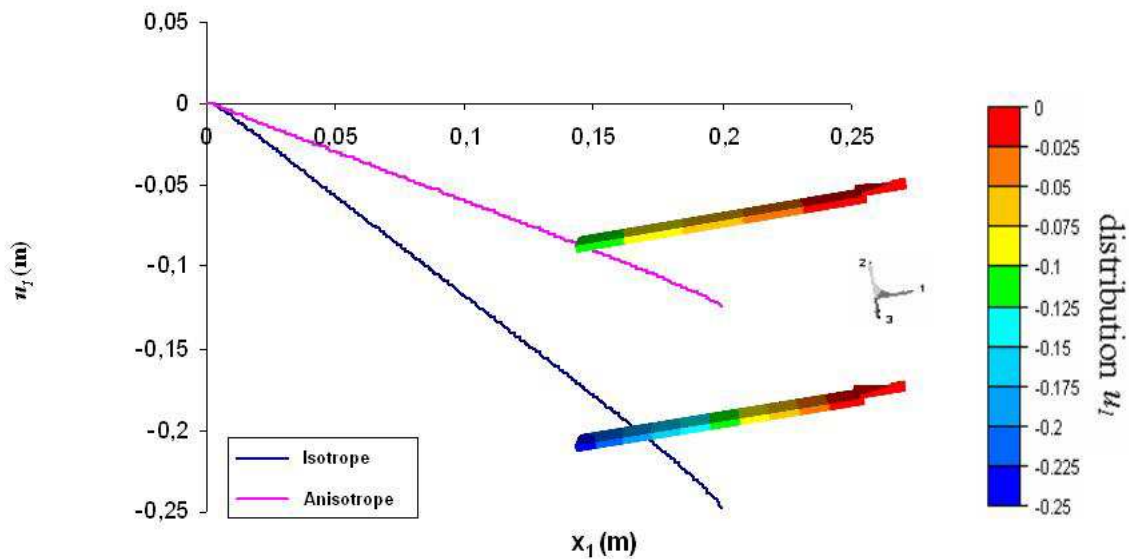


FIGURE 6.11 – composante u_1 du déplacement obtenue pour une distributions anisotrope et une distribution isotrope de fibres

Cette comparaison, entre distribution isotrope et distribution anisotrope induite par l'écoulement, est un argument supplémentaire pour la rigidité obtenue dans la

direction de l'écoulement pour une orientation anisotrope.

6.3 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons étudié le cas d'une plaque avec une géométrie particulière du seuil d'injection, renforcée de fibres. L'objectif était de prédire le comportement mécanique en fonction de l'état d'orientation que prennent les fibres à la fin du cycle d'injection.

Pendant la phase de prédiction de l'état d'orientation, nous avons comparé notre approche continue à l'approche discontinue et nous avons constaté un gain en précision ainsi qu'un gain en espace mémoire et en temps de calcul. Les résultats numériques ont été corrélés à l'expérience; nous avons obtenu des profils très semblables mais non confondus. Pour améliorer ces résultats, on doit jouer sur l'approximation de fermeture ainsi que le couplage rhéologie/orientation.

Par la suite, nous avons utilisé les outils numériques décrits dans les chapitres précédents pour la détermination des propriétés mécaniques anisotropes, en utilisant le modèle d'Advani et Tucker.

Les résultats présentés dans ce chapitre, montrent que l'on dispose bien d'un outil numérique, permettant de donner une estimation cohérente des propriétés mécanique avec la réalité et montrer que ces propriétés sont fortement liées au procédé d'injection.

Conclusion et perspectives

L'objet de cette étude est la prédiction par la simulation numérique de l'orientation des fibres dans les thermoplastiques chargés, et la prédiction du comportement mécanique à l'état solide. Cette étude depuis la partie injection, jusqu'à la partie simulation à l'état solide représente un enrichissement du code du calcul Rem3D, de par :

- ▷ La mise en place d'un module de calcul d'orientation utilisant une approche continue (interpolation P_1 en espace).
- ▷ La mise en place d'un solveur élastique isotrope et un solveur élastique anisotrope.
- ▷ La mise en place d'un module de prédiction des propriétés thermo-mécaniques des composites via la simulation de VER.

Calcul d'orientation en écoulement

Représentation d'un état d'orientation

Il existe principalement trois manières de représenter un état d'orientation de fibres :

- Représenter chaque fibre par un vecteur unitaire orienté selon l'axe de la fibre,
- Donner la probabilité de distribution de l'orientation
- Resumer l'information par les tenseurs d'orientation

La première description n'est pas pratique vu qu'un composite contient des dizaines (voir des centaines) de milliers de fibres, il est donc très difficile de toutes les représenter. Quant à la deuxième façon de décrire l'état d'orientation, la littérature a montré que l'implémentation des modèles faisant appel à ce descripteur, est très coûteuse en terme de ressources informatiques. Dans ces travaux nous avons opté pour les tenseurs d'orientation comme descripteur principal d'état d'orientation. Cette notation présente l'avantage d'être compacte et macroscopique.

Choix d'un modèle

Nous avons effectué une étude bibliographique sur les différents modèles macroscopiques décrivant l'orientation des fibres en écoulement. Cette étude nous a conduit à adopter le modèle de Folgar et Tucker qui présente l'avantage de prendre en compte l'interaction entre fibres. Ce modèle se présente sous forme d'une équation de convection réaction tensorielle.

Méthode numérique de résolution

Nous avons choisi de résoudre l'équation d'orientation par une formulation continue, basée sur une méthode du type Galerkin Standard et stabilisée par des méthodes du type SUPG ou RFB. Cette méthode a la caractéristique, pour un maillage donné, de produire une solution par noeud. La formulation continue a été comparée à la formulation discontinue (déjà implémentée sur Rem3D), et nous avons montré qu'on gagne en précision ainsi qu'en temps de calcul et en espace mémoire.

Prédiction du comportement à l'état solide

Le calcul d'orientation pendant l'écoulement est une étape indispensable pour la détermination du comportement mécanique du composite à l'état solide. L'orientation est supposée figée à la fin du remplissage et le tenseur d'orientation sera utilisé pour l'identification des propriétés du matériau à l'état solide. Nous avons supposé que ce comportement est thermo-élastique linéaire anisotrope, et que les tenseurs de raideur et dilatation thermique sont directement liés aux tenseurs d'orientation grâce au modèle d'Advani et Tucker. La difficulté principale du modèle d'Advani et Tucker est la détermination de cinq constantes mécaniques (b_1, \dots, b_5) et deux coefficients de dilatation thermique (P_1 et P_2). Ces sept paramètres peuvent être déterminés analytiquement ou numériquement.

Modèles analytiques

La littérature suggère, pour la détermination analytique des constantes thermo-élastiques de considérer tout d'abord un cas parfait où les fibres sont supposées toutes alignées selon une direction unique. Le modèle de Mori-Tanaka est, selon la littérature, le plus approprié pour le calcul des propriétés d'un tel composite. Les sept paramètres du modèle d'Advani et Tucker sont alors fonctions des propriétés unidirectionnelles du matériau. Les cas industriels les plus fréquents, utilisent des matériaux avec des renforcements en fibres allant jusqu'à 50% en poids (à peu près 31% en volume).

Approche numérique

L'approche numérique de détermination des propriétés thermo-élastiques que nous avons adopté est basée sur la sollicitation de volumes élémentaires représentatifs (VER). Nous sommes capables aujourd'hui de générer des VER et de contrôler la concentration volumique ainsi que l'orientation des fibres. Nous avons supposé dans notre étude que les fibres et la matrice ont chacune un comportement élastique. La sollicitation thermo-mécanique du VER permet de déterminer directement les paramètres b_1, \dots, b_5, P_1 et P_2 . Toutefois, cette approche est sensible principalement au maillage et au nombre de fibres dans l'échantillon. Il faut s'assurer que le maillage est suffisamment fin, et que le nombre de fibres est suffisamment élevé (mais pas trop élevé afin d'éviter un phénomène de recollement entre fibre qui est du au maillage) pour une bonne prédiction des propriétés thermo-élastiques.

Validation sur un cas industriel

La validation de notre étude a été effectuée sur le cas de la plaque avec seuil. Sur ce cas, nous avons déjà des résultats expérimentaux, sur le calcul du tenseur d'orientation, qui ont été effectués au Cemef. La corrélation était donc possible, et les résultats numériques étaient en concordance avec l'expérience. Sur ce cas, nous avons eu aussi la possibilité de voir un temps de calcul nettement moins important que celui obtenu par l'approche discontinue et qui existe déjà sur la version commerciale de Rem3D. La comparaison entre la solution numérique et la solution analytique nous a permis de relever des différences non-négligeables quant aux profils des composantes du tenseur d'orientation. Ces différences peuvent renvoyer sur les axes d'amélioration suivants :

- ▷ Meilleure modélisation de l'interaction entre fibres dans l'équation de Folgar et Tucker.
- ▷ Etude de l'influence des conditions aux limites en orientation sur l'évolution du profil en écoulement. Et par la suite un choix convenable des conditions aux limites.

Tout comme le modèle d'orientation de Folgar et Tucker, dans le modèle d'Advani et Tucker nous avons la présence d'un tenseur d'orientation de quatrième ordre. Ce tenseur nous l'avons exprimé en fonction du tenseur de second ordre à l'aide d'une équation de fermeture quadratique. Bienque les résultats sont cohérents avec la réalité, une étude de sensibilité sur les différentes équations de fermeture ainsi que leur impact sur le comportement mécanique peut s'avérer intéressante.

Perspectives

Comportements mécaniques plus riches à l'état liquide à l'état solide

La version recherche de Rem3D est capable aujourd'hui de prédire le comportement du composite depuis la phase moulage par injection jusqu'à la sollicitation thermo-mécanique à l'état solide. L'écoulement est régi par les équations de Navier Stokes alors que la réalité peut présenter des comportements plus compliqués. En effet, les polymères à l'état fondu ont un comportement visco-élastique. Nous pourrions proposer par la suite d'étudier l'effet d'un tel comportement ainsi que sur le couplage rhéologie-orientation sur l'orientation des fibres.

Une approche numérique d'homogénéisation étendue

Pour la validation de notre approche numérique d'estimation des propriétés thermo-élastiques, nous avons effectué les comparaisons par rapport au modèle analytique de Mori-Tanaka. Les résultats étaient assez proches, ce qui nous a permis de conclure que cette approche numérique permet de bien estimer les propriétés thermo-élastique du composite. La fiabilité de cette approche pour le cas élastique, lui permet d'être appliquée pour d'autres lois plus complexes à l'état solide. L'homogénéisation pourra ainsi être appliquée pour la détermination de lois élastoplastiques ou encore visco-élastiques à l'état solide.

Annexe A

Annexes A

A.1 Utilisation de l'équation de Folgar et Tucker pour la résolution du problème d'orientation de chaînes macromoléculaires

Selon McLeish et Larson [72], un polymère viscoélastique branché pourrait être considéré comme un ensemble de chaînes multi-modes (modèle Pom-Pom), où chaque mode représente le comportement d'une structure topologique particulière. McLeish et Larson ont considéré qu'une structure topologique monomodale est représentée par une branche centrale avec q branches à ses 2 extrémités. L'ensemble étant englobé dans un tube. Ce modèle décrit l'état du polymère branché par 3 variables moléculaires : l'étirement λ_e , l'orientation des chaînes $\underline{\underline{S}}$ et la pénétration des bras s_e (figure(A.1)).

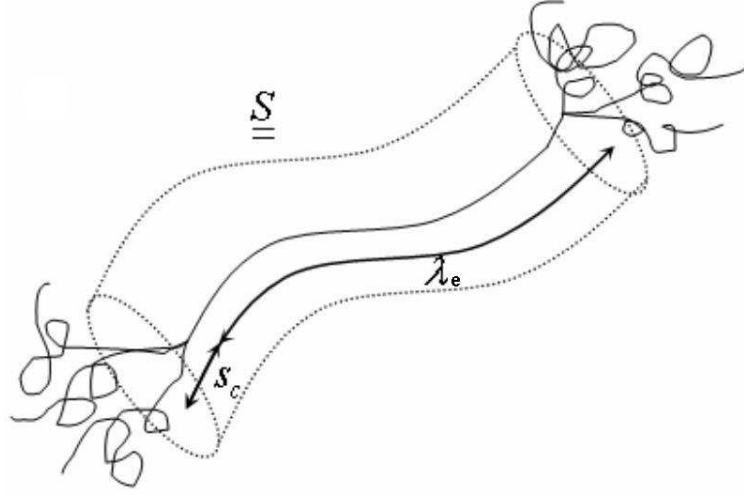


FIGURE A.1 – Structure topologique d'un polymère branché selon le modèle Pom-Pom[72]

L'orientation des chaînes est la moyenne spatiale quadratique du vecteur bout à bout de la chaîne. En écoulement, cette orientation $\underline{\underline{S}}$ suit l'équation d'évolution donnée par l'expression (2.32) :

$$\frac{\partial \underline{\underline{S}}}{\partial t} + \underline{\underline{v}} \cdot \nabla \underline{\underline{S}} + \underline{\underline{B}}_1 \cdot \underline{\underline{S}} + \underline{\underline{S}} \cdot \underline{\underline{B}}_2 + 2\lambda(\underline{\underline{S}} : \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{v}})) \cdot \underline{\underline{S}} + \frac{1}{\theta}(\underline{\underline{S}} - \frac{1}{d}\underline{\underline{1}}) = 0 \quad (\text{A.1})$$

Le paramètre λ est égal à un, et les paramètres $\underline{\underline{B}}_1$, $\underline{\underline{B}}_2$, et θ sont dans ce cas :

$$\begin{cases} \underline{\underline{B}}_1 = -\nabla \underline{\underline{v}} \\ \underline{\underline{B}}_2 = -\nabla \underline{\underline{v}}^T \\ \theta \text{ est le temps de relaxation de chaînes} \end{cases} \quad (\text{A.2})$$

Nous pouvons conclure que les mêmes méthodes numériques pourraient être employées pour résoudre deux problèmes physiques différents : le problème d'orientation de fibres et le problème d'orientation de chaînes macromoléculaires.

A.2 Equations de fermeture

- ▷ Approximation linéaire : c'est la plus ancienne des approximations. Établie par Hand [50], cette équation est exacte pour des faibles taux de cisaillement et une population de fibres orientée d'une façon aléatoire. Avec cette approximation, Toute composante du tenseur d'ordre 4 s'écrit :

$$a_{ijkl}^{lin} = -\frac{1}{35}(\delta_{ij}\delta_{kl} + \delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}) + \frac{1}{7}(a_{ij}\delta_{kl} + a_{ik}\delta_{jl} + a_{il}\delta_{jk} + a_{kl}\delta_{ij} + a_{jl}\delta_{ik} + a_{ik}\delta_{jl}) \quad (\text{A.3})$$

Ce modèle n'est pas performant pour des populations de fibres alignées [2].

- ▷ Approximation quadratique : toute composante du tenseur d'ordre 4 s'écrit :

$$a_{ijkl}^{quad} = a_{ij}a_{kl} \quad (\text{A.4})$$

Cette équation est exacte pour un écoulement avec des forts taux de cisaillement où toutes les fibres sont alignées dans une même direction[33]. Ce modèle est inadéquat pour des écoulements avec des faibles taux de cisaillement et lorsqu'il y a des zones où la répartition des fibres est isotrope [2]. Cependant, on remarque qu'avec cette approximation, le tenseur d'ordre 4, ne satisfait que 2 des 6 égalités présentés par l'équation(2.5).

- ▷ Approximation composite : Hinch et Leal [35] ont développé l'approximation composite dans le but de combiner les lois de fermeture linéaire et quadratique. Cette équation se présente comme suit :

$$a_{ijkl}^{comp} = \frac{2}{5}(\delta_{ij}a_{kl} + a_{ij}\delta_{kl}) - \frac{1}{5}a_{ij}a_{kl} + \frac{3}{5}(a_{ik}a_{jl} + a_{il}a_{jk}) - \frac{2}{5}\sum_{m=1}^3(\delta_{ij}a_{km}a_{ml} + a_{im}a_{jm}\delta_{kl}) \quad (\text{A.5})$$

Cette approximation est exacte pour les deux cas limites où l'orientation des fibres est isotrope et unidirectionnelle.

- ▷ Approximation hybride : cette approximation, établie par Advani et Tucker [2], est une autre façon de combiner les approximations de fermeture quadratique et linéaire :

$$a_{ijkl}^{hyb} = (1 - f)a_{ijkl}^{lin} + fa_{ijkl}^{quad}; \quad f = 1 - d^d \det(\underline{a}) \quad (\text{A.6})$$

f est un paramètre adimensionnel indépendant du repère de travail.

Advani et Tucker [1, 2] montrent que, globalement les approximations hybride et quadratique produisent des comportements physiques admissibles par rapport à la réalité. Néanmoins, sur l'ensemble des écoulements analysés, les 2 auteurs constatent que l'approximation hybride donne des résultats plus précis.

- ▷ Approximation orthotrope : l'idée de base de cette approximation [27] consiste à établir une expression orthotrope (les composantes extra-diagonales sont nulles) du tenseur du quatrième ordre. Ce tenseur a ainsi 9 composantes indépendantes. Si en plus les conditions de symétrie et de normalisation (équations (2.5) et (2.6)), le tenseur d'orientation d'ordre 4 n'aura ainsi que 3 composantes indépendantes ($a_{1111}, a_{2222}, a_{3333}$). Ces composantes s'expriment de la manière suivante :

$$a_{1111}^{orth} = f_1(a_{11}, a_{33}); \quad a_{2222}^{orth} = f_2(a_{11}, a_{33}); \quad a_{3333}^{orth} = f_3(a_{11}, a_{33}) \quad (\text{A.7})$$

Les fonctions f_1 , f_2 et f_3 ont été choisies par rapport à un écoulement particulier (cisaillement simple, écoulement en élongation,...) [27] où une solution exacte peut être calculée. Les valeurs des composantes indépendantes du tenseur d'ordre 4 sont alors :

$$\begin{pmatrix} a_{1111}^{orth} \\ a_{2222}^{orth} \\ a_{3333}^{orth} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.061 + 0.371a_{11} + 0.55a_{11}^2 - 0.369a_{33} + 0.318a_{11}^2 + 0.371a_{11}a_{33} \\ 1.229 - 2.05a_{11} + 0.822a_{11}^2 - 2.261a_{33} + 1.054a_{11}^2 + 1.82a_{11}a_{33} \\ 0.125 + 0.389a_{11} + 0.259a_{11}^2 - 0.086a_{33} + 0.796a_{11}^2 + 0.545a_{11}a_{33} \end{pmatrix} \quad (\text{A.8})$$

Le tenseur d'orientation d'ordre 4 fournit par la loi de fermeture orthotrope satisfait à toutes les conditions de symétrie et de normalisation données par les équations (2.5) et (2.6). Cependant, pour des petites valeurs du coefficient D_r , ce modèle peut produire des résultats physiquement inacceptables, comme a été montré dans les travaux de Megally [73] pour la détermination du coefficient a_{1212} .

- ▷ Approximation naturelle : Lipscomb et al. [67] ont montré que si, pour un écoulement donné, $D_r = 0$ alors il y a une relation directe entre les tenseurs d'orientation du second et du quatrième ordre. Verleye et Dupret [96] ont utilisé cette relation et ont proposé une approximation de fermeture dite "naturelle". Pour une orientation plane, cette approximation est donnée par :

$$a_{ijkl}^{nat} = -\frac{1}{6} \det(\underline{a}) (\delta_{ij}\delta_{kl} + \delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}) + \frac{1}{7} (a_{ij}a_{kl} + a_{ik}a_{jl} + a_{il}a_{jk} + a_{ik}a_{jl}) \quad (\text{A.9})$$

Cette approximation est exacte mais n'est valable que pour des distributions planes (en dimension 2).

L'utilisation des différentes approximations de fermeture donne des valeurs différentes du $\underline{\underline{a}}$ après son intégration en fonction de \underline{a} , et le choix de la meilleure approximation a fait l'objet de nombreux travaux [4, 11, 95]. Les performances des équations de fermetures ont été testées [85, 73] par rapport à des écoulements simples (écoulement en élongation, écoulement en cisaillement,...), comme le montre la figure (A.2).

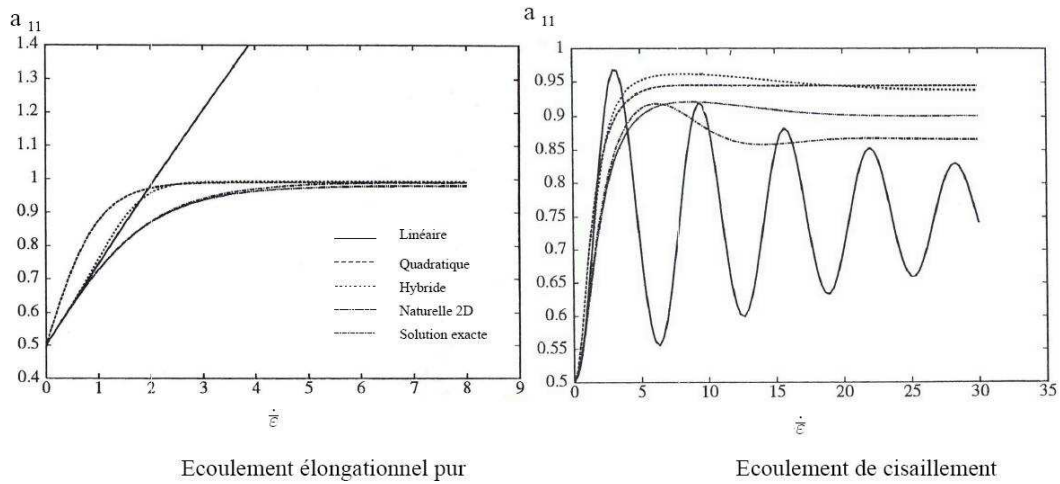


FIGURE A.2 – profil de la composante a_{11} en fonction du taux de cisaillement, avec un coefficient $C_I = 0.01$ [95]

Pour des applications bidimensionnelle, l'approximation naturelle donne les meilleurs résultats puisqu'elle est exacte.

Les meilleures approximations en dimension trois sont les approximations quadratique et hybride qui produisent en général des comportement physiques admissibles.

Annexe B

Annexes B

B.1 Expression du tenseur d'Eshelby dans un milieu isotrope

Pour un composite dont la matrice est élastique isotrope, Brown et Clarke[22]et Mura[77]ont établie l'expression du tenseur d'Eshelby dépendante des paramètres de l'ellipsoïde s_1, s_2 et s_3 :

✓ Si $s_2 = s_3 < s_1$:

$$\left\{ \begin{array}{l} E_{1111} = \frac{1}{2(1-\nu_m)} \left[1 - 2\nu_m + \frac{3\beta^2-1}{\beta^2-1} - (1 - 2\nu_m + \frac{3\beta^2}{\beta^2-1})g \right] \\ E_{2222} = E_{3333} = \frac{3}{8(1-\nu_m)} \frac{\beta^2}{\beta^2-1} + \frac{1}{4(1-\nu_m)(1-2\nu_m - \frac{9}{4(\beta^2-1)})g} \\ E_{2233} = E_{3322} = \frac{1}{4(1-\nu_m)} \left[\frac{\beta^2}{2(\beta^2-1)} - (1 - 2\nu_m + \frac{3}{4(\beta^2-1)})g \right] \\ E_{2211} = E_{3311} = \frac{1}{2(1-\nu_m)} \frac{\beta^2}{\beta^2-1} + \frac{1}{4(1-\nu_m)(-1+2\nu_m + \frac{9\beta^2}{\beta^2-1})g} \\ E_{1122} = E_{1133} = \frac{1}{2(1-\nu_m)} \left(1 - 2\nu_m + \frac{1}{\beta^2-1} \right) + \frac{1}{2(1-\nu_m)} \left(1 - 2\nu_m + \frac{3}{\beta^2-1} \right)g \\ E_{2323} = E_{3232} = \frac{1}{4(1-\nu_m)} \left[\frac{\beta^2}{2(\beta^2-1)} + (1 - 2\nu_m - \frac{3}{4(\beta^2-1)})g \right] \\ E_{1212} = E_{1313} = \frac{1}{4(1-\nu_m)} \left[1 - 2\nu_m + \frac{\beta^2+1}{\beta^2-1} - \frac{1}{2} \left(1 - 2\nu_m + \frac{3(\beta^2-1)}{\beta^2-1} \right)g \right] \end{array} \right.$$

où le scalaire g vaut :

$$g = \frac{\beta}{(\beta^2 - 1)^{3/2}} (\beta(\beta^2 - 1)^{1/2} - a \cos(\beta))$$

Les autres composantes du tenseur d'Eshelby sont nulles

✓ Si $s_1 = s_2 > s_3$ (sphéroïdes aplatis) :

Le rapport de forme des particules est dans ce cas : $\beta = \frac{s_3}{s_1}$

$$\left\{ \begin{array}{l} E_{1111} = E_{2222} = \frac{1}{8\pi(1-\nu_m)} \left[3\left(\pi - \frac{I_1 - I_3}{4(\beta^2 - 1)}\right) + (1 - 2\nu_m)I_1 \right] \\ E_{3333} = \frac{1}{8\pi(1-\nu_m)} \left[4\pi - 2\beta^2 \frac{I_1 - I_3}{\beta^2 - 1} - (1 - 2\nu_m)I_3 \right] \\ E_{1122} = E_{2211} = \frac{1}{8\pi(1-\nu_m)} \left[\pi - 2\beta^2 \frac{I_1 - I_3}{4(\beta^2 - 1)} - (1 - 2\nu_m)I_1 \right] \\ E_{1133} = E_{2233} = \frac{1}{8\pi(1-\nu_m)} \left[\beta^2 \frac{I_1 - I_3}{\beta^2 - 1} - (1 - 2\nu_m)I_1 \right] \\ E_{3311} = E_{3322} = \frac{1}{8\pi(1-\nu_m)} \left[\frac{I_1 - I_3}{\beta^2 - 1} - (1 - 2\nu_m)I_3 \right] \\ E_{1212} = \frac{1}{8\pi(1-\nu_m)} \left[\pi - \frac{I_1 - I_3}{4(\beta^2 - 1)} - (1 - 2\nu_m)I_1 \right] \\ E_{2323} = E_{1313} = \frac{1}{16\pi(1-\nu_m)} \left[(1 + \beta^2) \frac{I_1 - I_3}{\beta^2 - 1} + (1 - 2\nu_m)(I_1 + I_3) \right] \end{array} \right.$$

Les autres composantes étant nulles, et les coefficients I_1 et I_3 valent respectivement :

$$I_1 = \frac{2\pi\beta}{(1-\beta)^{1/2}} (a \cos(\beta) - \beta(1-\beta^2)^{1/2}); I_3 = 4\pi - 2I_1$$

✓ Si $s_1 = s_2 = s_3$ (particules sphériques) :

$$\begin{cases} E_{1111} = E_{2222} = E_{3333} = \frac{7-5\nu_m}{15(1-\nu_m)} \\ E_{1212} = E_{1313} = E_{2233} = E_{3322} = E_{2211} = E_{3311} = \frac{5\nu_m-1}{15(1-\nu_m)} \\ E_{1212} = E_{1313} = E_{2323} = E_{3232} = \frac{4-5\nu_m}{15(1-\nu_m)} \end{cases}$$

B.2 Expression du tenseur d'Eshelby dans un milieu isotrope transverse

Le tenseur d'Eshelby dans un milieu isotrope transverse est donné par :

$$E_{ijkl} = \frac{1}{8\pi} C_{pqmn} (\bar{G}_{ipjq} + \bar{G}_{jpiq})$$

Les différentes composantes du tenseurs $\bar{\underline{\underline{G}}}$ ont été calculées par Lin et Mura[66]et sont comme suit :

$$\left\{ \begin{array}{l} \bar{G}_{1111} = \bar{G}_{2222} = \frac{\pi}{2} \int_0^1 H(x)(1-x^2)[(C_{44}(1-x^2) + C_{33}\beta^2x^2)((3\frac{C_{11}-C_{12}}{2} \\ + C_{11})(1-x^2) + 4C_{44}\beta^2x^2) - (C_{13} + C_{44})^2\beta^2x^2(1-x^2)]dx \\ \bar{G}_{3333} = 4\pi \int_0^1 H(x)\beta^2x^2((C_{11}(1-x^2) + C_{44}\beta^2x^2)(\frac{C_{11}-C_{12}}{2}(1-x^2) + C_{44}\beta^2x^2)dx \\ \bar{G}_{1122} = \bar{G}_{2211} = \frac{\pi}{2} \int_0^1 H(x)(1-x^2)[(C_{44}(1-x^2) + C_{33}\beta^2x^2)((\frac{C_{11}-C_{12}}{2} + 3C_{11}) \\ (1-x^2) + 4C_{44}\beta^2x^2) - 3(C_{13} + C_{44})^2\beta^2x^2(1-x^2)]dx \\ \bar{G}_{1133} = \bar{G}_{2233} = 2\pi \int_0^1 H(x)\beta^2x^2[((C_{11} + \frac{C_{11}-C_{12}}{2})(1-x^2) + 2C_{44}\beta^2x^2)(C_{44}(1-x^2) \\ + C_{33}\beta^2x^2) - (C_{13} + C_{44})^2\beta^2x^2(1-x^2)]dx \\ \bar{G}_{3311} = \bar{G}_{3322} = 2\pi \int_0^1 H(x)(1-\beta^2)((C_{11}(1-x^2) + C_{44}\beta^2x^2)(\frac{C_{11}-C_{12}}{2}(1-x^2) + \\ C_{44}\beta^2x^2)dx \\ \bar{G}_{1212} = \frac{\pi}{2} \int_0^1 H(x)(1-\beta^2)[(C_{13} + C_{44})\beta^2x^2(1-\beta^2) - (C_{11} - \frac{C_{11}-C_{12}}{2}) \\ (C_{44}(1-x^2) + C_{44}\beta^2x^2)]dx \\ \bar{G}_{1313} = \bar{G}_{2323} = -2\pi \int_0^1 H(x)(1-\beta^2)\beta^2x^2(C_{13} + C_{44})(\frac{C_{11}-C_{12}}{2}(1-x^2) + C_{44}\beta^2x^2)dx \end{array} \right.$$

Les autres composantes du tenseur $\bar{\underline{\underline{G}}}$ sont nulles, et la fonction $H(x)$ est définie par :

$$H^{-1}(x) = \frac{((\frac{C_{11}-C_{12}}{2}(1-x^2))[(C_{11}(1-x^2) + C_{44}\beta^2x^2)(C_{44}(1-x^2) + C_{33}\beta^2x^2) - (C_{13} + C_{44})^2\beta^2x^2(1-x^2)]}{(C_{13} + C_{44})^2\beta^2x^2(1-x^2)}$$

Bibliographie

- [1] S.G. Advani and C.L. Tucker. The use of tensors to describe and predict fiber orientation in short fiber composites. *Journal of Rheology*, 31(1) :751–784, 1987.
- [2] S.G. Advani and C.L. Tucker. Closure approximations for three-dimensional structure tensors. *Journal of Rheology*, 34 :367, 1990.
- [3] A. Ahmed and A. N. Alexandrou. Unsteady flow of semi-concentrated suspensions using finite deformation tensors. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 55 :115–136, 1994.
- [4] M. C. Altan, S. G. Advani, S. G. Guceri, and R. B. Pipes. Description of the orientation state for fiber suspensions in homogeneous flows. *Journal of Rheology*, 33 :1289–1155, 1989.
- [5] M. C. Altan, S. S. Selcuk, I. Guceri, and R. B. Pipes. Numerical prediction of three-dimensional fiber orientation in hele-shaw flows. *Polym. Eng. Sci.*, 30 :848–859, 1990.
- [6] T.C. Papanastasiou A.N. and Alexandrou. Isothermal extrusion of non-dilute fiber suspensions. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 25 :313–328, 1987.
- [7] D. Arnold, F. Brezzi, and M. Fortin. A stable finite element for stokes equations. *Calcolo*, 21 :337–344, 1984.
- [8] J.E. Ashton, J.C. Halpin, and P.H. Petit. Primer on composite analysis. Technical Report Chapter 5, Stamford, Conn., 1969.
- [9] G.K Batchelor. Slender-body theory for particules of arbitrary cross-section in stokes flow. *Journal of Fluid Mechanics*, 44 :419, 1970.
- [10] G.K Batchelor. The stress generated in a non dilute suspension of elongated particles by pure straining motion. *Journal of Fluid Mechanics*, 46 :813–829, 1970.
- [11] R. S. Bay. *Fiber orientation in injection molded composites : A comparai-son of theory and experiment*. PhD thesis, University of Illinois at Urbana-Champaign, 1991.
- [12] R. S. Bay and C. L. Tucker III. Fiber orientation in simple injection moulding. part ii : Experimental results. *Polymer Composite*, 13 :332–341, 1992.

- [13] R.S Bay and C.L III Tucker. Fiber orientation in simple injection moulding. part i : Theory and numerical methods. *Polymer Composite*, 13 :317, 1992.
- [14] G. Beaume. *Modélisation et simulation numérique directe de l'écoulement d'un fluide complexe*. Thèse Ecole des Mines de Paris, 2008.
- [15] F. Bedoui. *Etude du comportement élastique et viscoélastique linéaire des polymères semi-cristallins par approche micromécanique*. Thèse de l'ENSAM de Paris, 2005.
- [16] Y. Benveniste. A new approach to the application of mori-tanaka's theory in composite materials. *Mechanics of Materials*, 6 :147–157, 1987.
- [17] F. Brezzi and M. Fortin. *Mixed and Hybrid Finite Element Methods*. New York, Inc. Springer-Verlag, 1991.
- [18] F. Brezzi, L. P. Franca, and A. Russo. Further considerations on residual free bubbles for advective-diffusive equations. *Computer Methods in Applied Mechanics*, 166 :25–33, 1998.
- [19] P. F. Bright and M. W. Darlington. Factors influencing fiber orientation and mechanical properties in fibre reinforced thermoplastics injection moldings. *Plastics and Rubber Processing and Application*, 1 :139–147, 1981.
- [20] P.F Britgh, F.Crowson, and M.J Flokes. A study of the effect or injection speed on fibre orientation in simple moulding of short glass fiber-filled polypropylene. *Journal of Material Sciences*, 13 :2497, 1978.
- [21] A. N. Brooks and T. J. R. Hughes. Streamline upwind/petrov galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible navier-stokes equations. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 32 :199–259, 1982.
- [22] L.M. Brown and D.R. Clarke. Work hardening due to internal stresses in composite materials. *ActaMetall*, 23 :821–830, 1975.
- [23] T.W. Chou, S Nomura, and M. Taya. A self-consistent approach to the elastic stiffness of short-fiber composites. *J. Compos Mater*, 14 :178–188, 19780.
- [24] R.M. Christensen and F.M. Waals. Effective stiffness of randomly oriented fiber composites. *J. Composite Materials*, 6 :518–532, 1972.
- [25] B. Chung and C.Cohen. Glass fiber filled thermoplastics i. wall and processing effects on rheological properties. *Polymer Engineering Sciences*, 25 :1001, 1985.
- [26] D. H. Chung and T. H. Kwon. Fiber orientation in the processing of polymer composites. *Korea-Australia Rhology Journal*, 14(4) :175–188, 2002.
- [27] J.S. Cintra and C.L. Tucker. Orthotropic closure approximations for flow induced fiber orientation. *Journal of Rheology*, 39 :1095, 1995.
- [28] T. Coupez. Stable-stabilized finite element for 3d forming calculation. Technical Report Chapter 5, Internal Report, 1996.

- [29] T. Coupez. Réinitialisation convective et locale des fonctions level set pour le mouvement de surfaces et d'interfaces. Technical report, Journées Activités Universitaires de Mécanique La Rochelle, 2006.
- [30] T. Coupez, J. Bruchon, , and S. Batkam. Complex free surface and interface dynamics in material forming computation. Technical Report 233, fifth World Congress on computational Mechanics, Vienna, Austria., 2002.
- [31] R.G Cox. The motion of long slender bodies in a viscous fluid. part i : General theory. *Journal of Fluid Mechanics*, 44 :791, 1970.
- [32] S.M Dinh and R.C Amstrong. A rheological equation of state for semi-concentrated fiber suspensions. *Journal of Rheology*, 28 :207, 1984.
- [33] M. Doi. Molecular dynamics and rheological properties of concentrated solutions of rodlike polymers in isotropic and liquid crystalline phases. *J. Polym. Sci. Polym. Phys.*, 19 :229, 1981.
- [34] D. Dray. *Prédiction des propriétés thermo-élastiques d'un composite injecté et chargé de fibres courtes*. Thèse Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Metiers, 2006.
- [35] L. G. Leal E. J. Hinch. Constitutive equations in suspension mechanics. part2. approximate forms for a suspension of rigid particles affected by brownian rotations. *Journal of Fluid Mechanics*, 76 :187, 1976.
- [36] J.D. Eshelby. The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion and related problems. *Proc Roy Soc A*, 241 :376–396, 1957.
- [37] J.D. Eshelby. Elastic inclusions and inhomogeneities, in : Sneddon in, hill r, editors. *Progress in Solid Mechanics*, 2 :89–140, 1961.
- [38] G. Facca, T. Kortschot, and N. Yan. Predicting the elastic modulus of natural fibre reinforced thermoplastics. *Composites, Part A : applied science and manufacturing*, 37 :1660–1671, 2006.
- [39] X.J. Fan, N. Phan-Thien, and R. Zheng. A direct numerical simulation of fibre suspensions. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 74 :113–135, 1998.
- [40] F. Folgar and C.L. Tucker. Orientation behavior of fibers in concentrated suspensions. *Journal of Reinforced Plastics and Composites*, 3 :98–119, 1984.
- [41] L.P. Franca and A. Russo. On petrov-galerkin formulations for the linear hyperbolic equation, appeared with the title "recovering supg using petrov-galerkin formulations enriched with adjoint residula-free bubbles".
- [42] K. Friedrich, D.E Spahr, and R.S Bailey. Microstructure and fracture behavior of short and long fiber reinforced polypropylene composite.
- [43] S.Y. Fu and B. Lauke. The elastic modulus of misaligned short fibre reinforced polymers. *Compos. Sci.*, 58 :389–400, 1998.

- [44] H. Giesekus. *Rheologica Acta*, 2 :50, 1962.
- [45] M. Gupta and K.K. Wang. Process induced fibre orientation : numerical simulation with experimental verification. *Polymer Composites*, 6 :82, 1984.
- [46] M. Gupta and K.K. Wang. Fibre orientation and mechanical properties of short-fibre-reinforced injection-molded composites : simulation and experimental results. *Polymer Composites*, 58(5), 1993.
- [47] J.C. Halpin. Elastic and expansion estimates for oriented short fiber composites. *J. composite materials*, 3 :732–734, 1969.
- [48] J.C. Halpin and J.L. Kardos. The halpin-tsai equations : a review polymer engineering and science. *J. composite materials*, 16 :344–352, 1976.
- [49] J.C. Halpin and N. J. Pagano. The laminate approximation for randomly oriented fibrous composites. *J. composite materials*, 3 :720, 1969.
- [50] G.L. Hand. A theory of anisotropic fluids. *Journal of Fluid Mechanics*, 13 :33–46, 1962.
- [51] A.V. Hershey. The elasticity of an isotropic aggregate of anisotropic cubic crystals. *J. Appl. Mechanics*, 21 :236–241, 1954.
- [52] R. Hill. Properties of reinforced solids : some theoretical principles. *Mech Phys Solids*, 11 :357–372, 1963.
- [53] J.H. Huang. Some closed-form solutions for effective moduli of composites containing randomly oriented short fibers. *Materials Science and Engineering*, 315 :11–20, 2001.
- [54] C.L. Tucker III and E. Liang. Stiffness predictions for unidirectional short-fiber composites : review and evaluation. *Composites Science and Technology*, 59(5) :655–671, 1999.
- [55] G.B. Jeffrey. The motion of ellipsoidal particules in a viscous fluid. *Proceeding Royal Society of London*, A102 :161–179, 1922.
- [56] K. K. Kabanemi and J. F. Héту. Modeling and simulation of nonisothermal effects in injection molding of rigid fiber suspensions. *Journal of Injection Molding Technology*, 3 :80–87, 1999.
- [57] K. K. Kabanemi, J. F. Héту, and A. Garcia-Rejon. Numerical simulation of the flow and fiber orientation in reinforced thermoplastic injection molded products. *Intern. Polymer Processing*, 2 :182–191, 1997.
- [58] P.A. Kakavas, N.K. Anifantis, and G.C. Papanicolaou. The role of imperfect adhesion on thermal expansivities of transversely isotropic composites with an inhomogeneous interphase. *Composites Part A*, 29 :1021–1026, 1998.
- [59] M.R Kamal and T.D Papathanasiou. Filling of a complex-shaped mould with a viscoelastic polymer ,part ii : a comparaisn with experimental data. *Polymer Engineering Sciences*, 33 :410, 1993.

- [60] S. Kenig. Fiber orientation development in moulding of polymer composites. *Polymer Composite*, 7(1) :50, 1986.
- [61] O. Klaas, A. Maniatty, and M. S. Shephard. A stabilized mixed finite element method for finite elasticity. : Formulation for linear displacement and pressure interpolation. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 1-2 :65–79, 1999.
- [62] R. Lanrivain, L. Silva, and T. Coupez. Approche biphasique du changement de phase avec interaction liquide-solide. *Résumé pour le 1er colloque du GDR interactions fluide-structure*, 26-27 septembre 2005.
- [63] M. Levesque. Modélisation du comportement mécanique de matériaux composites viscoélastiques non linéaires par une approche d'homogénéisation. 2004.
- [64] V.M. Levin. Thermal expansion coefficients of heterogeneous materials. *Mekhanika Tverdogo Tela*, 2 :88–94, 1967.
- [65] G. Lielens, P. Pirotte, A. Courniot, F. Dupret, and R. Keunigs. Prediction of thermo-mechanical properties of compression-moulded composites. *Composites Part A*, 29 :63–70, 1998.
- [66] S.C. Lin and T. Mura. Elastic fields of inclusions in anisotropic media (ii). *Phys Stat Sol (a)*, 15 :281–285, 1973.
- [67] G.G. Lipscomb, M.M. Denn, D.U. Hur, and D.V. Boger. The flow of fiber suspensions in complex geometries. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 26 :297, 1988.
- [68] G.G. Lipscomb, R. Keunigs, G. Marucci, and M.M. Denn. A continuum theory for fiber suspensions. *Proc. IX Int. Congress on rheology*, 2 :497–499, 1984.
- [69] J.F. Luyé. Etude thermophysique du refroidissement du polypropylène injecté. 1999.
- [70] M.B. Makaplow and E.S.G. Shaqfeh. A numerical study of the rheological properties of suspensions of rigid, non-brownian fibers. *Journal of fluid mechanics*, 329 :155–186, 1996.
- [71] M. A. Martínéz, E. Cueto, M. Doblaré, and F. Chinesta. Natural element meshless simulation of flows involving short fiber suspensions. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, pages 51–78, 2003.
- [72] T. McLeish and R. Larson. Molecular constitutive equations for a class of branched polymers : the pom-pom polymer. *Journal of Rheology*, 42 :81–110, 1998.
- [73] A. Megally. *Etude et Modélisation de l'orientation de fibres dans les thermoplastiques renforcés*. Thèse Ecole des Mines de Paris, 2005.
- [74] B. Mlekusch. Thermoelastic properties of short-fibre-reinforced thermoplastics. *Composites Science and Technology*, 59 :911–923, 1999.

- [75] I. Monton. *Modelización Numérica Tridimensional de la Inyección de Termoplásticos reforzados con Fibras Cortas*. PhD thesis, Universidad Politecnica de Valencia, 2004.
- [76] T. Mori and K. Tanaka. Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions. *Acta Metall*, 21 :571–574, 1973.
- [77] T. Mura. *Micromechanics of defects in solids*. Martinus Nijhoff Publishing, La Hague. Boston, Londres, 1991.
- [78] N. Phan-Thien N., X. J. Fan, and R. I. Tanner. Folgar-tucker constant for a fiber suspension in a newtonian fluid. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 103 :251–260, 2002.
- [79] G. Odegard and M. Kumosa. Elastic-plastic and failure properties of a unidirectional graphite/pmr-15 composite at room and elevated temperatures. *Composites Science and Technology*, 60 :2979–2988, 2000.
- [80] D.F. O'Regan, M. Akay, and B. Meenan. A comparison of young's modulus predictions in fibereinforced- polyamide injection mouldings. *Composites Science and Technology*, 59 :419–427, 1999.
- [81] S. Osher and J. Sethian. Fronts propagating with curvature dependent speed : algorithms based on hamilton-jacobi formulations. *Journal of Computational Physics*, 79 :12–49, 1988.
- [82] P. Gérard P. and J. Pabiot. Maîtrise technologique de la répartition et de l'orientation des fibres dans les pièces injectées en composites thermoplastiques.
- [83] S. Prager. Stress-strain relation in a suspension of dumbbells. *Trans. Soc. Rheol.*, 1 :53, 1994.
- [84] Y.P. Qiu and G.J. Weng. On the application of mori-tanaka's theory involving transversely isotropic spheroidal inclusions. *Int. J. Engng. Sci.*, 28(11) :1121–1137, 1990.
- [85] A. Redjeb. *Simulation numérique de l'orientation de fibres en injection de thermo-plastiques renforcés*. Thèse Ecole des Mines de Paris, 2007.
- [86] A. Reuss. Berechnung des fließgrense von mischkristallen auf grund der plastizitätsbedingung für einkristalle, zeitschrift für angewandte mathematik und mechanik. *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik*, 9 :49–58, 1929.
- [87] J. Rosenberg, M. M. Denn M. M., and R. Keunings. Simulation of non-recirculating flows of dilute fiber suspensions. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 37 :317–345, 1990.
- [88] P. Rupnowski, M. Gentz, and M. Kumosa. Mechanical response of a unidirectional graphite fiber/polyimide composite as a function of temperature. *Comp. Science and Technology*, 66 :1045–1055, 2006.

- [89] R.A. Shapery. Thermal expansion coefficients of composite materials based on energy principles. *J. Composite Materials*, 2(3) :380–404, 1968.
- [90] J. C. Smith. Experiment values for elastic constants of a particulate-filled flassy polymer. *Journal of Research of the National Institute of Standards and Technology*, 80 :45–49, 1976.
- [91] G.P. Tandon and G.J. Weng. The effect of aspect ratio of inclusions on the elastic properties of unidirectionally aligned composites. *Polymer Composites*, 5(4) :327–333, 1984.
- [92] M. Taya, M.L. Dunn, B. Derby, and J. Walker. Thermal residual stress in a two-dimensional in-plane misoriented short fiber composite. *Appl. Mech. Rev.*, 43 :S294–S303, 1990.
- [93] S.W. Tsai and N.J. Pagano. Invariant properties of composite materials, composite materials workshop, ed. by tsai, halpin and pagano. Technical Report 233, Technomic Publishing Co., Stamford, Conn., 1969.
- [94] C.L. Tucker. Flow regimes for fibers suspensions in narrow gaps. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 39 :239–268, 1991.
- [95] V. Verleye. *Simulation Numérique de l'orientaiton de fibres en moulage par injection de pièces complexes en matériaux composite*. PhD thesis, Université de Catholique, 1995.
- [96] V. Verleye and F. Dupret. Prediction of fiber orientation in complex injection molded parts. *Proceedings of the ASME Winter Annual Mtg., November 28-December 3, New Orleans, LA*.
- [97] M. Vincent and J.F. Agassant. Experimental study and calculations of short glass fibre orientation in centre gated moulded disks. *Polymer Composites*, 7 :73–83, 1986.
- [98] M. Vincent, T. Giroud, A. Clarke, and C. Eberhardt C. Description and modeling of fiber orientation in injection molding of fiber reinforced thermoplastics. *Polymer*, 46 :6719–6725, 2005.
- [99] M. Vincent, A. Redjeb, P. Laure, and T. Coupeuz. moulding of short fiber reinforced thermoplastics : a comparaison between experimental results and numerical simulation. *ECCM 12, Biarritz, France*, 2006.
- [100] W. Voigt. Lehrbuch der krisallphysik. Technical Report 38, Teubner, Berlin, 1910.
- [101] W. Voigt. Uber die beziehung zwischen den beiden elastizitätskonstanten isotroper körper. *Wied. Ann*, 38 :573, 1889.
- [102] S. Yamamoto and T. Matsuoka. A method for dynamic simulation of rigid and flexible fibers in flow field. *J. Chem. Phys.*, 98(1), 1993.

- [103] Y. Yamane, Y. Kaneda Y., and M. Dio. Numerical simulation of semi-dilute suspension of rodlike particules in shear flow. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 54 :405–421, 1994.

