

Luisa Alexandra ROCHA DA SILVA

Groupe Calcul Intensif en Mise en Forme
Centre de Mise en Forme des Matériaux - UMR 7635
École des Mines de Paris

Approches **multiphysiques** et **multiéchelles** pour le **calcul des écoulements** de « polymères complexes »
Applications en injection de polymères

Thierry COUPEZ
Patrice LAURE

Alexandra MEGALLY
Abla REDJEB
Grégory BEAUME

Modélisation et calcul scientifique en mécanique des fluides

Luisa Alexandra ROCHA DA SILVA

Ingénieur en Mécanique (Univ.Porto, Portugal)

num.: éléments finis et calcul de structures

appl.: polymères et composites à matrice polymérique

Master in Science en Mécanique (Univ.Porto, Portugal)

num.: volumes finis et CFD (calcul en mécanique des fluides)

appl.: calcul d'écoulements avec des phénomènes de transport

Doctorat en *Mécanique Numérique (École des Mines de Paris)*

Simulation d'écoulements viscoélastiques et compressibles par EF

Mathématiques
Appliquées

Analyse
Numérique

Calcul
Scientifique en
Mécanique des
Fluides
Complexes

✚ *prob.*: calcul d'écoulements de **fluides** complexes

✚ *num.*: formulation eulérienne et A.L.E.

EDP: système couplé **elliptique - hyperbolique**

éléments finis mixtes 3D à 3 et 4 champs

éléments finis **4D** (espace-temps)

approximations continues et discontinues (G et GD)

instabilités numériques et techniques de **stabilisation**

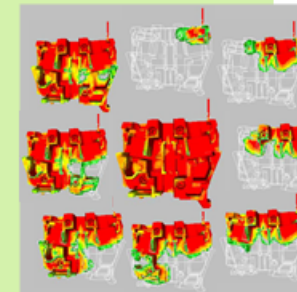
grands systèmes d'équations

✚ *phys.*: incompressible et faiblement compressible

viscoélasticité et implémentation de modèles moléculaires

résolution numérique d'eq. hyperboliques (Conv-Diff-React)

champs –solution scalaires et tensorielles



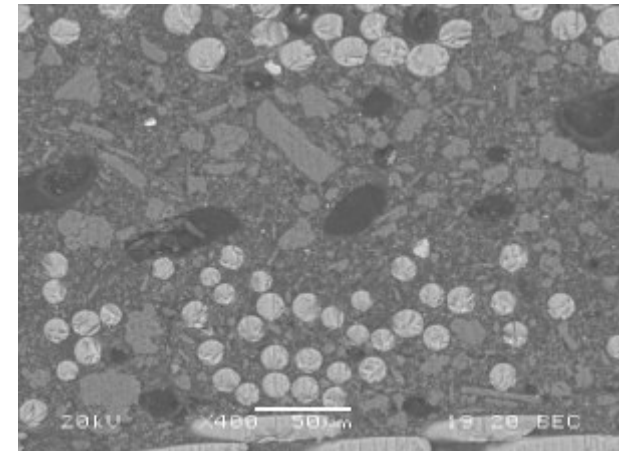
Matériaux :

Fluides viscoélastiques
Thermoplastiques et thermodurcissables chargés
BMCs
Mousses



Exemple d'application:

Injection de thermoplastiques chargés de fibres courtes



Composition :

- Résine thermodurcissable (20/25%)
- Fibres de renfort (20%)
- Nodules thermoplastiques (5 %)
- Charges minérales (50 %) : alumine, carbonate de calcium

Objectif meso/microscopique:

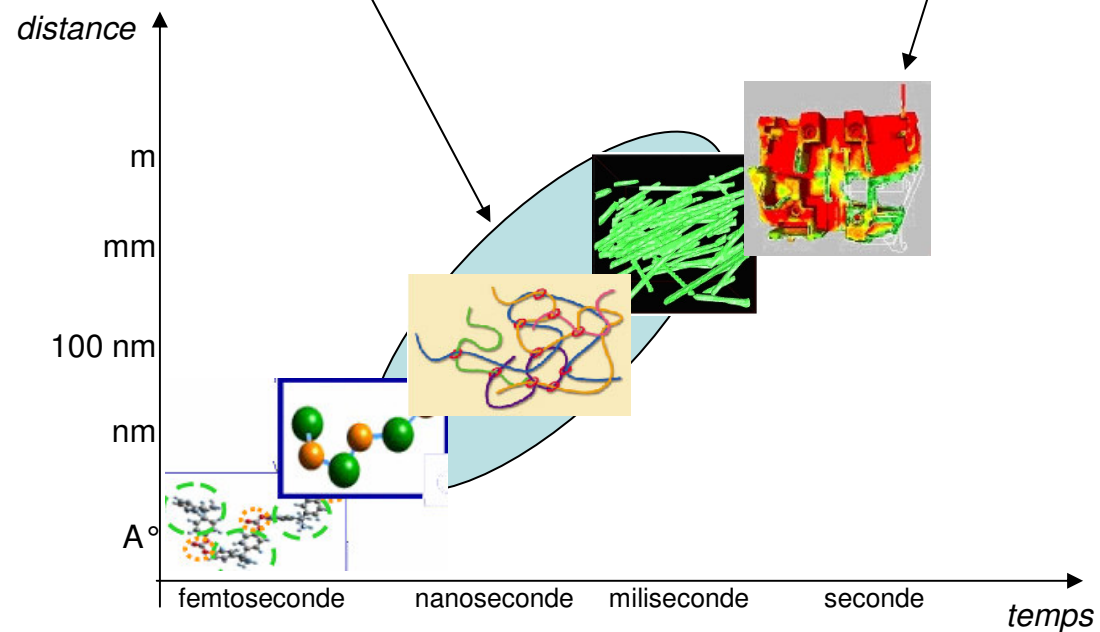
Décrire le comportement par connaissance directe de
la structure moléculaire du polymère
les interactions des chaînes
l'influence des charges

Outil de **rhéologie numérique**

Objectif macroscopique:

Calcul, par **éléments finis**, des **écoulements** de fluides complexes (multiphasés, anisotropes, ...)

Outil de **simulation** en mise en forme



Objectif meso/microscopique:

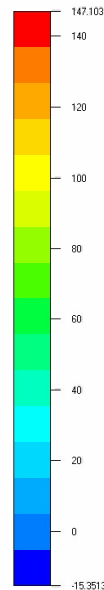
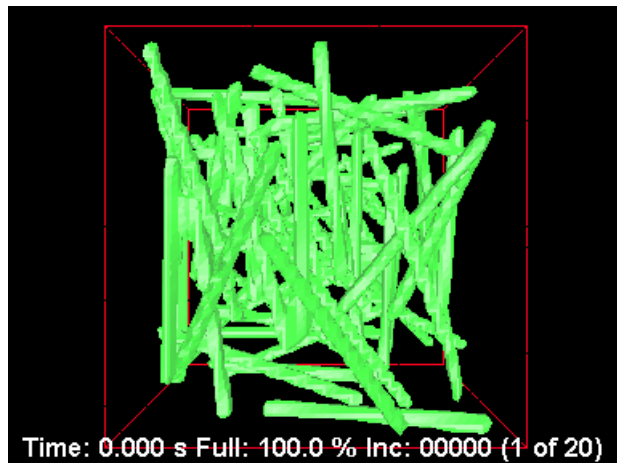
Décrire le comportement par connaissance directe de
la structure moléculaire du polymère
les interactions des chaînes
l'influence des charges

Outil de **rhéologie numérique**

Objectif macroscopique:

Calcul, par **éléments finis**, des **écoulements** de fluides complexes (multiphasés, anisotropes, ...)

Outil de **simulation** en mise en forme



Injection de Polymères Chargés de Fibres Courtes

Constatation: impossible de décrire l'écoulement dans le moule à l'échelle des particules

Technique: construction d'une loi de comportement macroscopique par homogenisation [Batchelor1970]

$$\underline{\underline{\Sigma}} = \underline{\underline{\Sigma}}_f + \underline{\underline{\Sigma}}_p$$

• Particules: sphères, ellipsoïdes, cylindres...

• Caractérisation: rapport de forme $\beta = \frac{D}{d}$ et vecteur orientation \vec{p}

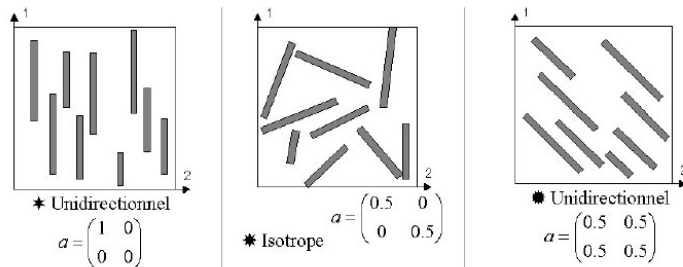
• Évolution de l'orientation d'une particule [Jeffery1922]:

$$\frac{D\vec{p}}{Dt} = \underline{\underline{\Omega}}\vec{p} + \underbrace{\left(\frac{\beta^2 - 1}{\beta^2 + 1}\right)}_{\lambda} (\dot{\underline{\underline{\epsilon}}}\vec{p} - (\dot{\underline{\underline{\epsilon}}} : \underline{\underline{\vec{p}}} \otimes \underline{\underline{\vec{p}}})\vec{p})$$

• Orientation d'une population de particules [Folgar et Tucker 1994]:

$$\forall (i, j, k, l) = 1 \dots 3 \quad \begin{cases} (\underline{\underline{a}}_2)_{ij} &= \int_{\vec{p}} p_i p_j \psi(\vec{p}, t) dp \\ (\underline{\underline{a}}_4)_{ijkl} &= \int_{\vec{p}} p_i p_j p_k p_l \psi(\vec{p}, t) dp \end{cases}$$

$$\underline{\underline{a}}_4 = f(\underline{\underline{a}}_2)$$



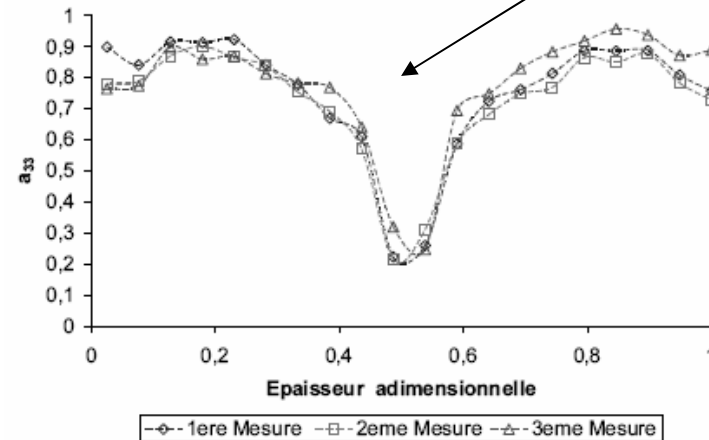
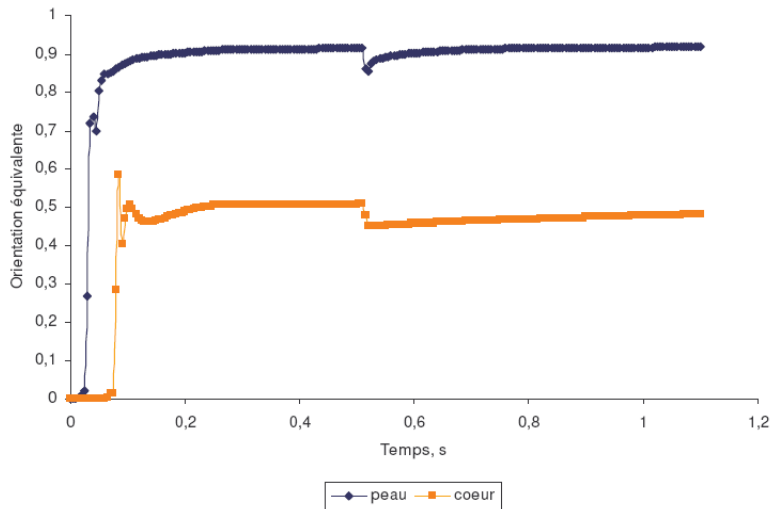
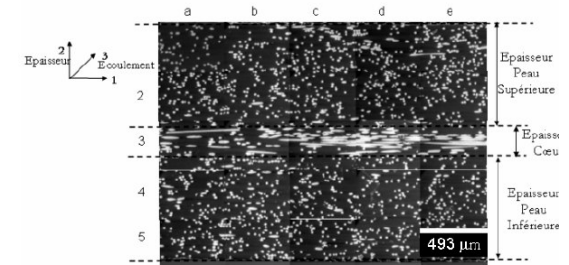
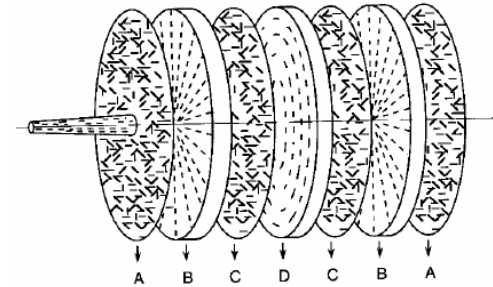
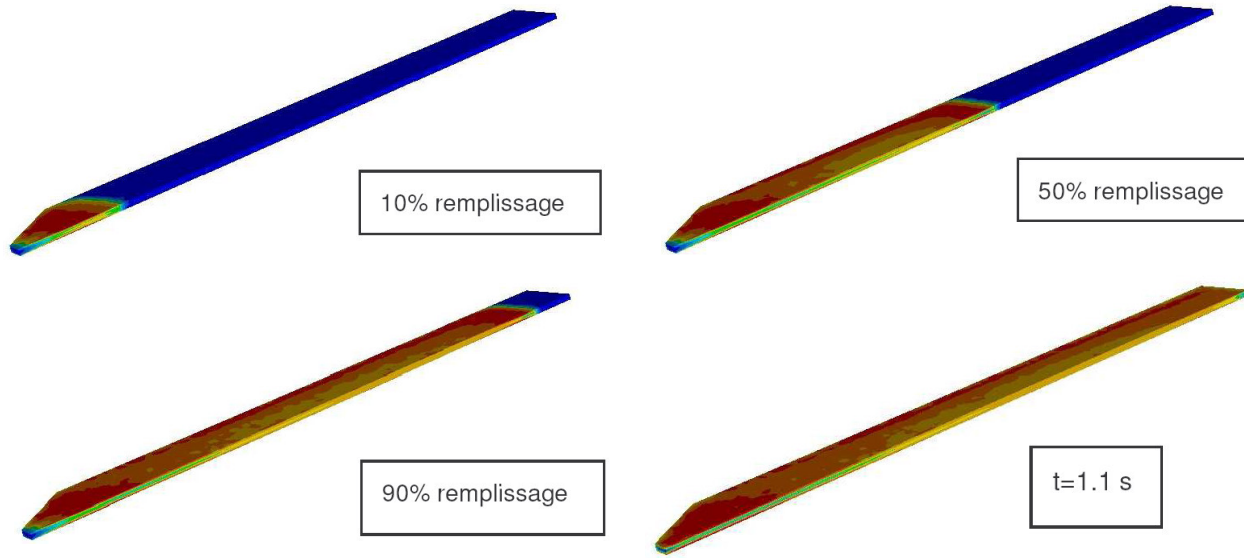
$$\frac{D\underline{\underline{a}}_2}{Dt} = -(\underline{\underline{\Omega}}\underline{\underline{a}}_2 - \underline{\underline{a}}_2\underline{\underline{\Omega}}) + \lambda(\dot{\underline{\underline{\epsilon}}}\underline{\underline{a}}_2 + \underline{\underline{a}}_2\dot{\underline{\underline{\epsilon}}} - 2\underline{\underline{a}}_4 : \dot{\underline{\underline{\epsilon}}}) + \underbrace{C_I \dot{\underline{\underline{\gamma}}}}_{\text{perturbation}} (\underline{\underline{Id}} - 3\underline{\underline{a}}_2)$$

• Loi de comportement: [Tucker1991]

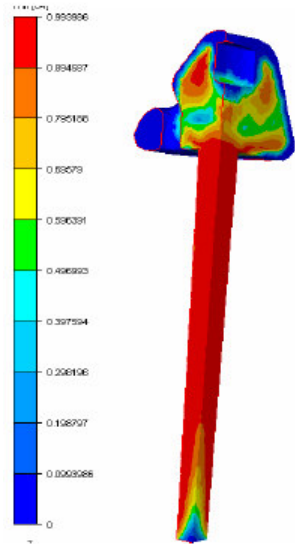
$$\underline{\underline{\Sigma}} = -p\underline{\underline{Id}} + 2\eta_f \left(\dot{\underline{\underline{\epsilon}}} + N_s (\dot{\underline{\underline{\epsilon}}}\underline{\underline{a}}_2 + \underline{\underline{a}}_2\dot{\underline{\underline{\epsilon}}}) + N_p \underline{\underline{a}}_4 : \dot{\underline{\underline{\epsilon}}} \right)$$

Injection de Polymères Chargés de Fibres Courtes

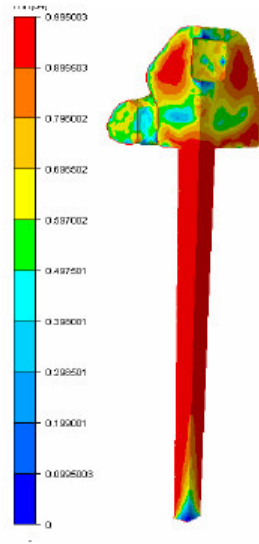
Résultats: fonction d'orientation



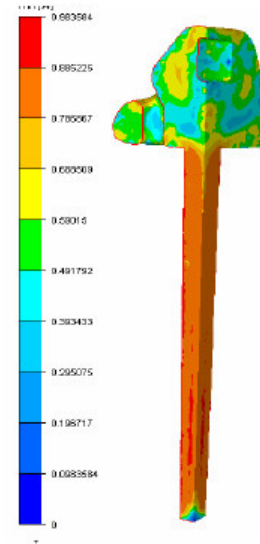
Injection de Polymères Chargés de Fibres Courtes



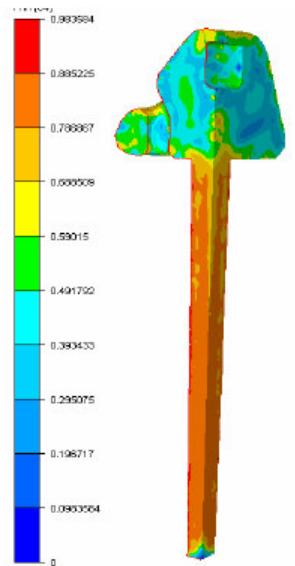
(a) equivalent orientation $t=0.5s$



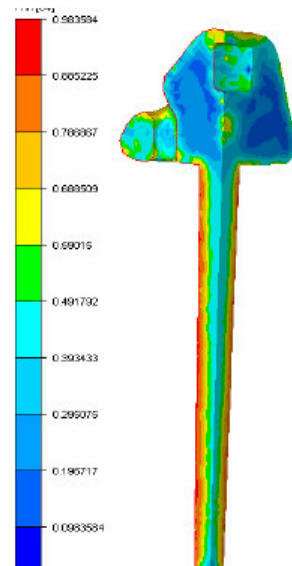
(b) equivalent orientation $t=1s$



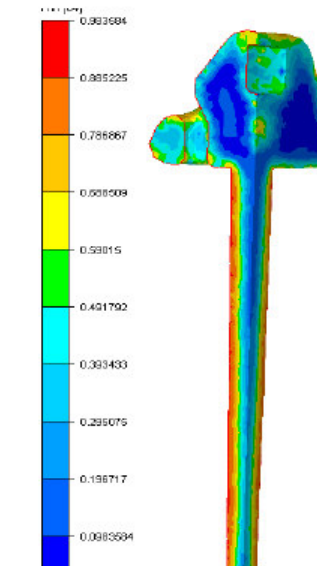
(c) equivalent orientation $t=3s$



(d) equivalent orientation $t=5s$



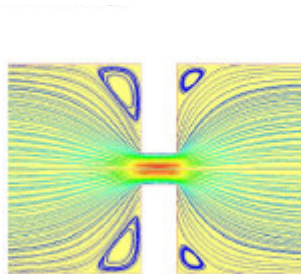
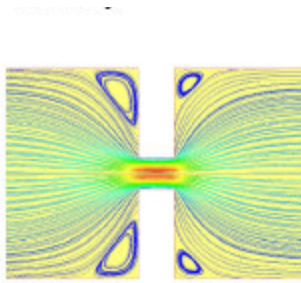
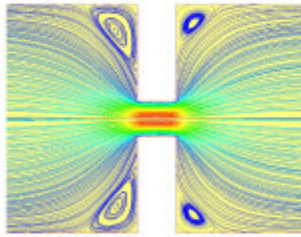
(e) equivalent orientation $t=9s$



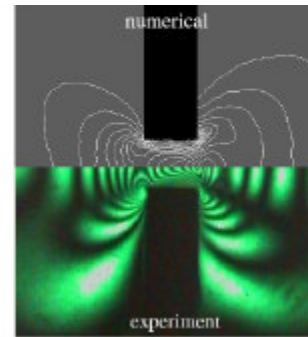
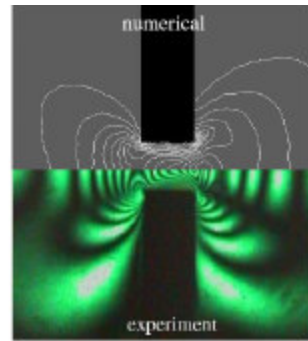
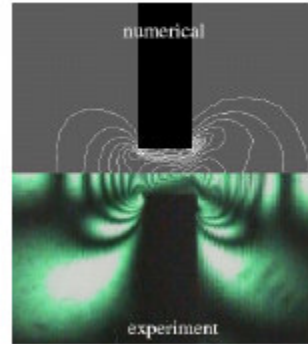
(f) equivalent orientation $t=15s$

Injection de Polymères Chargés de Fibres Courtes

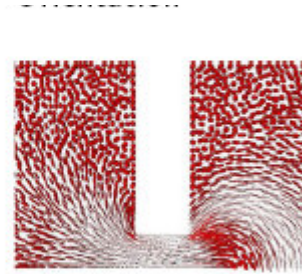
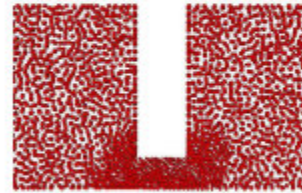
Velocity



Birefringence



Orientation



Injection de Polymères Chargés de Fibres Courtes

- Distribution de l'orientation:

$$\frac{D\underline{\underline{a}}_2}{Dt} = -(\underline{\underline{\Omega}}\underline{\underline{a}}_2 - \underline{\underline{a}}_2\underline{\underline{\Omega}}) + \lambda(\underline{\underline{\dot{e}}}\underline{\underline{a}}_2 + \underline{\underline{a}}_2\underline{\underline{\dot{e}}} - 2\underline{\underline{a}}_4 : \underline{\underline{\dot{e}}}) + \underbrace{C_I \dot{\gamma} (\underline{\underline{Id}} - 3\underline{\underline{a}}_2)}_{\text{perturbation}}$$

- Loi de comportement:

$$\underline{\underline{\Sigma}} = -p\underline{\underline{Id}} + 2\eta_f \left(\underline{\underline{\dot{e}}} + N_s (\underline{\underline{\dot{e}}}\underline{\underline{a}}_2 + \underline{\underline{a}}_2\underline{\underline{\dot{e}}}) + N_p \underline{\underline{a}}_4 : \underline{\underline{\dot{e}}} \right)$$

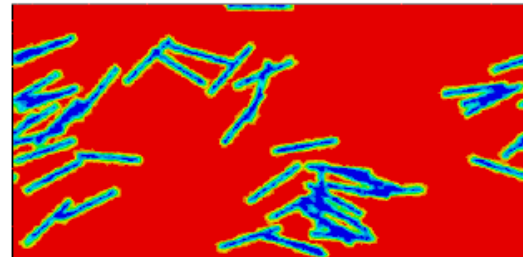
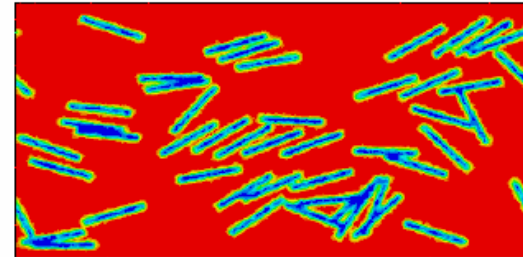
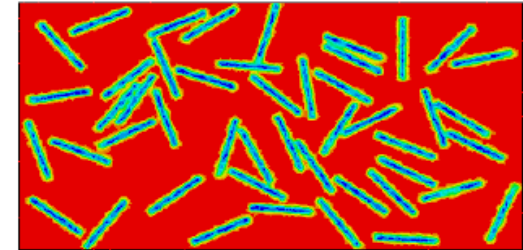
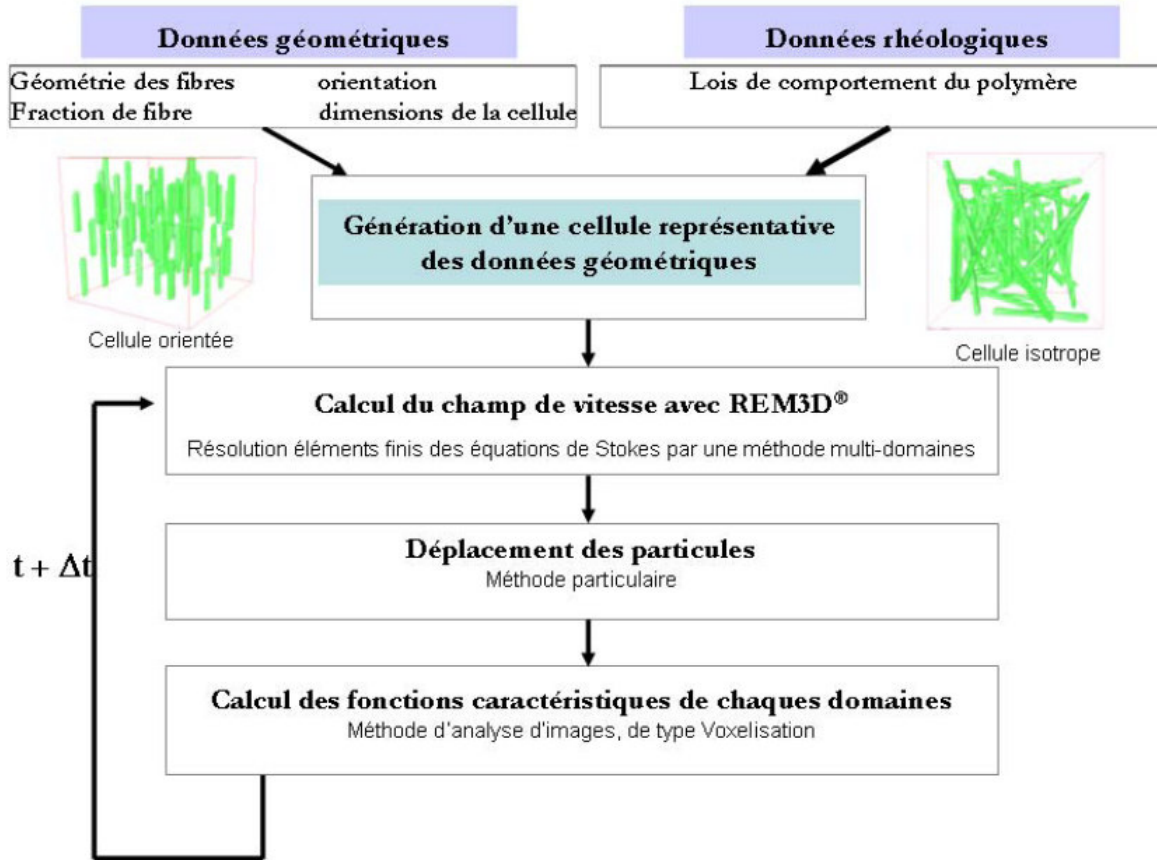
- Détermination à travers d'essais rhéologiques:

- Expérimentales -> très difficiles
- Numériques

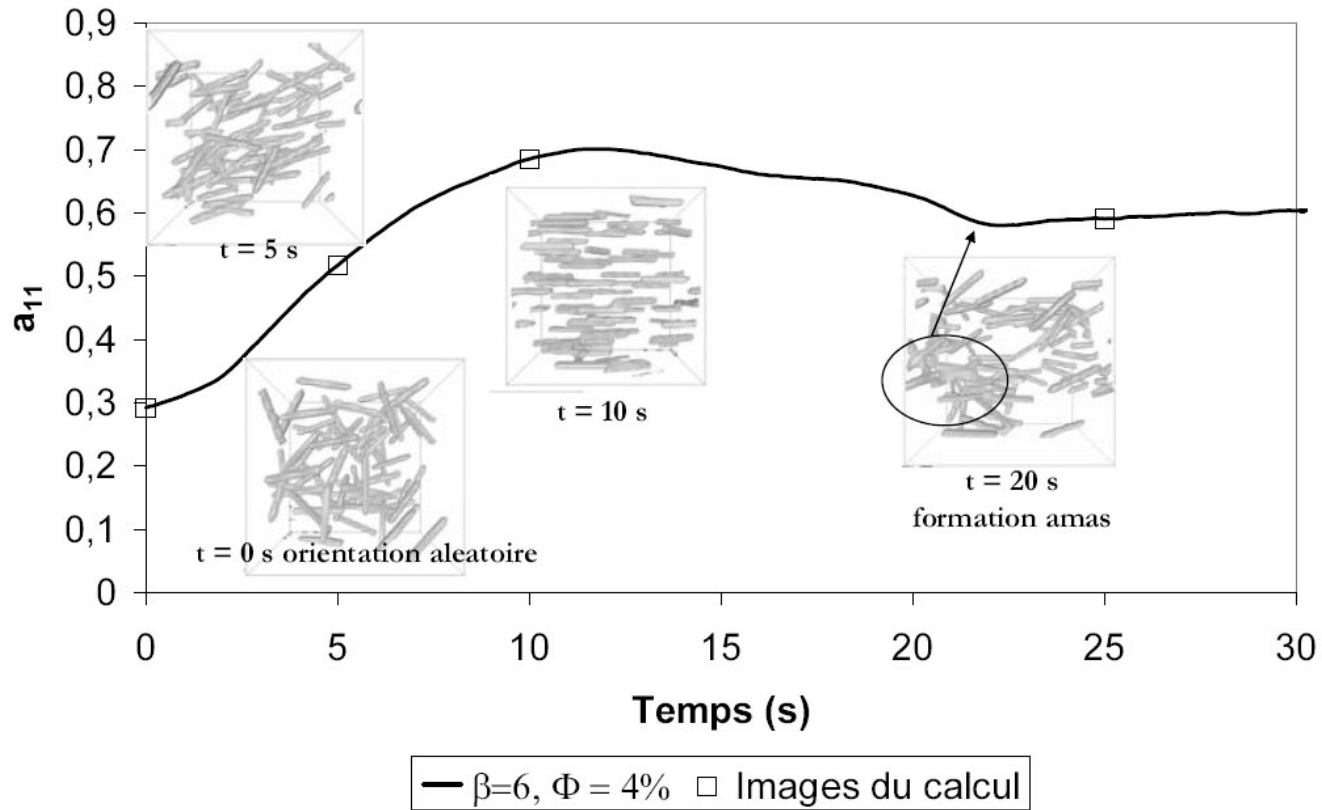
- Principe: simuler directement l'écoulement du fluide, à l'échelle microscopique

• Homogénéisation $\langle \underline{\underline{a}}_2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \vec{p}_k \otimes \vec{p}_k$ et $\langle \underline{\underline{a}}_4 \rangle = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \vec{p}_k \otimes \vec{p}_k \otimes \vec{p}_k \otimes \vec{p}_k$

Injection de Polymères Chargés de Fibres Courtes



Injection de Polymères Chargés de Fibres Courtes



Rapport de forme β	Concentration % en vol.	Paramètre rhéologique N_p
3	2	2,19
	4	4,79
6	4	6,9
	8	19,54
12	8	24,40
	15	54,71

$$C_i = 0.03[1 - e^{-0.224\Phi\beta}]$$

Charges déformables

① Calcul Multiphasique

✚ *prob.*: couplage phase solide/phase liquide et écoulement

✚ *num.*: formulation **diphasique**

éléments finis mixtes (v, p, u, p_s)

eq. de couplage

systèmes d'équations **non-linéaires non-symétriques**

Matrices complexes

② Cinétique de solidification, reticulation et cristallisation

✚ *prob.*: détermination de la fraction transformée
prédiction de la microstructure et sa distribution

✚ *mod.*: à partir des expériences et par **analyse inverse**

✚ *num.*: EDP non-linéaires couplées

éléments finis et méthode **RKGD**

couplage avec la formulation diphasique