



HAL
open science

Étude de l'apparition des contraintes résiduelles dans le procédé d'empilement par soudage et consolidation en continu de composites thermoplastiques

François Lemarchand

► **To cite this version:**

François Lemarchand. Étude de l'apparition des contraintes résiduelles dans le procédé d'empilement par soudage et consolidation en continu de composites thermoplastiques. Sciences de l'ingénieur [physics]. Arts et Métiers ParisTech, 2008. Français. NNT : 2008ENAM0034 . pastel-00004574

HAL Id: pastel-00004574

<https://pastel.hal.science/pastel-00004574>

Submitted on 10 Sep 2010

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.



Ecole doctorale n° 432 : Sciences des Métiers de l'Ingénieur

THÈSE

pour obtenir le grade de

Docteur

de

l'École Nationale Supérieure d'Arts et Métiers

Spécialité "Mécanique"

*présentée et soutenue publiquement
par*

François LEMARCHAND

le 3 décembre 2008

**ETUDE DE L'APPARITION DES CONTRAINTES RESIDUELLES
DANS LE PROCEDE D'EMPILEMENT PAR SOUDAGE ET
CONSOLIDATION EN CONTINU DE COMPOSITES
THERMOPLASTIQUES**

Directeur de thèse : Francisco CHINESTA

Co-encadrement de la thèse : Pierre BEAUCHENE

Jury :

M. Philippe BOISSE, Professeur, LAMCOS, INSA Lyon
M. Elias CUETO, Professeur associé, GEMM, Université de Saragosse
M. Amine AMMAR, Maître de Conférences, LR, Université Joseph Fourier
M. Julien YVONNET, Maître de Conférences, LAM, Université Paris-Est
M. Francisco CHINESTA, Professeur, Ecole Centrale de Nantes
M. Pierre BEAUCHENE, Ingénieur de Recherche, ONERA
M. Sylvain CHATEL, Ingénieur de Recherche, EADS IW

Président
Rapporteur
Rapporteur
Examineur
Examineur
Examineur
Invité

Laboratoire de Mécanique des Systèmes et des Procédés
ENSAM, CER de Paris

Remerciements

Ce travail représente l'aboutissement de trois années (et quelques mois de plus) de recherche, accomplies au sein de l'unité d'Étude et de Modélisation des Composites Organiques (EMCO) puis de l'unité de Modélisation des Structures Composites (MSC) du Département Matériaux et Systèmes Composites (DMSC) de l'Office National d'Études et de Recherches Aérospatiales (ONERA). Je tiens, en premier lieu, à remercier Monsieur Daniel Abbé, directeur du département et Monsieur Fabrice Boust, précédent chef de l'unité EMCO pour avoir proposé ce sujet novateur, pour m'avoir accueilli au sein de leur équipe et pour avoir financé ce travail.

Je suis très reconnaissant à Monsieur Elias Cueto, et Monsieur Amine Ammar qui avec leur regard de spécialiste, chacun dans leur domaine, ont accepté de porter un regard critique sur ce travail qui fait appel à des compétences transversales. Je suis sensible également à l'honneur qui m'est fait par Monsieur Philippe Boisse, d'accepter de présider ce jury. Je remercie vivement Monsieur Julien Yvonnet de sa présence dans le jury ainsi que Monsieur Sylvain Chatel d'EADS pour avoir accepté de participer à la discussion en tant que membre invité.

Je souhaiterais également exprimer ma sincère admiration et ma reconnaissance à Monsieur Francisco Chinesta du laboratoire GEM de l'École Centrale de Nantes. Il a dirigé cette thèse et est resté très présent malgré l'éloignement géographique tout en m'accordant une grande autonomie. Il m'a aidé, lors de nos rencontres régulières, par ses grandes compétences théoriques en méthodes numériques et par sa clairvoyance scientifique.

J'aimerais exprimer ma sincère gratitude à Monsieur Pierre Beauchêne. Toujours disponible, il a coencadré ma thèse à l'ONERA et a été un appui de taille grâce à ces talents multiples en physique, en programmation C++, en informatique ... C'est avec respect que je le remercie de m'avoir accordé sa confiance, de m'avoir laissé une autonomie importante, tout en étant présent quotidiennement au travers de nos enrichissantes discussions.

Je remercie également Monsieur Bertrand Laine du DMSC pour son aide et ses précieux conseils. Je remercie également Monsieur Amran Lounès Illoul du LMSP pour ses précieux conseils en programmation C++.

J'ai eu le plaisir également de partager des moments de convivialité avec les membres du département, Georges Désarmot, Christian Marais, David Lévêque, François-Henri Leroy, Cédric Huchette, Bruno passilly, Johan Petit, Nicolas Carrère, Jean-François Maire, Daniel Louis, Martin Hirsekorn, Myriam Kaminski, Jean-Claude Daux, Michel Bejet, Laurent Leylekian, ... Ainsi que les doctorants (pour certains désormais docteurs) et post-doctorants : Jean-Michel, Mathieu, Loïc, Lionel, François-Xavier, Thomas, Riadh ...

Que toute ma famille, et plus particulièrement mes parents, mon frère, ma soeur, ainsi que Jean-Baptiste et Caroline, reçoivent ma plus grande reconnaissance pour leur soutien constant et leurs conseils avisés tout au long de ce travail.

Table des matières

Table des figures	vii
-------------------	-----

INTRODUCTION	xiii
--------------	------

Chapitre 1	
LE SOUDAGE DES THERMOPLASTIQUES, ETAT DE L'ART	1

1.1	Rappels sur les différentes méthodes de soudage	2
1.1.1	Le soudage avec chauffage en volume	2
1.1.2	Le soudage avec chauffage par friction	3
1.1.3	Le soudage avec chauffage électromagnétique	3
1.1.4	Le soudage en deux étapes	4
1.2	Le procédé d'empilement par soudage et consolidation en continu	5
1.2.1	Principe du procédé et variantes technologiques	6
1.2.2	Description des mécanismes impliqués dans ce procédé	12
1.2.3	Modélisation du procédé en continu	19
1.3	Les matériaux utilisés	20
1.3.1	Le poly-éther-éther-cétone (PEEK)	20
1.3.2	Le composite à matrice PEEK renforcée de fibres de carbone	25
1.4	Cristallisation	29
1.4.1	Mécanismes de cristallisation	29
1.4.2	Cinétique de cristallisation	35
1.5	Contraintes résiduelles dans les composites thermoplastiques	40
1.5.1	Formation des contraintes résiduelles à l'échelle microscopique	41
1.5.2	Formation des contraintes résiduelles à l'échelle macroscopique	45
1.5.3	Etapes du procédé mises en cause dans la formation des contraintes résiduelles	48
1.5.4	Ajout multiple de plis	48
1.5.5	Refroidissement de la pièce jusqu'à la température ambiante	49
1.5.6	Zones de la pièce soumises à la formation des contraintes résiduelles	49

1.5.7	Études précédentes réalisées sur la modélisation des contraintes résiduelles dans les procédés de placement de pli	50
1.5.8	Conclusions	53

Chapitre 2	
METHODES NUMERIQUES	55

2.1	Méthode des éléments naturels contraints (CNEM)	56
2.1.1	Généralités sur les méthodes sans maillage, historique	56
2.1.2	Méthode des éléments naturels contraints CNEM	58
2.2	La décomposition orthogonale propre	63
2.2.1	Principe de la méthode	63
2.2.2	Une modélisation réduite à posteriori	64
2.2.3	Enrichissement de la base d'approximation	65
2.3	Les Approches en calcul multi-échelles	66
2.3.1	Approches analytiques basées sur la théorie de l'homogénéisation . .	66
2.3.2	Approches numériques basées sur la théorie de l'homogénéisation . .	71
2.3.3	Autres approches	77
2.3.4	Conclusion	80

Chapitre 3	
DEMARCHE DE MODELISATION	81

3.1	Modélisation numérique du refroidissement d'une pièce de composite thermo-plastique	82
3.1.1	Thermoélasticité linéaire : rappels	83
3.1.2	Modélisation mécanique	85
3.1.3	Modélisation thermique	85
3.1.4	Principes d'utilisation d'un passage micro-macro pour obtenir les propriétés thermomécaniques macroscopiques	87
3.1.5	Passages micro-macro dans le cas des matériaux thermoélastiques . .	89
3.2	Description de la méthode de modélisation	93
3.2.1	Motivations	93
3.2.2	Hypothèses	93
3.2.3	Principes généraux	93
3.2.4	Description géométrique	94
3.2.5	Couplage entre les échelles macroscopique et microscopique : méthode multi-pas en temps	95
3.2.6	Schéma général	97

3.3	Modélisation à l'échelle macroscopique	97
3.3.1	Description géométrique	97
3.3.2	Modélisation thermique	100
3.3.3	Modélisation mécanique	111
3.3.4	Calcul des contraintes	112
3.4	Modélisation à l'échelle microscopique	114
3.4.1	Objectifs	114
3.4.2	Types d'orientation de fibre	116
3.4.3	Emplacements des domaines microscopiques	118
3.4.4	Modélisation thermique	119
3.4.5	Modélisation mécanique	122
3.4.6	Calcul des contraintes	124
3.5	Homogénéisation : transfert de l'information de l'échelle microscopique à l'échelle macroscopique	126
3.5.1	Les différentes échelles de modélisation	126
3.5.2	Stratégie d'homogénéisation	129
3.5.3	Homogénéisation de la conductivité thermique	133
3.5.4	Homogénéisation du problème mécanique	137
3.6	Description du schéma algorithmique utilisé	142
3.6.1	Schéma algorithmique général	142
3.6.2	Initialisation du calcul	142
3.6.3	Variation des propriétés thermomécaniques du matériau : insertion dans le modèle	145

Chapitre 4

VALIDATION ET APPLICATION DE LA METHODE
--

153

4.1	Validation de la méthode de modélisation développée	154
4.1.1	Influence du raffinement du maillage microscopique	154
4.1.2	Validation de la méthode d'homogénéisation	154
4.1.3	Étude des contraintes à l'échelle microscopique	162
4.1.4	Influence du nombre de domaines microscopiques sur l'état de contraintes macroscopiques	163
4.2	Simulation du dépôt multiples de plis	165
4.2.1	Initialisation du calcul : choix du nombre et de l'emplacement des domaines microscopiques	175
4.2.2	Séquence d'empilement de type $0^\circ/90^\circ/90^\circ$	176
4.2.3	Séquence d'empilement de type $90^\circ/0^\circ/90^\circ$	220

4.2.4 Conclusions 227

CONCLUSION ET PERSPECTIVES **229**

Annexe A	
Travaux issus de l'étude	233

Bibliographie **235**

Table des figures

1	Procédé de placement et consolidation en continu	xiv
1.1	Représentation schématique : (a) du soudage par ultrasons, (b) du soudage par vibrations	3
1.2	Représentation schématique : (a) du soudage par induction, (b) du soudage par micro-ondes, (c) du soudage par résistance	4
1.3	Représentation schématique du soudage : (a) par gaz chaud, IR ou laser, (b) par miroir chauffant	5
1.4	Représentation du schéma de principe du procédé industriel	6
1.5	Phases successives lors du procédé d'empilement par soudage et consolidation en continu	7
1.6	Description schématique des phénomènes physiques au cours de la consolidation non-isotherme	9
1.7	Principe du procédé de Pitchumani [PRD ⁺ 96]	10
1.8	Tête de placement de l'université du Delaware (Etats-Unis) avec l'utilisation d'une torche supplémentaire pour préchauffer	11
1.9	Tête du NASA Langley Research Center [CM97, CM98]	11
1.10	Principe du procédé de Lamontia [LFG ⁺ 03]	11
1.11	Éléments rectangulaires représentant l'évolution de la surface rugueuse	13
1.12	Structure chimique du PEEK	20
1.13	Structure cristalline du PEEK [LD86]	21
1.14	Thermogramme obtenu par MDSC d'une plaque de PEEK brute (a) zoom sur la T _g (b) vue globale [Lam04]	22
1.15	Diffusivité thermique du PEEK en fonction de la température [Cog92, HG93]	23
1.16	Conductivité thermique du PEEK déduite à partir des valeurs de diffusivité obtenues par méthode flash [Lam04]	24
1.17	Courbe de traction contrainte vraie/ déformation vraie d'une éprouvette diabolo cylindrique en PEEK à 25°C [Cot91, G's95]	25
1.18	Coupe transverse de Tiff(PEEK)	26
1.19	Thermogrammes obtenus par MDSC (2°C/min) des échantillons de PEEK/Fibres de carbone (APC2 et Tifline) : (a) Zoom sur la T _g ; (b) Représentation sur toute la gamme de températures ([Lam04])	27
1.20	Diffusivité de l'APC2 en fonction de la température dans la direction perpendiculaire aux fibres [Lam04]	27
1.21	Représentation schématique d'un sphérolite	30
1.22	Température de fusion et température de fusion thermodynamique	31
1.23	Fissure interlaminaire générée par la coalescence des décohésions fibre-matrice	41

1.24	Evolution globale du module d'Young E du PEEK (MPa) en fonction de la température ($^{\circ}\text{C}$)	42
1.25	Schéma de la vitesse de cristallisation en fonction de la température	44
1.26	Développement de contraintes résiduelles thermiques dans un stratifié [0/90]	46
1.27	Le refroidissement de la température de surface entraîne un gauchissement de la pièce	48
1.28	Algorithme de calcul des contraintes résiduelles dans l'étude de Sonmez et coll. [SHA02a]	51
1.29	Maillage de la structure utilisée dans l'analyse des contraintes résiduelles. Les dimensions verticales et horizontales ne sont pas à l'échelle [SA07].	52
1.30	Entrées et Sorties du modèle du procédé [SA07].	52
1.31	Algorithme de la procédure de minimisation des contraintes résiduelles. [SA07].	52
2.1	(a) Construction des fonctions de formes Sibsoniennes. (b) Linéarité sur les bords convexes	58
2.2	Milieu hétérogène et son VER, les différentes échelles	68
2.3	Conditions de contraintes homogènes au contour	68
2.4	Milieu périodique, définition d'une cellule élémentaire.	69
2.5	Développement asymptotique du champ solution	70
2.6	Stratégie des méthodes EF multi-niveaux	72
2.7	Superposition de maillages S-FEM	74
2.8	Exemple de modélisation Arlequin	75
2.9	Exemple de stratégie multi-niveaux basée sur la méthode VC-FEM	76
2.10	Décomposition en sous domaines et interfaces	77
2.11	Exemple de grilles hiérarchiques pour une résolution multigrille (cas 1D)	78
3.1	Définition du domaine Ω	82
3.2	Conditions aux limites mixtes du problème mécanique	85
3.3	Conditions aux limites mixtes du problème thermique	86
3.4	Milieu hétérogène macroscopique et VER, les différentes échelles	88
3.5	Homogénéisation du tenseur de comportement (1) et du tenseur de dilatation thermique (2) : découplage du problème	92
3.6	Définition de la zone modélisée	94
3.7	Définition des domaines	95
3.8	Méthode à multi-pas de temps	96
3.9	Couplage entre les échelles microscopique et macroscopique	96
3.10	Tête de la machine	98
3.11	Machine en fonctionnement [Nic05]	98
3.12	Rouleau de composite APC-2	99
3.13	Ruban de composite APC-2	99
3.14	Dimensions d'un pli de préimprégné dans le sens des fibres de carbone	100
3.15	Modélisation des conditions aux limites du problème thermique	103
3.16	Méthode I, maillage du système (acier + composite)	104
3.17	Méthode II, l'acier est remplacé par un flux de convection	104
3.18	Flux à l'interface acier/composite en fonction de la température [Nic05]	105
3.19	Elément triangulaire à 3 noeuds	106
3.20	Définition d'une cellule microscopique	115
3.21	Décomposition de la cellule microscopique en sous-domaine	116

3.22	Noeud à l'interface de deux cellules de Voronoï Ω_1 et Ω_2	116
3.23	Maillage CNEM d'un domaine microscopique à fibre disposée à 90°	117
3.24	Maillage CNEM d'un domaine microscopique à fibre disposée à 0°	117
3.25	Choix des éléments macroscopiques parents dans le domaine macroscopique Ω	118
3.26	Choix des groupes d'éléments macroscopiques parents dans le domaine macroscopique Ω	119
3.27	Définition des distances s et L_{kl}	120
3.28	Interpolation des propriétés thermomécaniques homogénéisées dans le domaine macroscopique Ω au point \mathbf{X}	128
3.29	Structure périodique, les différents problèmes traités	129
3.30	Coefficient de Poisson homogénéisé	130
3.31	Module de Young homogénéisé	131
3.32	Condition de déformation homogène au contour	138
3.33	Schéma algorithmique général	143
3.34	Etapes d'initialisation du calcul	144
3.35	Module du PEEK (GPa) en fonction de la température ($^\circ\text{C}$)	146
3.36	Chaleur spécifique de l'APC-2 ($J.kg^{-1}.^\circ\text{C}^{-1}$) en fonction de la température ($^\circ\text{C}$)	146
3.37	Chaleur spécifique du PEEK ($J.kg^{-1}.^\circ\text{C}^{-1}$) en fonction de la température ($^\circ\text{C}$)	147
3.38	Chaleur spécifique des fibres de carbone ($J.kg^{-1}.^\circ\text{C}^{-1}$) en fonction de la température ($^\circ\text{C}$)	148
3.39	Conductivité thermique du PEEK ($W.m^{-1}.^\circ\text{C}^{-1}$) en fonction de la température ($^\circ\text{C}$)	149
3.40	Densité du PEEK ($kg.m^{-3}$) en fonction du degré de cristallinité	150
3.41	Dilatation thermique du PEEK ($^\circ\text{C}^{-1}$) en fonction de la température ($^\circ\text{C}$)	151
4.1	Influence du raffinement du domaine intermédiaire sur l'état de contrainte dans le domaine microscopique	155
4.2	Influence du raffinement du domaine intermédiaire sur l'état de contrainte dans le domaine microscopique	155
4.3	Champ de température obtenu après 1.e-1 s	156
4.4	Champ de température ($^\circ\text{C}$) dans le domaine microscopique à Fibres à 90°	157
4.5	Champ de température ($^\circ\text{C}$) dans le domaine microscopique à Fibres à 0°	158
4.6	Champ de température ($^\circ\text{C}$) dans le domaine microscopique à Fibres à 90°	159
4.7	Champ de température ($^\circ\text{C}$) dans le domaine microscopique à Fibres à 0°	159
4.8	Champ de température ($^\circ\text{C}$) dans le domaine microscopique à Fibres à 90°	160
4.9	Champ de température ($^\circ\text{C}$) dans le domaine microscopique à Fibres à 0°	161
4.10	Variation de la température du pic de cristallisation du PEEK avec la vitesse de refroidissement	162
4.11	État de contraintes microscopiques dans le domaine complet. $T_{cristallisation} = 317^\circ\text{C}, T = T_{ambiante} = 25^\circ\text{C}$	164
4.12	État de contraintes microscopiques dans le domaine microscopique. $T_{cristallisation} = 317^\circ\text{C}, T = T_{ambiante} = 25^\circ\text{C}$	164
4.13	Influence de la vitesse de refroidissement sur l'état de contraintes σ_{XX} . $T = T_{ambiante} = 25^\circ\text{C}$	165
4.14	Influence de la vitesse de refroidissement sur l'état de contraintes σ_{YY} . $T = T_{ambiante} = 25^\circ\text{C}$	166
4.15	1 pli libre	167
4.16	2 plis libres [0/90] - Influence de l'anisotropie	167

4.17	2 plis encastrés [0/90] - Influence de l'anisotropie et des conditions aux limites . . .	167
4.18	Influence de l'anisotropie des plis et des conditions aux limites appliquées aux plis. $T_{crystallisation} = 317^{\circ}C, T = T_{ambiante} = 25^{\circ}C$	168
4.19	Champ de température ($^{\circ}C$) en fin de phase de refroidissement, $t=10$ s	168
4.20	Comparaison des champs de contraintes macroscopiques σ_{XX} à $t=10$ s pour 14, 5 et 1 domaines microscopiques par ruban	169
4.21	Comparaison des champs de contraintes macroscopiques σ_{YY} à $t=10$ s pour 14, 5 et 1 domaines microscopiques par ruban	170
4.22	Comparaison des champs de contraintes macroscopiques σ_{XY} à $t=10$ s pour 14, 5 et 1 domaines microscopiques par ruban	171
4.23	Dépôt d'un pli	172
4.24	Dépot, chauffage et refroidissement d'un ruban de préimprégné	173
4.25	Dépot et chauffage d'un ruban de préimprégné sur le composite	174
4.26	Refroidissement d'un ruban de préimprégné sur le composite	175
4.27	Emplacement des 5 domaines microscopiques dans le domaine macroscopique	176
4.28	Champ de contraintes σ_{XX} et σ_{YY} au début de la phase de refroidissement	177
4.29	Champ de contraintes σ_{XY} au début de la phase de refroidissement	177
4.30	Champ de contraintes σ_{XX} et σ_{YY} à $t=5$ s	178
4.31	Champ de contraintes σ_{XY} à $t=5$ s	178
4.32	Champ de contraintes σ_{XX} et σ_{YY} à $t=10$ s	179
4.33	Champ de contraintes σ_{XY} à $t=10$ s	179
4.34	Champs de contraintes à $t=10$ s et à l'ordonnée $Y = 75 \mu m$	180
4.35	Champs de contraintes à $t=10$ s et à l'ordonnée $Y = 150 \mu m$	180
4.36	Champs de contraintes à $t=10$ s et à l'ordonnée $Y = 225 \mu m$	181
4.37	Champs de contraintes à $t=10$ s et à l'ordonnée $Y = 275 \mu m$	181
4.38	Champ de température ($^{\circ}C$) à $t=1$ s de la phase de refroidissement	182
4.39	Champ de température ($^{\circ}C$) à $t=5$ s de la phase de refroidissement	182
4.40	Champ de température ($^{\circ}C$) en fin de phase de refroidissement	182
4.41	Incrément de contraintes σ_{XX} à $t=10$ s	183
4.42	Incrément de contraintes σ_{YY} à $t=10$ s	183
4.43	Incrément de contraintes σ_{XY} à $t=10$ s	184
4.44	Champ de contraintes σ_{XX} à $t=10$ s	185
4.45	Champ de contraintes σ_{YY} à $t=10$ s	185
4.46	Champ de contraintes σ_{XY} à $t=10$ s	186
4.47	Champ de contraintes σ_{XX}, σ_{YY} et σ_{XY} à $t=10$ s	186
4.48	Champ de contraintes σ_{XX} à $t=10$ s	187
4.49	Champ de contraintes σ_{YY} à $t=10$ s	187
4.50	Champ de contraintes σ_{XY} à $t=10$ s	188
4.51	Champ de contraintes σ_{XX}, σ_{YY} et σ_{XY} à $t=10$ s	188
4.52	Champ de contraintes σ_{XX} à $t=10$ s	189
4.53	Champ de contraintes σ_{YY} à $t=10$ s	189
4.54	Champ de contraintes σ_{XY} à $t=10$ s	190
4.55	Champ de contraintes σ_{XX}, σ_{YY} et σ_{XY} à $t=10$ s	190
4.56	Champ de contraintes σ_{XX} à $t=10$ s	191
4.57	Champ de contraintes σ_{YY} à $t=10$ s	191
4.58	Champ de contraintes σ_{XY} à $t=10$ s	192
4.59	Champ de contraintes σ_{XX}, σ_{YY} et σ_{XY} à $t=10$ s	192
4.60	Champ de contraintes σ_{XX} à $t=10$ s	193

4.61	Champ de contraintes σ_{YY} à $t=10$ s	193
4.62	Champ de contraintes σ_{XY} à $t=10$ s	193
4.63	Champ de contraintes σ_{XX} , σ_{YY} et σ_{XY} à $t=10$ s	194
4.64	Champ de contraintes σ_{XX} à $t=10$ s	194
4.65	Champ de contraintes σ_{YY} à $t=10$ s	195
4.66	Champ de contraintes σ_{XY} à $t=10$ s	195
4.67	Champ de contraintes σ_{XX} , σ_{YY} et σ_{XY} à $t=10$ s	196
4.68	Champ de température ($^{\circ}\text{C}$) au début de la phase de refroidissement	196
4.69	Champ de contraintes σ_{XX} et σ_{YY} au début de la phase de refroidissement	197
4.70	Champ de contraintes σ_{XY} au début de la phase de refroidissement	197
4.71	Champ de contraintes σ_{XX} et σ_{YY} à $t=5$ s	198
4.72	Champ de contraintes σ_{XY} à $t=5$ s	198
4.73	Champ de contraintes σ_{XX} et σ_{YY} à $t=10$ s	199
4.74	Champ de contraintes σ_{XY} à $t=10$ s	199
4.75	Champs de contraintes à $t=10$ s et à l'ordonnée $Y = 150 \mu\text{m}$	200
4.76	Champs de contraintes à $t=10$ s et à l'ordonnée $Y = 300 \mu\text{m}$	200
4.77	Champs de contraintes à $t=10$ s et à l'ordonnée $Y = 375 \mu\text{m}$	201
4.78	Champ de température ($^{\circ}\text{C}$) à $t=1$ s de la phase de refroidissement	201
4.79	Champ de température ($^{\circ}\text{C}$) à $t=5$ s de la phase de refroidissement	202
4.80	Champ de température ($^{\circ}\text{C}$) en fin de phase de refroidissement	202
4.81	Champ de contraintes σ_{XX} à $t=10$ s	203
4.82	Champ de contraintes σ_{YY} à $t=10$ s	203
4.83	Champ de contraintes σ_{XY} à $t=10$ s	204
4.84	Champ de contraintes σ_{XX} , σ_{YY} et σ_{XY} à $t=10$ s	204
4.85	Champ de contraintes σ_{XX} à $t=10$ s	205
4.86	Champ de contraintes σ_{YY} à $t=10$ s	205
4.87	Champ de contraintes σ_{XY} à $t=10$ s	206
4.88	Champ de contraintes σ_{XX} , σ_{YY} et σ_{XY} à $t=10$ s	206
4.89	Champ de contraintes σ_{XX} à $t=10$ s	207
4.90	Champ de contraintes σ_{YY} à $t=10$ s	207
4.91	Champ de contraintes σ_{XY} à $t=10$ s	208
4.92	Champ de contraintes σ_{XX} , σ_{YY} et σ_{XY} à $t=10$ s	208
4.93	Champ de contraintes σ_{XX} à $t=10$ s	209
4.94	Champ de contraintes σ_{YY} à $t=10$ s	209
4.95	Champ de contraintes σ_{XY} à $t=10$ s	210
4.96	Champ de contraintes σ_{XX} , σ_{YY} et σ_{XY} à $t=10$ s	210
4.97	Champ de contraintes σ_{XX} à $t=10$ s	211
4.98	Champ de contraintes σ_{YY} à $t=10$ s	211
4.99	Champ de contraintes σ_{XY} à $t=10$ s	212
4.100	Champ de contraintes σ_{XX} , σ_{YY} et σ_{XY} à $t=10$ s	212
4.101	Champ de contraintes σ_{XX} à $t=10$ s	213
4.102	Champ de contraintes σ_{YY} à $t=10$ s	213
4.103	Champ de contraintes σ_{XY} à $t=10$ s	214
4.104	Champ de contraintes σ_{XX} , σ_{YY} et σ_{XY} à $t=10$ s	214
4.105	Champ de contraintes σ_{XX} à $t=10$ s	215
4.106	Champ de contraintes σ_{YY} à $t=10$ s	215
4.107	Champ de contraintes σ_{XY} à $t=10$ s	216
4.108	Champ de contraintes σ_{XX} à $t=10$ s	216

4.109	Champ de contraintes σ_{YY} à $t=10$ s	217
4.110	Champ de contraintes σ_{XY} à $t=10$ s	217
4.111	Champ de contraintes σ_{XX} à $t=10$ s	218
4.112	Champ de contraintes σ_{YY} à $t=10$ s	218
4.113	Champ de contraintes σ_{XY} à $t=10$ s	219
4.114	Champ de contraintes σ_{XX} , σ_{YY} et σ_{XY} à $t=10$ s	219
4.115	Comparaison des champs de contraintes σ_{XX} à $t=10$ s	220
4.116	Comparaison des champs de contraintes σ_{YY} à $t=10$ s	221
4.117	Comparaison des champs de contraintes σ_{XY} à $t=10$ s	221
4.118	Comparaison des champs de contraintes σ_{XX} à $t=10$ s	222
4.119	Comparaison des champs de contraintes σ_{YY} à $t=10$ s	223
4.120	Comparaison des champs de contraintes σ_{XY} à $t=10$ s	223
4.121	Comparaison des champs de contraintes σ_{XX} à $t=10$ s	224
4.122	Comparaison des champs de contraintes σ_{YY} à $t=10$ s	224
4.123	Comparaison des champs de contraintes σ_{XY} à $t=10$ s	225
4.124	Comparaison des champs de contraintes σ_{XX} à $t=10$ s	225
4.125	Comparaison des champs de contraintes σ_{YY} à $t=10$ s	226
4.126	Comparaison des champs de contraintes σ_{XY} à $t=10$ s	226

INTRODUCTION

La performance des matériaux composites a conduit à leur apparition massive ces dernières années, sur les avions de nouvelle génération. Ainsi il est à noter qu'aujourd'hui environ 20% en poids de matériaux composites sont introduits dans les structures, ce qui est le cas de l'Airbus A320 par exemple. L'étape suivante est l'introduction des composites dans les fuselages d'avions gros porteur. Pour l'Airbus A350 l'utilisation des composites a été étendue : c'est la première fois que la voilure d'un avion civil d'Airbus sera en carbone et la structure de cet appareil comportera au total 39% de carbone. Pour le Boeing 787 Dreamliner (nom officiel du 7E7), les matériaux composites constitueront 50% de la structure. Les renforts habituels des composites utilisés dans l'industrie aéronautique sont des fibres de carbone, de verre ou d'aramide. Les matrices thermodurcissables sont largement employées ; ce sont généralement des résines époxydes pour les structures et des résines phénoliques pour les aménagements intérieurs. Les matrices thermoplastiques commencent seulement à être introduites pour la réalisation de structure primaire. Citons ainsi l'A340-500/600 dont le bord d'attaque de la voilure est en matrice thermoplastique PPS (polysulfure de phénylène). Les résines thermoplastiques gagnent petit à petit du terrain sur les résines thermodurcissables, notamment pour des applications hautes performances. Les thermoplastiques présentent en effet des avantages en terme de processabilité, de recyclabilité, de comportement mécanique au choc, de conservation à température ambiante, de résistance aux contraintes environnementales (solvants, humidité) et de comportement au feu. Afin d'être utilisées dans des applications de structure, les matrices thermoplastiques doivent résister à de hautes températures. Les matrices thermostables à cycle aromatique utilisées sont le PEEK (polyétheréthercétone), le PEKK (polyéthercétonecétone), le PPS (polysulfure de phénylène) et PEI (polyétherimide), qui est amorphe. Parmi les matrices semi-cristallines, le PEEK, bien que très cher, tient une position de leader grâce à sa très bonne tenue aux hautes températures, ses excellentes propriétés mécaniques et sa grande résistance aux solvants. Cependant, l'augmentation du taux de matériaux composites sur les structures se heurte aujourd'hui au problème de la taille des pièces et de l'augmentation des coûts -coût intrinsèque du matériau mais aussi coût de la mise en oeuvre- .

Actuellement, la fabrication des pièces en composites dans l'industrie aéronautique est limitée aux structures secondaires mais les nouvelles perspectives d'application visent les structures primaires telles que les parties de fuselage ou les ailes dont la taille et la complexité augmentent. Les procédés de mise en forme utilisés actuellement (par autoclave par exemple) ne permettent pas la fabrication de telles pièces avec des coûts de production raisonnables. Les procédés de mise en oeuvre en continu semblent être une solution pour pallier ce problème et particulièrement l'empilement avec soudage et consolidation en continu.

Afin de limiter les coûts de mise en oeuvre des composites à matrice thermoplastiques, on tente ainsi de réduire le temps de cycle, d'automatiser les procédures manuelles et de réduire au

maximum les températures de mise en oeuvre. Dans cette perspective, le procédé l'empilement avec soudage et consolidation en continu de thermoplastiques a été développé dans le milieu aéronautique. Une variante du procédé a été étudié et développé conjointement par EADS, Dassault Aviation et Eurocopter récemment (procédé « Drapcocot »). Aux Etats-Unis, ce procédé s'intitule généralement « Automated tape placement » (procédé ATP). Ce procédé permet de fabriquer des pièces composites à matrice thermoplastique par soudage de plis pré-impregnés les uns sur les autres et présente un gain de temps et de coût par rapport à la technique classique qui consiste en un drapage manuel ou automatisé suivi d'une consolidation en autoclave. Le principe du procédé est le suivant (figure 1) : la tête de la machine dépose en continu les plis pré-impregnés les uns à côté des autres puis les uns sur les autres pour former la pièce souhaitée. Un système de chauffe (torche, laser etc.) effectue un chauffage local de la matrice au niveau de l'interface entre les deux plis au moment de la dépose. Un rouleau presseur passe alors en continu sur le pli qui vient d'être posé. Ce procédé innovant pourrait permettre la

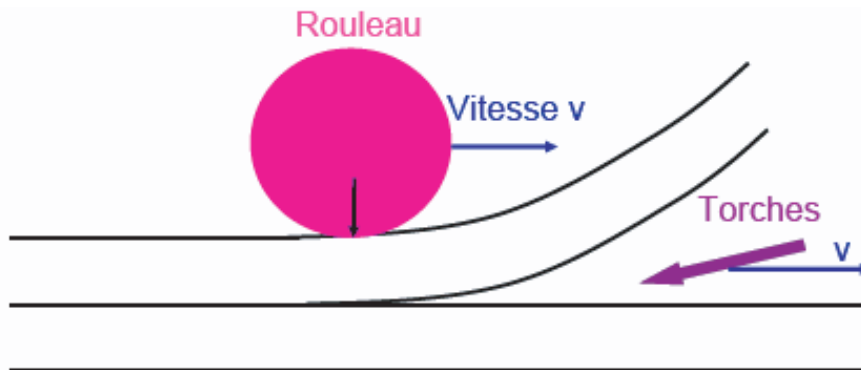


FIGURE 1 – Procédé de placement et consolidation en continu.

réalisation de pièces de géométrie complexes ou de pièces épaisses en s'affranchissant des problèmes de rigidité du pré-impregné. Le procédé de placement et de consolidation en continu serait également susceptible de réduire le nombre de pièces finales et d'éliminer certains travaux d'assemblage. Instinctivement, on sent que le choix des conditions opératoires influencera la qualité du soudage et que la détermination des paramètres de mise en oeuvre (température des torches et du rouleau, vitesse...) doit être optimisée. D'après plusieurs études réalisées sur le composite carbone/PEEK, les pièces fabriquées sur ce procédé présentent aujourd'hui un comportement mécanique en terme d'adhésion moins bon qu'un matériau consolidé en autoclave. En effet, le matériau passe un temps plus limité à haute température et pression sur le procédé en continu que sur les autres procédés classiques. Ainsi, en plus des problèmes classiques relatifs au soudage des composites à matrice thermoplastique cités plus haut, la spécificité de ce procédé est le temps de consolidation qui est très court. De plus les pièces actuellement élaborées avec ce procédé sont le siège d'importantes contraintes résiduelles, qui se traduit par un gauchissement des pièces manufacturées. L'ignorance de l'origine et du développement des contraintes résiduelles est un frein important à la validation industriel de ce procédé par ailleurs prometteur.

Lors de la soudure, les changements d'états de la matrice conduisent à la coexistence de trois composants (fibre, matrice amorphe et matrice cristalline) de propriétés thermomécaniques différentes dans une zone à forts gradients thermiques. Cet environnement particulièrement propice à la croissance des contraintes résiduelles est à mettre en relation avec les grandeurs géométriques comme l'épaisseur d'un pli ou le type d'empilement considéré.

Les études réalisées précédemment sur l'apparition des contraintes résiduelles dans le procédé ATP se sont concentrées sur des modèles à l'échelle macroscopique [Tie03, SHA02b, SA07], ne permettant pas un suivi des états de contraintes à l'échelle microscopique. L'évolution des propriétés thermomécaniques au cours du procédé n'est de plus pas pris en compte dans ces modèles. Les paramètres complexes intervenant dans le procédé (gradients thermiques importants générés par le système de chauffage, phénomène de cristallisation de la matrice, influence de la vitesse de refroidissement ...) entraînent le besoin d'utiliser des outils numériques performants pour modéliser le procédé ATP.

Dans ce contexte, notre étude visera à apporter une méthode de modélisation qui permette de prédire l'apparition et l'évolution des contraintes résiduelles au cours du procédé, aux deux échelles macroscopique et microscopique, tout en prenant en compte l'évolution des propriétés thermomécaniques du matériau au cours du temps. Pour cela, nous avons développé une méthode de calcul multi-échelle (couplage entre les échelles macroscopique et microscopique) et multi-physique (prise en compte de la cristallisation).

Le premier chapitre du présent manuscrit propose un état de l'art sur le soudage des thermoplastiques à matrice composite et l'apparition des contraintes résiduelles dans le procédé par soudage et consolidation en continu. Dans un premier temps, les différents procédés sont présentés brièvement en mettant l'accent sur leurs temps caractéristiques ; ceci permet d'introduire le procédé de consolidation en continu. Dans le cas de ce procédé, une étude bibliographique détaillée est faite, tant du point de vue de la modélisation thermique que de la prise en compte des phénomènes physiques relatifs au soudage. Ceci nous permet de bien cerner les difficultés et les lacunes actuelles dans la description du soudage en continu. Ensuite les mécanismes de cristallisation sont analysés, ainsi que les modèles de cinétique de cristallisation, avec une attention particulière pour la cristallisation du PEEK. Enfin, une étude bibliographique sur l'apparition des contraintes résiduelles dans le procédé ATP est présenté.

Le second chapitre permet d'introduire les méthodes numériques requises pour mener à bien la modélisation aux échelles microscopiques et macroscopiques du procédé. Nous présentons ainsi la méthode des éléments naturels contraints (CNEM), qui sera utilisée pour la description à l'échelle microscopique. Ensuite, la méthode de la décomposition orthogonale propre est introduite. Cette méthode permet de réaliser une exploitation des champs (thermique, mécanique) afin entre autre de réduire les temps de calcul. Enfin, une étude bibliographique sur les différentes méthodes multi-échelles est présentée dans une troisième partie.

Le troisième chapitre introduit la démarche de modélisation qui a été développée dans cette étude. La méthode de modélisation permet de réaliser une description simultanée aux deux échelles microscopique et macroscopique des contraintes résiduelles, tout en réalisant un couplage entre les deux échelles. L'échelle microscopique apporte à l'échelle macroscopique les propriétés thermomécaniques homogénéisées à chaque pas de temps. L'échelle macroscopique apporte à l'échelle microscopique les conditions aux limites, qui permettront de déterminer le champ de température au cours du temps à l'échelle microscopique et le champ de contrainte et de déformation. La méthode de modélisation développée a été entièrement développée en langage C++.

Le quatrième chapitre du manuscrit présente une validation et une application de la méthode de modélisation développée. La démarche de modélisation est dans un premier temps validée. Puis la méthode est ensuite appliquée à la simulation du dépôt de rubans de préimprégné. Nous simulons ainsi la phase de refroidissement que subit le matériau au cours du procédé ATP.

Chapitre 1

LE SOUDAGE DES THERMOPLASTIQUES, ETAT DE L'ART

Sommaire

1.1 Rappels sur les différentes méthodes de soudage	2
1.1.1 Le soudage avec chauffage en volume	2
1.1.2 Le soudage avec chauffage par friction	3
1.1.3 Le soudage avec chauffage électromagnétique	3
1.1.4 Le soudage en deux étapes	4
1.2 Le procédé d'empilement par soudage et consolidation en continu	5
1.2.1 Principe du procédé et variantes technologiques	6
1.2.2 Description des mécanismes impliqués dans ce procédé	12
1.2.3 Modélisation du procédé en continu	19
1.3 Les matériaux utilisés	20
1.3.1 Le poly-éther-éther-cétone (PEEK)	20
1.3.2 Le composite à matrice PEEK renforcée de fibres de carbone	25
1.4 Cristallisation	29
1.4.1 Mécanismes de cristallisation	29
1.4.2 Cinétique de cristallisation	35
1.5 Contraintes résiduelles dans les composites thermoplastiques .	40
1.5.1 Formation des contraintes résiduelles à l'échelle microscopique	41
1.5.2 Formation des contraintes résiduelles à l'échelle macroscopique	45
1.5.3 Etapes du procédé mises en cause dans la formation des contraintes résiduelles	48
1.5.4 Ajout multiple de plis	48
1.5.5 Refroidissement de la pièce jusqu'à la température ambiante	49
1.5.6 Zones de la pièce soumises à la formation des contraintes résiduelles	49
1.5.7 Études précédentes réalisées sur la modélisation des contraintes ré- siduelles dans les procédés de placement de pli	50
1.5.8 Conclusions	53

D'un point de vue industriel, les applications, actuelles et potentielles, basées sur le principe du soudage des polymères semi-cristallins et de leurs composites associés sont nombreuses et concernent différents secteurs industriels. Nous les passons en revue dans ce chapitre, ainsi que les tentatives de modélisation des procédés auxquelles elles ont donné naissance. Dans un premier temps, nous expliquerons les différentes méthodes de soudage utilisées actuellement, avant de nous concentrer sur le soudage en continu. Cette dernière technique est très prometteuse dans le secteur aéronautique pour mettre en oeuvre des pièces de composites de grandes tailles par empilement et soudage de couches de préimprégnés successives. Cette technique présente l'avantage d'être automatique et permet de réduire les coûts par rapport au procédé sous autoclave. Nous expliquerons les différents mécanismes physiques impliqués lors du procédé d'empilement avec soudage et consolidation en continu et la manière dont ils ont été traités dans la littérature. Ces mécanismes dépendent directement des conditions thermiques de l'interface. Nous décrivons ensuite les matériaux utilisés dans ce procédé. Enfin, les mécanismes de cristallisation sont analysés, ainsi que les modèles de cinétique de cristallisation, avec une attention particulière pour la cristallisation du PEEK. Enfin, nous présentons les mécanismes responsables de la formation des contraintes résiduelles dans le procédé, ainsi que les modélisations numériques qui ont été réalisées pour ce type de procédé.

1.1 Rappels sur les différentes méthodes de soudage

Ageorges [AYH01] a réalisé récemment une revue détaillée des différentes méthodes d'assemblage pour les composites thermoplastiques (en particulier dans le cas de composites PEEK (Poly-ether-ether-cétone) renforcé de fibres de carbone) et a répertorié les travaux associés. Il a classé ainsi les différentes techniques d'assemblage par fusion suivant quatre classes (tableau 1.1). Nous présentons dans la section suivante les quatres techniques d'assemblage par fusion.

Consolidation par fusion			
Chauffage en volume	Chauffage par friction	Chauffage électromagnétique	Soudage en 2 temps
-Co-consolidation -Adhésifs à chaud -Assemblage avec film amorphe	-Soudage par rotation -Soudage par vibration -Soudage ultra-sons	-Soudage par induction -Chauffage micro-ondes -Chauffage diélectrique -Soudage avec résistance	-Plaques chauffantes -Gaz chaud -Source rayonnante (Infra-rouge, laser)

TABLE 1.1 – Techniques de soudage par fusion [Ageorges, 2001]

1.1.1 Le soudage avec chauffage en volume

Les techniques de chauffage volumique pour réaliser une co-consolidation sont au nombre de trois : l'autoclave, le moulage par compression et le formage avec diaphragme. Le principe de ces techniques est de mettre en contact sous pression les deux parties à assembler et d'autre part de les maintenir à une température constante. La co-consolidation est une méthode de soudage quasi-idéale : en effet aucun matériau étranger n'est introduit à l'interface et la zone soudée doit pouvoir atteindre la même résistance mécanique que le matériau initial. Cependant, cette technique nécessite un outillage complexe pour maintenir la pression sur toute la pièce et éviter

la déconsolidation, car toute la pièce est chauffée au dessus de la température de fusion. L'ajout de colles à chaud ou d'un film amorphe peut également être utilisé. La technique utilisée pour permettre une bonne consolidation sans dépasser la température de fusion du matériau semi-cristallin consiste à introduire avant la consolidation un film thermoplastique amorphe pour souder deux parties semi-cristallines. On peut citer comme exemple la technique Thermabond qui consiste à introduire un film de PEI (Polyétherimide) pour souder l'APC-2 et qui semble avoir fait ses preuves [CMS⁺89].

1.1.2 Le soudage avec chauffage par friction

Pour cette catégorie de soudage, l'énergie nécessaire à la fusion du polymère à l'interface des deux pièces à souder est générée par frottement. Les techniques de soudage avec chauffage par friction sont par exemple le soudage par rotation, par vibrations ou par ultrasons. Les techniques de soudage par rotation et par vibrations ont été entreprises pour le soudage du matériau APC-2 [Mag89, Sch94]. Ces techniques ne semblent pas efficaces pour les matériaux composites : en effet le mouvement des matériaux l'un par rapport à l'autre peut causer une détérioration des microstructures ou casser des fibres [Mag89]. En revanche la technique de soudage par ultrasons est couramment utilisée pour les matériaux thermoplastiques. Les pièces à souder par cette technique sont alors tenues ensemble sous pression et soumises à des vibrations ultrasonores perpendiculaires à la surface de contact. Les contraintes hautes fréquences produisent de la chaleur dans le matériau. La chaleur doit de plus être générée de façon sélective pour provoquer la fusion de l'interface. Les fréquences utilisées sont généralement élevées (20-40 kHz) et les amplitudes relativement faibles (15-60 μm) (figure 1.1a). Les exemples d'application du soudage ultrasons au matériau APC-2 sont nombreux [SG89, Tod90, Bee91, DCJ⁺91, BG86, Ben95]. Le principe est le même pour le soudage par vibrations. La sollicitation est effectuée parallèlement à l'aire de contact et avec une fréquence plus faible (120-240 Hz) et des amplitudes de l'ordre de 1-5 mm (figure 1.1b).

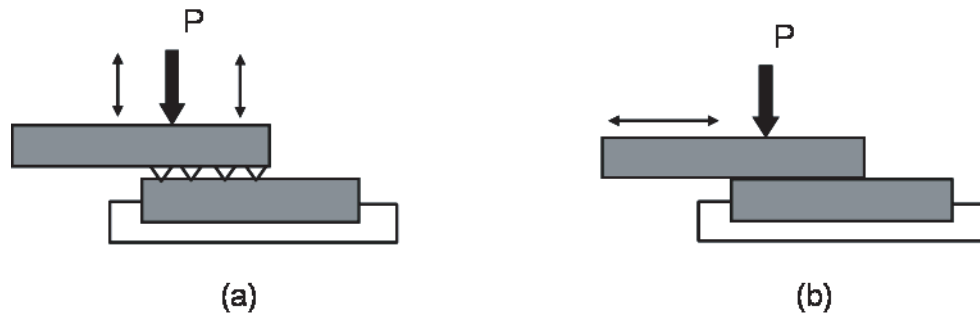


FIGURE 1.1 – Représentation schématique : (a) du soudage par ultrasons, (b) du soudage par vibrations

1.1.3 Le soudage avec chauffage électromagnétique

Parmi les techniques de chauffage électromagnétiques, les chauffages diélectriques et par micro-ondes sont nettement moins efficaces que les techniques de soudage par induction et par résistance, notamment si les matériaux sont renforcés par des fibres de carbone. En effet ces matériaux sont de véritables écrans aux ondes dans la plage des micro-ondes [LS4a, LS4b]. Dans le cas du soudage par induction (figure 1.2a), les matériaux à souder sont soumis à un

champ d'induction produit par une bobine. Le champ d'induction génère alors un courant de Foucault dans le matériau conducteur. Les fréquences du champ d'induction varient de 60 Hz à 10 MHz. Le chauffage par induction est couramment utilisé pour souder le matériau APC-2 [BS89, Tod90, WGMC90]. Dans le soudage par résistance (figure 1.2c), un courant électrique parcourt soit une grille conductrice implantée à l'interface à souder (qui doit être électriquement isolante), soit directement les fibres du matériaux lorsqu'elles sont conductrices. La température augmente ainsi par effet joule et le polymère fond, ce qui permet d'assembler les deux pièces. Lors du soudage par micro-ondes (figure 1.2b), l'interface est excitée à des fréquences allant de 1 à 100 GHz. Une couche interfaciale permet de concentrer à l'interface la chaleur générée. Le soudage par résistance de l'APC-2 a été étudié, avec ajout d'un film de PEEK [EG88b, EGV89, Mag89, DCJ+91], ou sans ajout de couche intermédiaire [SG89]. [AZ96] a montré que la technique de soudage par résistance avec impulsion (IRW) dans laquelle la chaleur est introduite via des pulsations électriques haute puissance - jusqu' à 600 kW/m², en comparaison à une puissance de 30 à 160 kW/m² pour la technique classique- conduit à des propriétés mécaniques prometteuses. Le principal avantage de ce système est de réduire le temps de chauffage jusqu'à 5 fois par rapport à la technique classique de soudage par résistance. Ceci permet alors de réduire les problèmes de sur-chauffages ou de dé-consolidation [Tod90].

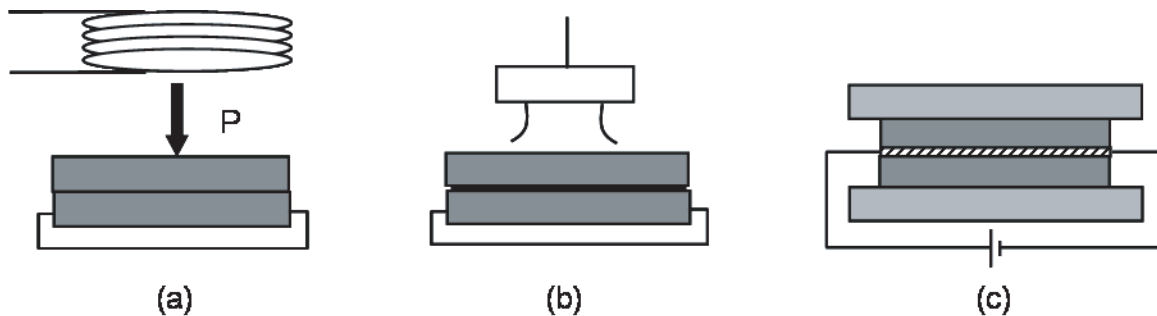


FIGURE 1.2 – Représentation schématique : (a) du soudage par induction, (b) du soudage par micro-ondes, (c) du soudage par résistance

1.1.4 Le soudage en deux étapes

Dans le soudage en deux étapes, une source de chaleur externe au système est utilisée et permet de chauffer la surface des pièces à mettre en contact. La source de chaleur peut être un miroir chauffant, un gaz chaud ou une source rayonnante (laser, infrarouge). Les techniques de « soudage en deux temps » nécessitent d'ôter l'outillage chauffant de la surface du matériau entre l'étape de chauffage et celle de consolidation. Cette technique cependant limite la taille envisageable des pièces à souder, car toute la surface doit être uniformément chauffée. Les temps de chauffe sont généralement longs. De plus, il faut noter qu'entre la première et la seconde étape, la température en surface diminue et la chaleur est conduite à l'intérieur du matériau, ce qui peut être problématique. Parmi toutes ces techniques de chauffage, chacune a des paramètres spécifiques différents et est plus ou moins avantageuse selon les utilisations. A l'échelle industrielle, l'optimisation des coûts pousse d'une manière générale à réduire les temps de fabrication. Il faudra donc dans ce cas avoir recours à une technique de consolidation par fusion rapide. D'autre part, la surchauffe du matériau a tendance à provoquer la déconsolidation des plis dans les zones adjacentes ou à dégrader le matériau. Dans l'article de Ageorges [AYH01] les paramètres typiques des différents procédés de soudage par fusion sont donnés. Les procédés

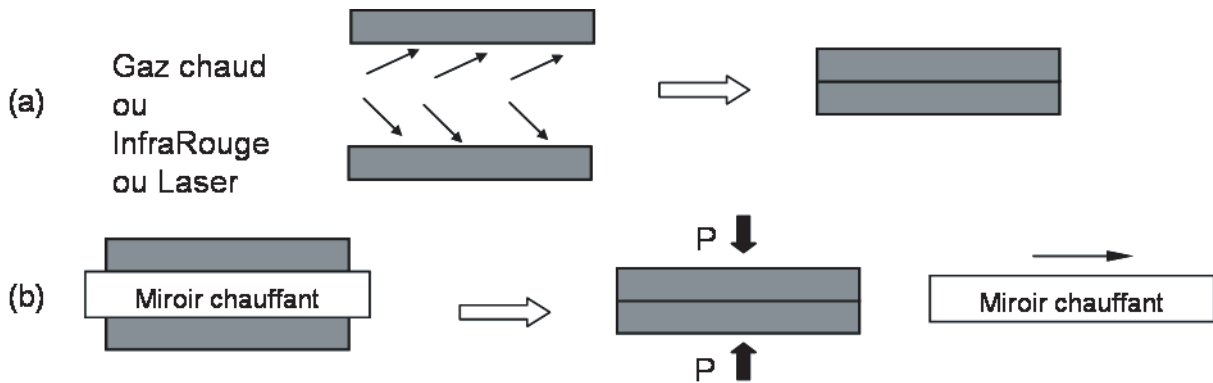


FIGURE 1.3 – Représentation schématique du soudage : (a) par gaz chaud, IR ou laser, (b) par miroir chauffant

de drapage et de consolidation en continu de matériaux composites à matrice thermoplastiques visent à fabriquer des grandes pièces à une cadence soutenue (vitesse de dépose d'environ 40 mm/s). Avec les paramètres procédés classiquement utilisés et disponibles sur les machines actuelles, le temps pendant lequel les deux surfaces à souder sont en contact à une température supérieure à leur température de fusion est typiquement de l'ordre de la seconde.

1.2 Le procédé d'empilement par soudage et consolidation en continu

Le coût des procédés de mise en forme des composites est un facteur diminutif majeur dans leur développement. Les coûts de production ne peuvent être réduits que par l'utilisation d'une technologie de fabrication peu coûteuse et automatisée. Cependant les processus automatisés soulèvent encore parfois des inquiétudes concernant la qualité du produit. Pour les composites thermoplastiques, le procédé de consolidation en continu développé récemment peut avoir le potentiel de réaliser la qualité désirée et de diminuer les coûts de production.

Le procédé réduit les coûts de fabrication [PRD⁺96] et ouvre des nouvelles possibilités de conception [TEP04]. On peut citer notamment la fabrication automatisée de pièces complexes 3D. Les utilisations les plus courantes du procédé d'empilement par soudage et consolidation en continu sont l'enroulement filamentaire et le « placement de pli » automatisé (c'est-à-dire le drapage et la consolidation en continu de plis). Cependant on peut également imaginer la fabrication de pièces convexes ou concaves avec un outillage adéquat. Ce procédé de mise en oeuvre de matériaux composites est une solution potentielle pour fabriquer des pièces structurales de grandes tailles avec des coûts de production réduits. Ainsi les applications envisageables pour ce type de matériau sont pour l'industrie aéronautiques les ailes d'avion, les peaux de fuselage, les châssis, les raidisseurs. Le procédé peut également être envisagé pour d'autres types d'applications industrielles : des pièces de structures pour les sous-marins, les véhicules militaires, l'industrie du pétrole [LGS⁺92, LGS⁺95] ou encore des peaux pour les matériaux sandwichs [LFG⁺03]. Le procédé est encore à l'étude aux Etats-Unis, en Europe (France, Allemagne, Angleterre, Irlande, Espagne, Hollande...) et en Asie (Japon, Corée du sud...) aussi bien dans le milieu universitaire qu'industriel. Les principaux avionneurs mondiaux s'intéressent à ce nouveau procédé, développé à la NASA en vue de son industrialisation. On peut ainsi citer les industriels Bell Helicopter, Lockheed Martin, Agusta Helicopter, Dassault, EADS (Airbus), Eurocopter, Boeing et probable-

ment ses partenaires.

1.2.1 Principe du procédé et variantes technologiques

Description générale

Les procédés de placement et de consolidation en continu de matériaux composites à matrice thermoplastiques consistent en un drapage automatisé des plis pré-impregnés ainsi qu'un soudage simultané des plis les uns sur les autres grâce à un chauffage local de la matrice (figure 1.4). Dans ce procédé, alors qu'habituellement pour fabriquer des pièces composites à matrice thermoplastiques on a recours à un processus en deux étapes avec un drapage manuel ou automatique suivi d'une consolidation en autoclave, le procédé de consolidation en continu réduit la fabrication à une seule étape. Une fois que la surface de la structure conçue a été couverte

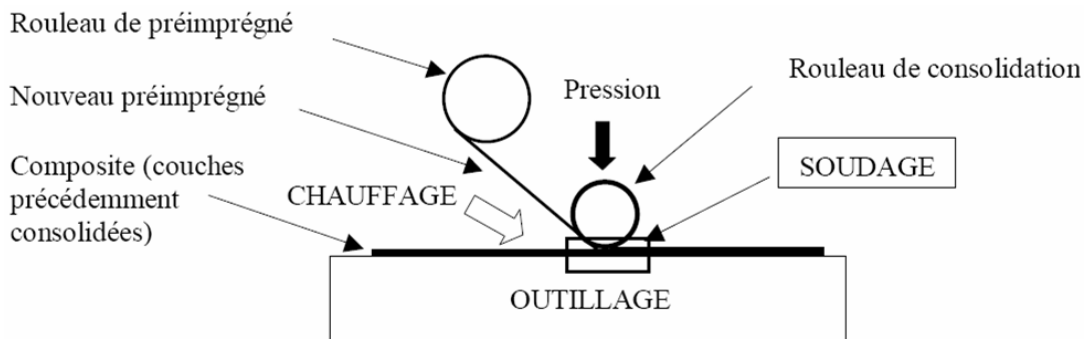


FIGURE 1.4 – Représentation du schéma de principe du procédé industriel

et que l'épaisseur a été réalisée, la pièce est achevée. Aucune cuisson ou consolidation postérieure n'est nécessaire. Le chauffage local des deux préimprégnés peut être réalisé avec un laser [Aga91, Gro88, PYG99] ou à l'aide de buses injectant un gaz chaud, technique qui a été le plus étudiée [Shi97, Tos03, TEP04, SH97, CM97, CM98, Tie03, KKL04]. La consolidation in-situ est assurée grâce à un rouleau qui peut être chauffé. En plus du coût réduit, le procédé de consolidation en continu offre également des avantages en terme de flexibilité et d'exécution. Le processus par chauffage localisé est en soi approprié à la fabrication de pièces de grandes surfaces et de courbures modérées, telles que des structures de fuselage [CHM93].

La consolidation en continu

Les techniques de consolidation en continu sont couramment utilisées dans les procédés de fabrication tels que l'enroulement filamentaire et le placement de fibres. Malgré les différences entre les techniques utilisées pour mettre en oeuvre ces deux dispositifs, des procédures similaires sont requises pour assurer une liaison complète entre les couches du composite. Une source de chaleur focalisée est appliquée à l'interface entre le ruban de préimprégné qui va être déposé et le substrat pour créer une zone fondue. L'intensité du chauffage de la source doit être correctement ajustée pour assurer la fonte des deux surfaces en contact. Une fois que la zone fondue créée par le système de chauffage, une pression proportionnée doit être appliquée à l'aide d'un rouleau pour comprimer les surfaces fondues, de taille inégales, et provoquer ainsi l'écoulement de la matrice afin de remplir les zones vides. Le contact d'intime et le soudage par diffusion dans l'interface peuvent alors être établis. La pression du rouleau doit être maintenue constante jusqu'à ce que la température en sortie de la zone fondue passe en-dessous de la température de

fusion de la matrice, ceci afin d'empêcher la formation de zones vides par rétrécissement volumétrique ou dégagement d'énergie du réseau de fibres. L'opération du processus de consolidation en continu est réalisée en déplaçant la tête de dépose. Cependant, la vitesse de la consolidation en continu est limitée par le temps requis pour effectuer le contact intime et le soudage par diffusion. En général, la vitesse de la consolidation, l'intensité du chauffage, et l'intensité de la pression exercée par le rouleau sont utilisées pour caractériser la fenêtre de mise en oeuvre du procédé de consolidation en continu. Le procédé de consolidation en continu peut être divisé en trois étapes comme représentées sur la figure 1.5. Ces étapes sont la fusion localisée, la consolidation non-isotherme et le refroidissement contrôlé. Elles sont présentées en détail dans la section suivante.

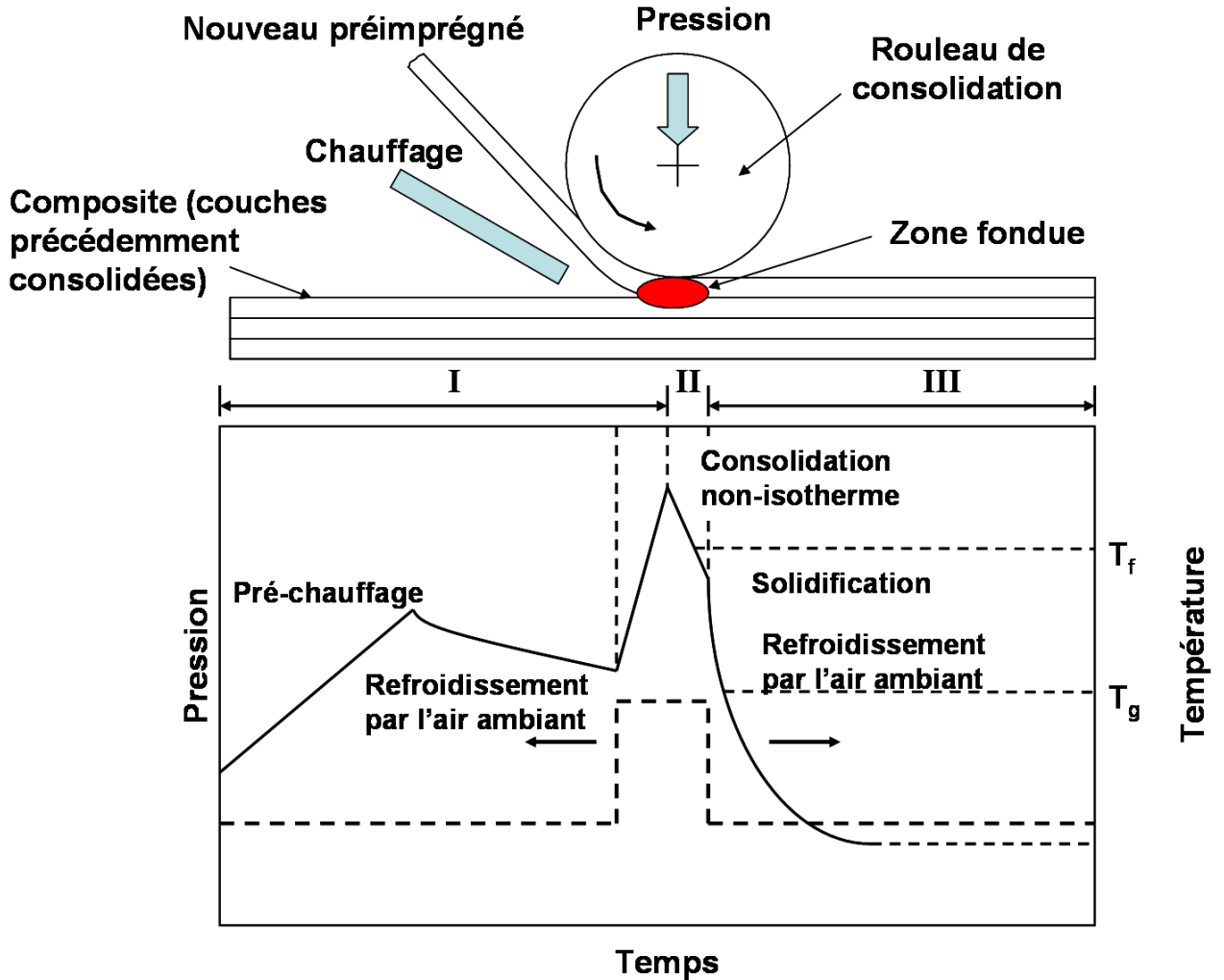


FIGURE 1.5 – Phases successives lors du procédé d'empilement par soudage et consolidation en continu

Fusion localisée

Dans le cas du procédé de consolidation en continu, il est préférable que la fusion soit générée uniquement dans le voisinage du point de contact où le nouveau ruban de préimprégné et

le substrat consolidé se rencontrent. Si la vitesse de consolidation souhaitée est trop élevée telle qu'une seule source de chaleur soit insuffisante pour atteindre la température requise, un système de préchauffage peut être adapté pour élever la température du nouveau ruban de préimprégné. Puisque le ruban de préimprégné doit être chauffé en quelques secondes bien au-dessus de la température de fusion, des dispositifs de chauffage fortement focalisés doivent être utilisés pour garantir la fusion des surfaces en contact. Cependant, un chauffage excessif peut mener à la dégradation de la matrice par la scission et l'oxydation des chaînes de polymère, et conséquemment peut affecter la cristallisation, la liaison de l'interface fibre/matrice et les propriétés de la matrice [DVK92]. Par conséquent, le choix et l'arrangement appropriés des dispositifs de chauffage sont les facteurs les plus importants pour obtenir un procédé de consolidation en continu efficace. Beaucoup de dispositifs de chauffage, dont le chauffage par gaz chaud, le chauffage par infrarouge focalisé, le chauffage par laser, le chauffage par ultrasonique, le chauffage par micro-onde, le chauffage par induction, et le chauffage par énergie conductrice peut être utilisés pour le soudage par des composites thermoplastiques. Parmi ces derniers, les dispositifs de chauffage hautement localisés, tels que le chauffage par gaz chaud et le chauffage par énergie laser, sont utilisées généralement pour effectuer le chauffage du point de contact et les dispositifs de chauffage par infrarouges sont la plupart du temps utilisés pour l'étape de préchauffage [BG87, EG88a, Güç92, TGML87, AGMS92, BG88, HGM95].

Consolidation non-isotherme

La consolidation en continu est un processus de fabrication non-isotherme qui implique un chauffage en continu, une phase de compactage, et une solidification en continu, ce qui entraîne une grande variation de température dans la zone de déformation. Cependant, il est très difficile, sinon impossible, de mesurer physiquement le changement rapide de température dans la zone de déformation. Par conséquent, un modèle qui prend en compte tous les mécanismes impliqués dans la consolidation non-isotherme doit être établi pour obtenir toute l'information nécessaire. Trois mécanismes majeurs, l'écoulement de la résine, le contact intime et le soudage par diffusion doivent être soigneusement pris en compte dans le modèle. On considère que pour former de bons contacts et liaisons, les mécanismes mentionnés ci-dessus doivent se produire séquentiellement ou simultanément [MNV89, Gut85, GCKW86]. Une description schématique des phénomènes physiques se produisant dans la consolidation en continu non-isotherme est présentée figure 1.6.

La variation des épaisseurs du ruban de préimprégné est employé comme indicateur pour montrer l'occurrence de chacun des mécanismes. L'échelle de temps de la consolidation en continu est inférieure à quelques secondes. Il est bien connu que les surfaces des préimprégnés disponibles dans le commerce sont de tailles inégales. Lorsque deux surfaces sont mises en contact sans appliquer de pression, des zones de vide se forment à l'interface des deux surfaces. Il est évident que les chaînes de polymère ne peuvent pas diffuser sans contact intime. Par conséquent, il est essentiel, pour réaliser une fusion par soudage réussie, d'appliquer un champ de pression approprié pour comprimer la matrice visqueuse, afin de combler les zones vides, et ainsi créer un contact parfait. Le temps nécessaire pour que les chaînes de polymère diffusent à travers l'interface est relativement court comparée au temps nécessaire à l'écoulement de la matrice. Par conséquent, il est connu que le soudage par diffusion est achevé immédiatement après la fusion des deux surfaces fondues. La microstructure de la zone de contact est également supposée être identique à celle de n'importe quelle autre section de coupe [BG91, DL85]. Cependant, une certaine partie de la pression appliquée est absorbée par le réseau de fibres, et l'énergie stockée dans le réseau de fibres déformé peut être libéré à la sortie du rouleau de compaction et former de ce fait des zones vides. Par conséquent, le réseau de fibres doit être bloqué dans la matrice

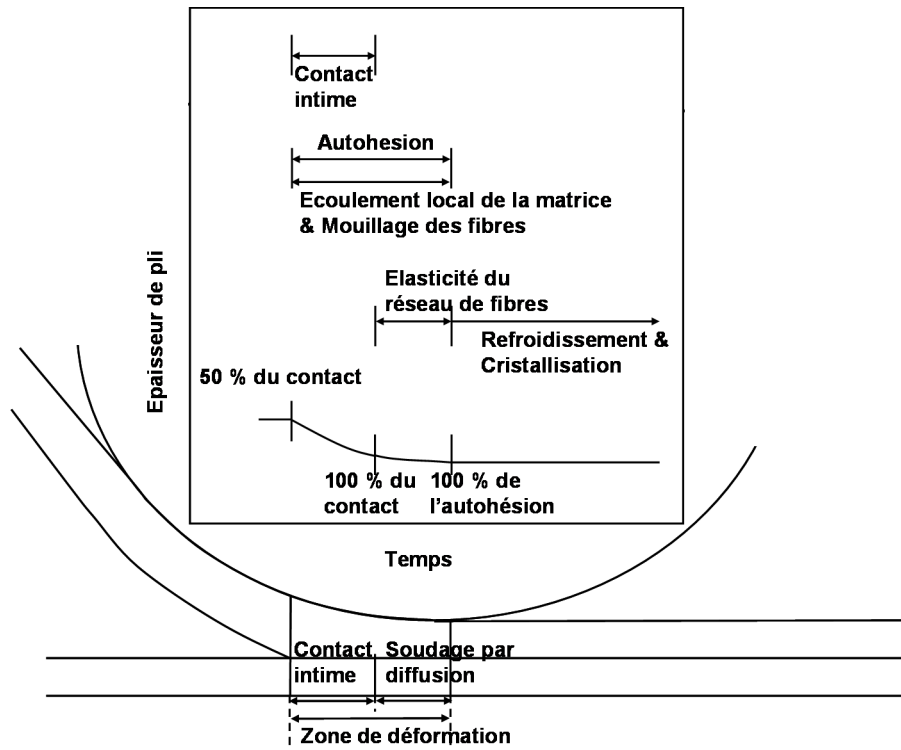


FIGURE 1.6 – Description schématique des phénomènes physiques au cours de la consolidation non-isotherme

avant la sortie. En d'autres termes, le rouleau de compaction devrait agir comme un absorbeur de chaleur pour abaisser la température de la zone de déformation et initier la cristallisation avant sa sortie. Ceci est difficile à réaliser compte tenu de la vitesse de consolidation élevée.

Refroidissement

La dernière étape de la consolidation en continu est de refroidir et de solidifier les parties consolidées. Il est bien connu que, en plus du renfort, les propriétés physiques et mécaniques des composites sont déterminées par la microstructure de la matrice, alors que la morphologie des thermoplastiques est déterminée par son histoire thermique [VS86, VS88, LP86, DVK92]. Pour les matériaux thermoplastiques semi-cristallins, la cristallisation se produit lors du refroidissement. L'équilibre entre les phases cristalline et non-cristalline est délicat. De plus, la présence de fibres de renforcement, qui procure une surface importante pour la nucléation, complique encore plus la cinétique de cristallisation pour un matériau composite thermoplastique [VS86, VS88, LP86, DVK92]. Afin de bien comprendre les changements dans les propriétés mécaniques des composites thermoplastiques fabriqués dans différentes conditions, nous devons étudier plus de paramètres que le degré de cristallinité. La densité de nucléation, les tailles des sphérolites et le degré de perfection cristalline devraient également être pris en compte [DVK92]. Cependant, corrélérer les changements des propriétés mécaniques avec les changements de la morphologie de la matrice n'entre pas dans le cadre de la présente étude. Alors que les propriétés physiques et mécaniques des composites thermoplastiques bruts sont influencés par le cycle entier de processus, la vitesse de refroidissement a été identifiée comme le paramètre le plus influent sur la morphologie de la matrice et le degré de cristallinité. En général, des vitesses

de refroidissement plus lentes mènent à des degrés de cristallinité plus élevés, qui entraînent une augmentation de la rupture en traction, de la rupture en compression, et de la résistance de la matrice aux solvants [TSB87]. Du fait du changement rapide de température dans la consolidation en continu, la vitesse de refroidissement peut être trop élevée pour obtenir la cristallisation désirée. Par conséquent, une vitesse de refroidissement contrôlée ou un procédé de recuit secondaire peuvent être incorporés dans le procédé global. Dans la consolidation en continu, le refroidissement commence immédiatement après le chauffage du point de contact. Ceci rend difficile le contrôle de l'histoire thermique. Cependant, les mécanismes physiques impliqués au cours du procédé doivent être bien compris et analysés pour contrôler chaque étape de la boucle procédé-structure-propriétés et ainsi prédire les propriétés mécaniques du stratifié consolidé.

Variantes du procédé

L'ensemble des procédés d'empilement par soudage et consolidation en continu suivent le même principe avec un chauffage au niveau de l'interface pli/pli -souvent réalisé par des torches- puis un rouleau qui passe à la surface du pli qui vient d'être posé. Cependant ce système classique a parfois été modifié par des développements plus ou moins « maison » dans le but d'améliorer la consolidation. Le centre des matériaux composites (CCM) de l'université du Delaware aux Etats-Unis a développé une tête disposant de deux torches (figure 1.8), l'une servant à préchauffer le matériau, et l'autre servant de chauffage principal [PGL97, Tie03, PRD⁺96]. Ainsi le système utilisé par Pitchumani [PRD⁺96] se compose de deux torches et de deux rouleaux. La première torche et le premier rouleau ont le même rôle que dans le procédé classique. L'originalité est que la seconde torche vient réchauffer la surface du pli qui vient d'être posé, avant que le second rouleau ne passe à sa surface (figure 1.7). L'étude de Pitchumani [PRD⁺96] semble montrer que

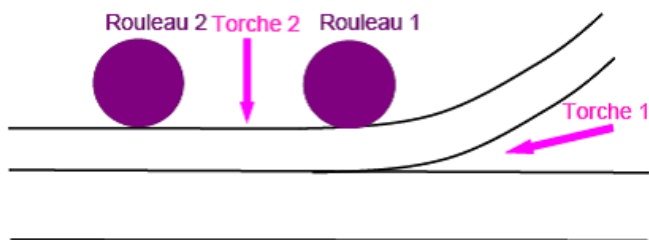


FIGURE 1.7 – Principe du procédé de Pitchumani [PRD⁺96]

c'est surtout la première torche qui a un effet notable sur le degré de consolidation ainsi que sur la porosité; alors que grâce au second rouleau on obtient des meilleurs résultats. En forçant le refroidissement des plis au-delà de la zone de consolidation, il semble donc qu'on favorise la réduction des porosités dans les plis. D'autres systèmes d'application de la pression ont été étudiés principal [CM97, CM98] (figure 1.9) ou développés récemment [LGF⁺03]. Le système proposé par Lamontia [LFG⁺03] se compose également de deux torches et de deux rouleaux, pourtant le principe est un peu différent (figure 1.10).

Chacune des deux torches chauffe le matériau à un endroit spécifique; la première réchauffe les couches déjà posées alors que la seconde chauffe le nouveau pli. Le premier rouleau fonctionne de façon classique en provoquant le contact intime entre les deux plis et permet ainsi le début de la cicatrisation. Un patin chauffant a été ajouté à ce rouleau pour maintenir plus longtemps une température élevée afin de faciliter la diffusion des chaînes. Le second rouleau qui passe ensuite est destiné à refroidir le matériau et à le consolider dans une bonne position en comprimant les

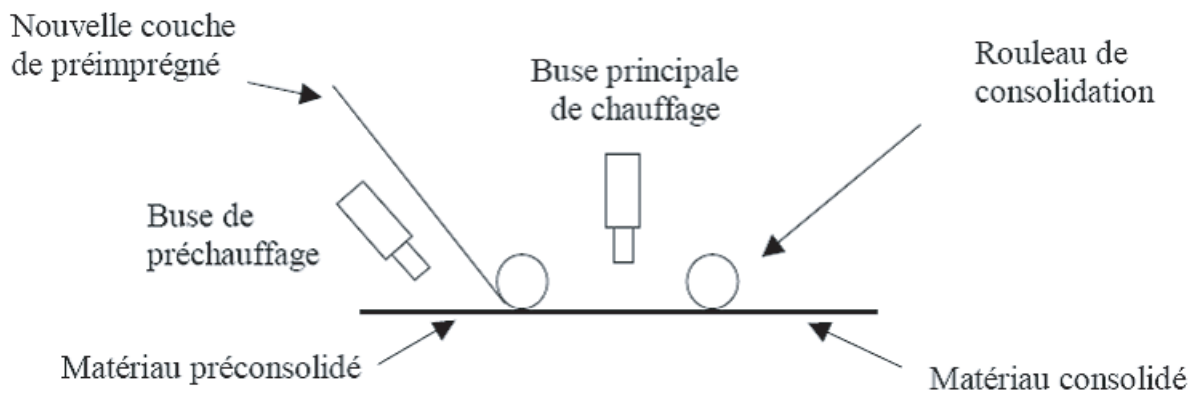


FIGURE 1.8 – Tête de placement de l’université du Delaware (Etats-Unis) avec l’utilisation d’une torche supplémentaire pour préchauffer

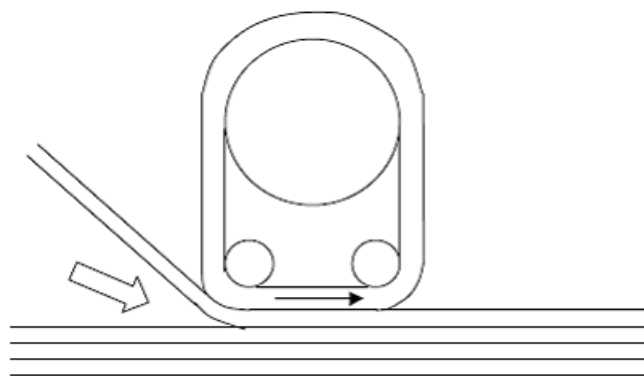


FIGURE 1.9 – Tête du NASA Langley Research Center [CM97, CM98]

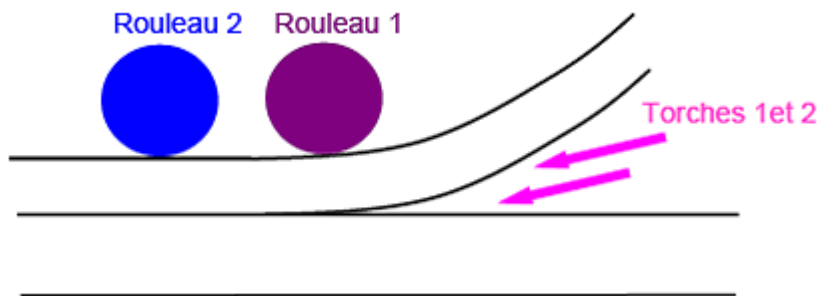


FIGURE 1.10 – Principe du procédé de Lamontia [LFG⁺03]

porosités. Un patin froid est également ajouté pour prolonger le processus de refroidissement. La tête conçue permet de consolider 12 plis en même temps pour la réalisation de pièces de géométrie simple, c'est-à-dire plate.

Dans son étude sur les contraintes induites par le rouleau, Sonmez [SH97] conseille également de mettre un patin qui prolonge l'étendue du rouleau ou un second rouleau afin de maintenir la pression jusqu'à ce que le matériau atteigne la T_g . Enfin, en ce qui concerne l'éventualité de préchauffer l'outillage, Yousefpour [YGN01] semble montrer qu'il est nécessaire de chauffer le mandrin dans le cas de l'enroulement filamentaire pour obtenir des pièces de bonne qualité. Gruber et al. [GLP04] ont également utilisé plusieurs torches de préchauffage de l'outillage nu, des couches de composites préalablement déposées et du nouveau pli de préimprégné avant son passage sous la torche principale.

1.2.2 Description des mécanismes impliqués dans ce procédé

Pendant leur mise en oeuvre, les composites thermoplastiques subissent un grand nombre de changements microstructuraux qui peuvent affecter leurs propriétés. Pendant la consolidation en continu, des changements de propriétés apparaissent lors de la fusion, de la cristallisation, et de l'éventuelle dégradation du polymère. Des porosités sont susceptibles de se former et des contraintes résiduelles peuvent se développer. Tous ces phénomènes sont fortement dépendants de l'histoire thermique du procédé. Comprendre ces changements et être capables de les prédire est essentiel pour prévoir la qualité des pièces fabriquées.

Dans la littérature, plusieurs travaux visent à modéliser la consolidation en continu de thermoplastiques que ce soit pour l'enroulement filamentaire ou le placement de plis. Ces modèles se décomposent en plusieurs étapes, un peu différentes selon les auteurs [DHSG93, BPWG94, SPBG95, PDGR4a, PRDG4b, PRD⁺96, LFG⁺03, TEP04], et sont plus au moins complets. Cependant, on peut schématiser ces modèles selon les différents points suivants :

- Transfert de chaleur.
- Contact intime et réduction des porosités [MS2a, MWS2b].
- Diffusion des chaînes macromoléculaires du polymère à travers l'interface. Ce mécanisme qui conduit à la cicatrization de l'interface est appelé « autohésion » [MS91].
- Consolidation.
- Fusion et cristallisation.
- Croissance des porosités tant que la température est supérieure à la T_g , avant et après le rouleau ; réduction / compression des porosités [PRD⁺96].
- Dégradation du polymère.
- Contraintes induites par la procédé [NGC92].
- Déformation viscoélastique du matériau dans la zone confinée [SH7b].

Chacun de ces phénomènes est dépendant de la température ou du gradient de température. Un modèle thermique doit donc être développé. La pression est un autre paramètre qui peut aussi être pris en compte dans la modélisation, ainsi que le flux de matrice dans les fibres. Pour débiter notre étude, il est nécessaire de faire un bilan point par point sur ce qui a déjà été fait.

a- Évolution de l'adhésion

Contact intime

Les auteurs justifient la prise en compte d'un tel phénomène dans le procédé par le fait que les surfaces de matériaux ne sont jamais parfaitement lisses dans la réalité et contiennent des aspérités de surface [LS87, MWS2b, BMCPG98, LD85a]. La présence de ces aspérités ne permet pas un contact parfait entre les deux surfaces amenées en contact. Il est donc nécessaire de définir à un instant donné, la proportion d'aire de surface qui est physiquement en contact, d'où l'appellation de contact intime. Ce phénomène se résume à un problème hydrodynamique puisqu'il faut étudier l'écoulement du polymère sous l'application de la pression. Le taux de surfaces en contact augmente lorsque les aspérités se déforment sous l'application de la pression. Dans un procédé de consolidation en continu, c'est le rouleau presseur qui va permettre le contact intime entre les deux plis et ainsi réduire la porosité inter-plis. Plusieurs auteurs se sont intéressés à l'évolution du contact intime entre deux plis pré-imprégnés lors de la consolidation en continu. Les approches proposées pour exprimer un degré de contact intime en fonction de la rugosité de surface des plis, de la pression entre les plis et du profil de température sont similaires [DL85, HL87, LS87, LL90a, LL90b, MS2a, MWS2b, TEP04]. Pitchumani et coll. [PRD⁺96] se basent sur le modèle de Mantell et Springer [MS2a, MWS2b] qu'ils étendent au cas anisotherme et en considérant une pression non uniforme sous le rouleau. Le modèle schématise ainsi les aspérités de surface du pli comme une suite périodique d'éléments rectangulaires qui fluent sous la pression. Ceci se traduit par une diminution de la hauteur de l'élément et simultanément une augmentation de sa largeur donc de l'aire de contact interfaciale (figure 1.11).

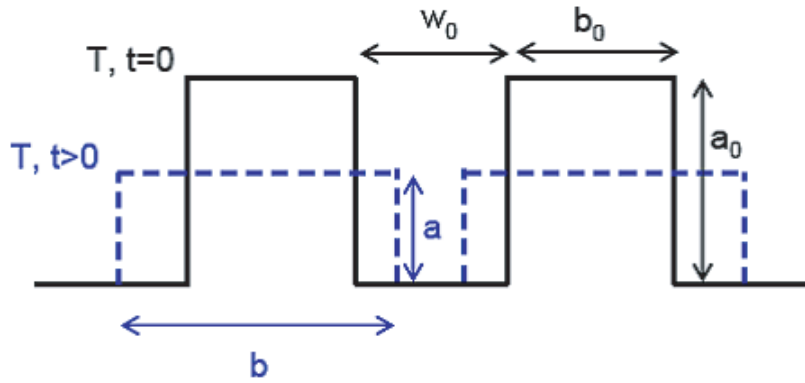


FIGURE 1.11 – Éléments rectangulaires représentant l'évolution de la surface rugueuse

Le degré de contact intime D_{ic} est défini comme le rapport entre la largeur instantanée des aspérités rectangulaires et la longueur d'onde de l'arrangement périodique. Physiquement, le terme D_{ic} représente la fraction de l'aire interfaciale en contact intime à un instant lagrangien τ pendant le processus. Ainsi, pour la valeur $D_{ic} = 1$ le contact intime est achevé. En reprenant les notations de Lee et Springer [LS87] définies figure 1.11, le degré de contact intime est :

$$D_{ic} = \frac{b}{w_0 + b_0} \quad (1.1)$$

En considérant la définition du degré de contact intime proposée ci-dessus, en écrivant la conservation du volume et de la masse et en faisant l'hypothèse d'un flux laminaire (qui dépend de la viscosité de la matrice et de la pression), Lee et Springer [LS87] propose d'estimer le degré de contact intime $D_{ic} = 1$ en fonction de la géométrie des aspérités, de la viscosité de la matrice μ_{mf} , de la pression appliquée P_{app} et de l'histoire thermique. D'une façon générale, le temps de contact intime pour lequel le contact inter-ply est parfait dépend des paramètres suivants :

$$t_{ic} = f [a_0, b_0, w_0, \mu_{mf}, P_{app}, T] \quad (1.2)$$

Pitchumani et coll. [PRD⁺96] ont appliqué le modèle de contact intime au cas de l'APC-2. En se basant sur des mesures expérimentales des régions lisses et rugueuses de la surface du pli, un modèle semi-empirique a été ajusté et s'exprime sous la forme :

$$D_{ic}(\tau_{ic}) = 0,29 \left[\int_0^{\tau_{ic}} \frac{P}{\mu} d\tau \right]^{1/5} \quad (1.3)$$

τ_{ic} est le temps sous le rouleau presseur pendant lequel il peut y avoir contact intime. Cette équation suppose que le matériau composite se comporte comme un fluide newtonien dans un écoulement laminaire sous une pression appliquée P . μ est la viscosité fibres/matrice qui dépend de la température selon [Gut88] :

$$\mu = A \exp\left(\frac{B}{T}\right) \quad (1.4)$$

On retiendra aussi du premier article de Lee et Springer [LS87] que pour le composite APC-2 consolidé en continu, il semble exister une pression seuil à 0,4 MPa. Cela signifie que si la pression appliquée est inférieure, le temps de contact intime sera plus long. En revanche, si on accroît la pression au dessus de ce seuil, les propriétés mécaniques de la pièce ne seront pas pour autant améliorées. Ceci semble signifier qu'au dessus d'une certaine pression, le temps de contact intime est négligeable devant les autres temps caractéristiques (temps d'interdiffusion des chaînes etc.).

La cicatrisation (« healing »)

La cicatrisation (« healing ») pilote le développement d'une adhésion entre deux polymères ou deux composites à matrice organique. La cicatrisation de l'interface a lieu par interdiffusion des chaînes de polymères de part et d'autre de l'interface, processus dont la cinétique est gouvernée par la reptation de de Gennes [dG71]. Le phénomène est bien compris dans le cas des polymères portés à l'état liquide fondu et dans des conditions isothermes, pour un matériau amorphe. L'interface est totalement réparée lorsque le temps de reptation s'est écoulé. Dans les procédés de soudage, plusieurs complications apparaissent : les conditions sont non-isothermes, il n'y a pas un temps de reptation mais un temps $t_{rep}(T)$, les effets de polydispersités entraînent une distribution des temps et finalement, il faut également intégrer la cristallinité. La guérison de l'interface n'a pas été étudiée de manière détaillée dans le cas de polymères semi-cristallins et dans des conditions fortement non-isothermes. L'étape de cicatrisation par interdiffusion des chaînes macromoléculaires peut se produire à partir du moment où le contact intime entre les deux surfaces est réalisé. Pour modéliser le soudage de composites PEEK renforcé de fibres de carbone à l'aide d'un film amorphe de PEI (Poly-ether-imide), Bastien et Gillespie [BG91] ont discrétisé le profil de température non-isotherme en une succession d'intervalles isothermes T_i^* pendant un temps $\Delta\tau$. Ils ont alors calculé l'évolution de la cicatrisation de l'interface D_h au temps τ_h de la manière suivante :

$$D_h(\tau_h) = \left(\frac{1}{t_r^*}\right)^{1/4} \sum^{\frac{\tau_h}{\Delta\tau}} \left[\frac{\tau(j)^{1/4} - \tau(j-1)^{1/4}}{a_T(\tau_j)^{1/4}} \right] \quad (1.5)$$

Dans ce paragraphe, dont l'objectif est de faire le point sur les différents modèles utilisés pour la description des procédés de consolidation en continu, on ne s'étendra pas sur le sens physique de cette expression. Le facteur de décalage a_T est introduit pour traduire la variation avec la

température du temps de reptation t_r^* déterminé à une température de référence T_{ref} :

$$a_T(T) = \exp \left[\frac{E_a}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{ref}} \right) \right] \quad (1.6)$$

Ce modèle a été utilisé par Agarwal [AGMS92] puis par Pitchumani [PRD⁺96] dans le cas de composites à matrice PEEK. Il faut noter cependant que dans ces articles, la détermination du temps de reptation en fonction de la température est très floue. Lee et Springer [LS87] définissent le degré d'autohésion à partir d'essais mécaniques comme étant le quotient de la résistance interfaciale au temps t sur cette même grandeur après un temps infini. Mantell [MS2a, MWS2b] exprime le degré d'autohésion selon $D_{au} = k.t_a^{n_a}$ avec k une constante qui dépend de la température et t_a le temps. Il faut remarquer que cette expression - avec une constante n_a qui semble dépendre du matériau - est difficilement justifiable par les lois classiques de la physique des polymères.

On pourrait également définir le facteur de décalage a_T à l'aide du modèle de Williams-Landel-Ferry (où modèle WLF) [WLF55]. Dans ce cas a_T s'exprime sous la forme :

$$a_T(T) = a_0 \exp \left[\frac{-C_1(T - T_r)}{C_2 + T - T_r} \right] \quad (1.7)$$

avec C_1 , C_2 , T_r et a_0 des paramètres empiriques.

Couplage contact intime/cicatrisation

Les phénomènes de contact intime et de cicatrisation qui dépendent du temps sont des phénomènes couplés. Le premier est ainsi un pré-requis pour le second. Les expressions relatives à chacun des phénomènes peuvent alors être couplées pour définir un degré de consolidation. Mantell [MS2a] définit le degré de « consolidation » (*bonding* en anglais) par le produit de deux termes : $D_b = D_{ic} \cdot D_{au}$, le premier étant le degré de contact intime et le second le degré d'autohésion. Cette expression a été utilisée dans un article suivant [MWS2b] et validée par des essais sur l'APC-2 dont les plis sont consolidés en autoclave ou par un procédé en continu conçu spécialement. Pitchumani [PRD⁺96] définit le degré de consolidation ou la résistance à l'adhésion interfaciale D_b par :

$$D_b(\tau_h) = \int_0^{\tau_{ic}} D_h(\tau_h - \tau) \cdot \frac{dD_{ic}(\tau)}{d\tau} d\tau \quad (1.8)$$

Le terme D_{ic} est à nouveau le degré de contact intime alors que le terme D_h est relatif à la cicatrisation (*healing* en anglais). Pour appliquer cette relation au procédé de placement de plis, une simplification est faite. On considère que le temps possible pour le contact intime τ_{ic} est égal au temps du pli sous le rouleau. Si le temps disponible pour la cicatrisation τ_h est supérieure à τ_{ic} alors l'approximation $D_h(\tau_h - 1) \approx D_h(\tau_h)$ est faite. On en déduit alors une expression de consolidation simplifiée : $D_b(\tau_h) = D_h(\tau_h) \cdot D_{ic}(\tau_{ic})$.

b- Cinétiques de cristallisation et de fusion

Cristallisation

Le phénomène de cristallisation, notamment dans le cas particulier du PEEK, sera étudié en détail dans le paragraphe 1.4. Le but de cette section est ici simplement de faire le point sur les

travaux qui ont tenté de prendre en compte le phénomène de cristallisation dans leur modélisation des procédés de soudage en continu.

Nejhad et coll. [NGC92] appliquent le modèle développé par Velisaris et Seferis [VS86] à leur procédé d'enroulement filamentaire. Mantell et Springer [MS2a, MWS2b] utilisent le modèle proposé par Lee et Springer [LS87] pour prédire le taux de cristallinité dans le procédé de consolidation en continu. Le premier modèle est basé sur l'équation isotherme d'Avrami. On peut alors avoir un doute quant aux résultats obtenus pour de forts gradients de température. Le second modèle est basé sur l'équation d'Ozawa. Cependant, cet article ne donne pas d'information quand à la détermination des constantes cinétiques et les données expérimentales à hautes vitesses de refroidissement font défaut.

Somnez et Hahn [SH7a, SH7b] s'appuient sur le modèle proposé par Choe et Lee [CL89] dans le cas du PEEK pur pour décrire le phénomène de cristallisation de l'APC-2. On regrettera que le modèle utilisé ait été établi pour le PEEK pur et non pour le composite. D'autre part, le modèle de Choe et Lee [CL89] décrit la densité de germes formés par seconde par la loi d'Hoffmann et Lauritzen -classiquement utilisée pour décrire la vitesse de croissance des sphérolites- ce qui est difficilement vérifiable.

Somnez et Hahn [SH7a, SH7b] disent prendre en compte l'effet de la température du fondu T_m sur le processus de cristallisation anisotherme. Pour cela ils introduisent une cinétique de fusion dépendant de T_m si cette température est comprise entre la température de fusion T_{fusion} et la température d'équilibre thermodynamique T_m^0 . Cependant, le problème physique n'est pas là : à la température T_m considérée, il se peut que tout le polymère soit fondu -i.e le taux de cristallinité tend vers zéro-, en revanche ce sont les germes cristallins non détruits qui modifieront la cinétique de cristallisation et ce phénomène ne peut pas être pris en compte par une cinétique de fusion.

Dans leur modélisation du procédé de consolidation en continu, d'autres auteurs ont tenté d'ajouter à l'équation classique de la chaleur un terme source relatif à la cristallisation. C'est le cas de Mantell [MS2a] qui se base sur le modèle de Maffezzoli [MKN89] pour déterminer la variation du taux de cristallinité. Cependant il faut noter que ce modèle est ajusté via de nombreux paramètres. La cinétique de cristallisation proposée semble loin de la physique classique rencontrée dans les polymères. Lee et Springer [LS87] utilisent de façon plus classique une cinétique de cristallisation identifiée selon la loi d'Ozawa. Cependant la cinétique de cristallisation a été identifiée seulement à de très basses vitesses de refroidissement. Guan et Pitchumani [GP04] ont eu récemment une approche originale et proposent de s'intéresser particulièrement à l'évolution de la microstructure des sphérolites lors du procédé de consolidation en continu de matériaux thermoplastiques. Pour simuler la morphologie cristalline dans l'APC-2 et son évolution au cours du temps ils utilisent : une densité de nucléation hétérogène (due aux fibres) plus une nucléation homogène (dans la matrice) dont la vitesse d'apparition des germes varie selon la loi de Hoffman et Lauritzen, ce qui est à nouveau discutable. D'autre part, il faut noter que cette étude est purement numérique et qu'il n'y a aucune comparaison avec l'expérience. Les résultats sont cependant en accord avec la physique : pour une vitesse de dépose lente, les sphérolites seront moins nombreux et plus grands qu'avec une vitesse de dépose rapide. Nous reviendrons en détail sur ce phénomène dans le paragraphe 1.4. On notera que la microstructure des sphérolites aura une influence sur les propriétés mécaniques du matériau et sur le mode de rupture. Talbott [TSB87] montrait déjà des différences de propriétés mécaniques, pour un taux de cristallinité global identique, dues à la morphologie de la phase cristalline du PEEK. Si la phase cristalline est composée de nombreux petits sphérolites, la déformation plastique sera plutôt intrasphérolitique, le matériau absorbe beaucoup d'énergie et est ductile. A contrario, si le diamètre des

sphérolites est important, la déformation intersphérolitique provoquera une concentration de contraintes à l'interface entre les sphérolites d'où une propagation de fissure intersphérolitique et un comportement plutôt fragile. Une étude sur du iPS (polystyrène) et du iPP (polypropylène) [Sch84] a montré que l'ajout d'agents nucléants - ce qui favorise une cristallisation de type « beaucoup de petits sphérolites »- améliore la ductilité, la contrainte seuil et la résistance au choc du matériau.

Fusion

Très peu de travaux ont pris en compte le caractère cinétique du phénomène de fusion du thermoplastique. Somnez et Hahn [SH7b] ont utilisé le modèle de Maffezzoli [MKN89] pour prendre en compte la fusion du PEEK. L'évolution du taux de cristallinité du polymère est alors décrite selon la loi :

$$C_v(t) = C_v(t_{initial}) \left(1 - 0,5 \int_{t_{initial}}^t K dt \right)^2 \quad (1.9)$$

Le paramètre K varie avec la température selon la loi d'Arrhenius.

c- Dégradation thermique

Certains auteurs ont tenté d'étudier la dégradation thermique du matériau exposé à de hautes températures lors du procédé du placement de plis [DPG94]. La cinétique de la dégradation thermique du polymère est souvent décrite par une loi cinétique de type Arrhenius [Sch81, NS92]. Étant donné qu'aucun mécanisme chimique de dégradation n'est proposé, on peut déjà penser que les lois proposées sont approximatives et manquent de sens physique.

Dans le cas particulier de l'APC-2, Somnez et Hahn [SH7b] adoptent le modèle de Nam [NS92] pour estimer la perte de poids du matériau causée par la dégradation thermique. Beyeler [BG88] et Nejhad [NGC92] donne une valeur limite à ne pas dépasser pour éviter la dégradation du PEEK. Il faut cependant noter qu'ils ne prennent pas en compte le paramètre temps qui a pourtant toute son importance. Enfin, le modèle proposé par James [JB99] pour la dégradation du PEEK lors de l'enroulement filamentaire est un modèle isotherme. Ce modèle sera donc difficilement utilisable si le matériau subit de forts gradients thermiques.

On constate donc que plusieurs auteurs, conscients que le polymère est susceptible de se dégrader pendant la consolidation en continu, ont tenté de prendre ce phénomène dans leurs modèles. Cependant, ces modèles « globaux » décrivent mal les modifications physiques et chimiques à l'échelle macromoléculaire lors de la dégradation du PEEK. Un effort devra être fait dans ce sens si on veut décrire proprement les limites des procédés de consolidation aux hautes températures.

d- Taux de porosité

Étant donné que les propriétés finales d'une pièce composite thermoplastique dépendent fortement du taux de porosité, il est intéressant, pour un procédé relativement complexe comme la consolidation en continu, de connaître le taux de porosité en fonction des paramètres du procédé. Alors que le mécanisme qui conduit à la réduction des porosités inter-plis est le contact intime, le mécanisme majeur de réduction des porosités intra-plis est la compression des gaz sous le rouleau, bien qu'il puisse y avoir aussi coalescence et migration des porosités et formation de bulles.

La dynamique des porosités, c'est-à-dire leur croissance et leur réduction, pendant le procédé de placement de plis d'APC-2 a été étudiée par Pitchumani [PRD⁺96]. L'étape de réduction

des porosités, prend place sous le rouleau de compaction. Grâce à l'application d'une force, la concentration des porosités intra-laminaire dans le pli diminue. Dans une étude de Ranganathan [RAL95] la réduction des porosités est modélisée par l'écoulement sous pression d'un mélange compressible fibres-résine-porosités sous le rouleau presseur. Lamontia [LFG⁺03] reprend ce modèle d'écoulement sous pression et décrit le flux transverse du mélange comme une fonction de la distribution de pression sur le pli, cette pression provoquant une diminution de la hauteur du pli et une augmentation de sa largeur en même temps que la réduction de porosités. Dans le modèle de Pitchumani [PRD⁺96] la phase de développement des porosités dans les régions hors zone de consolidation est décrite comme une expansion de porosités dans un polymère fondu statique sous la pression atmosphérique à la température du pli. Pitchumani [PRD⁺96] conclut son étude en notant que l'augmentation de la force de compaction diminue la concentration finale de porosité (tout en augmentant le degré de consolidation) d'où une amélioration de la qualité des pièces. En revanche, une augmentation de la température des torches provoque une augmentation de la porosité finale.

e- Tenue mécanique de la zone consolidée

Différents essais mécaniques peuvent être utilisés afin de tester la qualité du soudage inter-plis obtenue par les procédés en continu. D'une façon générale, les essais qui provoquent une sollicitation de cisaillement inter-plis sont bien adaptés pour quantifier les propriétés d'adhésion interfaciale. L'essai de flexion 3 points rapprochés, qui induit un cisaillement inter-plis important, a été employé sur l'APC-2 [PRD⁺96] ou sur des matériaux semblables comme le composite carbone/PEKK (polyethercétonecétone) [LFG⁺03]. L'essai en simple recouvrement est aussi souvent utilisé car il est simple à réaliser [MS2a, MWS2b, Cho95, GK02] même si les champs de contrainte induits par ce test sont très complexes. L'essai de choc entaillé, qui présente l'avantage d'être rapide, est également souvent utilisé pour mesurer la résistance à la fracture interlaminaire [LS87, CDK90]. L'essai DCB (Double Cantilever Beam) pour lequel la sollicitation en ouverture est mieux contrôlée est en revanche plus rarement utilisé car il est moins simple à mettre en oeuvre [Vau90].

L'effet de la microstructure sur les propriétés de l'interface a également été étudié. De nombreux auteurs ont tenté de corréler le taux de cristallinité aux propriétés d'adhésion interfaciale de l'APC-2 [LTSB7a, LS7b, Cho95, GK02]. Gao [GK02] a étudié en détail l'effet de la taille des sphérolites ainsi que l'effet de la cristallisation spécifique à l'interface fibre-matrice sur les propriétés mécaniques de l'APC-2. Si les effets de ces microstructures sur les propriétés mécaniques du composite sont largement étudiés dans la littérature, il faut noter toutefois la diversité des résultats et parfois leur relative incohérence. Ceci est le signe de phénomènes très complexes et encore mal compris. Ainsi la déformation d'un composite semi-cristallin renforcé par des fibres peut générer les phénomènes suivants : une cristallisation spécifique à l'interface fibre/matrice indépendante de tout autre processus de cristallisation, une déformation très complexe de la matrice incluant les mouvements de chaînes de la partie amorphe, les déformations de la structure intrasphérolitique et même des évolutions de ces microstructures en fonction de l'état de contrainte [OPR04]. A titre d'exemple, citons quelques résultats sur l'APC-2 ou sur le PEEK pur. Pour Lee [LTSB7a] les propriétés en traction ne sont pas affectées de façon significative quand le taux de cristallinité passe de 27 à 43% alors que pour Talbott [TSB87] la résistance en traction, le module de traction et la résistance en cisaillement augmentent lorsque le taux de cristallinité diminue, résultat très discutable pour le module de traction. En revanche, il semble y avoir un consensus sur le fait que la résistance à la fracture interlaminaire (K_{IC}) augmente lorsque le taux de cristallinité diminue [LTSB7a, TSB87]. Cantwell [CDK90] confirme ces résul-

tats en montrant que le K_{IC} augmente avec la vitesse de refroidissement. Pour Gao [GK02], les propriétés dans le plan du pli d'APC-2 ainsi que les propriétés interlaminaires augmentent d'une façon générale quand la vitesse de refroidissement diminue c'est-à-dire lorsque le taux de cristallinité augmente. Ceci est attribué à un changement de mode de rupture d'un mécanisme adhésif qui induit un déchaussement à l'interface fibre matrice aux grandes vitesses de refroidissement à un mécanisme cohésif dominant de la matrice aux basses vitesses de refroidissement. En effet, à faibles vitesses de refroidissement, le composite a le temps de cristalliser et la cristallisation à l'interface fibre/matrice renforce l'adhésion renforts/matrice.

1.2.3 Modélisation du procédé en continu

Les modèles

De nombreux auteurs se sont intéressés à la modélisation des procédés de mise en oeuvre des matériaux composites à matrice thermoplastique. Mantell [MS2a] propose un modèle très théorique et général qui peut s'appliquer à la consolidation sous presse, en autoclave, au procédé de consolidation en continu ou d'enroulement filamentaire. Ce modèle très général a pour but de relier la température appliquée, la pression, la vitesse et le temps au taux de cristallinité, à la consolidation interplis, aux contraintes et aux déformations résiduelles dans le composite. Lee [LS87] propose aussi un modèle pour la mise en oeuvre des composites à matrice thermoplastique dans un cas très général. Ce modèle a pour but de relier la température et la pression au flux dans la matrice entre les torons de fibres, à la formation du contact et de la consolidation entre les plis adjacents et au taux de cristallinité. Ces modèles sont très ambitieux et, certes, apportent des éléments de réponse mais sont malheureusement loin d'être complets et utilisables concrètement.

De nombreux auteurs se sont intéressés à la modélisation des procédés de consolidation en continu de matériaux composites comme l'APC-2 et notamment à leur simulation thermique. De nombreux modèles ont été écrits pour différentes sources de chaleur [AGMS92, SPBG95]. Parmi les modèles stationnaires ou non-stationnaires de placement de fibres, citons les travaux de Groove [Gut88], d'Agarwal [AGMS92] qui utilise le modèle développé par Beyeler et coll. [BG88], de Sonmez et Hahn [SH97] et de Tumkor et coll. [TTCM01]. Cependant, dans tous ces modèles il faut noter le manque de vérifications expérimentales. Seuls les modèles de Kim et al. [KH96] et de James [JB99] sont couplés à des mesures thermiques en utilisant respectivement des thermocouples et une caméra infra-rouge.

Plusieurs modèles ont été créés dans le cas du matériau à matrice PEEK. Pitchumani [PRD⁺96], conclut son étude sur la consolidation en continu de plis d'APC-2 en exprimant un degré de consolidation D_b en fonction des paramètres du procédé tels que la vitesse, la force de compactage, la température des torches et la configuration de la tête de la machine. Malheureusement, les résultats sont propres à chaque machine et les paramètres utilisés ne sont pas toujours clairement définis, ce qui empêche de comparer ces études avec nos propres résultats. Très récemment, Guan et Pitchumani [GP04] ont affiné leur modèle pour prendre en compte des paramètres procédés de façon très précise comme l'angle de la torche, la distance torche /matériau, le diamètre de la torche, la température du gaz en sortie du tube, la vitesse du gaz et l'épaisseur c'est-à-dire le numéro de la couche déposée. Les modèles numériques semblent très fins, cependant il faut noter qu'aucune vérification expérimentale n'a été effectuée et que la détermination des paramètres du modèle est très floue. En ce qui concerne la modélisation des torches, dans le modèle de Sonmez et Hahn [SHA02b], l'air exposé à la source chaude est considéré comme uniformément chauffé tout son long (c'est-à-dire que l'on impose un flux q uniforme sur une certaine distance).

Notons qu'en général la surface chauffée peut avoir différents taux d'absorption qui dépendent de l'exposition du matériau à la source chaude. Dans le cas d'un rayon laser par exemple, le taux d'absorption peut changer avec l'angle d'incidence et de multiples réflexions peuvent se produire [AGMS92].

1.3 Les matériaux utilisés

Les matériaux potentiels pour le procédé d'empilement par soudage et consolidation en continu sont des polymères à hautes performances renforcés de fibres de carbone longues. Les fibres de carbone sont utilisées pour les bonnes propriétés mécaniques qu'elles apportent au matériau. Les composites se présentent sous forme de rubans de plis unidirectionnels qui permettent d'assurer à la structure des propriétés mécaniques souhaitées en fonction de la séquence d'empilement. Les polymères constituant la matrice des composites doivent résister à des températures élevées du fait de leur utilisation pour des structures aéronautiques. Ce sont des polymères semi-cristallins pour assurer de bonnes propriétés mécaniques aux pièces finales et une bonne résistance aux solvants. Ainsi, les polymères envisagés sont le PEEK (poly-éther-éther-cétone), le PPS (sulfure de polyphénylène), le PEKK (poly-éther-cétone-cétone) aux propriétés de résistance thermique intermédiaire. Certains auteurs [LFG⁺03, HMM⁺99] ont également utilisé des matériaux encore plus exotiques tels que les composites à base de PIXA, polyimide thermoplastique développé par Mitsui Toatsu au Japon qui possède une meilleure résistance thermique que celle du PEEK. Pour des applications à plus basses températures, Toso [Tos03, TEP04] a étudié le cas de composites fibres de verres/polypropylène.

1.3.1 Le poly-éther-éther-cétone (PEEK)

Le poly-ether-ether-cetone (PEEK) est un polymère thermoplastique semi-cristallin à hautes performances qui a été développé et commercialisé par la société Imperial Chemical Industries (I.C.I.) au début des années 1980. Actuellement, il est produit principalement par la société Victrex, mais un concurrent est apparu en 2003, Gharda Chemical Ltd. en Inde.

Propriétés moléculaires

Le PEEK est un polymère aromatique à chaîne linéaire dont la formule chimique est indiquée dans la figure 1.12. Daoust et coll.137 ont répertorié les différents modes de synthèse de ce polymère. L'une des principales caractéristiques de ce polymère est sa non-solubilité dans les

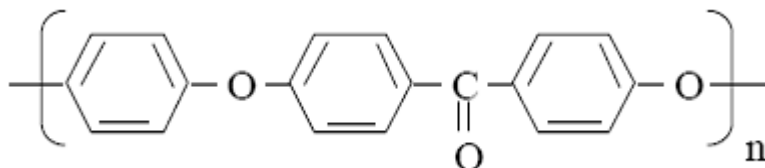


FIGURE 1.12 – Structure chimique du PEEK

solvants organiques classiques. Cette haute résistance chimique est un avantage important pour ses applications. En revanche, ceci complique fortement sa caractérisation. Il est donc assez difficile d'obtenir ses caractéristiques moléculaires à l'aide de techniques expérimentales classiques

comme la GPC (Chromatographie de Perméation de Gel) ou Chromatographie d'Exclusion Stérique (SEC). Cependant, Devaux et coll. [DDG⁺93, DDD⁺85] ont sulfoné les chaînes de PEEK dans des acides forts pour en déterminer les masses moléculaires et conformations. Plusieurs grades de PEEK sont commercialisés par la société Victrex. Les propriétés moléculaires associées aux différents grades sont répertoriées dans le tableau 1.2. Des informations complémentaires sur les caractéristiques du PEEK peuvent être obtenues dans la revue de Daoust [DDG⁺93]. Cogswell [Cog92] a calculé à partir de modèles moléculaires les différentes caractéristiques d'une

Paramètres	PEEK 150	PEEK 450
Viscosité (MPa.s)	150	450
M_w (g/mole)	28 000	40 000
M_w/M_n	2.7	2.7

TABLE 1.2 – Caractéristiques moléculaires du matériau [DDG⁺93, DDD⁺85]

chaîne étirée et sous forme de pelote. On trouve ainsi qu'une chaîne d'un poids moléculaire de $M_w = 40000 \text{ g/mol}$ a une longueur étirée de 208 nm sachant que la longueur d'un monomère est d'environ 1,5 nm. Le rayon de giration est de 19.2 nm. Le rapport entre les volumes de la chaîne en pelote et de la chaîne étirée est de 560. Le paramètre de tortuosité, rapport entre la longueur et le double du rayon de giration, est de 5.4.

Morphologies cristallines

Le caractère semi-cristallin du PEEK implique la présence de structures cristallines organisées en sphérolites qui ont une taille de 1 à 10 μm , voire plus, en fonction de l'histoire thermique du matériau et de la densité de sites de nucléation. L'épaisseur des lamelles est comprise entre 1 et 4 nm et l'espace entre les lamelles est de l'ordre de 10 nm [Cog92]. L'étude de diffraction X aux grands angles a montré que la cellule unitaire est orthorhombique, figure 1.13. Les valeurs reportées des axes a , b , c de la cellule varient, suivant les sources bibliographiques, pour a entre 0.773 à 0.788 nm, pour b entre 0.584 à 0.594 nm, et c entre 0.988 à 1.007 nm [KAA86, HKLR84, RAR⁺83, DB80, BO83]. On peut en déduire la valeur théorique de la densité d'un PEEK qui

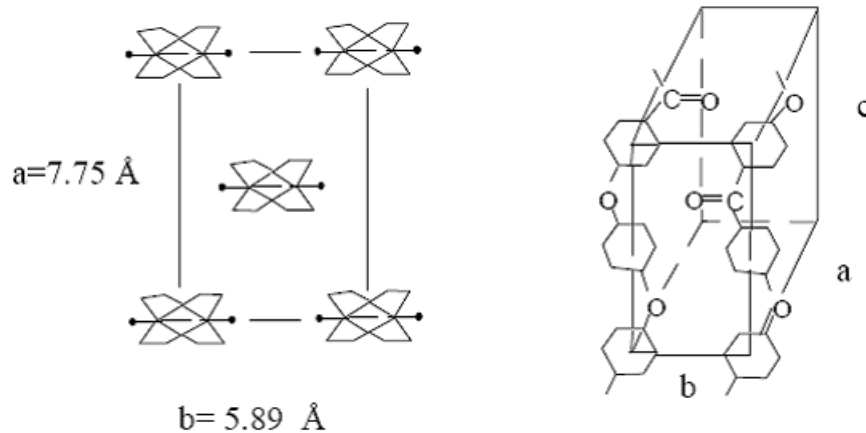


FIGURE 1.13 – Structure cristalline du PEEK [LD86]

serait entièrement cristallisé. Le tableau 1.3 reporte les différentes valeurs de densité du matériau pour les différents états et pour différents niveaux de cristallinité.

PEEK amorphe (kg/m ³)	1.264 (1.080 à 380°C)
PEEK 20% cristallin (kg/m ³)	1.291
PEEK 40% cristallin (kg/m ³)	1.318
PEEK Entièrement cristallin (théorie) (kg/m ³)	1.400

TABLE 1.3 – Densité du PEEK en fonction de sa cristallinité [Cog92]

Caractéristiques thermiques

Le PEEK possède d'excellentes propriétés thermiques. En effet, il conserve ses propriétés mécaniques jusqu'à 250°C. La figure 1.14 présente le thermogramme de PEEK que Lamèthe [Lam04] a obtenu à partir d'une pastille de 6 mm de diamètre extraite d'une plaque directement reçue, à partir d'une MDSC (analyse calorifique différentielle modulée) Dupont 2920. Les différents changements d'état du matériau sont clairement mis en évidence. La température de transition vitreuse apparaît à 143°C. On pourra noter que Lamèthe a réalisé des expériences en torsion rectangulaire qui donne une température de transition vitreuse de 150°C. Le pic obtenu à 165°C correspond au pic de cristallisation froide, c'est-à-dire la cristallisation qui apparaît depuis l'état solide, étudiée par Ivanov et coll. et Fougnyes et coll. [ILJ00, ILJ99, FDK99]. Ceci met en évidence

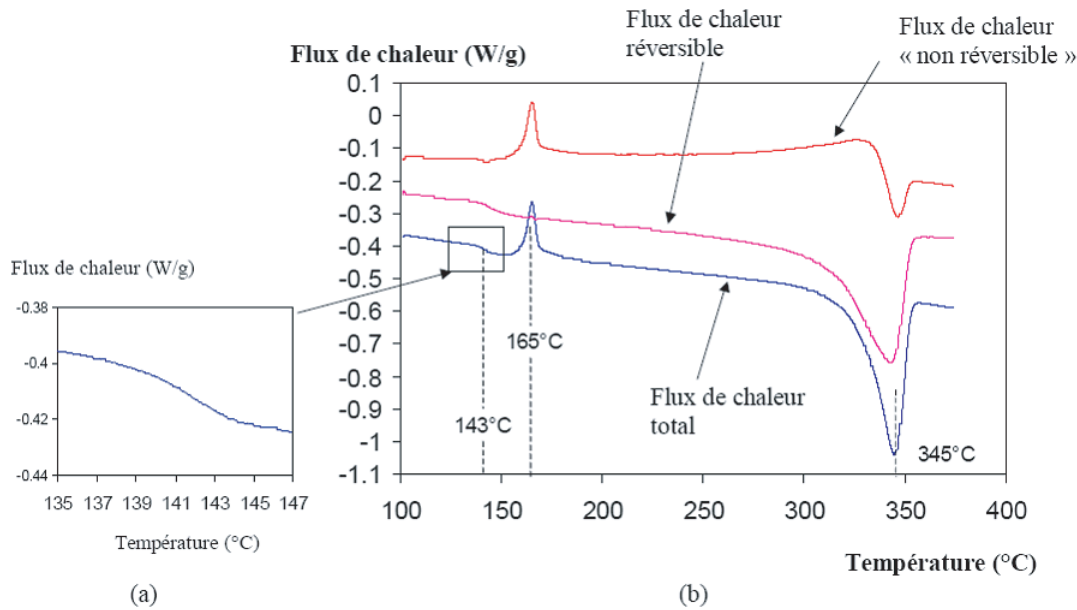


FIGURE 1.14 – Thermogramme obtenu par MDSC d'une plaque de PEEK brute (a) zoom sur la T_g (b) vue globale [Lam04]

le fait que la plaque obtenue par calandrage [BHB91] n'est pas totalement cristallisée. L'un des côtés a été refroidi beaucoup plus vite que l'autre et on peut observer une couche marbrée qui est beaucoup moins cristalline. Le dernier changement de phase correspond à la fusion et son pic est à 345°C. On remarque deux points : d'une part, le pic de fusion est dissymétrique et s'étend sur une gamme de température large et, d'autre part, on observe une réaction exothermique dans le signal non réversible lors de la fusion. Ce phénomène est associé à une recristallisation qui a lieu pendant la fusion. Les chaînes ont le temps de se réorganiser au cours de l'analyse calorimétrique. Le comportement à la fusion du PEEK par DSC a fait l'objet de nombreuses

études [LPL89, BO83, WCY03, SKNBT00, BBA94, Cha88, Blu87, CD86, CCW86, LHBB92]. L'enthalpie de fusion estimé du PEEK entièrement cristallisé ΔH_m^0 est de 122 J/g pour Hay et coll. [HKLR84] et 130 J/g pour Blundell et coll. [BO83]. L'enthalpie des pics de cristallisation froide et de fusion de la figure 1.14 sont respectivement de 6 J/g et 40 J/g. On peut en déduire un taux de cristallisation globale. Le taux de cristallisation global de la plaque est donc de 15 %. La DSC ne permet pas d'obtenir les informations sur les variations du taux de cristallisation suivant l'épaisseur.

Diffusivité thermique

La diffusivité thermique est une variable importante à connaître dans la mise en oeuvre de matériau. Les mesures de diffusivité ont été réalisées par Lamèthe [Lam04] par méthode flash [DBBC97]. Les mesures ont été effectuées dans la plage de températures de 20 à 300°C sous atmosphère neutre par paliers de température de 15 minutes. Les résultats sont représentés dans la figure 1.15 et sont en accord avec les valeurs de la littérature [Cog92, HG93]. Le montage mécanique du dispositif expérimental de mesures ne permet pas de tenir correctement l'échantillon cylindrique de PEEK au dessus de 300°C, d'autant que l'échantillon a tendance à fluer. L'évolution de la chaleur spécifique C_p en fonction de la température a été déterminée à l'aide

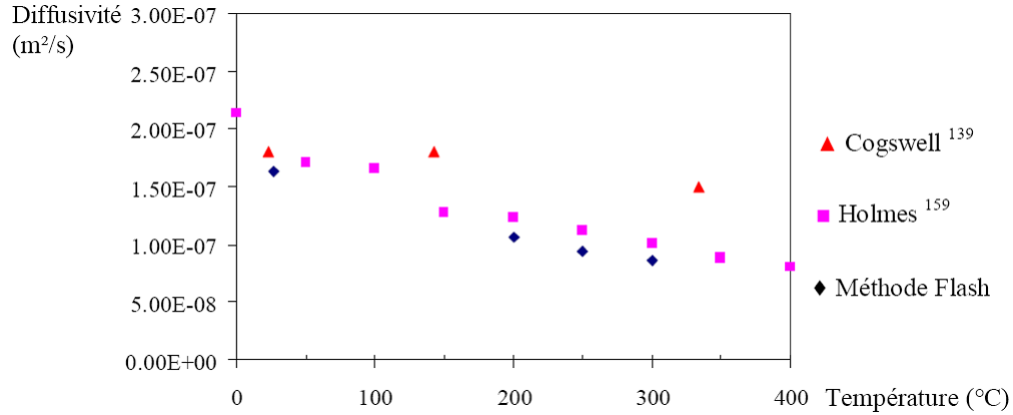


FIGURE 1.15 – Diffusivité thermique du PEEK en fonction de la température [Cog92, HG93]

de la MDSC, en prenant la ligne de base de la courbe en chauffant et en refroidissant pour s'affranchir du problème de cristallisation. On obtient l'équation suivante, en bon accord avec la littérature [Cog92] :

$$C_p \text{ (J/kg/°C)} = 2.5 T \text{ (°C)} + 1250 \quad (1.10)$$

La diffusivité thermique a est définie de la manière suivante :

$$a = \frac{k}{\rho C_p} \quad (1.11)$$

où k est la conductivité du matériau ($\text{W.m}^{-1}.\text{°C}^{-1}$), ρ la densité (kg.m^{-3}) et C_p la chaleur spécifique (J/kg/°C). Lamèthe [Lam04] en déduit l'évolution de la conductivité thermique en fonction de la température à partir des mesures de diffusivité, figure 1.16.

Celles-ci sont légèrement inférieures aux valeurs obtenues par Holmes et coll. [HG93] mais sont en accord avec les valeurs de conductivité mesurées dans les polymères [BHB91]. Les coefficients d'expansion thermiques sont indiqués dans le tableau 1.4.

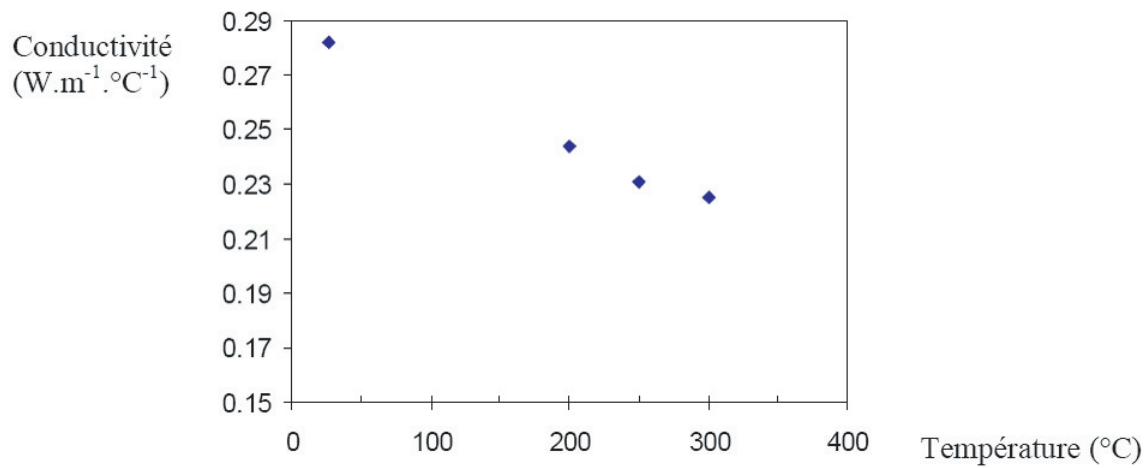


FIGURE 1.16 – Conductivité thermique du PEEK déduite à partir des valeurs de diffusivité obtenues par méthode flash [Lam04]

Gamme de température	23-143°C	143- 343°C	343-420°C
Coefficient d'expansion thermique (°C ⁻¹)	47×10^{-6}	108×10^{-6}	120×10^{-6}

TABLE 1.4 – Propriétés thermiques du PEEK [Cog92]

Cristallisation

La cristallisation est un phénomène important qu'il faut prendre en compte puisque les propriétés mécaniques du matériau en dépendent très fortement. Le taux de cristallisation et la morphologie des sphérolites dépendent fortement de l'histoire thermique du matériau à partir du fondu. La cristallisation est très différente si elle a lieu dans des conditions isothermes ou non isothermes.

Propriétés mécaniques

La figure 1.17 présente la courbe d'un essai de traction de PEEK 450G avec une éprouvette diablo à 25 °C [Cot91, G's95]. On distingue plusieurs zones : la déformation élastique jusqu'à 4%, la zone de déformation plastique à partir de $\sigma_y = 116$ MPa avec apparition de la striction, puis propagation de la striction le long de l'éprouvette avec un durcissement du matériau dû à la déformation des structures cristallines. Le module de flexion du PEEK a été obtenu par un essai de flexion trois points après un recuit à 250°C pour cinq éprouvettes. Il est de 3.69 (± 0.09) GPa.

La ténacité du PEEK à 25°C est de l'ordre de 5-8 MPa/ \sqrt{m} suivant les auteurs [Cog92, Cot91]. Cogswell [Cog92] indique un taux de restitution critique en mode I, G_{IC} de 6,6 kJ/m². Le lecteur intéressé par d'autres propriétés mécaniques du PEEK pourra consulter par exemple la thèse de Cottenot [Cot91].

Dégradation

Connaître les limites jusqu'auxquelles le polymère peut être porté afin d'éviter sa dégradation par oxydation est un aspect important lors de la mise en oeuvre de matériau. Chen et coll. [CCC98] ont observé la dégradation du PEEK par thermogravimétrie sous un flux

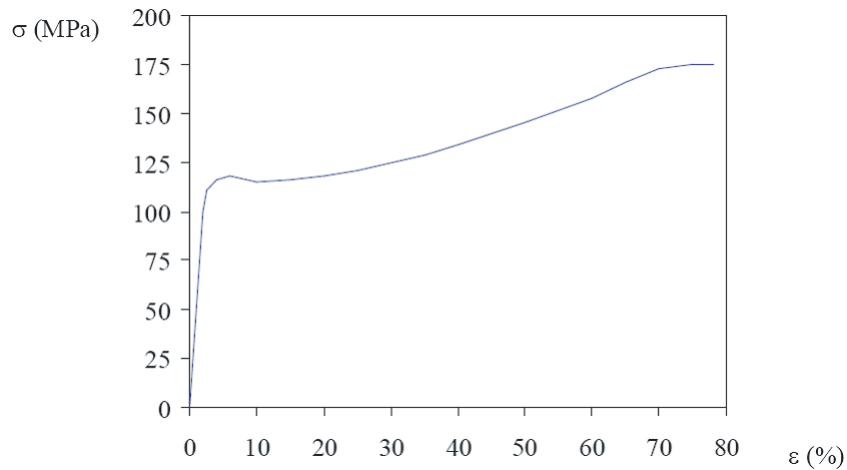


FIGURE 1.17 – Courbe de traction contrainte vraie/ déformation vraie d'une éprouvette diabolique en PEEK à 25°C [Cot91, G's95]

d'azote et d'air avec une vitesse de chauffe de 1 °C/min. Aucune dégradation du PEEK n'a été observée jusqu'à 415°C pour des temps de chauffe allant jusqu'à une demi-heure sous flux d'azote. Une perte de poids notable s'observe seulement au dessus de 510°C sous azote. Le taux de perte augmente graduellement jusqu'à un taux maximum de 540°C, puis chute rapidement en laissant 57% de résidu. L'augmentation de la température jusqu'à 900°C (à 1 °C/min) ne cause seulement que 10% de réduction de poids supplémentaire. Dans l'air, le PEEK apparaît stable jusqu'à 450°C et s'est totalement décomposé à 570°C.

Jonas et Legras [JLSR93] ont montré que des phénomènes de branchements peuvent être observés lorsque le polymère est porté au dessus de 385°C au bout de plusieurs minutes dans une atmosphère oxydante, ce qui est préjudiciable pour les propriétés de cristallisation. Le branchement apparaît suite à un processus de scission de chaînes qui deviennent réactives avec des chaînes proches [JLSR93].

1.3.2 Le composite à matrice PEEK renforcée de fibres de carbone

Caractéristiques générales

Le composite à matrice PEEK peut être fourni sous forme de preimpregnés unidirectionnels sous le nom commercial APC2 (Aromatic Polymer Composites). Il est fabriqué par imprégnation sur les fibres de la matrice fondue [Cog92]. Le composite à matrice PEEK peut également être fourni sous le nom commercial TIFF(PEEK) (TIFF : Thermoplastic Intermediate Forms Facility) de la même société et est plus spécifiquement utilisé pour les procédés, tel que l'empilement avec soudage et consolidation en continu car la rugosité est beaucoup mieux contrôlée des deux côtés. Une étude par analyse d'images sur des coupes enrobées (figure 1.18) a permis de déterminer la rugosité (écart type des épaisseurs) des deux types de préimpregnés : 24 μm pour l'APC2 classique et 2 μm pour le Tiff(PEEK) [Bea02]. Les fibres employées sont des fibres à haute résistance AS4 fabriquées à partir d'un précurseur polyacrylonitrile (PAN). Leur diamètre moyen, déterminé par analyse d'images est de 7 μm . De la même façon, la fraction volumique de fibres a été déterminée à 60% pour le Tiff(PEEK). Les caractéristiques moléculaires de l'APC2 ont été déterminées par Daoust et coll. [DDG⁺93]. Ils ont extrait le PEEK par dissolution du composite dans de l'acide sulfurique H₂SO₄ et filtration et obtiennent les caractérisations molé-

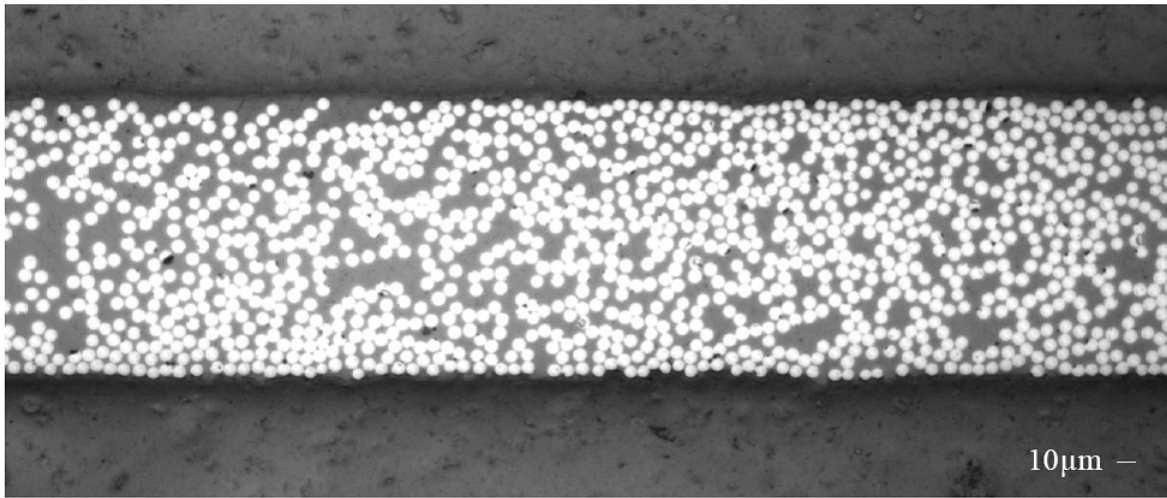


FIGURE 1.18 – Coupe transverse de Tiff(PEEK)

culaires répertoriées dans le tableau 1.5. Les caractéristiques moléculaires de l'APC2 montrent

M_w	M_n	I_p
25 500	11 500	2.3

TABLE 1.5 – Propriétés moléculaires du composite APC2 [DDG+93]

que le PEEK utilisé est très probablement le grade PEEK 150 de Victrex. Celui-ci est d'ailleurs plus facile à mettre en oeuvre car il a une viscosité plus faible.

Caractéristiques thermiques

La figure 1.19 présente les thermogrammes de composites PEEK renforcé de fibres de carbone, l'APC2 et le Tiff(APC2) ([Lam04]). Il est important de remarquer que la matrice pour les deux composites est la même puisque la T_g apparaît à la même température à 141°C . On observe également les autres phases : la température de cristallisation froide à $166-167^\circ\text{C}$ et la température de fusion à 348°C . La présence des fibres, très conductrices, dans la matrice isolante PEEK modifie totalement les propriétés thermiques du composite formé. Elles sont répertoriées pour le composite PEEK/AS4 dans le tableau 1.6. Les valeurs de diffusivité du composite de

k_L , conductivité longitudinale (dépend de la température) ($\text{W/m } ^\circ\text{C}$)	6.0
k_T , conductivité transverse (dépend de la température) ($\text{W/m } ^\circ\text{C}$)	0.72
C_p chaleur spécifique (dépend de la température) ($\text{J/kg } ^\circ\text{C}$)	1425
Emissivité ϵ	0.85
Densité (kg/m^3)	1560

TABLE 1.6 – Propriétés thermiques du composite APC2 [Cog92]

l'APC2 ont également été mesurées par la méthode flash [DBBC97]. Elles sont en bon accord avec les mesures de la littérature et sont représentées sur la figure 1.20.

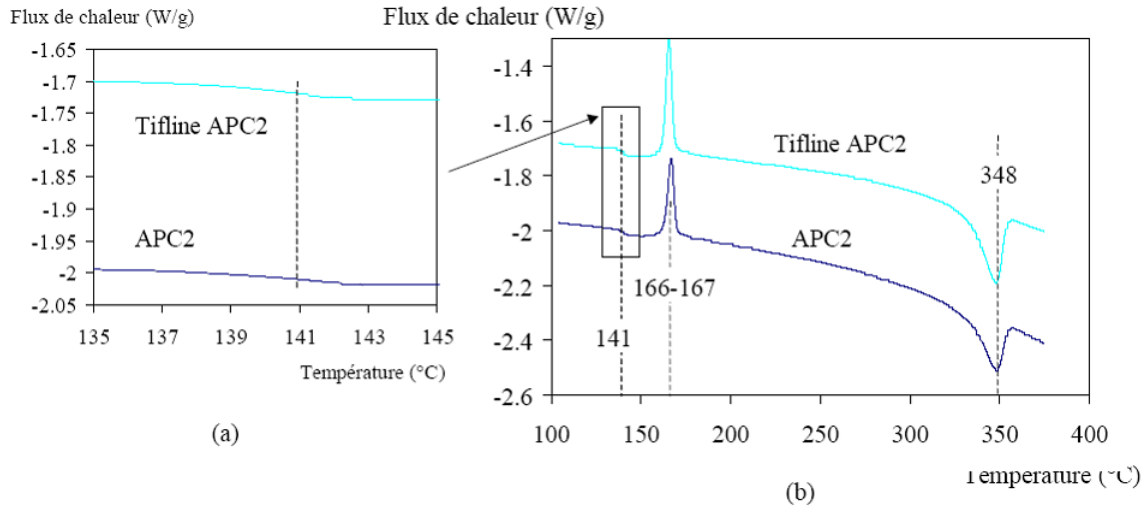


FIGURE 1.19 – Thermogrammes obtenus par MDSC ($2^{\circ}\text{C}/\text{min}$) des échantillons de PEEK/Fibres de carbone (APC2 et Tifline) : (a) Zoom sur la Tg; (b) Représentation sur toute la gamme de températures ([Lam04])

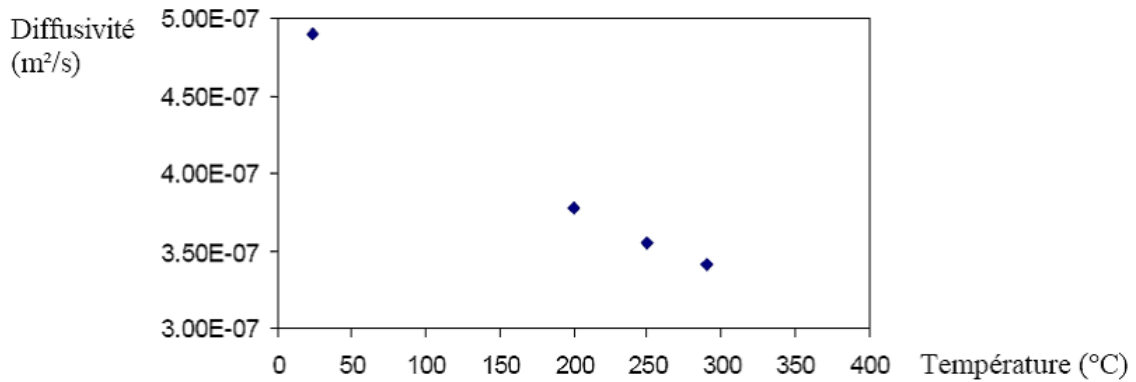


FIGURE 1.20 – Diffusivité de l'APC2 en fonction de la température dans la direction perpendiculaire aux fibres [Lam04]

Propriétés mécaniques

Les fibres de carbone possèdent d'excellentes propriétés mécaniques rappelées dans le tableau 1.7. La présence des fibres dans la matrice de PEEK modifie le comportement mécanique du matériau. Les propriétés finales du composite varient en fonction de l'empilement des préimprégnés et peuvent être calculées par la théorie des plis [HC96]. On ne s'attardera pas sur les différentes propriétés mécaniques du matériau composite APC2, bien que très importantes pour l'application finale car ceci sort du cadre de cette étude. Le lecteur intéressé par des informations complémentaires peut se référer à la littérature [Cog92, Vau93, CD93, Moo93].

E_1 module de traction longitudinal (GPa)	227
E_2 module de traction transverse (GPa)	15
Force à la rupture (MPa)	3600
Allongement à la rupture (%)	1.7

TABLE 1.7 – Propriétés mécaniques de la fibre de carbone AS4 d'Hercules [Cog92]

Module de flexion

La mesure du module de flexion a été réalisée ([Lam04]) sur cinq échantillons de composite APC2 ayant une épaisseur d'environ 1 mm, préalablement moulés par compression en empilant plusieurs couches de préimprégnés. Les échantillons ont été refroidis de manière lente afin de favoriser la cristallisation. Le module ainsi obtenu est de 108 ± 11 GPa.

Résistance interlaminaire

La résistance interlaminaire à la fracture en mode I du composites APC2 est une des propriétés importantes dans le cadre de notre étude. Celle-ci est testée classiquement par un test de DCB (Double Cantilever Beam) mais les propriétés du composite dépendent de nombreux paramètres comme les conditions de mise en oeuvre ou la géométrie des échantillons mais aussi des conditions de l'essai et particulièrement la vitesse de déformation [FRPF01]. En effet, dans la littérature, les valeurs de G_{IC} varient de 1500 à 3000 J/m² pour l'APC2 [CD93]. L'adhésion fibres/matrice est également un paramètre important qui influence la résistance interlaminaire des composites unidirectionnels. Il existe un lien direct entre la cristallinité et l'adhésion interfaciale entre fibres et matrice qui décroît avec la vitesse de refroidissement [GK00, GK02]. Ceci est associé à un changement de mode de rupture passant d'une rupture adhésive à l'interface fibre/matrice à hautes vitesses de refroidissement à une rupture cohésive de la matrice à basses vitesses de refroidissement. Gao et Kim [GK01] ont fait une synthèse des différents travaux de la littérature qui concernent l'étude de l'évolution de la rupture interlaminaire en fonction de la vitesse de refroidissement pour des vitesses de 1 à 80°C/min. Dans l'ensemble, G_{IC} diminue lorsque la vitesse de refroidissement augmente. L'adhésion entre les fibres et la matrice est moins bonne et la matrice a tendance à être plus ductile.

Dégradation

Phillips et coll. [PGM97] ont étudié la stabilité thermique du composite PEEK renforcé de fibres de carbone à l'aide de mesures rhéologiques dans l'air et de mesures de DSC sur des échantillons maintenus pendant plusieurs minutes pour des températures comprises entre 360 et

420°C. Phillips et coll. [PGM97] ont observé une augmentation du module complexe lorsque la température augmente et une diminution des températures de fusion et de transition vitreuse, d'enthalpie de fusion. Phillips et coll. [PGM97] ont montré que la consolidation du composite est détériorée en raison du phénomène de dégradation. Néanmoins, la limite d'une chute de la qualité de la consolidation est fixée à 350 secondes à 420°C. L'échelle de temps à hautes températures pour nos expériences est très largement inférieure.

1.4 Cristallisation

1.4.1 Mécanismes de cristallisation

La cristallisation d'un polymère semi-cristallin comme le PEEK se décompose en plusieurs étapes :

- une étape de germination au cours de laquelle les germes cristallins sont formés ;
- puis une étape de croissance cristalline pendant laquelle les cristaux se développent à partir des germes ;
- enfin une éventuelle étape de cristallisation secondaire pendant laquelle les entités cristallines déjà formées se perfectionnent et il pourrait même y avoir cristallisation par épitaxie sur les entités cristallines déjà formées, comme dans le cas bien connu du PP [Lov83].

a- Morphologie de la phase cristalline du PEEK

La morphologie des polymères semi-cristallins peut être décrite selon 3 échelles d'organisation.

i. Conformation des chaînes dans la maille cristalline, échelle de l'angström

La conformation des chaînes macromoléculaires du PEEK induit une structure cristalline orthorhombique [Ian93]. Sans entrer en détail sur la conformation des chaînes dans la maille cristalline, les paramètres de cette maille sont : $a = 7,73 - 7,88 \text{ \AA}$, $b = 5,84 - 5,94 \text{ \AA}$ et $c = 9,86 - 10,06 \text{ \AA}$ où c est dans la direction des chaînes [DB80, RAR⁺83, Wak84, FCWA86, HKLR84, HLL89]. La densité de cette phase cristalline est comprise entre 1,36 et 1,41 g/cm³ [DB80, BO83, HKLR84, VS86, Wak87]. Ces variations s'expliquent par une évolution des paramètres cristallographiques en fonction des conditions de cristallisation. Notons que la densité de la phase amorphe est de 1,26 g/cm³ [HKLR84, CD86, VS86].

ii. Les lamelles cristallines, échelle du nanomètre

Les cristallites peuvent être classées selon trois catégories : les micelles à frange, les cristallites à chaînes repliées et les lamelles à chaînes étendues. Dans le cas du PEEK, les lamelles sont à chaînes repliées quelque soit le mode de cristallisation [WHKB87, WKB92]. L'axe de croissance des lamelles est l'axe b [LD85b, WHKB87] et l'axe c semble être normal au plan des lamelles [LD86]. La technique de diffraction des rayons X aux petits angles a montré que l'épaisseur des lamelles est comprise entre 2 nm et 6 nm. Par contre les relations entre l'épaisseur des lamelles et les conditions de cristallisation ne semble pas bien établies [BO83, WAZ⁺92].

iii. Morphologie cristalline, échelle du micron

La morphologie du cristal sous forme de sphérolites, gerbes ou shish-kebabs résulte de l'organisation des lamelles. Une étude du PEEK réalisé par Basset et coll. [BOAR88] en microscopie électronique a confirmé que, comme pour d'autres thermoplastiques semi-cristallins, les sphérolites sont des structures lamellaires qui croissent de façon radiale à partir d'un point de départ. Le point de départ peut être un germe du polymère lui-même ou un agent externe tel qu'une impureté, un agent nucléant, une particule de charge ou une surface externe. A l'intérieur d'une sphérolite, l'espace interlamellaire est formé de la fraction de polymère qui n'arrive pas à cristalliser (phase amorphe) et parfois de lamelles cristallisées par épitaxie pendant la cristallisation secondaire. Dans le PEEK, les principales unités morphologiques



FIGURE 1.21 – Représentation schématique d'un sphérolite

sont des sphérolites qui ont été mises en évidence par microscopie électronique à transmission [KAA86, WKB92, LHD92] et à balayage [OBB86, ZZ93] et par microscopie en lumière polarisée [KAA86, OBB86, WHKB87, BOAR88, MP92, ZZ92, ZZ93, JLSR93] quelque soit la température de cristallisation. La taille de ces sphérolites serait comprise entre 1 et 10 microns [BO85].

D'après des études sur d'autres polymères cristallins, il a été montré que c'est la structure interne dans les sphérolites plutôt que la superstructure de l'organisation des sphérolites qui jouerait un rôle important sur les propriétés mécaniques du matériau [BCMG85].

L'effet de la déformation ou des forts gradients thermiques n'a pas été étudié en détail comme pour d'autres polymères. On peut simplement dire que dans ce cas le nombre de germes est fortement accru et que la déformation va générer une orientation des lamelles cristallines.

b- Température de fusion thermodynamique

Tout système thermodynamique tend toujours à évoluer vers un état dans lequel son enthalpie libre G sera minimale. Soit T_m° la température de fusion à laquelle les courbes $G_{\text{solide}}(T)$ et $G_{\text{liquide}}(T)$ se croisent (figure 1.22). En dessous de cette température, c'est l'état solide qui est le plus stable, alors qu'au dessus de T_m° , c'est l'état liquide qui présente l'enthalpie libre minimale. Ces considérations sont générales et valables pour tous les corps, mais les polymères qui présentent en plus la particularité de cristalliser en lamelles de petites tailles ont un comportement particulier. Du fait de ces dimensions réduites, le rapport surface/volume est fortement augmenté, et l'enthalpie libre, énergie volumique, ne suffit plus pour décrire correctement la cristallisation. Les énergies de surface doivent donc être prises en compte pour décrire la thermodynamique du système. Du fait de la faible épaisseur des lamelles cristallines, les polymères cristallins présentent un point de fusion T_f inférieur à T_m° (figure 1.22) [HW62]. Dans le cas des polymères, T_m° est la température de fusion thermodynamique qui représente la température de fusion d'un cristal hypothétique d'épaisseur infinie. On appelle surfusion ΔT l'écart entre T_m° et la température considérée ($\Delta T = T_m^\circ - T$).

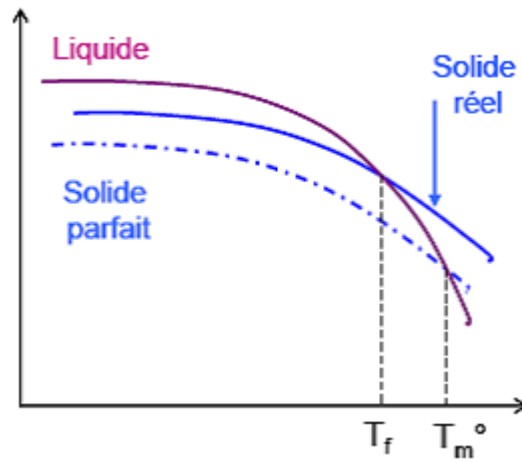


FIGURE 1.22 – Température de fusion et température de fusion thermodynamique

Relation de Gibbs-Thomson

La relation de Gibbs-Thomson considère la fusion à l'équilibre de lamelles cristallines de faible épaisseur. Elle permet d'obtenir la température de fusion thermodynamique en traçant la température de fusion du polymère en fonction de l'inverse de l'épaisseur des lamelles. Cette dernière peut être obtenue par diffraction des rayons X aux petits angles. Cette relation s'écrit :

$$T_f = T_m^\circ \left(1 - \frac{\sigma_e}{l\rho_c\Delta h_f} \right) \quad (1.12)$$

ou σ_e est l'enthalpie libre de surface du cristal (surface de repliements) par unité de surface, l est l'épaisseur des lamelles, ρ_c est la masse volumique du cristal et Δh_f est l'enthalpie de fusion du cristal.

Relation d'Hoffman-Weeks

La méthode d'Hoffman-Weeks pour la détermination de T_m° est basée sur la mesure de la température de fusion T_f d'échantillons polymères cristallisés à différentes températures T_c [HW62]. Notons que cette détermination n'est pas toujours sans difficulté. Lorsque la température de cristallisation T_c imposée est élevée, il peut y avoir épaississement des lamelles et la température de fusion des lamelles T_f n'est plus liée à T_c . D'autre part, pour les faibles températures de cristallisation, le processus de cristallisation peut commencer pendant le refroidissement. Les points expérimentaux $T_f = f(T_c)$ ne sont donc pas toujours bien alignés. Cependant, la température de fusion à l'équilibre T_m° a été définie expérimentalement pour le PEEK par l'intersection des courbes $T_f = f(T_c)$ et $T_f = T_c$. Ainsi $T_m^\circ = 390 \pm 5^\circ\text{C}$ selon les auteurs [BO83, LS87, CL89].

c- Germination

Germination homogène/hétérogène

A des températures inférieures à T_m° , la phase solide est la plus stable. Cependant, en raison de la contribution non négligeable des énergies de surface, la création d'un germe ne se

produit pas systématiquement. En effet, l'enthalpie libre d'une entité cristalline se décompose en un terme volumique (favorable à la phase solide), et un terme surfacique (défavorable à la création d'interface solide/liquide). Pour qu'un germe cristallin perdure, il faut qu'en croissant son énergie libre diminue c'est-à-dire que le terme volumique soit dominant sur le terme surfacique. C'est le cas lorsque le germe est d'une taille supérieure à une taille critique. Dans le fondu, la germination est homogène si le germe cristallin est constitué du polymère lui-même, et elle est hétérogène si le cristal croît à la surface d'un corps étranger.

Influence de la température de fusion et du temps de maintien sur la phase cristalline

T_m^o représente un équilibre entre un cristal parfait et l'état fondu, donc, si la température T_m^o à laquelle on fond le polymère avant de le refroidir n'est pas suffisamment haute, quelques « germes cristallins » persisteront. Ces germes persistants activeront ensuite la germination pendant le refroidissement et accéléreront le processus de cristallisation. L'origine exacte des sites de germination reste encore incertaine. Pour certains auteurs il s'agit de « reliquats » de cristaux antérieurs non fondus ou de cristaux de hauts poids moléculaires résiduels [Wun76]. D'autres pensent que de petits cristaux cloîtrés dans les fissures ou les cavités de particules étrangères peuvent survivre à des températures plus importantes que la température de fusion [Tur50]. Enfin, certains auteurs évoquent une organisation locale des chaînes qui demeure à une température supérieure à la température de fusion [LP88, FR0b, Rau90, Wun90, JL91] ou encore des régions relativement orientées dans un polymère fondu qui peuvent agir comme des sites de germination [Mor54, Bin77]. En effet, il a été montré que le PEEK garde un certain ordre local à 380°C [NI85]. Ainsi, la présence de tels germes primaires diminue la barrière d'énergie libre de cristallisation et augmente la vitesse de cristallisation.

Avant une solidification, une étude sur le PEEK [FR0b] a montré que lorsqu'il est porté à une température T_m supérieure à T_f , le nombre de germes diminue avec l'augmentation soit de cette température soit du temps de maintien à cette température et la cinétique de cristallisation change. Ainsi, que ce soit pour une cristallisation isotherme ou anisotherme, si T_m diminue alors la cristallisation sera globalement accélérée. Pour le grade G450 de PEEK par exemple, la température de cristallisation T_c diminue lorsque T_m augmente, et ce pour des valeurs de T_m inférieures à 385°C. Au delà, T_c est constante quelque soit T_m . En effet, il a été montré que le nombre de germes cristallins par unité de volume N décroît exponentiellement quand la température de fusion augmente [CL89]. Le processus de cristallisation du PEEK depuis le fondu est donc très sensible à la température de chauffe et la température de fusion à l'équilibre thermodynamique T_m^o semble être un paramètre important. D'autre part la taille des entités cristallines du PEEK sera influencée par la température de chauffe si elle est inférieure à T_m^o . Globalement si T_m est faible on obtiendra beaucoup de petits sphérolites [CD86].

Si on veut étudier la cinétique de cristallisation du PEEK ou de l'APC-2, il est donc nécessaire de choisir une température de fusion suffisamment haute pour fondre tous les reliquats de cristaux. Sinon, le processus de cristallisation serait accéléré et les résultats seraient dépendants de l'histoire thermique. Fondre l'APC-2 à 380°C pendant deux minutes ne semble pas suffisant pour effacer l'histoire thermique [BO85]. Il est alors préconisé d'attendre plusieurs minutes à 400°C [BO85, CD86, BGTA95], ceci est un bon compromis entre le phénomène d'« auto-germination » et le phénomène de dégradation qui risque d'intervenir si le polymère est trop chauffé.

Influence des fibres de carbone sur la cristallisation du PEEK

On pressent que la présence de fibres de carbone dans le PEEK crée des surfaces supplémentaires pour la germination et peut influencer l'équilibre entre les phases cristallines et non cristallines du polymère et ainsi modifier la cinétique de cristallisation. Ainsi, il est montré qu'à histoire thermique équivalente, les échantillons de PEEK avec des fibres de carbone ont une densité de germination supérieure à celle d'un PEEK pur [LP86]. Dans l'APC-2 il existe donc deux types de sites qui jouent un rôle dans le processus de croissance cristalline : les germes de la matrice PEEK et la surface des fibres de carbone.

La technique de diffraction des rayons X aux grands angles (WAXS) permet d'étudier de façon détaillée la cristallisation de la matrice PEEK dans l'APC-2 [BCMG85]. Quand on refroidit l'APC-2 à une vitesse plus rapide que $10^{\circ}\text{C}/\text{min}$, ou quand on recuit le composite, cette technique montre que les cristallites du PEEK sont aléatoirement orientées. On obtient alors une croissance tridimensionnelle de sphérolites qui n'a pas été altérée de façon significative par la présence des fibres de carbone. Par contre, après un refroidissement lent, la croissance est influencée de façon significative par les fibres ; il existe ainsi un biais préférentiel dans l'orientation du cristal de façon perpendiculaire à la direction des fibres. Cela est certainement une conséquence des sites de nucléation situés sur, ou proches de, la surface des fibres. Des figures de pôle montrent alors une croissance du cristal qui apparaît préférentiellement à angle droit par rapport à l'axe des fibres. La tendance d'une orientation privilégiée pour le composite refroidit lentement est probablement due à la réduction de la densité de germination dans la matrice lorsque le processus de cristallisation apparaît à de plus hautes températures. Le processus de cristallisation peut être en effet vu comme une compétition entre la croissance des sphérolites de façon aléatoire à partir de germes de la matrice (croissance privilégiée à basses températures pour lesquelles la germination de la matrice est importante) et la croissance des structure qui émergent de sites de surface. Une étude utilisant la microscopie polarisée comme technique a également confirmé qu'il existe deux mécanismes distincts de cristallisation du PEEK dans l'APC-2 [VS86]. Un cliché typique d'une croissance sphérolitique émergeant de la matrice est obtenu ainsi qu'un cliché caractéristique de la croissance transcristalline émergeant des fibres de carbone.

On peut se demander si la présence de ces régions transcristallines influence l'adhésion fibres/matrices, propriété très importante car l'APC-2 est utilisé comme matériau composite de structure. Des essais de traction dans la direction transverse aux fibres ont été réalisés sur des éprouvettes d'APC-2 soumises à différents cycles de cristallisation [LP86]. On sait que pour un temps de maintien long dans l'état fondu, le nombre de sphérolites formées dans la matrice pendant le refroidissement est relativement faible et ainsi une région transcristalline prononcée est obtenue. Ainsi, il a été montré une nette amélioration des propriétés mécaniques dans la direction transverse (contrainte et déformation à rupture). Les surfaces de fracture correspondantes montrent aussi une meilleure adhésion fibres/matrice. Un lien interfacial fort est ainsi développé par la cristallisation sur les surfaces de fibres de carbone.

d- Croissance cristalline

Une fois le germe créé, la croissance du cristal se fait par dépôts successifs de portions de chaînes macromoléculaires sur le front de croissance cristallin [Mon90, HM97].

Modèle de Hoffman et Lauritzen

La théorie de Hoffman et Lauritzen décrit la croissance des cristaux à l'échelle microscopique. La vitesse de croissance des lamelles cristallines est donnée par :

$$G_1 \propto \exp\left(\frac{-K_g}{T(T_m^o - T)}\right) \quad (1.13)$$

avec K_g une constante qui dépend du régime de croissance et qui est fonction de l'énergie de surface libre du cristal ainsi que de l'enthalpie de fusion du cristal parfait. Le terme $G_1(T)$ est relatif à la force motrice de cristallisation. En dessous de la température de fusion, l'enthalpie libre du cristal est plus faible que l'enthalpie libre du fondu et le polymère tend à cristalliser. Plus la température diminue et plus cette différence d'enthalpie libre entre le cristal et le fondu représentée par G_1 augmente. La vitesse de croissance globale des lamelles cristallines est également gouvernée par le transport des chaînes macromoléculaires. En effet, pour qu'une portion de chaîne puisse se déposer sur le front cristallin, il faut que la chaîne entière se déplace par diffusion dans le fondu jusqu'à la surface de la lamelle. La vitesse d'extraction par diffusion d'une chaîne dans le fondu à la température T est donnée par :

$$G_2 \propto \exp\left(\frac{-\Delta G_t}{RT}\right) \quad (1.14)$$

où ΔG_t est l'énergie d'activation gouvernant le transport des chaînes macromoléculaires vers la surface du cristal et R la constante des gaz parfaits. Le terme $G_2(T)$ est lui un facteur de "retard" qui traduit la réduction de la mobilité des chaînes moléculaires lorsque la température diminue. Il existe plusieurs expressions pour ΔG_t . La plus couramment utilisée est une loi semi-empirique :

$$\Delta G_t = \frac{U^*T}{T - T_\infty} \quad (1.15)$$

avec U^* l'énergie d'activation relative aux mouvements macromoléculaires dans le fondu ; c'est une constante du matériau mais qui est généralement fixée à 6300 J/mol. T_∞ est la température hypothétique à laquelle tous les mouvements moléculaires sont figés ; elle dépend aussi du polymère et on trouve le plus souvent $T_\infty = T_g - 30^\circ\text{C}$.

Une seconde expression de ΔG_t se base sur le modèle de Williams, Landel et Ferry. Enfin, une expression de type Arrhenius donne cette énergie d'activation en fonction de l'énergie d'activation de reptation Q_D [Bus02].

Il y a alors compétition entre ces deux phénomènes antagonistes et ainsi, la vitesse globale de croissance des lamelles cristallines s'écrit :

$$G = G_0 \exp\left(\frac{-U^*}{R(T - T_\infty)}\right) \exp\left(\frac{-K_g}{T\Delta T}\right) \quad (1.16)$$

La première exponentielle correspond au terme de diffusion des chaînes macromoléculaires au sein du fondu. Cette diffusion, nécessaire pour qu'une chaîne puisse venir se déposer à la surface d'une lamelle cristalline en croissance, est favorisée à faible surfusion. La seconde exponentielle correspond au dépôt des germes secondaires et tertiaires à la surface de la lamelle en croissance.

Ces dépôts sont favorisés à faible température. La courbe de G en fonction de la température est donc une courbe en cloche. A faible surfusion, la croissance des lamelles est très lente parce que le dépôt des germes à leurs surfaces est thermodynamiquement défavorisé, à forte surfusion parce que la diffusion des macromolécules dans le fondu est freinée.

Dans la littérature, le modèle de Hoffmann et Lauritzen a déjà été utilisé, parfois sous des formes parfois un peu différentes, pour exprimer la vitesse de croissance radiale du PEEK [CD86, CL89]. Les valeurs suivantes des constantes ont été données : $U^* = 8300$ J/mol et $K_g = 660$ K², alors que des travaux antérieurs donnaient $K_g = 590$ K² pour le PEEK [BO83]. Très récemment, grâce à une technique de diffraction des rayons X aux petits angles (SAXS) une valeur de $K_g = 6,8 \cdot 10^5$ K² a été déterminée pour le PEEK, pour un régime de croissance pour lequel de multiples germination apparaissent à la surface du cristal c'est-à-dire plutôt à des températures faibles [JHT03]. Notons que dans l'équation de Hoffman et Lauritzen, un facteur de correction peut être ajouté pour prendre en compte la variation de chaleur latente de fusion qui apparaît lorsque la température du cristal diminue [JHT03].

Cristallisation secondaire

Le processus de cristallisation primaire se termine lorsque les sphérolites empiètent les uns dans les autres de façon à ce que toute la matrice soit incluse à l'intérieur des limites des sphérolites. La cristallisation dite « secondaire » est une cristallisation annexe qui obéit à un type de croissance différent. Elle peut être de deux types : soit une cristallisation des macromolécules amorphes, soit une perfection des cristaux des molécules initialement pauvrement cristallines. Généralement, la cristallisation secondaire est un mélange de ces deux processus. Ce sont souvent les portions de chaînes macromoléculaires moins parfaites (portions porteuses de branchements ou de terminaisons) qui sont incluses dans cette cristallisation secondaire. Les lamelles issues de la cristallisation primaire servent de germe pour la cristallisation secondaire. L'orientation de ces deux types de lamelles peut donc être différente. La cristallisation secondaire peut en théorie débiter aussitôt que les lamelles primaires sont créées mais, du fait de la relative lenteur de cette cristallisation secondaire, cette dernière ne se manifeste en général que lorsque les superstructures sont déjà presque ou entièrement terminées.

1.4.2 Cinétique de cristallisation

a- Les modèles globaux

Les théories cinétiques dites globales permettent de décrire l'évolution de la fraction de polymère transformé en entités semi-cristallines en fonction du temps dans le cas des cristallisations isothermes, et en fonction de la température dans le cas des cristallisations anisothermes. Ces théories supposent que les germes potentiels sont repartis uniformément dans le volume de l'échantillon qui est lui-même considéré constant. De plus, les germes potentiels ne peuvent disparaître que par activation ou absorption par une entité semi-cristalline en croissance. Enfin, la géométrie des entités cristallines est imposée : sphères dans un échantillon à 3 dimensions, disques dans un échantillon plan ou à deux dimensions, et bâtonnets dans un échantillon linéaire, plan ou à une dimension. Ces théories permettent de calculer le volume de l'échantillon transformé, le taux de transformation α est le rapport entre le volume transformé et le volume total de l'échantillon. Il s'écrit :

$$\alpha = 1 - \exp[-E(t)] \quad (1.17)$$

où $E(t)$ est le nombre moyen d'entités semi-cristallines ayant atteint un point quelconque du volume entre les instants 0 et t . A la fin de la cristallisation, α atteint la valeur de 1 alors que l'échantillon est semi-cristallin. Le taux de cristallinité absolu est obtenu en multipliant α par le taux de cristallinité maximal X_∞ (de l'ordre de 40 % dans le cas du PEEK) :

$$X_c(t, T) = X_\infty \cdot \alpha(t, T) \quad (1.18)$$

Cas isotherme : théorie d'Avrami-Evans

La théorie d'Avrami-Evans décrit les cristallisations isothermes [Avr39, Avr40, Avr41, Eva45]. En plus des hypothèses communes à toutes les théories cinétiques « globales », la théorie d'Avrami-Evans fait l'hypothèse supplémentaire que la fréquence d'activation des germes q et la vitesse de croissance des entités semi-cristallines G sont constantes. Deux cas extrêmes de germination peuvent être distingués. La germination instantanée pour laquelle on peut considérer que q est très élevée et que tous les germes commencent à grossir dès l'instant initial. Et la germination sporadique pour laquelle q est faible et les germes commencent à grossir tout au long de la cristallisation. D'une façon générale, le taux de transformation volumique s'écrit sous la forme :

$$\alpha(t) = 1 - \exp[-K_{avrami}(T) \cdot t^n] \quad (1.19)$$

où n est l'exposant d'Avrami qui dépend des caractéristiques géométriques de la croissance et K_{avrami} est la constante d'Avrami qui dépend de façon complexe de la température, de la géométrie et de la concentration des germes. Ces deux constantes dépendent aussi du type de germination. Les tableaux 1.8 et récapitulent les valeurs de l'exposant d'Avrami n et de la constante d'Avrami K_{avrami} dans les deux cas limites de germination pour une croissance tri- ou bidimensionnelle.

	Germination instantanée	Germination sporadique
3 dimensions (sphérolites)	3	4
2 dimensions (disques)	2	3

TABLE 1.8 – Exposant d'Avrami n

	Germination instantanée	Germination sporadique
3 dimensions (sphérolites)	$\frac{4\Pi N_0 G^3}{3}$	$\frac{q\Pi N_0 G^3}{3}$
2 dimensions (disques)	$\Pi N_0 G^2$	$\frac{q\Pi N_0 G^2}{3}$

TABLE 1.9 – Constante d'Avrami $K_{Avrami}(T)$

Dans la pratique, les valeurs de n obtenues sont rarement entières. En fait il existe de nombreuses raisons de ne pas obtenir les valeurs prévues par la théorie puisque les hypothèses de cette dernière ne sont pas toujours strictement vérifiées :

- la germination est le plus souvent intermédiaire entre sporadique et instantanée. Il peut également y avoir un temps d'induction pendant lequel aucun germe n'est activé.
- La répartition uniforme des germes potentiels n'est pas toujours vérifiée (cristallisation hétérogène). Les germes peuvent apparaître préférentiellement à la surface de charges, ou

en contact avec un métal ou du verre. S'il existe un gradient thermique dans l'échantillon, la répartition des germes ne sera pas non plus homogène.

- La vitesse de croissance des entités semi-cristalline n'est pas constante jusqu'à la fin de la cristallisation. En effet au cours de celle-ci, les défauts présents le long de la chaîne macromoléculaire sont rejetés dans le fondu puisque ils ne permettent pas aux segments de chaîne qui les portent de faire partie du cristal. La phase fondue s'enrichit donc en défauts, et en fin de cristallisation, la vitesse de croissance des entités semi-cristallines peut diminuer.
- Le modèle d'Avrami-Evans suppose que dans le volume transformé, la cristallisation du polymère est terminée. En réalité, les parties amorphes situées entre les lamelles cristallines peuvent cristalliser à leur tour. C'est le phénomène de cristallisation secondaire qui n'est pas pris ici en compte dans le calcul de volume transformé.

PEEK & Loi d'Avrami

Si le mécanisme de cristallisation suit bien la loi d'Avrami (Equation 1.19), en traçant $\ln[-\ln(1-\alpha)]$ en fonction de $\ln(t)$ on doit obtenir, pour chaque température, des droites de pentes n et d'ordonnée à l'origine $K_{\text{Avrami}}(T)$. De nombreux auteurs qui ont étudié la cristallisation isotherme du PEEK s'accordent pour dire que ces courbes présentent deux portions linéaires [Wun76, CD86, DSCW8a, DSCW8b, FR0b]. Ce changement de pente dans la représentation d'Avrami est considérée comme un effet de la cristallisation secondaire qui débiterait dans le cas du PEEK pour un taux de cristallinité relatif d'environ 45% [FR0b, CD86]. Que ce soit depuis le PEEK amorphe à l'état vitreux ou le fondu, les valeurs de n sont centrées autour de 3 [CD86, BGTA95]. Ceci signifie, que sur toute la large gamme de température, le processus de germination est spontané et la croissance du cristal est sphérolitique [Mor54]. De façon plus précise, une étude réalisée avec du PEEK pur [BGTA95] donne des valeurs de n depuis le fondu comprises entre 2,3 et 2,7 et depuis le solide des valeurs de n comprises entre 2,7 et 3,1. On constate alors une légère différence des mécanismes de cristallisation depuis le solide ou depuis le fondu. Selon cette étude, en considérant que la constante de vitesse d'Avrami varie selon la loi d'Arrhenius, les valeurs d'énergie d'activation calculées sont alors $E_a = 2500$ kJ/mol depuis le fondu et $E_a = 1700$ kJ/mol depuis le solide.

Il est important de remarquer que l'équation d'Avrami ignore les grandes différences de taux de cristallinité maximum obtenu à des temps très longs entre les cristallisations isothermes à basses et à hautes températures. En effet le taux de cristallinité final du PEEK est moins grand depuis le solide que depuis le fondu [CD86, BBA94]. Notons d'autre part que la littérature donne des valeurs de constantes d'Avrami $K_{\text{Avrami}}(T)$ mais ces données sont difficilement comparables d'une étude à l'autre car, avec la représentation d'Avrami, une toute petite variation de la pente n provoque une grande variation de la constante $K_{\text{Avrami}}(T)$. L'effet du maintien à une température T_m dans le fondu sur les paramètres de la loi d'Avrami a été étudié sur du PEEK pur [FR0b]. Il est montré que si n est indépendant de la température de cristallisation sur une certaine gamme de température, il dépend de la température de fusion : $n = 3,3$ pour $T_m = 410$ °C et $n = 3$ pour $T_m = 365$ °C. Ces résultats sont cohérents avec les explications données précédemment, à savoir une germination spontanée pour une faible température T_m et une germination plus sporadique pour une température T_m élevée, pour laquelle les germes cristallins sont détruits.

Il a été vérifié selon le traitement d'Avrami que la présence des fibres de carbone modifie la

crystallisation du PEEK; les constantes de vitesses sont plus élevées pour l'APC-2 que pour le PEEK pur [VS86]. Les valeurs d'indice d'Avrami n sont comprises entre 3 et 3,5 selon les températures [BO85].

Cas des refroidissements à vitesse constante : théorie d'Ozawa

La théorie d'Ozawa décrit les cristallisations où la vitesse de refroidissement est constante [Oza71]. Puisque la température varie, la vitesse de croissance G des entités cristallines, ainsi que la fréquence d'activation q ne peuvent plus être considérés comme constantes. Par contre, la théorie d'Ozawa fait l'hypothèse que G et q varient de la même façon avec la température. C'est l'hypothèse isocinétique qui se traduit par l'équation :

$$G/q = \text{constante} \quad (1.20)$$

Dans le cas général, le modèle d'Ozawa s'écrit :

$$\alpha(T) = 1 - \exp\left(-\frac{k_{\text{ozawa}}}{\Phi^n}\right) \quad (1.21)$$

où k_{ozawa} est la constante de vitesse d'Ozawa et Φ la vitesse de refroidissement. Notons que, comme pour la théorie d'Avrami, les hypothèses de la théorie d'Ozawa ne sont pas toujours vérifiées expérimentalement. Ozawa considère aussi que le taux de cristallisation du polymère est maximal en fin d'expérience quelque soit la vitesse de refroidissement. Or, ceci n'est pas vrai à des vitesses de refroidissement très élevées. Si on effectue par exemple une trempe en plongeant un polymère dans l'eau froide, on obtiendra un matériau quasiment amorphe.

PEEK & Loi d'Ozawa

Si le modèle d'Ozawa décrivait correctement le processus de cristallisation alors le trace de $\ln[-\ln(1-\alpha)]$ en fonction de $\log(\Phi)$ devrait être une série de lignes parallèles de pente n et d'ordonnée à l'origine $k_{\text{ozawa}}(T)$. Cependant, d'après plusieurs études réalisées avec du PEEK, ce traé semble donner des courbes plutôt que des droites [EW83, AMS87, FR0b]. Comme dans le cas isotherme, cet effet est souvent attribue a un processus secondaire plus lent non decrit par la theorie d'Ozawa.

On peut cependant aussi se demander si l'hypothèse d'une fonction de chauffe constante tout au long du processus est valide, c'est-à-dire si a une température donnée, il est réaliste que k_{ozawa} soit constante quelque soit l'avancement de la cristallisation [CD86]. Certains auteurs renoncent alors à déterminer les constantes du modèle d'Ozawa pour le PEEK [CD86] alors que d'autres donnent une valeur de n pour le PEEK pur dans la première partie de la cristallisation ($\alpha < 50\%$) de 3,8 [FR0b]. Les valeurs de n semblent donc plus élevées que pour une cristallisation isotherme.

Enfin, on note a nouveau que n augmente avec la température de maintien dans le fondu [FR0b].

Le modèle d'Ozawa ne tient pas compte non plus de la variation du taux de cristallinité final du matériau en fonction de la vitesse de refroidissement, pourtant il a été constaté a plusieurs reprises que celui-ci chute lorsque la vitesse de refroidissement est élevée [BCMG85, BO85, VS86]. La diffraction aux grands angles a été utilisée [BCMG85] pour étudier l'influence de la vitesse de refroidissement de l'APC-2 sur son taux de cristallinité final. Pour une large plage de vitesse de

refroidissement comprises entre 10 et 600 °C/min, le taux de cristallinité final se situe entre 25 et 35 % et il augmente relativement lentement quand la vitesse de refroidissement diminue. Par contre, lorsque la plaque d'APC-2 est refroidie au delà de 2000 °C/min, les clichés montrent que le matériau obtenu est amorphe [BCMG85, BO85, VS86]. Après avoir étudié la cristallisation du PEEK à des vitesses de refroidissement allant jusqu'à 160 °C/min puis extrapolé leur modèle à des vitesses de refroidissement bien plus élevées, Blundell et Osborn [BO85] préconisent de rester à des vitesses de refroidissement inférieures à 700 °C/min si on veut que le taux de cristallinité soit uniforme dans toute la matrice. Au delà de cette vitesse, le taux de cristallinité final chutera [VS86], il restera des régions non cristallisées dans le polymère, les sphérolites n'auront pas terminé leur croissance lorsque la température atteindra la T_g (145°C).

Théorie de Nakamura

La théorie de Nakamura décrit les cristallisations pour lesquelles le refroidissement est quelconque [NWKA72, NKA73]. Son expression est générale (Equation 1.22) et permet de modéliser des refroidissements complexes.

$$\alpha = 1 - \exp \left[- \left(\int_0^t K_{Nakamura}(T) dt \right)^n \right] \quad (1.22)$$

$K_{Nakamura}$ est la fonction de Nakamura qui dépend de la température et du temps et n est le coefficient d'Avrami.

Liens mathématiques

Les théories cinétiques présentées ci-dessus (Avrami, Ozawa et Nakamura) ont les mêmes racines. Elles calculent le nombre moyen d'entités semi-cristallines ayant atteint un point quelconque M de l'échantillon au temps t . Il existe donc des liens mathématiques entre elles qui prennent en compte l'évolution de la température spécifique à chacune d'elle [Hie95].

Avrami-Ozawa :

$$K_{avrami} = \left[- \frac{d \left(k_{ozawa}^{1/n}(T) \right)}{dT} \right]^n \quad (1.23)$$

$$k_{ozawa} = \left[\int_T^{T_i} K_{avrami}^{1/n}(T') dT' \right]^n \quad (1.24)$$

Avrami-Nakamura :

$$\kappa_{nakamura} = K_{avrami}^{1/n} \quad (1.25)$$

Notons que les formes différentielles des expressions d'Avrami et de Nakamura sont équivalentes ; en effet, en différentiant les équations 1.19 et 1.22 on obtient respectivement :

$$\frac{d\alpha}{dt} = n(1-\alpha) [-\ln(1-\alpha)]^{(n-1)/n} K_{avrami}(T)^{1/n} = n(1-\alpha) [-\ln(1-\alpha)]^{(n-1)/n} \kappa_{nakamura}(T) \quad (1.26)$$

Il est donc possible d'identifier une cinétique de cristallisation en conditions statiques, par le suivi de cristallisations isothermes ou de cristallisations à des vitesses de refroidissement constantes en DSC, et de définir un modèle valable quelque soit le mode de refroidissement imposé au matériau.

b- Cristallisation secondaire & autres modèles

Les théories « globales » ne prenant pas en compte la cristallisation secondaire, les cinétiques de cristallisation prédites peuvent fortement diverger de la réalité sur les derniers instants de la cristallisation. La plupart des nouveaux modèles se proposent alors d'introduire une fonction de correction qui permet la description de cette cristallisation secondaire. Seule la forme de ces fonctions diffère dans les 4 modèles suivants :

Hillier [Hil65] exprime le taux de cristallinité globale du matériau comme une somme de deux fonctions. Il considère que le matériau cristallise dans un premier temps selon un mécanisme de type Avrami avant de compléter sa cristallisation ou de « recristalliser » selon un second mécanisme de type Avrami. La première expression est une fonction classique d'Avrami alors que la seconde est un produit de convolution de la même fonction d'Avrami par une exponentielle décroissante. Ce modèle permet bien d'expliquer les valeurs fractionnaires de n mais l'ajustement de ce modèle de Hillier a des données expérimentales est plus rare.

Velisaris et Seferis [VS65] décrivent aussi le processus global de cristallisation comme deux fonctions d'Avrami successives ou en parallèle. Les paramètres de la première fonction d'Avrami sont obtenus classiquement alors que la seconde fonction est ajustée aux valeurs expérimentales. Ce type de modèle a été utilisé pour décrire le comportement global du PEEK [VS86] avec deux indices d'Avrami n différents.

Hinrichs et coll. [HKH90] basent leur modèle sur la notion de cristallinité locale $\alpha_L(t)$. Chaque point à l'intérieur d'un sphérolite a un taux de cristallinité qui dépend du temps depuis lequel il a été atteint par le front de cristallisation. L'augmentation du taux de cristallinité à l'intérieur des sphérolites est alors couvert par ce nouveau modèle : la cristallinité en un point M atteint par un germe en croissance ne varie pas instantanément de 0 à sa valeur finale (comme dans Avrami) mais croît progressivement avec le temps. Tobin [Tob74, Tob76, Tob77] propose une théorie cinétique de transition de phase avec empilement des sites de croissance. Ce modèle semble s'accorder avec les constatations expérimentales : il propose une équation du taux de cristallinité relatif α qui est semblable à celle d'Avrami à des temps courts (c'est-à-dire α faible) puis qui tend vers 1 moins vite que l'équation d'Avrami à des temps longs.

Enfin, d'autres modèles résultent de la combinaison ou de la modification de ces modèles. C'est le cas du modèle de Cruz-Pinto et coll. [CPMO94] qui a été appliqué au PEEK.

Notons que le grand nombre de paramètres ajustables permettent effectivement de bien ajuster ces modèles à des cinétiques de cristallisations très particulières ; cependant ces modèles doivent être utilisés avec beaucoup de précaution et souvent il est nécessaire de les coupler à des études poussées de la morphologie du matériau si l'on veut qu'ils soient cohérents avec la réalité physique.

1.5 Contraintes résiduelles dans les composites thermoplastiques

Les procédés de mise en oeuvre des composites thermoplastiques impliquent inévitablement le développement de contraintes résiduelles, du fait des variations des propriétés thermomécaniques avec la température. Le procédé ATP est unique en plusieurs aspects car, contrairement à

d'autres procédés thermiques tels que l'autoclave ou le formage, la pièce est chauffée de manière locale (torche, laser etc.).

Du fait de ce type de chauffage, des gradients thermiques se développent dans la direction de l'épaisseur des rubans et dans les directions perpendiculaires.

Les propriétés thermomécaniques du matériau, telles que le module d'Young de la matrice ou la conductivité thermique, et le degré de cristallinité varient avec la température à une échelle locale, et de ce fait doivent être pris en compte dans la modélisation du procédé. Les contraintes résiduelles qui se produisent lors du procédé ATP peuvent mener à la distorsion des pièces manufacturées, la fissuration de la matrice, et des délaminations inter pli (figure 1.23). Des contraintes de traction peuvent même atteindre une fraction significative de la traction à rupture. Par conséquent, pour assurer des performances fiables et satisfaisantes, les contraintes résiduelles au sein d'un composite devraient être connues avant que la pièce soit mise en fonctionnement.

Dans cette section, nous présentons les mécanismes responsables de la formation des contraintes résiduelles dans les composites thermoplastiques.

Le développement de contraintes résiduelles dans les structures composites peut être traité à une échelle microscopique et à une échelle macroscopique. Dans les deux cas, les contraintes

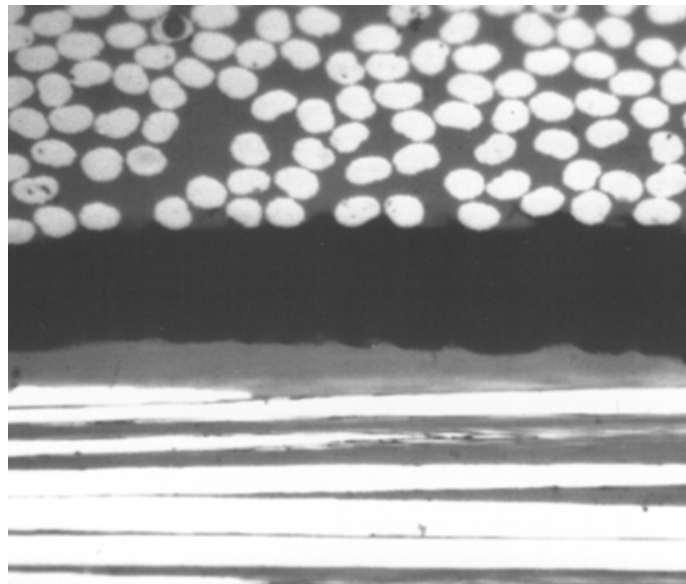


FIGURE 1.23 – Fissure interlaminaire générée par la coalescence des décohésions fibre-matrice

résiduelles générées sont induites par les effets de la thermique (forts gradients thermiques induits par le procédé) et des variations du degré de cristallinité (effet de la cristallisation) [Tie03, Bog89, BG92, NGC07, NGC92].

1.5.1 Formation des contraintes résiduelles à l'échelle microscopique

A l'échelle microscopique, les contraintes résiduelles sont de deux types :

- contraintes induites par la thermique ;
- contraintes induites par la cristallisation.

Nécessité d'utiliser des incréments de contraintes et de déformations

On ne peut pas calculer directement le champ de contraintes et de déformations sans passer par des incréments de contraintes et de déformations, car les propriétés thermomécaniques du matériau varient au cours du temps et de ce fait on surestimerait ou on sous estimerait les champs de contraintes et de déformation. De plus, la présence d'un phénomène non-linéaire, la cristallisation, impose également ce choix.

Le comportement du matériau varie fortement avec la température (3.35). Ainsi pour une température supérieure à la température de transition vitreuse $T_g = 143^\circ C$, le module d'Young du PEEK est faible et il n'y a pratiquement pas de formation de contraintes.

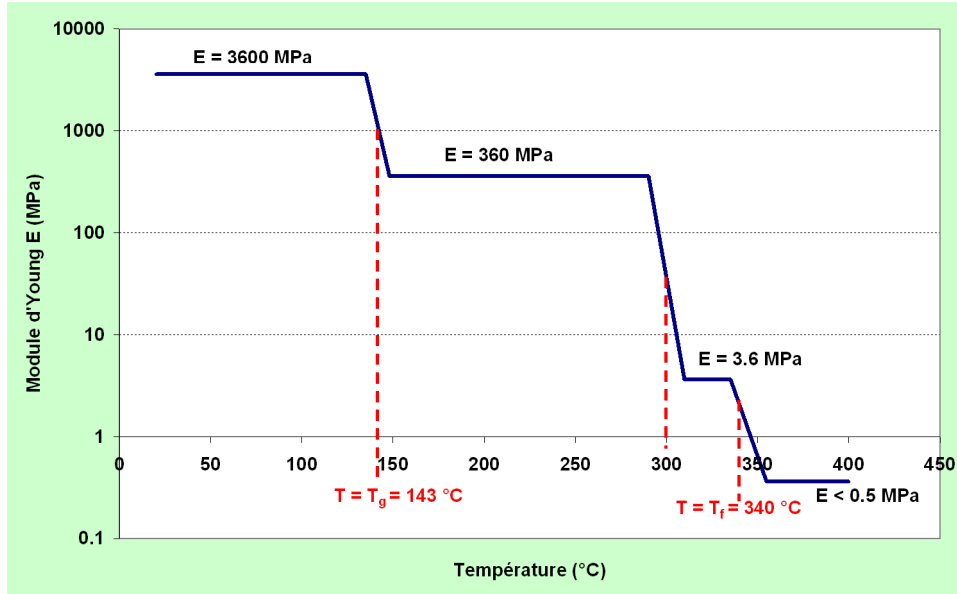


FIGURE 1.24 – Evolution globale du module d'Young E du PEEK (MPa) en fonction de la température (°C)

Contraintes d'origine thermique

Les contraintes résiduelles à l'échelle microscopique résultent de la différence de coefficient de dilatation thermique entre la fibre et la matrice. La matrice possédant un coefficient de dilatation thermique largement supérieur à celui de la fibre (environ 10 fois)(tableaux 1.10 et 1.11), on observe, dans le sens longitudinal, une mise en traction de la matrice qui est équilibrée par la mise en compression de la fibre. La contraction thermique de la matrice se traduit également par le développement de contraintes radiales de compression à la surface de la fibre.

Gamme de température	23-143°C	143- 343°C	343-420°C
Coefficient d'expansion thermique (°C ⁻¹)	47×10^{-6}	108×10^{-6}	120×10^{-6}

TABLE 1.10 – Coefficients de dilatation thermique du PEEK [Cog92]

Composantes du coefficient de dilatation thermique	α_L	α_T
Coefficient d'expansion thermique ($^{\circ}\text{C}^{-1}$)	-1.2×10^{-6}	12×10^{-6}

TABLE 1.11 – Coefficients de dilatation thermique des fibres de carbone [Cog92]

L'incrément de contrainte thermique entre deux instants peut être calculé par une relation le liant au coefficient de dilatation thermique.

Calcul de l'incrément de contrainte thermique

Dans chacune des deux phases, fibre ou matrice, on peut calculer facilement la déformation et la contrainte d'origine thermique.

Le tenseur incrément de déformation thermique entre deux instant $t - dt$ et t se calcule comme suit [NGC92] :

$$\Delta \epsilon^{th}(\mathbf{x}, t) = \boldsymbol{\alpha}^{th}(\mathbf{x}, t) (T(\mathbf{x}, t) - T(\mathbf{x}, t - dt)) \quad (1.27)$$

Avec $\boldsymbol{\alpha}^{th}(\mathbf{x}, t)$ le tenseur de dilatation thermique de la phase considérée au point \mathbf{x} et à l'instant t et $T(\mathbf{x}, t)$, $T(\mathbf{x}, t - dt)$ les températures au point \mathbf{x} , respectivement aux temps t et $t - dt$. On considère que le tenseur de dilatation thermique varie peu entre les instants $t - dt$ et t .

On en déduit le tenseur incrément de contrainte thermique au point \mathbf{x} entre les deux instant $t - dt$ et t :

$$\Delta \sigma^{th}(\mathbf{x}, t) \equiv \mathbf{C}(\mathbf{x}, t) : \boldsymbol{\alpha}^{th}(\mathbf{x}, t) (T(\mathbf{x}, t) - T(\mathbf{x}, t - dt)) \quad (1.28)$$

En considérant que le comportement du matériau \mathbf{C} varie peu entre les instants $t - dt$ et t .

Contraintes induites par la cristallisation

Lors du refroidissement du matériau composite, les variations du degré de cristallinité de la matrice se traduisent par une contraction, ou rétreint de la matrice.

En effet, la densité de la matrice augmente avec le degré de cristallinité lors du refroidissement. Comme montré sur la figure 1.25, la vitesse de cristallisation (s^{-1}) en fonction de la température présente la forme d'une courbe de Gauss.

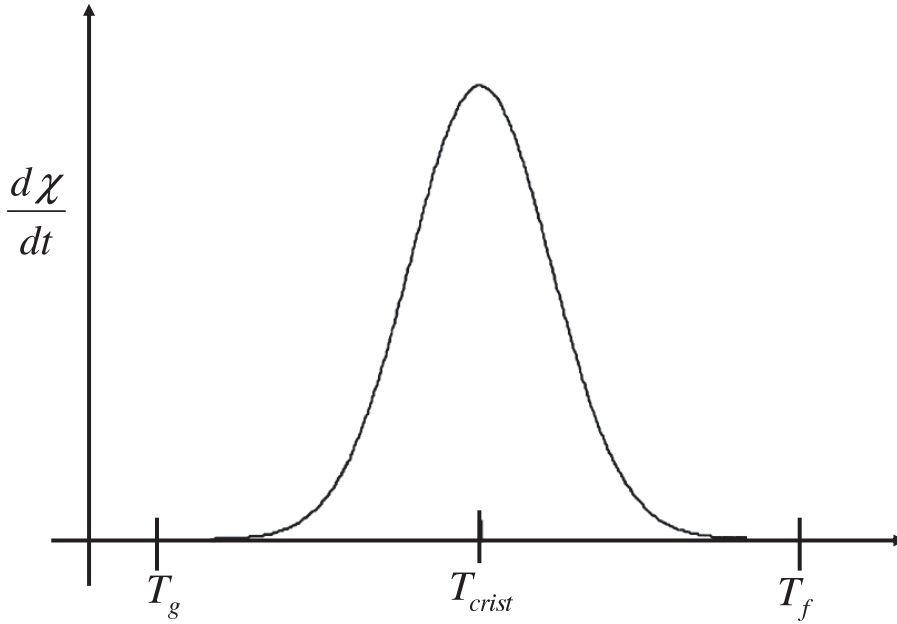


FIGURE 1.25 – Schéma de la vitesse de cristallisation en fonction de la température

Les cristaux croissent entre la température de fusion T_f , et la température de transition vitreuse T_g , avec un maximum de la vitesse de croissance cristalline atteinte à la température de cristallisation T_{crist} , située entre T_f et T_g , et dépendant de la vitesse de refroidissement. Pour la cristallisation depuis l'état fondu, la température de cristallisation augmente lorsque la vitesse de refroidissement diminue. Le plus élevée la température à laquelle la cristallisation se produit est, le plus élevé les contraintes résiduelles seront à la fin du refroidissement à la température ambiante [TAN00]. Ainsi, la matrice demeure dans un état amorphe à une température plus basse si la vitesse de refroidissement augmente. Ceci réduit effectivement l'intervalle de température ΔT , au dessus duquel les contraintes résiduelles se développent. De ce fait, les contraintes résiduelles induites par la cristallisation seront réduites en refroidissant le composite le plus rapidement possible, au détriment d'autres propriétés thermomécaniques.

Calcul de l'incrément de contrainte induite par la cristallisation

Ce type de déformation et de contrainte ne concerne que la phase matrice. L'incrément de déformation induite par la cristallisation dans la matrice isotrope entre deux instant $t - dt$ et t se calcule comme suit [BG92] :

$$\Delta\epsilon^{crist}(\mathbf{x}, t) = \sqrt[3]{1 + \Delta V_{crist}(\mathbf{x}, t) / V_{crist}(\mathbf{x}, t)} - 1 \quad (1.29)$$

où ΔV_{crist} est la variation de volume induite par la cristallisation. La variation de volume spécifique induite par la cristallisation s'exprime sous la forme :

$$\Delta V_{crist}(\mathbf{x}, t) / V_{crist}(\mathbf{x}, t) = \frac{\rho(\mathbf{x}, t - dt) - \rho(\mathbf{x}, t)}{\rho(\mathbf{x}, t)} \quad (1.30)$$

où $\rho(\mathbf{x}, t)$ et $\rho(\mathbf{x}, t - dt)$ sont la densité dépendant du degré de cristallinité aux instants t et $t-dt$ respectivement. La densité fonction du degré de cristallinité s'exprime sous la forme :

$$\rho(\chi, \mathbf{x}, t) = \chi(\mathbf{x}, t) \rho_{crist} + (1 - \chi(\mathbf{x}, t)) \rho_{am} \quad (1.31)$$

où ρ_{am} est la densité du PEEK amorphe ($\chi(\mathbf{x}, t) = 0$) ρ_{cris} est la densité du PEEK totalement cristallisé ($\chi(\mathbf{x}, t) = 1$).

Une autre expression [BG92] pour exprimer la variation de volume spécifique induite par la cristallisation est :

$$\Delta V_{cris}(\mathbf{x}, t) / V_{cris}(\mathbf{x}, t) = \Delta \nu_{cris} = \Delta \chi(\mathbf{x}, t) \cdot \nu_{cris}^{total} \quad (1.32)$$

où ν_{cris}^{total} est la variation de volume spécifique induite par la cristallisation pour le matériau totalement cristallisé ($\chi = 1$) et $\Delta \chi(\mathbf{x}, t) = \chi(\mathbf{x}, t) - \chi(\mathbf{x}, t - dt)$ est la variation de degré de cristallinité entre les instants $t-dt$ et t . On peut également exprimer l'incrément de déformation induite par la cristallisation sous la forme :

$$\Delta \epsilon^{cris}(\mathbf{x}, t) = \left(\frac{\rho(\mathbf{x}, t - dt)}{\rho(\mathbf{x}, t)} \right)^{1/3} - 1 \quad (1.33)$$

Et le tenseur incrément de déformation induite par la cristallisation sous la forme :

$$\Delta \epsilon^{cris}(\mathbf{x}, t) = \begin{bmatrix} \left(\frac{\rho(\mathbf{x}, t - dt)}{\rho(\mathbf{x}, t)} \right)^{1/3} - 1 & & \\ & \left(\frac{\rho(\mathbf{x}, t - dt)}{\rho(\mathbf{x}, t)} \right)^{1/3} - 1 & \\ & & 0 \end{bmatrix} \quad (1.34)$$

On en déduit le tenseur incrément de contrainte induite par la cristallisation entre deux instant $t - dt$ et t :

$$\Delta \sigma^{cris}(\mathbf{x}, t) \equiv \mathbf{C}(\mathbf{x}, t) : \Delta \epsilon^{cris}(\mathbf{x}, t) \quad (1.35)$$

En considérant que le comportement du matériau \mathbf{C} varie peu entre les instants $t-dt$ et t . Une fois que les incréments de déformation thermique et de cristallisation ont été calculés, on peut calculer l'incrément de contrainte totale entre les instants $t-dt$ et t .

Calcul de l'état de contrainte totale

L'incrément de contraintes en un point \mathbf{x} du domaine et à l'instant t s'exprime sous la forme :

$$\Delta \sigma(\mathbf{x}, t) = \mathbf{C}(\mathbf{x}, t) : \left(\Delta \epsilon^{total}(\mathbf{x}, t) - \left(\Delta \epsilon^{th} + \Delta \epsilon^{cris} \right) \right) \quad (1.36)$$

avec $\Delta \epsilon^{total}$ le tenseur incrément de déformation total (dérivant d'un champ de déplacement) au point \mathbf{x} et à l'instant t .

Le champ de contraintes en un point \mathbf{x} et à l'instant t est obtenu en sommant les tenseurs incréments de contraintes pour tous les pas de temps du calcul.

$$\sigma(\mathbf{x}, t) = \sum_{p=0}^{p=(N-1)\Delta t_{micro}} \Delta \sigma(\mathbf{x}, t) \quad (1.37)$$

1.5.2 Formation des contraintes résiduelles à l'échelle macroscopique

Les contraintes résiduelles à l'échelle macroscopique dans le procédé ATP se développent à cause d'une combinaison de quelques uns ou de tous les mécanismes suivants :

- différence de coefficient de dilatation thermique induite par la séquence d'empilement des plis ;

- gradients de température et des propriétés du matériau à travers l'épaisseur ;
- déformations de contraction induites par la cristallisation ;
- dépôt séquentiel des plis et consolidation des plis durant la fabrication ;
- interactions pièce-outils.

Nécessité d'utiliser des incréments de contraintes et de déformations

On ne peut pas calculer directement le champ de contraintes et de déformations sans passer par des incréments de contraintes et de déformations, car les propriétés thermomécaniques du matériau varient au cours du temps et de ce fait on surestimerait ou on sous estimerait les champs de contraintes et de déformation. De plus, la présence d'un phénomène non-linéaire, la cristallisation, impose également ce choix.

Contraintes d'origine thermique

L'anisotropie du coefficient de dilatation thermique de chaque pli unidirectionnel induit le développement de contraintes d'un pli à l'autre : chaque couche subit les variations de température, mais à la déformation résultante s'oppose la réaction des couches adjacentes. Dans le cas d'un stratifié déséquilibré (par exemple $0^\circ/90^\circ/\dots$), ces contraintes se traduisent par l'apparition d'une courbure à l'issue du cycle de cuisson et de refroidissement.

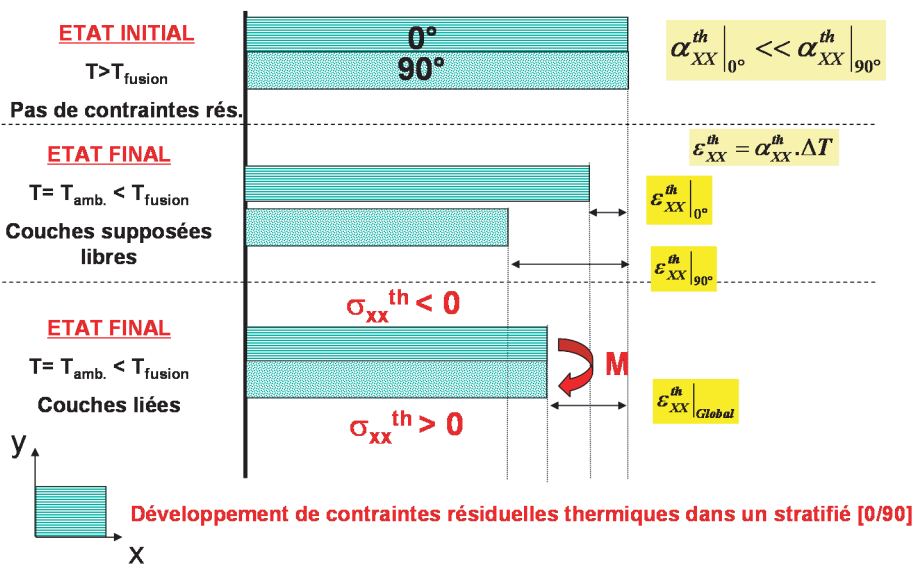


FIGURE 1.26 – Développement de contraintes résiduelles thermiques dans un stratifié [0/90]

Calcul de l'incrément de contrainte thermique

Le calcul du tenseur incrément de déformation thermique s'effectue de la manière suivante :

$$\Delta \epsilon^{th}(\mathbf{x}, t) = \alpha^{th}(\mathbf{x}, t) (T(\mathbf{x}, t) - T(\mathbf{x}, t - dt)) \quad (1.38)$$

En considérant que le coefficient de dilatation thermique varie peu entre les instants $t-dt$ et t . De plus, la dilatation thermique n'est différente de zéro qu'à partir une température de référence.

Cette température de référence est la température de cristallisation de l'APC-2 dans notre étude. On en déduit l'incrément de contrainte thermique entre deux instant $t - dt$ et t :

$$\Delta\sigma^{th}(\mathbf{x}, t) \equiv \mathbf{C}(\mathbf{x}, t) : \boldsymbol{\alpha}^{th}(\mathbf{x}, t) (T(\mathbf{x}, t) - T(\mathbf{x}, t - dt)) \quad (1.39)$$

En considérant que le comportement du matériau varie peu entre les instants $t-dt$ et t .

Contraintes induites par la cristallisation

Les variations du degré de cristallinité de la matrice au sein du composite entraîne des variations de densité au sein du stratifié. Des déformations et des contraintes sont ainsi générées au cours de la phase de refroidissement.

Calcul de l'incrément de contrainte induite par la cristallisation

Les déformations induite par la cristallisation ne concerne que la phase matrice. L'expression 1.29 doit donc être modifiée pour tenir compte du fait que seule la matrice induit des déformations de cristallisation.

On peut dans ce cas pondérer la déformation de cristallisation par le taux de matrice $\tau_{Matrice}$ du composite :

$$\Delta\epsilon^{cryst}(\mathbf{x}, t) = \tau_{Matrice} \times \left(\left(\frac{\rho(\mathbf{x}, t - dt)}{\rho(\mathbf{x}, t)} \right)^{1/3} - 1 \right) \quad (1.40)$$

Le tenseur incrément de déformation induite par la cristallisation s'exprime alors sous la forme :

$$\Delta\epsilon^{cryst}(\mathbf{x}, t) = \begin{bmatrix} \tau_{Matrice} \times \left(\left(\frac{\rho(\mathbf{x}, t - dt)}{\rho(\mathbf{x}, t)} \right)^{1/3} - 1 \right) \\ \tau_{Matrice} \times \left(\left(\frac{\rho(\mathbf{x}, t - dt)}{\rho(\mathbf{x}, t)} \right)^{1/3} - 1 \right) \\ 0 \end{bmatrix} \quad (1.41)$$

On en déduit le tenseur incrément de contrainte induite par la cristallisation entre deux instant $t - dt$ et t :

$$\Delta\sigma^{cryst}(\mathbf{x}, t) \equiv \mathbf{C}(\mathbf{x}, t) : \Delta\epsilon^{cryst}(\mathbf{x}, t) \quad (1.42)$$

En considérant que le comportement du matériau \mathbf{C} varie peu entre les instants $t-dt$ et t .

Une fois que les incréments de déformation thermique et de cristallisation ont été calculés, on peut calculer l'incrément de contrainte totale entre les instants $t-dt$ et t .

Calcul de l'état de contrainte totale

L'incrément de contraintes en un point \mathbf{x} et à l'instant t du domaine s'exprime sous la forme :

$$\Delta\sigma(\mathbf{x}, t) = \mathbf{C}(\mathbf{x}, t) : \left(\Delta\epsilon^{total}(\mathbf{x}, t) - \left(\Delta\epsilon^{th} + \Delta\epsilon^{cryst} \right) \right) \quad (1.43)$$

avec $\Delta\epsilon^{total}$ l'incrément de déformation total (dérivant d'un champ de déplacement) au point \mathbf{x} et à l'instant t .

Le champ de contraintes en un point \mathbf{x} et à l'instant t est obtenu en sommant les incréments de contraintes pour tous les pas de temps du calcul.

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t) = \sum_{p=0}^{p=(N-1)\Delta t_{micro}} \Delta\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t) \quad (1.44)$$

Dans la section suivante, nous présentons les étapes du procédé qui provoquent la formation de contraintes résiduelles.

1.5.3 Etapes du procédé mises en cause dans la formation des contraintes résiduelles

Refroidissement de la température de surface

Les contraintes thermiques non uniformes représentent la contribution principale au développement des contraintes résiduelles transitoires dans n'importe quel procédé. Ces contraintes peuvent se développer dans des matériaux homogènes et sont amplifiées dans le cas de pièces constituées de matériaux anisotropes ou hétérogènes. La formation de ces gradients thermiques est inévitable durant le procédé et doit être prise en compte dans l'analyse thermomécanique. Durant le procédé, des gradients de température non uniformes et asymétriques se développent dans la direction de l'épaisseur du composite et entraînent le développement de contraintes internes du fait de la différence de coefficients de dilatation thermique entre les plis nouvellement consolidés et les plis préconsolidés comme montrés figure 1.27.

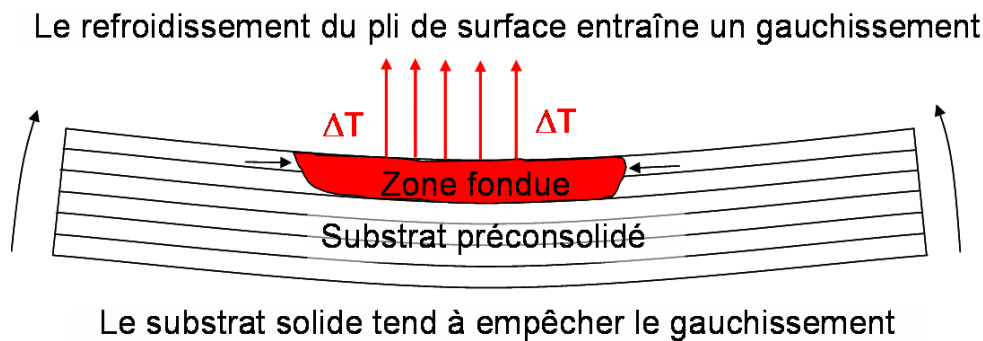


FIGURE 1.27 – Le refroidissement de la température de surface entraîne un gauchissement de la pièce

Le développement de la courbure à partir de ces gradient thermiques locaux est contraint par la frontière composite solide entourant la zone chauffée. Cette contrainte résulte en une croissance globale des contraintes résiduelles internes au sein de la structure du stratifié. L'effet de ce mécanisme est amplifié lorsque les plis sont ajoutés, et lorsque l'orientation des plis change au cours du dépôt. Pour des pièces composite de grande taille ce mécanisme est moins prédominant car le chauffage est appliqué sur un pourcentage très petit de la surface totale du composite, limitant ainsi la région exposée aux gradients thermiques.

1.5.4 Ajout multiple de plis

Une des caractéristique unique du procédé ATP est la manière dont il utilise des méthodes in-situ pour consolider un ruban de préimprégné au substrat déjà consolidé. Cette caractéristique entraîne également des champs de contraintes résiduelles induites par les variations de la séquence de dépôt durant la fabrication. Par exemple un stratifié symétrique n'est pas toujours symétrique durant l'empilement, ainsi des contraintes indésirables et du gauchissement peuvent se former dans les pièces qui normalement seraient plates, en utilisant un procédé autoclave ou de mise en oeuvre par presse à chaud. Comme pour le cas des gradients thermiques, ces contraintes sont

également amplifiées par les dépôts successifs des plis et par la consolidation des plis de surface. Pour maintenir l'équilibre sous ces conditions, la pièce de composite développe des courbures, et ce gauchissement est bloqué pendant le refroidissement graduel du stratifié. Cet effet est unique à ce procédé et peut être utilisé comme une méthode pour minimiser les courbures par l'utilisation de techniques de précontraintes [Tie03]. Cette méthode d'addition de plis multiples associée à la formation de gradients thermiques est appelée effet « peau d'onion » [Tie03].

1.5.5 Refroidissement de la pièce jusqu'à la température ambiante

Durant le procédé ATP, la température dans le stratifié composite peut augmenter du fait du système de chauffage se déplaçant à la surface de la pièce. Cet échauffement graduel n'affecte pas l'histoire thermique locale au niveau de la tête de dépose mais influence les températures en fin de cuisson à la surface. Pour des pièces de composite de taille plus importante, ce chauffage graduel est moins prononcé à cause des temps plus longs entre les passes de la tête de dépose, mais peut encore avoir un impact significatif sur le gauchissement final. En effet la pièce entière subit un refroidissement, ce qui amplifie ainsi les gradients de contraintes résiduelles sur la pièce de composite entière [Tie03]. Comme pour tous les autres procédés de mise en forme des composites, il est plus logique de fabriquer des panneaux symétriques. Avec un refroidissement uniforme, les panneaux symétriques ne développent pas de courbure. Ils peuvent, cependant, développer des contraintes internes qui peuvent affecter la performance de structure. Ainsi, il est préférable d'augmenter les températures au coeur de la pièce avant la fin de fabrication du panneau, de telle manière que l'écart entre les températures maximales de surface et les températures au coeur de la pièce soit réduit, limitant ainsi le développement de gauchissement. Cette approche de refroidissement uniforme est utilisée comme une technique de post-processing pour relaxer les contraintes et le gauchissement qui se développent durant le procédé ATP, en chauffant le matériau juste au dessus de la température de transition vitreuse, et ainsi refroidir uniformément le matériau jusqu'aux conditions ambiantes. Des fabricants utilisent cette technique comme une méthode pour consolider les plis constitutifs, en appliquant une pression, de même qu'en utilisant une technique pour relaxer les champs de contraintes non uniformes au sein du stratifié. Une autre méthode similaire serait de chauffer le matériau substrat durant le procédé, mais cette méthode n'est pas économique, car elle requière des outillages particulièrement coûteux pour des géométries complexes et grandes.

Dans la section suivante nous présentons les différentes zones de la pièce à l'échelle macroscopique soumises à la formation des contraintes résiduelles au cours du procédé.

1.5.6 Zones de la pièce soumises à la formation des contraintes résiduelles

Certaines zones de la pièce de composite sont soumises plus particulièrement à la formation des contraintes résiduelles au cours du procédé ATP [Tie03] :

1. refroidissement de la surface à partir de la fusion : ce phénomène s'applique au ruban en train d'être déposé, car l'état de contrainte et de déformation avant le placement est égal à zéro.
2. Chauffage, fusion et refroidissement de surface : cette zone est constituée par les premiers plis placés directement sous la surface. Dans cette zone, on a une relaxation des contraintes lorsque les températures dépassent la température de fusion, une fusion partielle des cristaux avec une diminution correspondante des déformations de cristallisation, la recristallisation avec les déformations de cristallisation correspondantes, et le développement de contraintes résiduelles à partir de la fusion.

3. Chauffage et refroidissement (au dessus de la température de transition vitreuse) : cette zone représente une part significative du matériau localisé, et résulte en une relaxation des contraintes, qui est suivie par une augmentation des contraintes induites par le refroidissement et la cristallisation/recristallisation.
4. Chauffage et refroidissement (en dessous de la température de transition vitreuse) : une fois qu'un nombre suffisant de plis ont été déposés, cette zone se forme dans la zone proche du mandrin et implique une augmentation et une diminution des contraintes résiduelles, mais cependant entraîne seulement une augmentation des contraintes résiduelles induites par la croissance cristalline.

Dans la section suivante, nous présentons les études qui ont été réalisées précédemment sur la modélisation des contraintes résiduelles dans les procédés de placement de pli.

1.5.7 Études précédentes réalisées sur la modélisation des contraintes résiduelles dans les procédés de placement de pli

Mantell et Springer [MS2a, MWS2b] ont été les premiers à tenter de déterminer les contraintes et les déformations lors du placement de plis en s'appuyant sur le modèle de Lee et Springer [LS90] et sur des modèles mécaniques pour des plis minces [Jon75, LP86, Tsa87]. Feltman et Santare [FS99] ont développé un modèle thermo-élastique pour évaluer l'état de contraintes dans le procédé d'empilement avec soudage et consolidation en continu avec un chauffage laser. Ils ont présenté des résultats de simulations dans le cas de deux couches mises en contact. La plupart des études précédentes sur la prédiction des contraintes résiduelles développées durant les procédés d'élaboration de composites thermoplastiques se sont concentrées sur le procédé d'injection [CGP⁺90, JP88, LMS⁺90, WDG92, UH93, LW94, LWLM97, WS97, DH98, EV00, Ers98]. D'un autre côté, Neijhad et al. [NGC92] ont proposé un modèle pour prédire les contraintes induites dans l'enroulement filamentaire. Ils ont modélisé l'enroulement filamentaire comme un procédé transitoire. Puisque cela a mené à des temps de calcul excessifs, les champs de contraintes résiduelles ne pouvaient pas être obtenus dans des temps de calcul raisonnables. Dans les sections suivantes nous présentons deux études principales qui ont été réalisées sur la modélisation des contraintes résiduelles dans le procédé ATP.

Étude réalisée par Tierney [Tie03]

Tierney [Tie03] dans son étude a développé un modèle basé sur la théorie classique des stratifiés [PD59, RS61, Bog89, BG92, Edu91]. Le modèle est décrit à l'échelle macroscopique. Le modèle prend en compte la localisation du chauffage dans le cas de l'empilement avec soudage et consolidation en continu et ajoute une contrainte locale dans les équations de la théorie des stratifiés pour calculer les contraintes internes. Tierney [Tie03] évalue également le rôle du changement d'état du polymère (fusion/cristallisation) qui induit une contraction du matériau. Tierney [Tie03] mesure expérimentalement la déformation de plaques, de PEEK renforcé de fibres de carbone, réalisées avec ce procédé en fonction des séquences d'empilement. Deux méthodes ont été développées dans l'étude pour contrôler le gauchissement final de la pièce : la mise en précontrainte du substrat et la prédiction « spring-back » basée sur le concept de la courbure initiale optimale. Ces deux méthodes se sont révélées prometteuses pour contrôler la forme finale des panneaux de composite fabriqués par le procédé d'empilement par soudage et consolidation en continu.

Étude réalisée par Sonmez et coll. ([SHA02a])

Par une modélisation macroscopique réalisée par éléments finis, Sonmez et coll. [SHA02a] déterminent les contraintes résiduelles dans l'épaisseur de l'échantillon en ramenant le problème à un phénomène quasi-statique en se plaçant dans le repère de la tête de dépose du nouveau préimprégné. Dans le but de prendre en compte la relaxation des contraintes résiduelles dans les couches précédentes, l'état de contraintes résiduelles calculé lors du placement du dernier pli est utilisé comme champ de contraintes initial pour la configuration courante. Des résultats ont été obtenus pour des stratifiés croisés et unidirectionnels. Ils ont montré les distributions des contraintes résiduelles à travers l'épaisseur pour un nombre choisi de paramètres du procédé (par ex. la vitesse du roller ou le chauffage). La conclusion de l'étude est que la formation des contraintes résiduelles dans un stratifié peut être contrôlée en modifiant ces paramètres. Dans

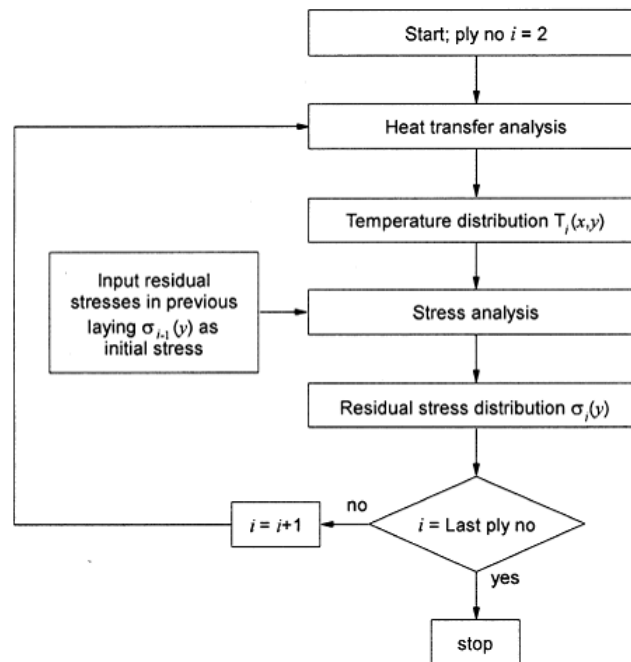


FIGURE 1.28 – Algorithme de calcul des contraintes résiduelles dans l'étude de Sonmez et coll. [SHA02a]

une étude plus récente, Sonmez et coll. [SA07] ont appliqué le modèle de contraintes résiduelles présenté dans [SHA02a] mais en utilisant un plus grand domaine d'analyse macroscopique et un maillage plus fin dans le but d'assurer l'efficacité de toutes les valeurs des variables du procédé générées par l'algorithme d'optimisation (cf. figure 1.29). Afin de prendre en compte la relaxation des contraintes résiduelles dans les plis précédemment déposés durant le placement de fibre en cours, l'approche suivante a été adoptée : dans les plis déposés précédemment subissant des températures supérieures à la température libre de contraintes du matériau thermoplastique, les contraintes résiduelles sont supposées être totalement relaxées et égales à zéro. Un algorithme d'optimisation est proposé pour minimiser la formation des contraintes résiduelles, en modifiant les paramètres du procédé (vitesse du roller etc.), tout en conservant une bonne adhésion et en limitant la dégradation thermique du matériau (figure 1.30 et 1.31).

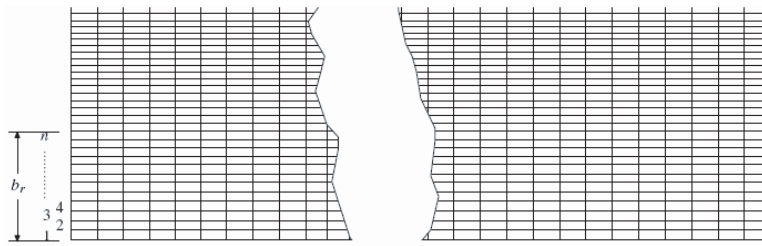


FIGURE 1.29 – Maillage de la structure utilisée dans l'analyse des contraintes résiduelles. Les dimensions verticales et horizontales ne sont pas à l'échelle [SA07].

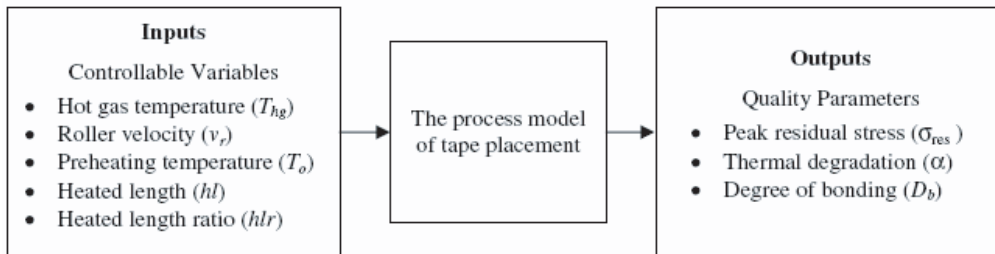


FIGURE 1.30 – Entrées et Sorties du modèle du procédé [SA07].

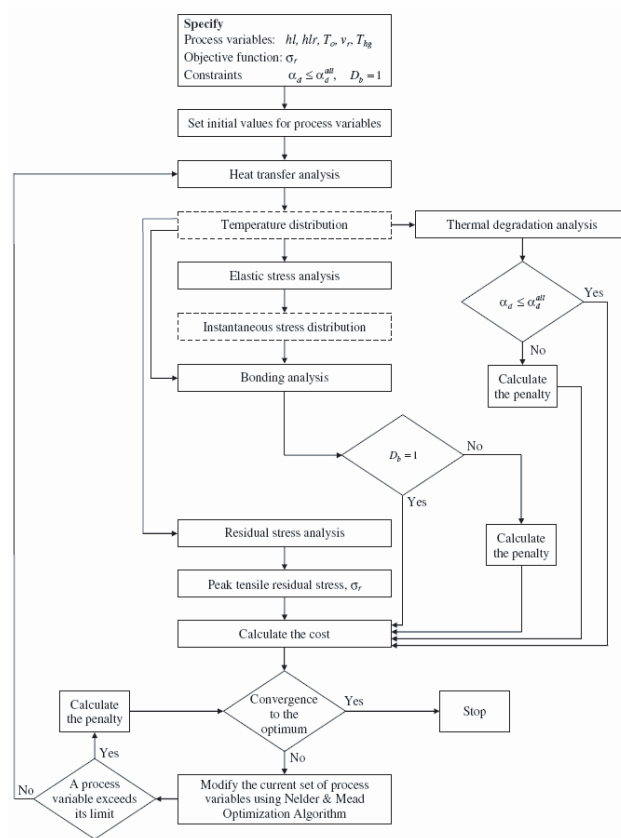


FIGURE 1.31 – Algorithme de la procédure de minimisation des contraintes résiduelles. [SA07].

1.5.8 Conclusions

Comme nous l'avons vu dans la section 1.5, les contraintes résiduelles dans le procédé ATP peuvent être modélisées aux échelles macroscopiques et microscopiques. L'échelle macroscopique influence la formation des contraintes résiduelles à l'échelle microscopique par les déplacements induits dans la pièce à l'échelle macroscopique. Les études réalisées précédemment sur la modélisation des contraintes résiduelles dans ce type de procédé (1.5.7) reposent sur des modélisations à l'échelle macroscopique, sans prendre en compte l'interaction entre les deux échelles sur la formation des contraintes.

Nous en arrivons à l'objectif de l'étude : proposer une méthode de modélisation qui permette une description simultanée aux échelles macroscopiques et microscopiques de la formation des contraintes résiduelles au cours du procédé.

Dans la méthode que nous proposons et présentée dans le chapitre 3, les deux échelles microscopiques et macroscopiques interagissent :

- échelle microscopique : l'homogénéisation des propriétés thermomécaniques du matériau à l'échelle microscopique et leur insertion à l'échelle macroscopique permet de disposer de propriétés actualisées tout au long du calcul ;
- échelle macroscopique : les champs thermiques et de déplacement macroscopiques sont utilisés à l'échelle microscopique pour le calcul des contraintes résiduelles à l'échelle microscopique.

Enfin, nous proposons également une méthode issue des travaux de Ryckelynck [Ryc05] pour accélérer les temps de calcul.

Ces développements nécessitent d'utiliser des outils numériques adaptés. Nous présentons à cet effet dans le chapitre 2 les outils numériques utilisés.

Chapitre 2

METHODES NUMERIQUES

Sommaire

2.1	Méthode des éléments naturels contraints (CNEM)	56
2.1.1	Généralités sur les méthodes sans maillage, historique	56
2.1.2	Méthode des éléments naturels contraints CNEM	58
2.2	La décomposition orthogonale propre	63
2.2.1	Principe de la méthode	63
2.2.2	Une modélisation réduite à posteriori	64
2.2.3	Enrichissement de la base d'approximation	65
2.3	Les Approches en calcul multi-échelles	66
2.3.1	Approches analytiques basées sur la théorie de l'homogénéisation	66
2.3.2	Approches numériques basées sur la théorie de l'homogénéisation	71
2.3.3	Autres approches	77
2.3.4	Conclusion	80

L'objectif de notre étude est de proposer une méthode de modélisation qui permette une description simultanée aux échelles macroscopiques et microscopiques de la formation des contraintes résiduelles au cours du procédé ATP et un couplage entre les deux échelles. Comme nous l'avons vu dans la section 1.5.7, les études réalisées précédemment sur la modélisation des contraintes résiduelles dans ce type de procédé reposent sur des modélisations à l'échelle macroscopique, sans prendre en compte l'interaction entre les deux échelles dans la formation des contraintes résiduelles. Il est donc nécessaire d'utiliser de nouvelles méthodes numériques, permettant de réaliser une modélisation multi-échelle couplée du problème de l'apparition des contraintes résiduelles au cours du procédé. Nous présentons dans ce chapitre les méthodes numériques utilisées pour le développement de notre méthode de modélisation des contraintes résiduelles au cours du procédé ATP ainsi qu'un état de l'art succinct des approches en calcul multi-échelle.

Dans une première partie, nous présentons la méthode des éléments naturels contraints (CNEM), qui est utilisée pour la description à l'échelle microscopique. Dans une seconde partie, nous présentons la méthode de la décomposition orthogonale propre, qui est utilisée pour exploiter les informations thermomécaniques issues de l'échelle microscopique. Nous présentons également une méthode permettant de réduire les temps de calcul, issue des travaux de [Ryc05]. Enfin, dans une troisième partie, nous présentons les différentes approches en calcul multi-échelle.

2.1 Méthode des éléments naturels contraints (CNEM)

2.1.1 Généralités sur les méthodes sans maillage, historique

La question du choix et de l'évaluation des performances des différentes méthodes sans maillage a été abordée au cours de la thèse de J. Yvonnet [Yvo04]. On peut aussi y trouver un état de l'art complet sur ces méthodes. On se reposera donc sur les développements et conclusions issues de ce travail pour ce qui est du choix et de la mise en oeuvre de la méthode sans maillage à employer.

Historique

L'origine des méthodes sans maillage remonte à la fin des années 70, cependant elles sont restées peu utilisées jusqu'au début des années 90. On trouve une revue intéressante de ces méthodes dans [FM03]. Les méthodes sans maillage furent initiées avec la méthode « Smooth Particle Hydrodynamics » (SPH) [Luc77], qui fut créée à l'origine pour la simulation des phénomènes astrophysiques. La généralisation de l'approximation SPH qui consiste à introduire une fonction de correction dans la fonction noyau [LJZ95] pour obtenir la consistance d'ordre supérieure a donné naissance à la technique « Reproducing Kernel ParticleMethod » (RKPM) Une 2eme grande famille de méthodes sans maillage est basée sur la technique des « Moindres Carrés Mobiles » (MLS). plusieurs méthodes se sont inspirées de cette approche dont on peut citer la « méthode des éléments diffus » (DEM) [NTV92]. La méthode « Element Free Galerkin » [BLG94] est aussi basée sur le MLS, elle est plus performante et plus précise que la méthode DEM.

D'autres approches ont été proposées comme la méthode des différences finies généralisées , pouvant être appliquées pour des nuages de noeuds quelconques. Une méthode sans maillage basée sur des principes totalement différents a émergé récemment sous le nom de « méthode des éléments naturels - NEM » [SMB98, SBM95, CSC+03]. Cette technique utilise des fonctions de forme très particulières, basées sur les constructions géométriques du diagramme de Voronoi et de son dual, la triangulation de Delaunay. Cette technique offre presque tous les avantages des méthodes sans maillage, tout en éliminant un grand nombre d'inconvénients. De plus, les fonctions de forme, bien que construites uniquement à partir des noeuds, deviennent linéaires sur les bords du domaine, ce qui permet de les substituer directement aux fonctions de forme éléments finis linéaires dans un code de calcul conçu au départ sur la base d'une interpolation éléments finis.

Avantages

Contrairement à l'approche éléments finis dans laquelle l'approximation est liée aux éléments, dans les méthodes sans maillage l'approximation est construite exclusivement à l'aide des données nodales. Ces caractéristiques offrent de nombreux avantages :

- La possibilité de traiter plus facilement les problèmes en grandes transformations que dans la méthode des éléments finis, et pour les mêmes raisons la possibilité de traiter des problèmes avec une haute hétérogénéité de densité nodale (le cas qui se pose dans le présent travail). Les performances des méthodes meshless (plus particulièrement la NEM) sont expliquées par les facteurs suivants :

- Une connectivité variable. Les voisins naturels (NEM) ont un support de fonctions de forme plus large que les seuls noeuds de l'élément dans la méthode des éléments finis. Ainsi, la matrice jacobienne associée ne deviendra singulière que pour des distorsions beaucoup plus importantes du voisinage [LHL00]
- La qualité de la solution est moins sensible à la position relative des noeuds (comme cela va être montré dans la suite), autorisant la construction de la solution à partir de positions relatives entre les noeuds déconseillées dans la méthode des éléments finis
- La possibilité d'insérer, ou de retirer des noeuds assez facilement en général. Ce point est particulièrement attrayant pour définir des stratégies de raffinement, pour les problèmes présentant de la localisation.
Remarque : Si un support de fonction de forme moins large est utilisé (pour des raisons de coût et de qualité), les problèmes rencontrés avec la méthode des éléments finis réapparaissent. Même si les difficultés sont moindres, elles subsistent donc dans le cas général.

Inconvénients

En contrepartie, un certain nombre de difficultés apparaissent dans les méthodes sans maillage :

- Le principal défaut de la plupart des méthodes sans maillage "classiques" (SPH, RKPM, DEM, EFG) est la difficulté liée à l'imposition des conditions aux limites. En effet, pour pouvoir imposer les conditions aux limites de type Dirichelt de manière directe comme dans la méthode des éléments finis, il est nécessaire :
 - que l'approximation construite passe par les valeurs nodales (interpolation stricte) ;
 - que l'influence des noeuds intérieurs s'annule sur le bord du domaine.

Or la fonction d'approximation construite par les méthodes sans maillage les plus répandues ne vérifient aucune de ces deux conditions. Différentes techniques pour imposer les conditions aux limites dans les méthodes sans maillage les plus utilisées ont depuis été proposées. Ces techniques entraînent des coûts supplémentaires.

- Le second inconvénient est lié à l'intégration numérique. Dans la majorité des cas, les fonctions de forme meshless ne sont pas polynomiales mais rationnelles, ce qui rend les schémas d'intégration de type Gauss non optimaux. Toutefois des solutions ont été proposées pour remédier à ces difficultés [DB99, CWY01, CYW02].
- Un autre inconvénient des techniques « meshless » est lié au support des fonctions de forme. Dans la plupart de ces approches, le support, ou domaine d'influence d'un noeud est défini par une sphère ou un parallélépipède centré sur le noeud. Un support suffisamment large est nécessaire pour que la méthode soit stable, mais un support trop large entraîne des coûts de calcul plus importants et une qualité fortement dégradée à cause du lissage qu'il entraîne. A noter toutefois que « la méthode des éléments naturels » avec son support basé sur le diagramme de Voronoï ne souffre pas de ce problème.

- Des difficultés apparaissent pour des géométries non convexes (la présence d'un bord concave, d'une cavité ou d'une fissure). Le problème essentiel est lié à la définition du support des fonctions de forme, cela vient des influences entre noeuds de part et d'autre du bord non convexe. La technique dite du critère de visibilité introduite dans [KB96], permet de supprimer ces influences. Cependant, dans certains cas, cela introduit des discontinuités parasites. De plus les techniques décrites ne peuvent être étendues facilement au cas 3D.

2.1.2 Méthode des éléments naturels contraints CNEM

Les différents inconvénients précités ont largement contribué à un déclin de l'utilisation des méthodes « meshless » de type moindre carrés mobiles depuis quelques années.

L'utilisation de la méthode des éléments naturels et de ses extensions permet grâce à ses fonctions de forme particulière de contourner la plupart des difficultés bien connues dans la majorité des méthode sans maillage, telles que l'imposition des conditions aux limites de type Dirichlet ou le réglage de la taille du support définissant le schéma local d'interpolation. De plus la méthode NEM partage beaucoup de caractéristiques avec la méthode des éléments finis notamment sur le bord du domaine, en conservant en partie les avantages des méthodes sans maillage.

L'interpolation basée sur les éléments naturels contraints

L'interpolation NEM est construite sur la base du diagramme de Voronoï associé au nuage de noeuds considéré (le diagramme de Voronoï étant le dual de la triangulation de Delaunay). Pour un approfondissement sur l'interpolation NEM Sibsonienne et ses applications dans la résolution des équations différentielles de second ordre on peut se référer à Braun et Sambridge et Sukumar et al.. Pour faire simple on se restreindra au cas 2D. Le développement du cas

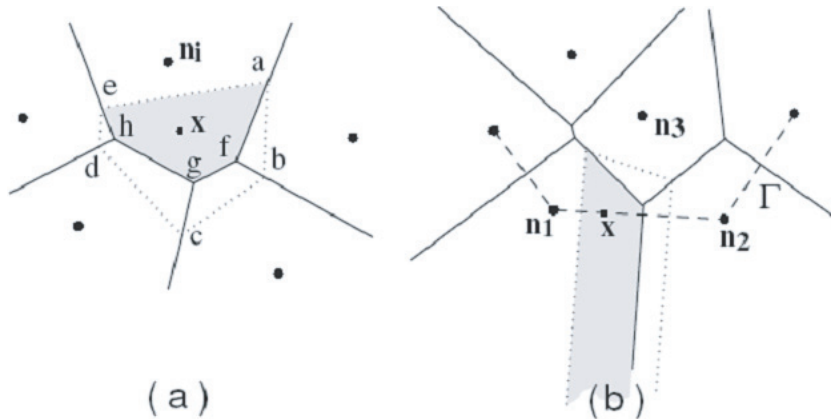


FIGURE 2.1 – (a) Construction des fonctions de formes Sibsoniennes. (b) Linéarité sur les bords convexes

3D, qui est une extension directe du cas 2D, a fait l'objet de développements récents [III08]. Soit $S = \{n_1, n_2, \dots, n_N\}$ un nuage de noeuds dans $\hat{A}2$ de coordonnées $\{x_1, x_2, \dots, x_N\}$. le diagramme de Voronoï est la subdivision de $\hat{A}2$ en régions T_i (cellules de Voronoï) tel que :

$$T_i = \{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^2 : d(\mathbf{x}, n_i) < d(\mathbf{x}, n_j) \}, \quad \forall i, \forall j \neq i \quad (2.1)$$

où $d(.,.)$ est la distance euclidienne.

A un point \mathbf{x} , on associe à chaque noeud n_i la fonction de forme $\phi(\mathbf{x})$ définie comme un rapport d'aires (ou de volumes en 3D) entre la cellule résultante de l'introduction du point x dans le diagramme de Voronoï originel et celle résultant de son intersection avec la cellule centrée sur le noeud n_i .(cf. 2.1)

$$\phi_i(\mathbf{x}) = \frac{\text{Aire}(afghe)}{\text{Aire}(abcde)} \quad (2.2)$$

On note bien que si le point x coïncide avec le noeud n_i , alors la fonction de forme $\phi(x_i) = 1$, et toutes les autres fonctions de formes s'annulent. On vérifie là une propriété essentielle, celle du delta de Kronecker. Les fonctions de forme CNEM vérifient d'autres propriétés intéressantes (positivité, consistance linéaire ainsi que la partition de l'unité) que le lecteur intéressé peut trouver en détails dans les travaux de Sukumar [54] :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \phi_i(\mathbf{x}_j) = \delta_{ij} & \text{Delta de Kronecker} \\ 0 \leq \phi(\mathbf{x}) \leq 1 & \text{Positivité} \\ \mathbf{x} = \sum_{i=1}^n \phi(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{x}_i & \text{Consistance linéaire} \\ \sum_{i=1}^n \phi(\mathbf{x}) = 1 & \text{Partition de l'unité} \end{array} \right. \quad (2.3)$$

où n est le nombre de noeuds voisins du point x . Les fonctions de forme éléments naturels sont C^∞ à n'importe quel point, excepté sur les bords des cercles de Delaunay (sphères en 3D) où elles sont C^1 (à cause du changement de voisins naturels), et aux noeuds où elles sont seulement C^0 . Une autre propriété importante de l'interpolation basée sur les éléments naturels est sa capacité à reproduire les fonctions linéaires sur les bords des domaines convexes que nous illustrons dans la figure (figure 2.1(b)). La démonstration a été apportée par Sukumar et al. [SMB98] : étant donné que les aires des cellules de Voronoï associées aux points sur la frontière deviennent infinies, la contribution des points internes disparaît à la limite quand le point approche la frontière convexe, et les fonctions de forme liées aux noeuds n_1 et n_2 deviennent linéaires sur le segment $(n_1 - n_2)$. Ce n'est pas le cas quand des frontières non convexes sont considérées.

Ainsi, l'interpolation d'une fonction vectorielle $\mathbf{u}(\mathbf{x}) : \Omega \subset \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$, s'écrit sous la forme :

$$U^h(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n \phi_i(\mathbf{x}) U_i \quad (2.4)$$

Où U_i représente les vecteurs des degrés de liberté aux n voisins naturels du point x , et $\phi_i(\mathbf{x})$ sont les fonctions de forme de Sibson définies dans (Eq. 2.2) associées à chaque noeud n_i . Revenons sur le cas des frontières non convexes : un développement récent dans la NEM, la méthode des éléments naturels contrainte (C-NEM), est proposé dans [YRLC04, YCLR05] afin d'éviter les problèmes induits par des domaines non convexes. Dans cette approche, un critère de visibilité est présenté pour limiter les voisins naturels (noeuds influents).

Pour cela le diagramme de Voronoï contraint est construit, à partir duquel les fonctions de forme peuvent être facilement calculées. De cette manière, l'interpolation linéaire est récupérée le long de la frontière des domaines non convexes, rendant possible l'introduction de conditions aux limites essentielles aussi bien que le traitement des discontinuités fixes ou mobiles.

Dans le cadre de C-NEM, l'interpolation peut être exprimée par :

$$U^h(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^V \phi_i^C(\mathbf{x}) U_i \quad (2.5)$$

Où V représente le nombre de voisins naturels visibles depuis le point x et ϕ_i^C les fonctions de forme éléments naturels contraintes, calculées de manière similaire aux fonctions NEM classiques (Sibson) mais à partir du diagramme de Voronoï contraint [YRLC04].

Formulation CNEM d'un problème classique en élasticité linéaire HPP

Nous considérons le problème d'élasticité linéaire en petites perturbations 2D, décrit par l'équation d'équilibre :

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{b} = \mathbf{0} \quad \text{dans } \Omega \quad (2.6)$$

où $\Omega \in \mathbb{R}^2$ est le domaine matériel, $\nabla \cdot$ est l'opérateur divergence, $\boldsymbol{\sigma}$ est le tenseur des contraintes de Cauchy et \mathbf{b} est un terme de force volumique.

La relation de comportement est donnée par :

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C} \boldsymbol{\epsilon} \quad (2.7)$$

où $\boldsymbol{\sigma}$ et $\boldsymbol{\epsilon}$ sont les formes vectorielles du tenseurs de contrainte et du tenseur des déformations linéarisé (partie symétrique), respectivement. avec \mathbf{C} le tenseur élastique sous sa forme matricielle.

Les conditions aux limites essentielles et naturelles sont données par :

$$\begin{aligned} \mathbf{U} &= \mathbf{U}_c \text{ sur } \partial_U \Omega \\ \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} &= \mathbf{F}_c \text{ sur } \partial_F \Omega \end{aligned} \quad (2.8)$$

ou $\partial \Omega = \partial_U \Omega \cup \partial_F \Omega$ est le bord du domaine Ω , \mathbf{n} est la normale unitaire sortante sur $\partial \Omega$, \mathbf{U}_c et \mathbf{F}_c sont les déplacements et efforts imposés, respectivement. La formulation variationnelle associée au problème élastostatique est donnée par :

Trouver $\mathbf{U} \in H^1(\Omega)$ cinématiquement admissible $\mathbf{U} = \mathbf{U}_c$ sur $\partial_U \Omega$ tel que :

$$\int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\epsilon}^* d\Omega = \int_{\Omega} \mathbf{f} \cdot \mathbf{U}^* d\Omega + \int_{\partial_F \Omega} \mathbf{F}_c \cdot \mathbf{U}^* d\Gamma, \quad \forall \mathbf{U}^* \in H_0^1(\Omega) \quad (2.9)$$

où $H^1(\Omega)$ et $H_0^1(\Omega)$ sont les espaces fonctionnels de Sobolev usuels.

En substituant les fonctions d'approximation et les fonctions test (toutes les deux approximées par le schéma C-NEM) dans l'équation précédente et en utilisant le fait que le champ \mathbf{U}^* est arbitraire, on obtient le système d'équations linéaires après intégration numérique :

$$\mathbf{K} \mathbf{q} = \mathbf{f}^{\text{ext}} \quad (2.10)$$

où \mathbf{q} est le vecteur des degrés de liberté, avec la matrice \mathbf{K} et le vecteur \mathbf{f}^{ext} donnés par :

$$\begin{aligned} \mathbf{K} &= \int_{\Omega} \mathbf{B}^t \mathbf{C} \mathbf{B} d\Omega \\ \mathbf{f}^{\text{ext}} &= \int_{\partial_F \Omega} \mathbf{N}^t \mathbf{F}_c d\Gamma + \int_{\Omega} \mathbf{N}^t \mathbf{f} d\Omega \end{aligned} \quad (2.11)$$

où \mathbf{N} et \mathbf{B} sont les matrices des fonctions de forme et leurs dérivées respectivement.

Intégration numérique et gradient stabilisé

Deux types d'intégration sont généralement utilisées pour la méthode CNEM :

1. l'intégration de Gauss sur les triangles de Delaunay ;
2. l'intégration nodale stabilisée conforme SCNI (Stabilized Conforming Nodal Integration).

L'intégration de Gauss réalisée sur les triangles de Delaunay introduit une erreur due aux points suivants :

- Supports des fonctions de forme meshless ne coïncident pas avec les triangles de Delaunay
- Caractère non polynomiale des fonctions de forme meshless, un grand nombre de points d'intégration est donc nécessaire pour minimiser l'erreur, rendant l'intégration numérique coûteuse.

Aussi, l'intégration nodale directe, utilisant les noeuds comme des points d'intégration, conduit à des instabilités numériques [CYW02].

Dans ce travail, nous utilisons la procédure d'intégration nodale stabilisée conforme (SCNI) [CWY01]. Cette approche fut appliquée pour la première fois dans la méthode [GCMD04], et a permis de mettre en évidence une amélioration significative de la qualité en comparaison avec l'intégration de Gauss. Cette technique d'intégration numérique peut être naturellement appliquée à la méthode C-NEM, car les domaines d'intégration coïncident exactement avec les cellules de Voronoï contraintes.

Cette approche consiste en une intégration nodale et une stabilisation basée sur la substitution du gradient par un gradient moyenné sur un domaine représentatif entourant le noeud, *la cellule de Voronoï* (Eq. 2.12) . Ceci permet d'éviter les oscillations parasites inhérentes à l'intégration nodale.

$$\tilde{\nabla} \mathbf{U}^h(\mathbf{x}_i) = \frac{1}{|\omega_i|} \int_{\omega_i} \nabla \mathbf{U}^h(\mathbf{x}) d\omega \quad (2.12)$$

Où \mathbf{x}_i sont les coordonnées du noeud n_i , ω_i est la cellule de Voronoï associée au noeud n_i . En utilisant le théorème de la divergence, 2.12 peut se simplifier en :

$$\tilde{\nabla} \mathbf{U}^h(\mathbf{x}_i) = \frac{1}{|\omega_i|} \int_{\Gamma\omega_i} \mathbf{U}^h h(\mathbf{x}) \vec{n} d\Gamma\omega \quad (2.13)$$

La formule 2.13 permet :

- de passer d'une intégrale volumique à une intégrale surfacique ;
- d'intégrer directement le champ plutôt que son gradient.

Le tenseur des déformations modifié est alors donnée par :

$$\tilde{\epsilon}^h(\mathbf{x}_i) = \frac{1}{|\omega_i|} \int_{\omega_i} \epsilon^h(\mathbf{x}) d\omega = \frac{1}{|\omega_i|} \int_{\omega_i} \left\{ \begin{array}{c} \frac{\partial u_1^h(\mathbf{x})}{\partial x} \\ \frac{\partial u_2^h(\mathbf{x})}{\partial y} \\ \frac{\partial u_1^h(\mathbf{x})}{\partial y} + \frac{\partial u_2^h(\mathbf{x})}{\partial x} \end{array} \right\} d\Omega \quad (2.14)$$

Où u_1 et u_2 sont les composantes du vecteur \mathbf{U} .

En appliquant le théorème de la divergence, on obtient la forme suivante :

$$\widetilde{\boldsymbol{\epsilon}}^h(\mathbf{x}_i) = \frac{1}{|\omega_i|} \int_{\partial\omega_i} \begin{Bmatrix} u_1^h(\mathbf{x}) n_1 \\ u_2^h(\mathbf{x}) n_2 \\ u_1^h(\mathbf{x}) n_2 + u_2^h(\mathbf{x}) n_1 \end{Bmatrix} d\Gamma \quad (2.15)$$

Où : $\partial\omega_i$ la frontière de la cellule de Voronoï. $|\omega_i|$ l'aire ou le volume en 3D.

En introduisant à présent l'approximation NEM on obtient :

$$\widetilde{\boldsymbol{\epsilon}}^h(\mathbf{x}_i) = \widetilde{\mathbf{B}}_i \mathbf{q} \quad (2.16)$$

Qui est donnée explicitement par :

$$\widetilde{\boldsymbol{\epsilon}}^h(\mathbf{x}_i) = \begin{Bmatrix} \frac{\partial \widetilde{\phi}_1(\mathbf{x}_i)}{\partial x} & 0 & \frac{\partial \widetilde{\phi}_2(\mathbf{x}_i)}{\partial x} & 0 & \dots & \frac{\partial \widetilde{\phi}_N(\mathbf{x}_i)}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial \widetilde{\phi}_1(\mathbf{x}_i)}{\partial y} & 0 & \frac{\partial \widetilde{\phi}_2(\mathbf{x}_i)}{\partial y} & \dots & 0 & \frac{\partial \widetilde{\phi}_N(\mathbf{x}_i)}{\partial y} \\ \frac{\partial \widetilde{\phi}_1(\mathbf{x}_i)}{\partial y} & \frac{\partial \widetilde{\phi}_1(\mathbf{x}_i)}{\partial x} & \frac{\partial \widetilde{\phi}_2(\mathbf{x}_i)}{\partial y} & \frac{\partial \widetilde{\phi}_2(\mathbf{x}_i)}{\partial x} & \dots & \frac{\partial \widetilde{\phi}_N(\mathbf{x}_i)}{\partial y} & \frac{\partial \widetilde{\phi}_N(\mathbf{x}_i)}{\partial x} \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} u_{11} \\ u_{12} \\ u_{21} \\ u_{22} \\ \vdots \\ u_{N1} \\ u_{N2} \end{Bmatrix} = \widetilde{\mathbf{B}}_i \mathbf{q} \quad (2.17)$$

Où les composantes de $\widetilde{\mathbf{B}}_i$ sont définies par :

$$\frac{\partial \widetilde{\phi}_j(\mathbf{x}_i)}{\partial x} = \frac{1}{|\omega_i|} \int_{\partial\omega_i} \phi_j(\mathbf{x}) n_1(\mathbf{x}) d\Gamma \quad (2.18)$$

$$\frac{\partial \widetilde{\phi}_j(\mathbf{x}_i)}{\partial y} = \frac{1}{|\omega_i|} \int_{\partial\omega_i} \phi_j(\mathbf{x}) n_2(\mathbf{x}) d\Gamma \quad (2.19)$$

Il est évident qu'un grand nombre de termes dans la matrice $\widetilde{\mathbf{B}}_i$ sont nuls du fait du support compact des fonctions de forme C-NEM. En introduisant l'approximation CNEM, la déformation stabilisée et l'intégration nodale, la matrice de rigidité globale est obtenue en assemblant la contribution de chacun des noeuds n_i :

$$\mathbf{K} = \sum_i \widetilde{\mathbf{K}}_i = \sum_i |\omega_i| \widetilde{\mathbf{B}}_i^t \mathbf{C} \widetilde{\mathbf{B}}_i \quad (2.20)$$

Ensuite, on associe à chaque cellule une contrainte donnée par :

$$\widetilde{\boldsymbol{\sigma}}_i^h = \mathbf{C} \widetilde{\mathbf{B}}_i \mathbf{q} \quad (2.21)$$

La contrainte ainsi trouvée est de la même forme que le gradient stabilisé et donc constante sur chaque cellule de Voronoï.

L'application du théorème de la divergence permet d'éviter le calcul des dérivées des fonctions de forme, seules les fonctions de forme sont requises.

De la même manière, le tenseur des gradients thermique modifié sur chaque cellule est donnée par la relation :

$$\widetilde{\nabla \mathbf{T}}^h(\mathbf{x}_i) = \widetilde{\mathbf{A}}_i \mathbf{T} \quad (2.22)$$

avec $\widetilde{\mathbf{A}}_i$ donné par l'expression :

$$\left\{ \begin{array}{cccc} \frac{\partial \widetilde{\phi}_1(\mathbf{x}_i)}{\partial x} & \frac{\partial \widetilde{\phi}_2(\mathbf{x}_i)}{\partial x} & \dots & \frac{\partial \widetilde{\phi}_N(\mathbf{x}_i)}{\partial x} \\ \frac{\partial \widetilde{\phi}_1(\mathbf{x}_i)}{\partial y} & \frac{\partial \widetilde{\phi}_2(\mathbf{x}_i)}{\partial y} & \dots & \frac{\partial \widetilde{\phi}_N(\mathbf{x}_i)}{\partial y} \end{array} \right\} \quad (2.23)$$

2.2 La décomposition orthogonale propre

La D.O.P. ou Décomposition Orthogonale aux valeurs Propres permet de construire des systèmes dynamiques représentatifs de phénomènes pour lesquels on dispose de réalisations instantanées. Cette méthode s'appuie sur une décomposition sur une base propre de modes définis à partir d'une sélection des valeurs propres de la matrice des corrélations temporelles d'un certain nombre de réalisations.

2.2.1 Principe de la méthode

On suppose l'évolution d'un champ de température $\mathbf{T}(\mathbf{x}, t)$ connue. Ce champ est défini aux noeuds \mathbf{x}_i d'un maillage spatial et aux temps $t^m = m \times \Delta t$, avec $i \in [1, \dots, N]$ et $m \in [0, \dots, M]$. On introduit la notation $\mathbf{T}(\mathbf{x}_i, t^m) = \mathbf{T}^m(\mathbf{x}_i) \equiv \mathbf{T}_i^m(t^m)$. \mathbf{T}^m définit le vecteur contenant les degrés de liberté aux noeuds (températures) au temps t^m . L'idée principale de la décomposition orthogonale propre est d'obtenir la structure la plus caractéristique ou la plus typique $\phi(\mathbf{x})$ parmi les $\mathbf{T}^m(\mathbf{x})$, $\forall m$. La maximisation de :

$$\alpha = \frac{\sum_{m=1}^{m=M} \left[\sum_{i=1}^{i=N} \phi(\mathbf{x}_i) \mathbf{T}^m(\mathbf{x}_i) \right]^2}{\sum_{i=1}^{i=N} (\phi(\mathbf{x}_i))^2} \quad (2.24)$$

conduit à :

$$\sum_{m=1}^{m=M} \left[\left(\sum_{i=1}^{i=N} \widetilde{\phi}(\mathbf{x}_i) \mathbf{T}^m(\mathbf{x}_i) \right) \left(\sum_{j=1}^{j=N} \phi(\mathbf{x}_j) \mathbf{T}^m(\mathbf{x}_j) \right) \right] = \alpha \sum_{i=1}^{i=N} \widetilde{\phi}(\mathbf{x}_i) \phi(\mathbf{x}_i); \forall \widetilde{\phi} \quad (2.25)$$

qui peut être réécrit sous la forme :

$$\sum_{i=1}^{i=N} \left\{ \sum_{j=1}^{j=N} \left[\sum_{m=1}^{m=M} \mathbf{T}^m(\mathbf{x}_i) \mathbf{T}^m(\mathbf{x}_j) \phi(\mathbf{x}_j) \right] \widetilde{\phi}(\mathbf{x}_i) \right\} = \alpha \sum_{i=1}^{i=N} \widetilde{\phi}(\mathbf{x}_i) \phi(\mathbf{x}_i); \forall \widetilde{\phi} \quad (2.26)$$

En définissant le vecteur ϕ tel que sa $i^{\text{ème}}$ composante est $\phi(\mathbf{x}_i)$, l'équation (2.26) résulte en le problème aux valeurs propres (2.27), dont les vecteurs propres relatifs aux plus grandes valeurs propres définissent la structure caractéristique de $\mathbf{T}^m(\mathbf{x})$,

$$\widetilde{\phi}^T \mathbf{Cov} \phi = \alpha \widetilde{\phi}^T \phi; \forall \widetilde{\phi} \Rightarrow \mathbf{Cov} \phi = \alpha \phi \quad (2.27)$$

où la matrice de corrélation est définie par :

$$\mathbf{Cov}_{ij} = \sum_{m=1}^{m=M} \mathbf{T}^m(\mathbf{x}_i) \mathbf{T}^m(\mathbf{x}_j) \Leftrightarrow \mathbf{Cov} = \sum_{m=1}^{m=M} \mathbf{T}^m (\mathbf{T}^m)^T \quad (2.28)$$

qui est symétrique et définie positive. Si on définit la matrice \mathbf{Q} contenant l'histoire du champ discrétisé :

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} T_1^1 & T_1^2 & \dots & T_1^M \\ T_2^1 & T_2^2 & \dots & T_2^M \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ T_N^1 & T_N^2 & \dots & T_N^M \end{pmatrix} \quad (2.29)$$

Alors il est aisé de vérifier que la matrice \mathbf{Cov} de l'équation (2.27) peut s'exprimer sous la forme :

$$\mathbf{Cov} = \mathbf{Q}\mathbf{Q}^T \quad (2.30)$$

2.2.2 Une modélisation réduite à posteriori

On résout le problème aux valeurs propres définie par l'équation (2.27) en sélectionnant les fonctions de forme ϕ_k associées aux valeurs propres appartenant à l'intervalle défini par la plus grande valeur propre et cette valeur divisée par une valeur suffisamment grande (par exemple 10^8). En pratique n est beaucoup plus petit que N . Ainsi, on peut essayer d'utiliser ces n fonctions de forme ϕ_k pour approximer la solution $\mathbf{T}^m(\mathbf{x})$, $\forall m$. Pour ceci on a besoin de définir la matrice $\mathbf{B} = [\phi_1 \dots \phi_n]$:

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} \phi_1(\mathbf{x}_1) & \phi_2(\mathbf{x}_1) & \dots & \phi_n(\mathbf{x}_1) \\ \phi_1(\mathbf{x}_2) & \phi_2(\mathbf{x}_2) & \dots & \phi_n(\mathbf{x}_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_1(\mathbf{x}_N) & \phi_2(\mathbf{x}_N) & \dots & \phi_n(\mathbf{x}_N) \end{pmatrix} \quad (2.31)$$

Maintenant si on considère le système linéaire d'équations résultant de la discrétisation semi-implicite d'un modèle thermique :

$$\mathbf{G}^m \mathbf{T}^{m+1} = \mathbf{H}^m \quad (2.32)$$

En exprimant :

$$\mathbf{T}^{m+1} = \sum_{i=1}^{i=n} \zeta_i^{m+1} \phi_i = \mathbf{B}\boldsymbol{\zeta}^{m+1} \quad (2.33)$$

l'équation (2.32) devient :

$$\mathbf{G}^m \mathbf{T}^{m+1} = \mathbf{H}^m \Rightarrow \mathbf{G}^m \mathbf{B}\boldsymbol{\zeta}^{m+1} = \mathbf{H}^m \quad (2.34)$$

Et en multipliant les deux termes par \mathbf{B}^T on obtient :

$$\mathbf{B}^T \mathbf{G}^m \mathbf{B}\boldsymbol{\zeta}^{m+1} = \mathbf{B}^T \mathbf{H}^m \quad (2.35)$$

Où la taille de $\mathbf{B}^T \mathbf{G}^m \mathbf{B}$ est égale à $n \times n$, au lieu de $N \times N$. Lorsque $n \ll N$, comme lorsque c'est le cas dans les modèles physiques numériques, la solution de l'équation (2.35) est préférée du fait de sa taille réduite.

Remarque 1 : l'équation (2.35) peut également être obtenue en introduisant l'approximation (3.85) dans la formulation variationnelle de Galerkin relative à l'équation différentielle partielle.

Remarque 2 : une technique alternative pour réduire la taille du problème aux valeurs propres consiste en l'application de la décomposition orthogonale propre par la méthode des « clichés » (« the snapshot proper orthogonal decomposition »). Cette technique est basée sur la recherche des modes significatifs par l'application de la DOP, mais en supposant que ces modes peuvent être écrits comme une combinaison linéaire de M clichés qui ont été utilisés pour définir la décomposition. Le principal avantage de cette stratégie est que ces modes résultent du problème aux valeurs propres définis par :

$$(\mathbf{Q}^T \mathbf{Q}) \boldsymbol{\gamma} = \lambda \boldsymbol{\gamma} \quad (2.36)$$

dont la taille est $M \times M$ au lieu de $N \times N$. Seuls les vecteurs propres relatifs aux plus grandes valeurs propres sont retenus. De ces vecteurs propres les fonctions d'approximation réduites sont calculées en utilisant le fait que ces fonctions sont une combinaison linéaire des clichés, i.e. :

$$\boldsymbol{\phi}_i = \mathbf{Q} \boldsymbol{\gamma}_i \quad (2.37)$$

Remarque 3 : dans l'analyse précédente la base réduite a été construite à partir de l'évolution du champ inconnu calculé qui a été obtenue en résolvant le problème d'évolution discret. Ainsi, on peut se demander de l'intérêt d'une telle approche. Il existe deux types d'approches considérées. La première approche consiste à résoudre le modèle non-réduit dans un intervalle de temps court, permettant l'extraction des fonctions caractéristiques et ainsi la définition de la base d'approximation réduite qui est alors utilisée pour calculer la solution du modèle d'évolution réduit (2.35) dans des intervalles de temps plus grands avec les temps de calcul associés. L'autre approche consiste à résoudre le modèle non-réduit dans tout l'intervalle de temps, dont la solution permet de définir la base d'approximation réduite qui peut alors être utilisée pour résoudre des modèles « similaires », comme ceux impliquant par exemple des variations faibles des paramètres du matériau ou des conditions aux limites. Des avancées récentes dans de telles approches sont présentées dans [PC96, MR04, RHCA05, BKF05, BGL06, GPS07].

2.2.3 Enrichissement de la base d'approximation

De manière évidente, la réalisation de simulations exactes requière une évaluation de l'erreur ainsi que la possibilité d'adapter la base réduite en introduisant de nouvelles fonctions capables de décrire l'exactitude de la solution. Ryckelynck a proposé dans [Ryc05] une procédure adaptative, capable de construire ou d'enrichir la base d'approximation réduite. Dans ce but, il proposa d'enrichir la base d'approximation réduite en ajoutant des sous-espaces de Krylov générés par le résidu de l'équation. Cet enrichissement tend à augmenter le nombre de fonctions d'approximation, mais lorsque il est combiné avec la décomposition DOP qui réduit le nombre de fonctions d'approximation de manière continue, la taille des problèmes est stabilisé rapidement. Cette stratégie, qui a été utilisée avec succès dans [ARCK06] et dans [RCCA06], est résumée dans la section suivante.

On suppose la solution décrite exactement dans l'intervalle de temps $] 0, t_s]$ en utilisant la base réduite \mathbf{B} . Maintenant, on calcule l'évolution de la solution dans l'intervalle de temps $] t_s, t_{s+1}]$ en résolvant l'équation (2.35) et en utilisant la base d'approximation réduite définie par la matrice \mathbf{B} :

$$\boldsymbol{\zeta}^{m+1} = (\mathbf{B}^T \mathbf{G}^m \mathbf{B})^{-1} \mathbf{B}^T \mathbf{H}^m \quad (2.38)$$

Lorsque le temps t_{s+1} est atteint, une étape de contrôle est effectuée dans le but d'évaluer l'exactitude de la solution calculée à l'aide de la base réduite. L'étape de contrôle est effectuée

seulement à la fin de chaque intervalle de temps.

On suppose que $t_{s+1} - t_s = M \times \Delta t$ et par conséquent le résidu à t_{s+1} , \mathbf{R}^M , peut être calculé par :

$$\mathbf{R}^M = \mathbf{G}^{M-1} \mathbf{B} \zeta^m - \mathbf{H}^{M-1} \quad (2.39)$$

Si la norme du résidu est suffisamment faible $\|\mathbf{R}^M\| < \epsilon \|\mathbf{B} \zeta^m\|$ (ϵ étant un paramètre suffisamment petit) la solution calculée peut être considérée bonne, et on poursuit l'intégration en temps dans l'intervalle $] t_{s+1}, t_{s+2}]$ en utilisant l'équation (2.38) sans modifier la base d'approximation réduite.

Au contraire, si $\|\mathbf{R}^M\| \geq \epsilon \|\mathbf{B} \zeta^m\|$, alors l'approximation doit être améliorée. Dans ce but, on propose d'enrichir la base d'approximation réduite en introduisant le résidu qui vient d'être calculé (ou bien des sous-espaces de Krylov générés par le résidu, comme proposé dans [Ryc05]) :

$$\mathbf{B} \leftarrow [\mathbf{B} \mathbf{R}^M] \quad (2.40)$$

et ainsi, l'évolution est recalculée dans l'intervalle de temps $] t_s, t_{s+1}]$ en utilisant l'équation (2.38) avec la base réduite \mathbf{B} mise à jour. Lorsque le critère de convergence est satisfait (i.e. $\|\mathbf{R}^M\| < \epsilon \|\mathbf{B} \zeta^m\|$) on applique la DOP sur toute l'histoire passée $] 0, t_{s+1}]$ pour définir la base réduite capable de représenter l'ensemble de l'évolution passée du champ inconnu, qui résulte d'une base réduite \mathbf{B} actualisée qui peut être considérée comme la base réduite optimale pour décrire l'évolution du champ inconnu dans l'intervalle de temps $] 0, t_{s+1}]$. En utilisant la base réduite \mathbf{B} actualisée, l'évolution en temps donnée par l'équation (2.38) est calculée dans $] t_{s+1}, t_{s+2}]$ et l'exactitude de la solution est vérifiée à $t = t_{s+2}$.

Si un enrichissement de la base a été nécessaire à la fin de l'intervalle de temps précédent, à $t = t_{s+1}$, alors la longueur de l'intervalle de temps actuel est réduit en effectuant $t_{s+2} - t_{s+1} = (t_{s+1} - t_s) / 2$, et si aucun enrichissement n'a été nécessaire, alors la longueur de l'intervalle de temps est augmentée selon $t_{s+2} - t_{s+1} = 2(t_{s+1} - t_s)$ (se reporter à [ARCK06] pour des détails supplémentaires sur l'adaptation de la longueur de l'intervalle de temps).

L'enrichissement de la base réduite tend à augmenter la taille de la base réduite, mais en contrepartie la DOP réduit sa taille. La combinaison des deux procédures permet de stabiliser la taille du modèle comme il a été montré dans [ARCK06].

2.3 Les Approches en calcul multi-échelles

Un des principaux objectifs dans l'étude d'un matériau non homogène est la déduction du comportement global « effectif » ou « apparent » du matériau à partir du comportement des constituants, du comportement des interfaces entre eux, et de l'arrangement géométrique des phases. C'est ce qu'on appelle *l'homogénéisation*.

Il existe plusieurs approches de l'homogénéisation. Nous nous attacherons à présenter, de manière non exhaustive, les méthodes les plus classiques ainsi que certains développements récents en la matière.

2.3.1 Approches analytiques basées sur la théorie de l'homogénéisation

Les approches analytiques sont historiquement les plus anciennes. Les formulations utilisées dans ces approches considèrent un comportement élastique linéaire. L'extension des formulations

au domaine non linéaire n'est pas triviale et reste un domaine ouvert à la recherche.

Les approches analytiques de la théorie de l'homogénéisation se divisent en deux grandes familles :

- la théorie du champ moyen ;
- l'approche asymptotique.

Théorie du champ moyen

La théorie du champ moyen s'applique aux milieux hétérogènes aléatoires. Une présentation de la théorie et un état de l'art récent se trouve dans [BBG01]. Cette approche s'appuie sur 3 étapes majeures :

- Représentation
- Localisation
- Homogénéisation

Etape de représentation :

Il faut, pour travailler sur des milieux hétérogènes, en définir une représentation d'une certaine forme de base. On définit pour cela un volume d'homogénéisation, le VER ou Volume Élémentaire Représentatif. Dans le cas idéal, le VER devrait être choisi pour être un volume élémentaire approprié. C'est un volume secondaire statistiquement représentatif de la géométrie microscopique du matériau. Le choix du VER est conditionné par 3 paramètres :

- d : la taille caractéristique des hétérogénéités et des propriétés sujettes à l'analyse. Il est nécessaire de ne pas descendre inutilement à des niveaux plus fins que nécessaire et de toujours conserver la validité des outils de la mécanique des milieux continus si possible (dans certains problèmes il est nécessaire d'aller vers l'échelle nanoscopique et d'utiliser les lois correspondantes : dynamique moléculaire ...).
- L : la taille de la structure à analyser.
- l : la taille du VER proprement dite. Le rapport entre la taille du VER et la taille caractéristique des hétérogénéités et des propriétés sujettes à l'analyse, l/d , doit être suffisamment grand pour permettre un échantillonnage significatif des champs microscopiques. Aussi un rapport l/d insuffisant entraîne une forte fluctuation du comportement global d'une particule macroscopique à l'autre, dû à sa dépendance vis a vis de ses constituants. Ce phénomène s'atténue lorsque l/d augmente. Le rapport L/l doit être suffisamment grand pour que l'influence des gradients macroscopiques soit négligeable. Il est aussi nécessaire pour que l'on puisse traiter la structure comme un milieu continu et y déterminer des champs continus (ou continus par morceaux).

Cette condition est symboliquement dénotée :

$$d \ll l \ll L$$

A titre d'exemple, dans le cas d'un alliage poly-cristallin : la taille des grains d est de l'ordre de la dizaine de micromètres. Le VER serait alors de taille l de l'ordre de la fraction du millimètre pour une structure de taille L de l'ordre au moins du centimètre.

Etape de localisation :

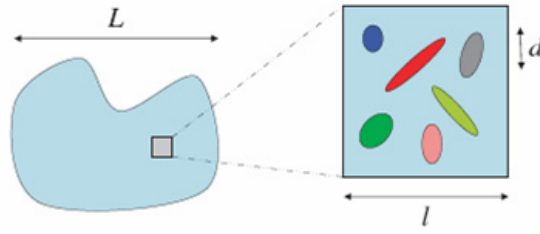


FIGURE 2.2 – Milieu hétérogène et son VER, les différentes échelles

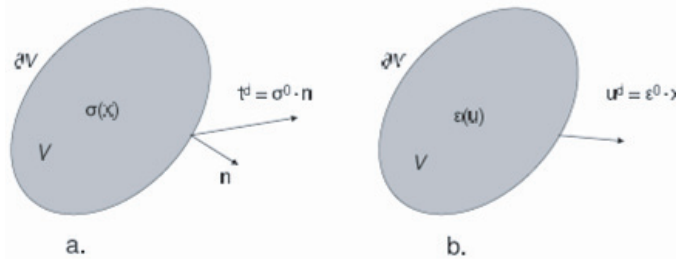


FIGURE 2.3 – Conditions de contraintes homogènes au contour

Le fait que le VER soit une image statistique et incomplète de la microstructure considérée nous interdit d'affecter à coup sûr des caractéristiques mécaniques précises à tout point du VER. De ce fait la détermination des champs locaux n'a pas de solution unique. De plus le problème est mal posé dans le sens où on doit résoudre un problème de structure sans véritables conditions aux limites. On a ainsi à la place des conditions de moyenne sur les variables locales. Cependant, en pratique on préfère substituer un problème plus classique en imposant des conditions homogènes sur le contour ∂V qui respectent la condition de moyenne ($\bar{\epsilon} = \epsilon^0$, $\bar{\sigma} = \sigma^0$) :

$$\begin{aligned}
 t^d(x) &= \sigma^0 \cdot n(x) & \forall x \in \partial V, & \text{conditions de contraintes homogènes au contour} \\
 u^d(x) &= \epsilon^0 \cdot x & \forall x \in \partial V, & \text{conditions de déformations homogènes au contour} \\
 u(x) &= \epsilon^0 \cdot x + u'(x) & \forall x \in \partial V, & \text{conditions de périodicité}
 \end{aligned}
 \tag{2.41}$$

σ^0 et ϵ^0 étant les valeurs macroscopiques de la contrainte et de la déformation au point matériel que représente le VER.

Il faut noter toutefois que ces conditions ne sont pas équivalentes et peuvent conduire à des comportements homogénéisés très différents si la condition $d \ll l$ n'est pas respectée.

Ainsi et partant de la connaissance de la morphologie des phases, on peut formuler une loi de localisation des contraintes et des déformations qui prendra la forme :

$$\begin{aligned}
 \epsilon(x) &= f_x(\bar{\epsilon}, Y_x) \\
 \sigma(x) &= g_x(\bar{\sigma}, Y_x)
 \end{aligned}
 \tag{2.42}$$

Où $(\epsilon(x), \sigma(x))$ et $(\bar{\epsilon}, \bar{\sigma})$, sont respectivement les champs de déformation et de contrainte microscopiques et macroscopiques, Y_x représente l'ensemble des paramètres attachés à la description géométrique et mécanique retenu du VER.

Dans les cas simples on pourra écrire ces fonctionnelles sous la forme :

$$\begin{aligned}
 \epsilon(x) &= A(x) \bar{\epsilon} \\
 \sigma(x) &= B(x) \bar{\sigma}
 \end{aligned}
 \tag{2.43}$$

Où $A(x)$ et $B(x)$ sont les tenseurs de concentration de déformation et de contrainte (ou tenseurs de localisation), respectivement.

Etape d'homogénéisation :

Cette étape a pour objectif de déterminer l'expression du comportement du milieu homogène équivalent. Pour ce fait on exprime, grâce à la loi de comportement locale et aux conditions aux limites homogènes sur le contour, les champs localisés fonction de la variable microscopique x . Puis on effectue une opération de moyenne sur la variable microscopique, couramment définie comme :

$$\begin{aligned} \langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle &= \frac{1}{V_{VER}} \int_{VER} \boldsymbol{\epsilon}(x) dV \\ \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle &= \frac{1}{V_{VER}} \int_{VER} \boldsymbol{\sigma}(x) dV \end{aligned} \quad (2.44)$$

On détermine ainsi les champs macroscopiques associés et on peut à partir de là définir le module effectif qui servira au calcul macroscopique.

Remarques : La résolution du problème microscopique est très complexe, et souvent impossible analytiquement, des approximations sont faites pour simplifier le problème.

En posant que la déformation microscopique est homogène partout et non seulement sur le bord ∂V du VER on obtient alors l'estimation de Voigt :

$$C_{Voigt} = \frac{1}{V_{VER}} \int_{VER} \mathbf{C}(x) dV \quad (2.45)$$

En posant que la contrainte microscopique est homogène partout et non seulement sur le bord ∂V du VER on obtient alors l'estimation de Reuss :

$$C_{Reuss}^{-1} = \frac{1}{V_{VER}} \int_{VER} \mathbf{C}^{-1}(x) dV \quad (2.46)$$

Ceci nous donne deux bornes grossières (dites du premier ordre) encadrant le comportement effectif :

$$C_{Reuss} \leq C_{eff} \leq C_{Voigt}$$

D'autres auteurs ont par la suite introduit des estimations plus sophistiquées et plus précises : estimation de Hashin-Shtrikman, estimation de Mori-Tanaka et modèle autocohérent.

Par soucis de concision et vue l'abondante littérature existante, on ne détaillera pas les approches classiques pour définir le module effectif d'un matériau hétérogène.

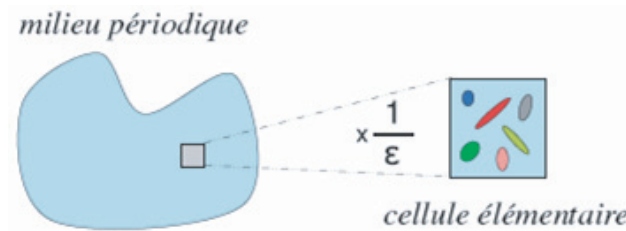


FIGURE 2.4 – Milieu périodique, définition d'une cellule élémentaire.

Approche asymptotique

Le principe de l'approche asymptotique consiste essentiellement en l'étude de l'influence de petits paramètres sur la solution du problème global. Dans ce type d'approche on réalise les hypothèses suivantes :

- le milieu est parfaitement périodique
- les échelles sont infiniment séparées

Ceci se traduit en pratique par des coefficients caractéristiques du matériau $C^\epsilon(x)$ (conduction thermique, tenseur d'élasticité, ...) *périodiques de période ϵP* avec un $\epsilon \rightarrow 0$. Le facteur ϵ représentant le rapport entre la dimension du VER et la dimension de l'échelle macroscopique. On définit alors un espace auxiliaire de variables y reliées à x , la variable d'espace, par la relation d'échelle $y = x/\epsilon$. Le champ solution de notre problème (déplacement, température, ...) s'écrit alors sous la forme d'un développement asymptotique de la forme :

$$\begin{aligned} u^\epsilon(x) &= u^0(x) + \epsilon u^1(x, y) + \epsilon^2 u^2(x, y) + \dots \\ y &= x/\epsilon \end{aligned} \tag{2.47}$$

Où les termes $u^i(x, y)$ sont P périodiques en y . Comme dans la pratique seuls les deux premiers termes sont pris en considération, le champ $u^\epsilon(x)$ se compose d'une fonction régulière de x plus un terme plus petit (d'un facteur ϵ) d'une fonction fortement oscillante (figure 2.5).

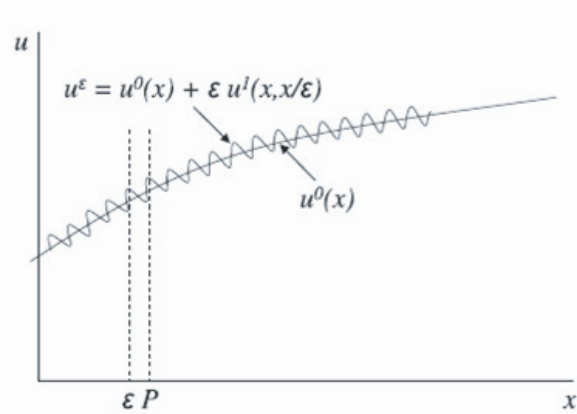


FIGURE 2.5 – Développement asymptotique du champ solution

On redéfinit aussi l'opérateur gradient qui s'écrit sous la forme :

$$\nabla = \nabla_x + \frac{1}{\epsilon} \nabla_y \tag{2.48}$$

Sous ces hypothèses, un problème mécanique d'élasticité linéaire en petites déformations s'écrit sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot \sigma(u^\epsilon(x)) &= f(x) && \text{dans } \Omega \\ \sigma(u^\epsilon(x)) &= C(x/\epsilon) E(u^\epsilon(x)) && \text{dans } \Omega \\ u^\epsilon(x) &= \varphi(x) && \text{sur } \partial\Omega \end{aligned} \tag{2.49}$$

avec, comme pour $(u^\epsilon(x))$, les développements asymptotiques de la déformation $E(u^\epsilon)$ et de la contrainte $\sigma(u^\epsilon)$ que l'on substituera dans les équations (2.49) :

$$\begin{aligned} E(u^\epsilon) &= E^0(x, y) + \epsilon E^1(x, y) + \dots \\ \sigma(u^\epsilon) &= \sigma^0(x, y) + \epsilon \sigma^1(x, y) + \dots \end{aligned} \tag{2.50}$$

Ceci revient à résoudre les équations suivantes obtenues en identifiant à zéro les puissances successives de ϵ :

- à l'ordre ϵ^{-1} , on a l'équation régissant le comportement microscopique :

$$\frac{\partial \sigma_{ij}^0}{\partial y_j} = 0 \quad (2.51)$$

- à l'ordre ϵ^0 , on a l'équation régissant le comportement macroscopique :

$$-\frac{\partial \sigma_{ij}^0}{\partial x_j} - \frac{\partial \sigma^0 1_{ij}}{\partial y_j} = f_i \quad (2.52)$$

Qui devient après l'application de l'opérateur moyenne :

$$-\frac{\partial \langle \sigma \rangle_{ij}^0}{\partial x_j} = f_i \quad (2.53)$$

En résumé :

- On résout d'abord l'équation régissant le comportement microscopique, avec les conditions aux limites périodiques. Cela nous permet d'évaluer la raideur homogénéisée.
- La raideur homogénéisée nous permet de résoudre l'équation régissant le comportement macroscopique, avec les conditions aux limites correspondantes.
- Avec la solution de l'équation macroscopique, $u^0(x)$, on peut calculer le champ microscopique $u^1(x, y)$.

Il s'agit d'une stratégie multi-échelle efficace et très répandue. Cependant cette stratégie montre ses limites pour les milieux non périodiques. Également, si l'on s'intéresse aux solutions homogénéisées près des frontières de la structure, un traitement différent est exigé [Dum86]. Une autre limite de la théorie est due à sa nature asymptotique ($\epsilon \rightarrow 0$), qui la rend inadaptée pour les cas où les échelles ne peuvent pas être considérées comme infiniment séparées.

2.3.2 Approches numériques basées sur la théorie de l'homogénéisation

L'application analytique de la théorie de l'homogénéisation étant très complexe pour des cas autres que les cas simples, les recherches se sont orientées vers son couplage avec la méthode des éléments finis.

Simulation directe de la microstructure

Une manière de résoudre des problèmes d'homogénéisation est d'employer des techniques de simulation numérique sur des échantillons de microstructures. Dans ce cas, la notion de VER est d'importance primordiale. En effet habituellement considéré comme un volume de matériel hétérogène incluant efficacement un prélèvement de toutes les hétérogénéités, le VER doit dans ce cas inclure un grand nombre d'hétérogénéités microscopiques (grains, inclusions, vides, fibres, etc...). Il doit cependant rester assez petit pour être considéré comme un volume élémentaire. De plus la réponse du VER doit être indépendante du type de conditions aux limites prescrites sur son bord (contrainte moyenne ou effort moyen donnée), ceci plaide en faveur d'un VER de grande taille. On retrouve un exemple de cette utilisation ainsi qu'une discussion autour de la taille optimale d'un VER dans [KFG⁺03].

Méthodes multi-niveaux

Une avancée intéressante fut de coupler la simulation de microstructure et de l'inclure directement dans la simulation des structures macroscopiques, ceci a donné les méthodes multi-niveaux. Les méthodes multi-niveaux sont de trois types.

Méthodes multi-niveaux de type I :

Plusieurs auteurs [SBM98, Fey99, Wn04, YH07] nous proposent de remplacer la loi de comportement macroscopique (très utile pour rendre compte de phénomènes non linéaires ou purement microscopiques) par des calculs sur la microstructure, sous forme de sous domaines associés aux points d'intégration. La procédure se déroule comme suit (figure 2.6) :

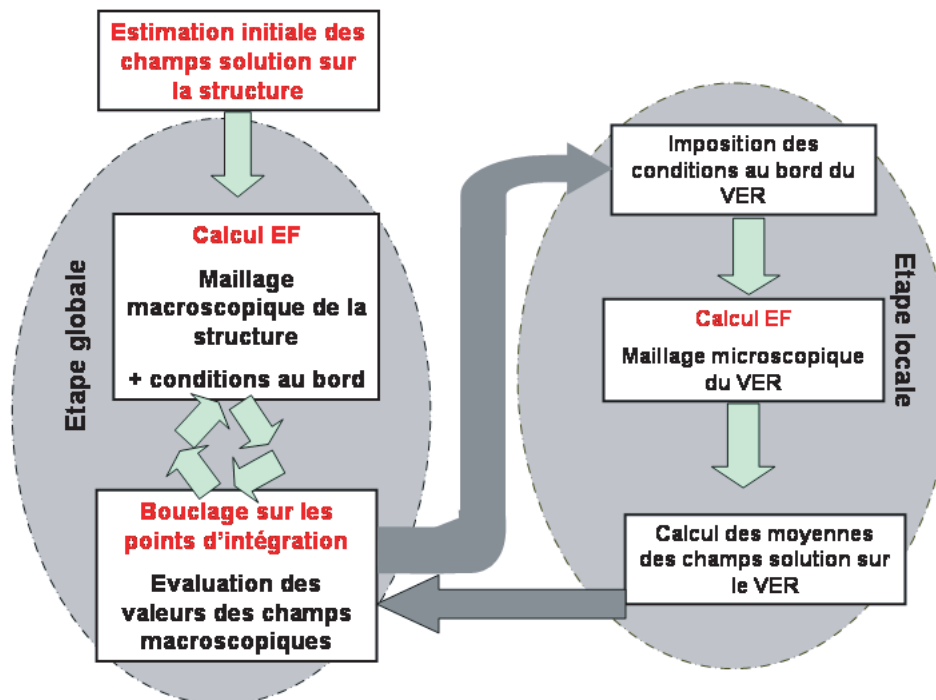


FIGURE 2.6 – Stratégie des méthodes EF multi-niveaux

- Assigner à chaque point macroscopique approprié (en fait un point d'intégration dans le maillage éléments finis macroscopique) un VER unique.
- Calculer le tenseur de déformation macroscopique à partir d'une évaluation des déplacements nodaux macroscopiques, et imposer les déplacements appropriés aux bords de la cellule unitaire de telle manière que le tenseur de déformation moyen sur le VER est égal au tenseur de déformation macroscopique (localisation).
- Calculer les champs non uniformes de contrainte et de déformation résultants dans les VER qui sont le résultat des déplacements prescrits aux bords.
- Calculer la contrainte moyenne dans le VER, le résultat donne la contrainte macroscopique locale (homogénéisation).

Apparemment, la méthode d'homogénéisation ci-dessus découple le champ macroscopique de déplacement de celui microscopique. L'imposition des conditions au bord du VER se fait par une simple hypothèse de périodicité dans [Fey99]. Dans [SBM98] on pose des conditions au bord

cinématiques et naturelles combinées pour tenir compte de la continuité de la contrainte sur la frontière et de la compatibilité (issue de l'hypothèse de périodicité du VER).

Dans [Wn04] les auteurs vont plus loin. Ils revisitent la stratégie multi-niveaux sous l'appellation « The Heterogeneous Multiscale Method », on est plus obligé d'avoir recours à la méthode des éléments finis. On définit deux solveurs, l'un macroscopique (volumes finis, éléments finis ...), l'autre microscopique (éléments finis, dynamique moléculaire (MD), Quasicontinuum Method (QC)), puis la démarche à suivre reste sensiblement similaire :

- Identifier les variables et la structure du problème à l'échelle macroscopique : lois de conservation, procédés de diffusion ...
- Exprimer le modèle à l'échelle microscopique sous une forme conforme à la structure identifiée à l'échelle macroscopique. Cela sert de base pour relier les modèles à l'échelle macroscopique et à l'échelle microscopique.
- Choisir le solveur à l'échelle macroscopique, et identifier les données qui doivent être estimées à partir du solveur à l'échelle microscopique.
- Concevoir le solveur contraint à l'échelle microscopique, qui donne les données nécessaires (techniquement, c'est l'étape la plus difficile).

Malgré des résultats significatifs, cette approche est confrontée à quelques problèmes. Le coût des calculs est énorme : on est dans un processus itératif qui nécessite qu'on conduise autant de simulations microscopiques que de point d'intégration dans le problème macroscopique à chaque estimation de la solution. De plus, si l'on s'intéresse à l'état microscopique, rien n'est fait pour assurer une bonne solution sur les bords des sous domaines microscopiques (VER). Enfin, il paraît irréaliste à l'heure actuelle de vouloir introduire plus que deux échelles de comportement.

Méthodes multi-niveaux de type II :

Une autre vision des méthodes multi-niveaux est de les aborder au sens d'une superposition d'éléments macroscopiques et microscopiques [Fis92, Rat03, TO04].

L'idée de superposer des maillages éléments finis n'est pas nouvelle, l'auteur dans [Fis92] la propose en 1992 sous l'appellation « Finite element mesh superposition method » (S-FEM) comme une méthodologie pour améliorer la qualité des calculs éléments finis dans les régions où les erreurs sont inacceptables. A la différence des techniques adaptatives préexistantes, où soit le maillage est raffiné (h-version), soit l'ordre du polynôme est augmenté (p-version), ou bien la combinaison des deux (hp-version), la s-version augmente la résolution par superposition d'un ou plusieurs maillages additionnels de forme arbitraire. La continuité C0 du champ de déplacement est maintenue en imposant des conditions de bord homogènes sur le champ superposé dans la partie de la frontière qui n'est pas contenu dans la frontière du problème.

Cette idée est reprise dans [TO04], où les auteurs nous proposent d'associer l'homogénéisation asymptotique et la superposition de maillage pour traiter des problèmes où la condition de séparation d'échelle est satisfaite entre la microstructure et le problème macroscopique, mais où une échelle intermédiaire (représentant défauts, fissure et autres) doit être prise en compte dans la simulation. Certaines restrictions sont alors imposées à la méthode S-FEM. Si on écrit le déplacement, en adoptant l'indice G pour le maillage global et l'indice L pour le maillage local (figure 2.7), sous la forme :

$$u = \begin{cases} u^G & \text{sur } \Omega^G, \Gamma^G \\ u^G + u^L & \text{sur } \Omega^L \end{cases} \quad (2.54)$$

La méthode S-FEM permettant des maillages de tailles différentes, la connexion entre les champs de déplacement microscopiques et macroscopiques se fait par le biais des fonctions de

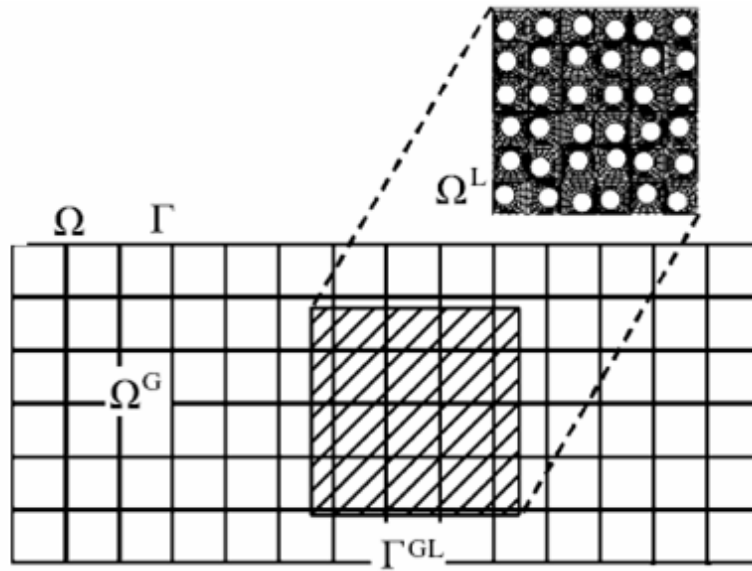


FIGURE 2.7 – Superposition de maillages S-FEM

forme des deux maillages. La continuité est assurée sur le bord Γ^{GL} par :

$$u^L = 0 \quad \text{sur } \Gamma^{GL}$$

Les relations constitutives sont données par :

$$\sigma = \begin{cases} C^G B^G u^G & \text{sur } \Omega^G \\ C^L (B^G u^G + B^L u^L) & \text{sur } \Omega^L \end{cases} \quad (2.55)$$

Où C , B sont les tenseurs contrainte déformation et déformation déplacement respectivement. On arrive à écrire la relation suivante :

$$\begin{bmatrix} K^G & K^{GL} \\ (K^{GL})^T & K^L \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u^G \\ u^L \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} f \\ 0 \end{Bmatrix} \quad (2.56)$$

Les matrices de rigidité K^G et K^L sont calculées en utilisant les maillages macroscopiques et microscopiques, respectivement. Le couplage entre les deux maillages est exprimé par K^{GL} . Par conséquent, la méthode S-FEM est avantageuse par rapport aux méthodes de raffinement conventionnelles. Il faut cependant relever quelques problèmes dans cette technique (dus à la nature multi-échelle du problème) :

- l'intégration numérique liée à K^G et K^{GL} est à effectuer avec beaucoup de soins, cela est dû à la différence significative de taille entre les maillages.
- dans les régions où il y a superposition, les équations d'équilibre microscopiques et macroscopiques sont résolues simultanément. Par conséquent la consistance entre ces équations est essentielle. Ceci impose d'utiliser une technique d'homogénéisation (avec toutes les restrictions que cela impose) pour prédire correctement le comportement macroscopique.
- enfin, la discontinuité au bord Γ^{GL} entre le modèle macroscopique et celui microscopique conduit à une marge d'erreur non négligeable autour de Γ^{GL} .

Les auteurs de la méthode « Arlequin » [Rat03, BD98a, BDR01] ont une vision plus large et ne parlent pas de superposition de maillage mais de superposition de modèles. Les différentes zones nécessitant des niveaux d'analyse différents, sont chacune associée à un modèle qui peut être de nature diverse (analytique, numérique, mécanique, physico-chimique, ...). Les domaines de ces modèles ne sont pas astreints à présenter, entre eux, des interfaces géométriquement compatibles, mais peuvent se recouvrir totalement ou partiellement. Une particularité de la méthode Arlequin est alors de raccorder ces modèles, non pas sur une frontière (comme cela se fait classiquement), mais dans le volume. De cette façon, dans les zones de coexistence, la modélisation globale est obtenue par le mélange de plusieurs modélisations (figure 2.8). Le



FIGURE 2.8 – Exemple de modélisation Arlequin

déplacement dans cet exemple est représenté par le triplet $(u_{poutre}, u_{couche\ limite}, u_{singularite})$ sous la forme :

$$u = \begin{cases} u_{poutre} & \text{sur } (\Omega_{poutre} - \Omega_{couche\ limite}) \\ \alpha u_{poutre} + (1 - \alpha) u_{couche\ limite} & \text{sur } (\Omega_{poutre} \cap \Omega_{couche\ limite}) \\ u_{couche\ limite} & \text{sur } (\Omega_{couche\ limite} - (\Omega_{poutre} \cup \Omega_{singularite})) \\ \beta u_{couche\ limite} + (1 - \beta) u_{singularite} & \text{sur } \Omega_{singularite} \end{cases}$$

Où α, β sont des valeurs comprises entre 0 et 1.

Pour raccorder les modèles, l'idée est d'activer des forces fictives de couplage contrôlant, sur les zones de recouvrement, l'écart entre leurs états mécaniques (déplacement, déformations, contraintes, ...). Toutefois, pour que chacun des modèles puisse exprimer sa richesse propre, ces écarts sont mesurés de manière affaiblie et à l'aide d'opérateurs moyennant. Dans la formulation, pour ne pas compter plusieurs fois l'énergie du système global dans la zone de recouvrement, chacun des travaux virtuels associés à un modèle est pondéré par une fonction (α, β) dite de pondération ou de mélange. L'ensemble de ces fonctions forme une partition de l'unité sur le domaine d'étude. Ces fonctions représentent un ingrédient important de la méthode, puisqu'elles définissent le niveau de mélange entre les modèles dans la zone de recouvrement. De plus, suivant leurs valeurs, elles précisent quelle part de confiance et de pertinence est accordée à chacun des modèles. Cette modélisation est pour le moins séduisante, mais le choix des fonctions de pondération reste assez délicat et dépend de l'expérience et du savoir faire de l'utilisateur.

Méthodes multi-niveaux de type III :

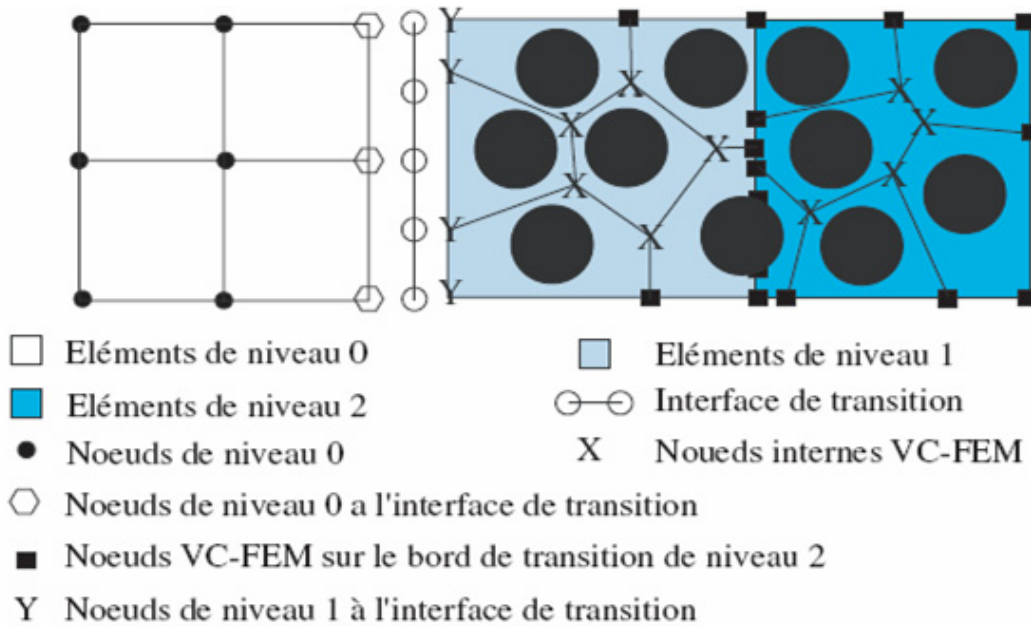


FIGURE 2.9 – Exemple de stratégie multi-niveaux basée sur la méthode VC-FEM

La démarche multi-niveaux peut être perçue au sens du mélange d'éléments macroscopiques et microscopiques. Les auteurs dans [RG04] abordent l'application de l'esprit multi-niveaux dans ce sens. Ils proposent un modèle multi-niveaux adaptatif. Le domaine global est décomposé en un ensemble de sous domaines non intersectés ouverts, le modèle se base sur trois niveaux essentiels (figure 2.9) :

- un domaine purement macroscopique (niveau 0).
- un domaine micro-macro basé sur la répétition périodique d'un VER (niveau 1).
- un domaine purement microscopique où le VER cesse d'exister et où la microstructure doit être modélisée (niveau 2).

Une analyse macroscopique pure avec des propriétés homogénéisées (modules effectifs) et une formulation régularisée du problème est conduite dans la région de niveau 0.

La microstructure et le VER correspondant peuvent changer d'un élément à un autre, de ceci résultera différents modules effectifs pour différents éléments. Le modèle peut commencer par la prétention que tous les éléments appartiennent au sous domaine de niveau 0. Des techniques de raffinement et d'adaptation du maillage sont mises en oeuvre pour affiner la solution autant que possible.

Le sous domaine de niveau 1 est introduit dans les régions de niveau 0 où le gradient des variables macroscopiques est localement élevé. Des analyses concourantes du problème macroscopique régularisé et du problème micromécanique basé sur le VER périodique sont conduites dans ce sous domaine pour déterminer la nécessité du passage au domaine de niveau 2. On introduit alors le sous domaine de niveau 2, qui représente la microstructure hétérogène arbitraire. Tous les calculs sont conduits en utilisant une discrétisation en éléments finis adaptatifs basée sur les cellules de Voronoï [GM95, GNL97, GLM95] (adaptive Voronoi cell finite element VC-FEM).

Dans cette méthode on est confronté à un coût de calcul élevé sur le domaine entièrement microscopique, ceci pose des restrictions à son utilisation (calculateur parallèle).

2.3.3 Autres approches

Certaines approches des problèmes multi-échelles n'exploitent pas directement la théorie d'homogénéisation classique (on peut cependant y retrouver quelques ingrédients et similitudes). Ces approches sont intéressantes dans le fait qu'elles s'affranchissent de certaines limitations intrinsèques liées à l'homogénéisation.

Discrétisation microscopique, décomposition de domaine

Cette démarche consiste en l'utilisation d'une discrétisation microscopique totale du problème globale. On peut voir cette stratégie comme multi-niveaux car on est obligé d'avoir des stratégies hiérarchiques avec des *super éléments* homogénéisés pour que le coût du calcul ne soit pas prohibitif.

Dans cette perspective, les auteurs de [LN03, LD99] nous proposent une méthode se caractérisant par une subdivision du domaine d'étude. La structure est modélisée comme un assemblage de sous structures (Ω_E) et d'interfaces (Γ_{EE}) servant au transfert de la distribution de l'effort et du déplacement entre les sous structures, chaque constituant a ses propres variables et ses propres équations (figure 2.10). Les inter-efforts F_E sur les interfaces et les déplacements u_E

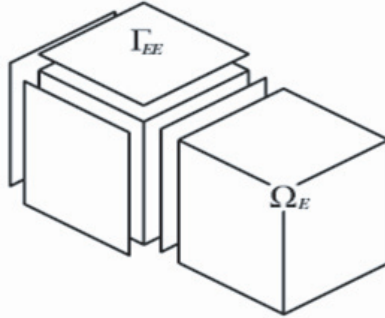


FIGURE 2.10 – Décomposition en sous domaines et interfaces

sont décrits sur les deux échelles :

$$\begin{aligned} F_E &= F_E^M + F_E^m \\ u_E &= u_E^M + u_E^m \end{aligned} \quad (2.57)$$

Les inter-efforts et déplacements microscopiques (F_E^m, u_E^m) ne sont pas assujettis à vérifier a priori les conditions de transmission sur (Γ_{EE}) même partiellement, par contre les quantités macroscopiques (F_E^M, u_E^M) le sont.

Pour résoudre le problème ainsi posé, une stratégie itérative basée sur la méthode LATIN est mise en oeuvre. Chaque itération comporte deux étapes :

- une étape locale (possiblement non linéaire) : consiste à satisfaire un jeu d'équations, exprimant pour chaque sous structure le comportement du matériau et le comportement aux deux échelles des interfaces.
- une étape globale linéaire : il s'agit de vérifier un jeu d'équations exprimant l'admissibilité et l'équilibre sur les sous structures. On doit avoir un champ de contraintes sur (Ω_E) en équilibre avec les efforts sur les interfaces (Γ_{EE}), et un champ de déplacements sur (Ω_E) compatible avec les déplacements sur (Γ_{EE}).

Cette vérification est conduite aux échelles microscopique et macroscopique du problème. Sur cette dernière échelle, le problème peut être interprété comme un problème homogénéisé sur la sous structure portant sur des quantités macroscopiques effectives.

Cette technique apparentée aux méthodes de décomposition de domaine est assez lourde en terme de calcul, mais aussi bien adaptée aux architectures parallèles.

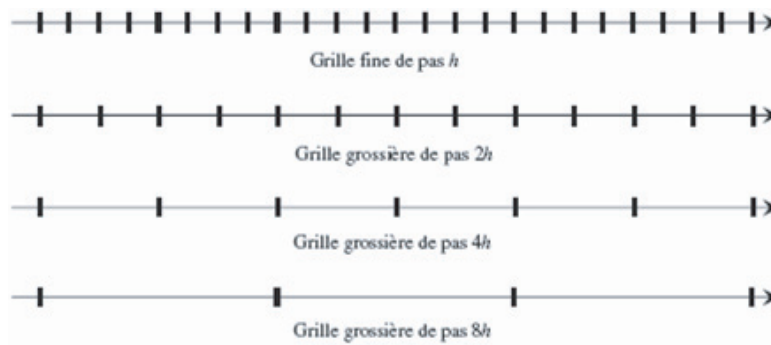


FIGURE 2.11 – Exemple de grilles hiérarchiques pour une résolution multigrille (cas 1D)

Méthode multigrille

La méthode multigrille correspond à une stratégie de calcul itératif particulièrement efficace, proposée initialement pour la résolution de problèmes elliptiques linéaires discrétisés sur des grilles régulières raffinées.

Pour présenter simplement la méthode, on se limite au problème linéaire discret posé sur 2 grilles $[Spi]$, cette procédure peut être étendue sur autant de grilles que nécessaire (figure 2.11) :

$$AU_h = F_h$$

Dans ce cas la méthode se compose de deux phases :

- une phase de lissage, correspondant à deux ou trois itérations d'une méthode de relaxation, permettant de réduire les hautes fréquences de l'erreur lorsque l'on décompose celle-ci dans la base des vecteurs propres.
- une phase de correction sur grille grossière qui traite efficacement les basses fréquences de l'erreur. Un mode basse fréquence sur la grille fine se transforme en un mode oscillant sur la grille grossière et sera bien lissé par une méthode de relaxation.

Soit u_h l'estimation obtenue en phase 1 de la solution U_h du problème, $r_h = F_h - Au_h$ le résidu. La seconde phase de la méthode consiste alors à :

- définir la restriction r_H du résidu r_h sur la grille grossière à l'aide d'un opérateur de restriction.
- résoudre le système linéaire $AV_H = r_H$, donnant la correction V_H sur la grille grossière.
- prolonger V_H obtenue sur la grille grossière en une fonction sur la grille fine, par exemple par interpolation.

La méthode multigrille est adapté dans [FB95a, FB95b] à l'étude du comportement mécanique de pièces constituées de matériaux composites périodiques. Pour ces problèmes, les auteurs constatent que les opérateurs classiques de prolongement/restriction donnent une mauvaise approximation des composantes basses fréquences de la solution, et proposent une nouvelle expression de ces opérateurs choisie de sorte que le problème sur la grille grossière soit posé avec les propriétés du matériau homogénéisé.

Enrichissement de l'interpolation éléments finis

Un autre ensemble d'approches récentes cherche à adapter le cadre de la méthode des éléments finis classique, pour pouvoir résoudre des problèmes multi-échelles avec des discrétisations relativement grossières. L'idée consiste à enrichir l'espace d'interpolation éléments finis à l'aide de fonctions qui traduisent une connaissance à priori du comportement local de la solution.

Une des principales approches dans l'enrichissement a été proposée par Babuska et *al.* sous le nom de « partition de l'unité » (The partition of unity finite element method PU-FEM) [MB96, BM97]. Cette approche offre un cadre simple pour enrichir les espaces d'approximation construits par la méthode des éléments finis, en y ajoutant des fonctions de nature à priori quelconque. Dans le but de localiser cet enrichissement et d'obtenir des champs continus, les auteurs pondèrent les fonctions d'enrichissement par les fonctions de forme éléments finis. Sur chaque élément fini enrichi, le champ de déplacement global de la forme :

$$u(x) = u_H(x) + \delta u_h(x)$$

s'écrit alors avec :

$$u_H(x) = \sum_i u_i \varphi_i(x)$$

$$\delta u_h(x) = \sum_i \left(\sum_j \alpha_{ij} f_j(x) \right) \varphi_i(x)$$

Où $f(x)$ représente la fonction d'enrichissement, et $\varphi(x)$ es fonctions de forme éléments finis standard constituant une partition de l'unité.

$$\sum_i \varphi_i(x) = 1 \tag{2.58}$$

Cette approche constitue le point de départ pour plusieurs méthodes. Parmi elles la méthode des éléments finis généralisés (The generalized finite element method GFEM) [SCB01, SBC00]. L'auteur introduit la notion de fonctions référence ou « handbook functions », connues analytiquement ou générées numériquement, qui reflètent le caractère de la solution dans le domaine ou à proximité bords, inclusions, trous, fissures ... Ces fonctions sont définies comme les solutions de problèmes de référence dont on connaît a priori la géométrie et les conditions aux limites, elles sont utilisées pour l'enrichissement dans le cadre de la méthode de la partition de l'unité.

La mise en oeuvre pratique de cette approche soulève certaines difficultés. Les fonctions spéciales d'enrichissement peuvent être quasi linéairement dépendantes des fonctions de base éléments finis, imposant de recourir à des techniques de factorisation partielle ou à des stratégies de régularisation. D'autre part, des schémas d'intégration adaptatifs sont introduits pour contrôler l'erreur d'intégration numérique afin que les fonctions spéciales soient correctement prises en compte.

Une autre méthode dérivée de la partition de l'unité est la méthode des éléments finis étendus (Extended Finite Element Method X-FEM) [BMUP01, SCMB00, SMBM00]. Elle s'adresse à des problèmes où diverses discontinuités (fissures, trous, interfaces) sont introduites dans le modèle éléments finis classique sans en modifier le maillage. Les interfaces Γ sont décrites en s'appuyant sur la technique des « level set » par une fonction distance signée $\Psi_\Gamma(x)$ telle que :

$$\Psi_\Gamma(x) = \begin{cases} d(x, \Gamma) & \text{si } x \text{ se situe dans la région extérieure de } \Gamma \\ -d(x, \Gamma) & \text{dans le cas contraire} \end{cases}$$

La méthode X-FEM offre une grande souplesse pour introduire des discontinuités, une application particulièrement intéressante concerne la propagation de fissures dans un modèle éléments finis indépendamment de son maillage.

2.3.4 Conclusion

Dans cette section, on a passé en revue différentes stratégies destinées au calcul multi-échelles. Un grand nombre de méthodes reprennent la philosophie des techniques classiques d'homogénéisation tandis que d'autres radicalement différentes tentent d'améliorer les techniques de modélisation classiques pour qu'elles prennent en compte les effets à plusieurs échelles. Chacune des méthodes présentées est bien adaptée à une classe de problèmes. Celles qui se veulent plus généralistes souffrent souvent d'un coût de calcul élevé, partiellement compensé par leurs aptitudes au parallélisme.

Nous utiliserons dans notre modélisation la méthode de superposition d'éléments macroscopiques et microscopiques (superposition de maillages) [Fis92, Rat03, TO04]. Ainsi les maillages microscopiques et macroscopiques sont réalisés indépendamment.

Chapitre 3

DEMARCHE DE MODELISATION

Sommaire

3.1	Modélisation numérique du refroidissement d'une pièce de composite thermoplastique	82
3.1.1	Thermoélasticité linéaire : rappels	83
3.1.2	Modélisation mécanique	85
3.1.3	Modélisation thermique	85
3.1.4	Principes d'utilisation d'un passage micro-macro pour obtenir les propriétés thermomécaniques macroscopiques	87
3.1.5	Passages micro-macro dans le cas des matériaux thermoélastiques	89
3.2	Description de la méthode de modélisation	93
3.2.1	Motivations	93
3.2.2	Hypothèses	93
3.2.3	Principes généraux	93
3.2.4	Description géométrique	94
3.2.5	Couplage entre les échelles macroscopique et microscopique : méthode multi-pas en temps	95
3.2.6	Schéma général	97
3.3	Modélisation à l'échelle macroscopique	97
3.3.1	Description géométrique	97
3.3.2	Modélisation thermique	100
3.3.3	Modélisation mécanique	111
3.3.4	Calcul des contraintes	112
3.4	Modélisation à l'échelle microscopique	114
3.4.1	Objectifs	114
3.4.2	Types d'orientation de fibre	116
3.4.3	Emplacements des domaines microscopiques	118
3.4.4	Modélisation thermique	119
3.4.5	Modélisation mécanique	122
3.4.6	Calcul des contraintes	124
3.5	Homogénéisation : transfert de l'information de l'échelle microscopique à l'échelle macroscopique	126
3.5.1	Les différentes échelles de modélisation	126
3.5.2	Stratégie d'homogénéisation	129
3.5.3	Homogénéisation de la conductivité thermique	133

3.5.4	Homogénéisation du problème mécanique	137
3.6	Description du schéma algorithmique utilisé	142
3.6.1	Schéma algorithmique général	142
3.6.2	Initialisation du calcul	142
3.6.3	Variation des propriétés thermomécaniques du matériau : insertion dans le modèle	145

Nous présentons dans ce chapitre la démarche de modélisation développée dans notre étude. Dans une première partie, nous rappelons les principes de modélisation numérique du refroidissement d'une pièce de composite thermoplastique, avec prise en compte de l'homogénéisation des propriétés thermomécaniques. Dans une deuxième partie, nous présentons les grandes lignes de la méthode de modélisation développée. Puis dans les parties suivantes, nous présentons plus en détail la modélisation à l'échelle macroscopique, microscopique et la méthode d'homogénéisation des propriétés thermomécaniques retenue. Enfin, dans une dernière partie, nous présentons le schéma algorithmique utilisé pour la calcul des contraintes résiduelles au cours du procédé ATP.

3.1 Modélisation numérique du refroidissement d'une pièce de composite thermoplastique

On considère un domaine fini Ω de frontière $\partial\Omega$ (figure 3.1). Ce domaine Ω est constitué d'un matériau composite thermoplastique soumis à une phase de refroidissement. On approxime le

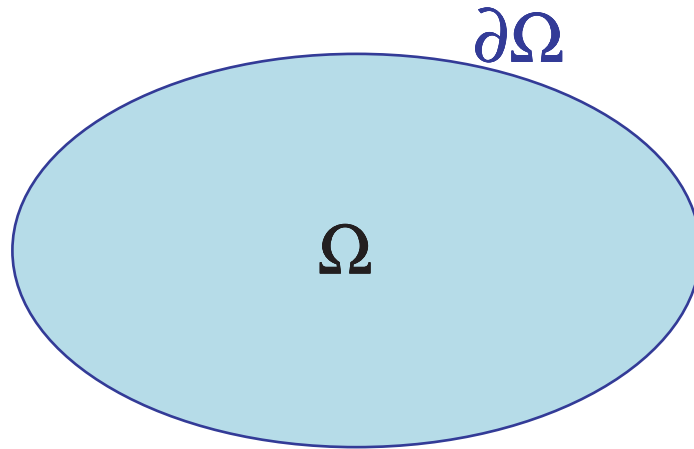


FIGURE 3.1 – Définition du domaine Ω

comportement du matériau par un modèle de thermoélasticité découplée. Il s'agit de situations où la réponse de la structure (supposée ici élastique linéaire et dans le cadre HPP) résulte de l'incompatibilité des déformations qu'un champ de température tend à engendrer en raison de la dilatation thermique du matériau et de la dilatation résultant du phénomène de cristallisation du matériau. Le calcul de la réponse thermoélastique nécessite la connaissance du champ de température. Une fois celui-ci connu, il est facile de le prendre en compte dans la formulation éléments finis du problème mécanique sous la forme d'un terme de type force généralisée. Si le champ de température correspond à un état d'équilibre, il vérifie l'équation de Laplace avec des

conditions aux limites appropriées, et le traitement numérique du problème thermique est alors essentiellement une forme simplifiée du traitement de l'élasticité linéaire.

3.1.1 Thermoélasticité linéaire : rappels

Les variations de température dans un matériau thermoplastique induisent des variations de volume (dilatations thermiques et variations de volume induites par la cristallisation). Celles-ci correspondent en général à des déformations non compatibles (c'est-à-dire ne dérivant pas d'un champ de déplacement). La déformation apparaissant effectivement dans un matériau soumis à des variations de température doit ainsi « corriger » cette incompatibilité, ce qui donne naissance à des contraintes d'origine thermique et induites par la cristallisation, même en l'absence de toute sollicitation mécanique.

Le modèle thermomécanique le plus simple, sur lequel cette section se concentre, est celui de la thermoélasticité découplée. Dans cette approche, le champ de température $\mathbf{T}(\mathbf{x}, t)$ à tout instant t résulte de causes externes (non mécaniques) et n'est pas affecté par l'état mécanique du matériau. La relation de comportement thermoélastique linéaire est alors :

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{C}(\mathbf{x}, t) : \left(\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{x}, t) - \boldsymbol{\epsilon}^{th}(\mathbf{x}, t) - \boldsymbol{\epsilon}^{crist}(\mathbf{x}, t) \right) \quad (3.1)$$

où $\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{x}, t)$ est la déformation totale linéarisée, $\boldsymbol{\epsilon}^{th}(\mathbf{x}, t)$ la déformation induite par la thermique et $\boldsymbol{\epsilon}^{crist}(\mathbf{x}, t)$ la déformation induite par la cristallisation.

Dans cette approche découplée, l'état thermomécanique d'une structure est alors calculé en deux étapes :

1. Calcul du champ de température $\mathbf{T}(\mathbf{x}, t)$ par résolution des équations de la thermique ;
2. Calcul de la solution de problème d'élasticité incorporant les effets de dilatation thermique et de contraction induite par la cristallisation via la relation de comportement (3.1).

Déformations et contraintes d'origine thermique

La déformation induite par la thermique s'écrit :

$$\boldsymbol{\epsilon}^{th}(\mathbf{x}, t) = \boldsymbol{\alpha}^{th}(\mathbf{x}, t) (T(\mathbf{x}, t) - T_{ref}) \quad (3.2)$$

avec $\boldsymbol{\alpha}^{th}(\mathbf{x}, t)$ le tenseur de dilatation thermique du matériau et T_{ref} la température de référence pour laquelle le matériau ne présente pas de dilatation thermique.

La contrainte thermique au point \mathbf{x} du domaine macroscopique et à l'instant t s'exprime par :

$$\boldsymbol{\sigma}^{th}(\mathbf{x}, t) \equiv \mathbf{C}(\mathbf{x}, t) : \boldsymbol{\epsilon}^{th}(\mathbf{x}, t) \quad (3.3)$$

Le champ de contraintes thermiques induit des forces nodales dans le domaine Ω qui sont exprimées par :

$$\mathbf{F}^{th}(t) = \int_{\Omega} \mathbf{B}^T \boldsymbol{\sigma}^{th}(\mathbf{x}, t) d\Omega \quad (3.4)$$

où \mathbf{B} est la matrice qui contient les dérivées des fonctions de forme.

Déformations et contraintes induites par la cristallisation

La variation de volume induite par la cristallisation $\Delta V_{crist}(\mathbf{x}, [t - dt, t])$ en un point \mathbf{x} du domaine macroscopique Ω et dans l'intervalle de temps $[t, t + dt]$ peut s'exprimer comme :

$$\Delta V_{crist}(\mathbf{x}, [t - dt, t]) = V(\mathbf{x}, t - dt) \left(\frac{\rho(\mathbf{x}, t - dt)}{\rho(\mathbf{x}, t)} - 1 \right) \quad (3.5)$$

La matrice PEEK étant un matériau isotrope, la variation de volume au point \mathbf{x} et dans l'intervalle de temps $[t - dt, t]$ est :

$$\frac{\Delta V_{crist}(\mathbf{x}, [t - dt, t])}{V(\mathbf{x}, t - dt)} = \left(1 + \frac{\Delta l_{crist}(\mathbf{x}, [t - dt, t])}{l(\mathbf{x}, t - dt)} \right)^3 - 1 \quad (3.6)$$

On en déduit :

$$\frac{\Delta l_{crist}(\mathbf{x}, t)}{l(\mathbf{x}, t - dt)} = \left(\frac{\Delta V_{crist}(\mathbf{x}, [t - dt, t])}{V(\mathbf{x}, t - dt)} + 1 \right)^{1/3} - 1 \quad (3.7)$$

et par conséquent le tenseur de déformation induite par la cristallisation au point \mathbf{x} et à l'instant t est :

$$\boldsymbol{\epsilon}^{crist}(\mathbf{x}, t) = \begin{bmatrix} \left(\frac{\Delta V_{crist}(\mathbf{x}, [t - dt, t])}{V(\mathbf{x}, t - dt)} + 1 \right)^{1/3} - 1 & & \\ & \left(\frac{\Delta V_{crist}(\mathbf{x}, [t - dt, t])}{V(\mathbf{x}, t - dt)} + 1 \right)^{1/3} - 1 & \\ & & 0 \end{bmatrix} \quad (3.8)$$

Finalement, le tenseur de déformation induite par la cristallisation au point \mathbf{x} et à l'instant t est :

$$\boldsymbol{\epsilon}^{crist}(\mathbf{x}, t) = \begin{bmatrix} \left(\frac{\rho(\mathbf{x}, t - dt)}{\rho(\mathbf{x}, t)} \right)^{1/3} - 1 & & \\ & \left(\frac{\rho(\mathbf{x}, t - dt)}{\rho(\mathbf{x}, t)} \right)^{1/3} - 1 & \\ & & 0 \end{bmatrix} \quad (3.9)$$

A l'échelle microscopique, seule la densité de la matrice varie. La densité de la phase amorphe et de la phase cristalline étant supposées connues, la densité en un point \mathbf{x} et à l'instant t est :

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \chi(\mathbf{x}, t) \rho_c + (1 - \chi(\mathbf{x}, t)) \rho_a \quad (3.10)$$

avec ρ_a la densité de la phase amorphe et ρ_c la densité de la phase cristalline.

La contrainte induite par la cristallisation au point \mathbf{x} du domaine Ω et à l'instant t s'exprime par :

$$\boldsymbol{\sigma}^{crist}(\mathbf{x}, t) \equiv \mathbf{C}(\mathbf{x}, t) : \boldsymbol{\epsilon}^{crist}(\mathbf{x}, t) \quad (3.11)$$

Le champ de contraintes induites par la cristallisation induit des forces nodales dans le domaine Ω qui sont exprimées par :

$$\mathbf{F}^{crist}(t) = \int_{\Omega} \mathbf{B}^T \boldsymbol{\sigma}^{crist}(\mathbf{x}, t) d\Omega \quad (3.12)$$

où \mathbf{B} est la matrice qui contient les dérivées des fonctions de forme.

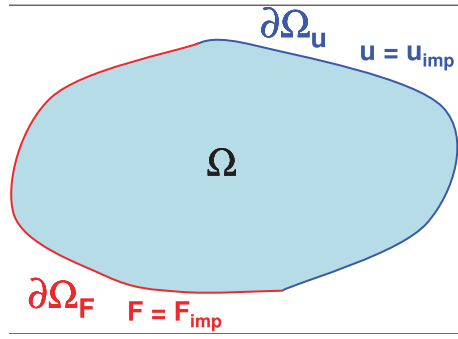


FIGURE 3.2 – Conditions aux limites mixtes du problème mécanique

3.1.2 Modélisation mécanique

Il est possible sans perte de généralité de se limiter à l'étude de la réponse mécanique aux seules sollicitations thermiques, la prise en compte d'autres sollicitations pouvant se faire via le principe de superposition par résolution séparée de problèmes purement mécaniques. On se restreint donc dans la modélisation mécanique à des données nulles en forces de volume, déplacements imposés sur $\partial\Omega_u$ et efforts imposés sur $\partial\Omega_F$. L'évolution du solide dans les conditions ainsi définies et sur un intervalle temporel $[0, t^F]$ choisi a priori est gouverné par les équations locales :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \epsilon = \frac{1}{2} (\text{grad} \mathbf{u} + \text{grad}^T \mathbf{u}) & \text{dans } \Omega \times [0, t^F] \quad \text{relation} \\ \text{div} \boldsymbol{\sigma} = 0 & \text{dans } \Omega \times [0, t^F] \quad \text{déplacement-déformation} \\ \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{C}(\mathbf{x}, t) : (\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{x}, t) - \boldsymbol{\epsilon}^{th}(\mathbf{x}, t) - \boldsymbol{\epsilon}^{crist}(\mathbf{x}, t)) & \text{dans } \Omega \times [0, t^F] \quad \text{équilibre} \\ \mathbf{u} = \mathbf{0} & \text{sur } \partial\Omega_u \times [0, t^F] \quad \text{comportement} \\ \mathbf{F} = \mathbf{0} & \text{sur } \partial\Omega_F \times [0, t^F] \quad \text{déplacements imposés} \\ & \text{efforts imposés} \end{array} \right. \quad (3.13)$$

dans lesquelles le champ de température $\mathbf{T}(\mathbf{x}, t)$ résulte d'un calcul thermique préliminaire et est supposé connu.

Formulation variationnelle

La formulation variationnelle du problème est obtenue par multiplication des équations de conservation par des fonctions tests, puis par intégration sur le domaine. On obtient l'expression faible du problème (3.1.2) :

Trouver $\mathbf{u} \in U^{ca}$ tel que

$$\forall \mathbf{u}^* \in U_0^{ca} \quad \int_{\Omega} \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u}) : \mathbf{C} : \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u}^*) d\Omega - \int_{\Omega} \boldsymbol{\epsilon}^{th} : \mathbf{C} : \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u}^*) d\Omega - \int_{\Omega} \boldsymbol{\epsilon}^{crist} : \mathbf{C} : \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u}^*) d\Omega \quad \forall \mathbf{u}^* \in U^{ca} \quad (3.14)$$

avec U^{ca} l'ensemble des déplacements cinématiquement admissibles à zéro.

3.1.3 Modélisation thermique

Dans cette section, nous présentons la modélisation thermique utilisée pour les simulations.

Équation de la chaleur

Les échanges thermiques entre la pièce, le milieu extérieur sont régis par l'équation de la chaleur :

$$\rho(T) C_p(T) \frac{dT}{dt} = \text{div}(k(T) \text{grad}T) + \Pi_{\text{cristallisation}} + \Pi_{\text{fusion}} \quad (3.15)$$

où $\rho(T)$, densité du matériau (kg.m^{-3})

$C_p(T)$, chaleur spécifique du matériau ($\text{J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$)

$k(T)$, conductivité thermique du matériau ($\text{W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$)

$\Pi_{\text{cristallisation}}$, est un terme source exothermique relatif à la cristallisation du matériau (W)

Π_{fusion} , est un terme source endothermique relatif à la fusion (W)

Conditions aux limites

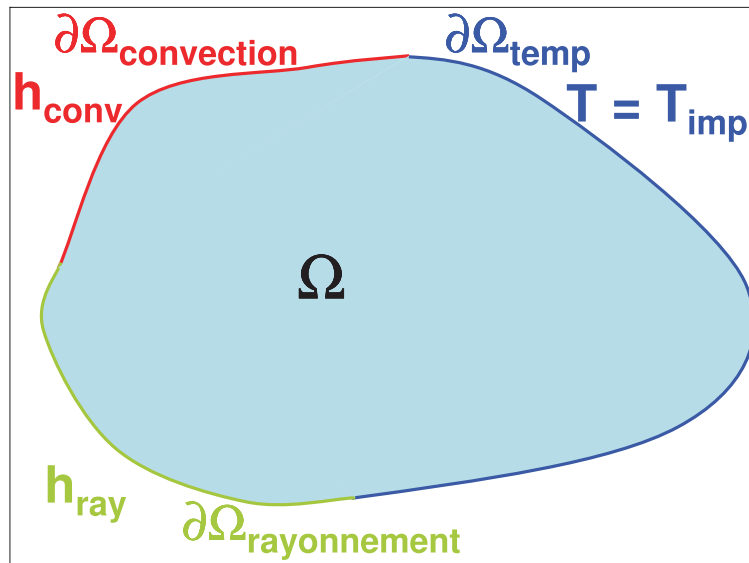


FIGURE 3.3 – Conditions aux limites mixtes du problème thermique

Les conditions aux limites de ce problème thermique sur la frontière $\partial\Omega$ peuvent être de trois types différents. Elles résultent des phénomènes physiques de transfert de chaleur. On décompose la frontière du domaine en plusieurs parties disjointes :

$$\partial\Omega = \partial\Omega_{\text{convection}} \cup \partial\Omega_{\text{rayonnement}} \cup \partial\Omega_{\text{temp}} \quad (3.16)$$

- **Convection sur $\partial\Omega_{\text{convection}}$**

De la chaleur est échangée sur les surfaces libres $\partial\Omega_{\text{convection}}$ à cause du phénomène de convection. L'échange dû à la convection est quantifié par la relation :

$$(-k \text{grad}T) \cdot n = h_{\text{conv}} (T - T_{\text{ext}}) \text{ sur } \partial\Omega_{\text{convection}} \quad (3.17)$$

où h_{conv} est le coefficient de transfert de convection et T_{ext} la température extérieure.

- **Rayonnement sur $\partial\Omega_{\text{rayonnement}}$**

L'échange dû au rayonnement est quantifié par la relation :

$$(-kgradT) \cdot n = \epsilon_{ray}\sigma_{ray} (T^4 - T_{ext}^4) \text{ sur } \partial\Omega_{rayonnement} \quad (3.18)$$

On peut définir le coefficient $h_{ray} = \epsilon_{ray}\sigma_{ray} (T + T_{ext}) (T^2 + T_{ext}^2)$, et dans ce cas (3.18) devient :

$$(-kgradT) \cdot n = h_{ray} (T - T_{ext}) \text{ sur } \partial\Omega_{rayonnement} \quad (3.19)$$

- **Température imposée sur $\partial\Omega_{temp}$**

On peut enfin tout simplement imposer une température T_{imp} sur une partie $\partial\Omega_{temp}$ du bord du domaine :

$$T = T_{imp} \text{ sur } \partial\Omega_{temp} \quad (3.20)$$

Formulation variationnelle

L'équation de la chaleur (3.15) enrichie des conditions aux limites précédemment définies s'écrit sous forme variationnelle :

$$\text{Trouver } T \in \Theta \text{ tel que} \\ \forall T^* \in \Theta_0, \left\{ \begin{array}{l} \int_{\Omega} \rho C_p \frac{dT}{dt} T^* d\Omega + \int_{\Omega} kgrad(T) grad(T^*) d\Omega \\ + \int_{\partial\Omega_{conv}} h_{conv} (T - T_{ext}) T^* dS + \int_{\partial\Omega_{ray}} \epsilon\sigma (T^4 - T_{ext}^4) T^* dS \\ - \int_{\Omega} \Pi_{cristallisation} T^* d\Omega - \int_{\Omega} \Pi_{fusion} T^* d\Omega = 0 \end{array} \right. \quad (3.21)$$

Avec $\Theta = \{T \in \Omega / T = T_{imp} \text{ sur } \partial\Omega_{temp}\}$ et $\Theta_0 = \{T \in \Omega / T = 0 \text{ sur } \partial\Omega_{temp}\}$.

Nous allons maintenant traiter des principes généraux de l'homogénéisation des propriétés thermomécaniques du matériau.

3.1.4 Principes d'utilisation d'un passage micro-macro pour obtenir les propriétés thermomécaniques macroscopiques

Avant de parler d'approches micro-macro, il semble nécessaire de différencier les différentes échelles (figure 3.4) :

- **l'échelle macroscopique** (domaine Ω). Dans notre cas, il s'agit de l'échelle du composite.
- **l'échelle microscopique**. C'est l'échelle locale du domaine microscopique (Volume Élémentaire Représentatif (VER)) que nous noterons Λ . Il peut s'agir de l'échelle fibre/matrice si la matrice est considérée homogène, ou celle du grain de matrice si l'on prend en compte le comportement polycristallin de la matrice.

Le but des approches présentées dans cette section est de décrire le comportement thermomécanique macroscopique par un passage micro-macro, ceci en vue d'un calcul de structure. On cherche à relier, pour le calcul des contraintes résiduelles, la contrainte macroscopique à la déformation macroscopique. Deux options s'offrent à nous :

- **résoudre les lois de comportement thermomécaniques au niveau local**. Les propriétés thermomécaniques étant supposées connues en tout point du domaine microscopique Λ , on calcule la déformation totale et la déformation libre puis la contrainte en tout

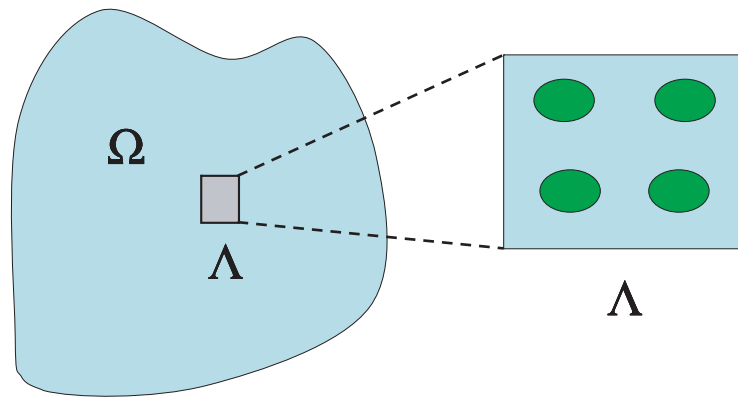


FIGURE 3.4 – Milieu hétérogène macroscopique et VER, les différentes échelles

point du domaine microscopique Λ . Enfin, en effectuant une moyenne, on remonte à la contrainte macroscopique (ou respectivement à la déformation macroscopique). On parle alors de méthode intégrée.

- **résoudre les lois de comportement thermomécaniques au niveau global.** Dans ce cas, on se sert des relations micro-macro (localisation puis homogénéisation) afin de reconstruire un modèle de comportement thermomécanique dont les lois d'évolutions ne dépendent que de variables internes macroscopiques. On parle alors de méthode séquentielle.

Dans ce document, nous nous intéresserons plus particulièrement au deuxième cas, c'est-à-dire à la reconstruction d'un modèle macroscopique par passages micro-macro. L'intérêt de cette méthode est de fournir une loi de comportement thermomécanique macroscopique, facilement utilisable d'un point de vue industriel et dont l'implantation dans un code de calcul par éléments finis pose moins de problèmes car elle consiste en une démarche usuelle en calcul de structure.

Principe du passage micro-macro

Les passages micro-macro reposent sur deux étapes :

- **La localisation :**
 - problème thermique : on cherche la relation entre le gradient thermique (ou le flux thermique) macroscopique et le gradient thermique (ou le flux thermique) dans chacune des sous-phases (éléments du domaine microscopique Λ).
 - problème mécanique : on cherche la relation entre la déformation (ou la contrainte) macroscopique et la déformation (ou la contrainte) dans chacune des sous-phases (éléments du domaine microscopique Λ).
- **L'homogénéisation :**
 - problème thermique : on cherche la relation entre le flux thermique (ou le gradient thermique) dans chacune des sous-phases (éléments du domaine microscopique Λ) et le

flux thermique (ou le gradient thermique) macroscopique.

- problème mécanique : on cherche la relation entre la contrainte (ou la déformation) dans chacune des sous-phases (éléments du domaine microscopique Λ) et la contrainte (ou la déformation) macroscopique.

L'étape d'homogénéisation est assez simple puisque l'on définit les grandeurs macroscopiques (contrainte Σ , déformation \mathbf{E} , flux thermique Φ_{th} , gradient thermique \mathbf{G}) à partir de leurs homologues microscopiques par leurs moyennes volumiques sur le VER Λ (dans le cas où il n'y a pas d'endommagement) :

$$\Sigma = \langle \sigma(\mathbf{x}) \rangle = \frac{1}{|\Lambda|} \int_{\Lambda} \sigma(\mathbf{x}) d\Lambda \quad (3.22)$$

$$\mathbf{E} = \langle \epsilon(\mathbf{x}) \rangle = \frac{1}{|\Lambda|} \int_{\Lambda} \epsilon(\mathbf{x}) d\Lambda \quad (3.23)$$

$$\Phi_{th} = \langle \phi_{th}(\mathbf{x}) \rangle = \frac{1}{|\Lambda|} \int_{\Lambda} \phi_{th}(\mathbf{x}) d\Lambda \quad (3.24)$$

$$\mathbf{G} = \langle \mathbf{g}(\mathbf{x}) \rangle = \frac{1}{|\Lambda|} \int_{\Lambda} \mathbf{g}(\mathbf{x}) d\Lambda \quad (3.25)$$

où $|\Lambda|$ désigne le volume du VER Λ (surface en 2D).

La réelle difficulté réside dans l'étape de localisation qui est délicate dans le cas de matériaux possédant un comportement thermomécanique non linéaire.

3.1.5 Passages micro-macro dans le cas des matériaux thermoélastiques

Le calcul d'homogénéisation est réaliser dans le but d'obtenir les propriétés thermomécaniques homogénéisées suivantes :

- Pour le problème thermique : le tenseur de conductivité thermique homogénéisée \mathbf{k}^{Hom} .
- Pour le problème mécanique : le tenseur de comportement homogénéisé du matériau \mathbf{C}^{Hom} et le tenseur de dilatation thermique homogénéisé α^{Hom} .

On présente dans les sections suivantes les différentes étapes à réaliser pour l'homogénéisation de ces propriétés thermomécaniques. On désigne par Λ le volume élémentaire représentatif (VER) et par $|\Lambda|$ le volume (surface en 2D) du domaine Λ .

Homogénéisation du tenseur de conductivité thermique

Du fait de l'hétérogénéité microscopique, la modélisation thermique macroscopique nécessite de calculer une conductivité thermique homogénéisée qui dépend des détails microscopiques (arrangement des fibres dans le volume microscopique représentatif en chaque point du domaine macroscopique).

On suppose que la conductivité thermique microscopique $\mathbf{k}(\mathbf{x})$ est connue en chaque point \mathbf{x} du domaine microscopique Λ .

Pour le problème thermique, on définit la température par T , le gradient thermique par ∇T et le vecteur du flux thermique par \mathbf{q} . Le vecteur du flux thermique et le gradient de température sont reliés par la loi de Fourier, qui s'écrit :

$$\mathbf{q}(\mathbf{x}) = -\mathbf{k}(\mathbf{x}) \nabla T(\mathbf{x}) \quad (3.26)$$

Trois types de conditions aux limites peuvent être utilisées pour l'étude de la conductivité thermique homogénéisée :

- Gradient de température uniforme sur la frontière (GTU) :

$$T = \mathbf{G} \cdot \mathbf{x} \quad \forall \mathbf{x} \in \partial\Lambda \quad (3.27)$$

\mathbf{G} est un vecteur constant indépendant de \mathbf{x} . Ceci implique que :

$$\langle \nabla T \rangle = \frac{1}{|\Lambda|} \nabla T d\Lambda_i = \mathbf{G} \quad (3.28)$$

Le vecteur flux macroscopique est défini par la moyenne spatiale :

$$\mathbf{Q} \equiv \langle \mathbf{q}(\mathbf{x}) \rangle = \frac{1}{|\Lambda|} \int_{\Lambda} \mathbf{q} d\Lambda \quad (3.29)$$

- Flux thermique uniforme à la frontière (FTU) :

$$\mathbf{q} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{Q} \cdot \mathbf{x} \quad \forall \mathbf{x} \in \partial\Lambda \quad (3.30)$$

\mathbf{Q} est un vecteur constant indépendant de \mathbf{x} . Ceci implique que :

$$\langle \mathbf{q} \rangle = \frac{1}{|\Lambda|} \int_{\Lambda_i} \mathbf{q} d\Lambda_i = \mathbf{Q} \quad (3.31)$$

Le gradient de température macroscopique est donné par la moyenne spatiale :

$$\mathbf{G} \equiv \langle \nabla T \rangle = \frac{1}{|\Lambda|} \int_{\Lambda} \nabla T d\Lambda \quad (3.32)$$

- Conditions aux limites périodiques (PERIODIC) : le champ de température prend alors la forme :

$$T = \mathbf{G} \cdot \mathbf{x} + t \quad \forall \mathbf{x} \in \partial\Lambda \quad (3.33)$$

La température de fluctuation t est périodique.

Des tenseurs de concentration \mathbf{A}_{th} et \mathbf{B}_{th} existent tels que :

$$\nabla T(\mathbf{x}) = \mathbf{A}_{th}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{G} \quad \text{et} \quad \mathbf{q}(\mathbf{x}) = \mathbf{B}_{th}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{Q} \quad (3.34)$$

pour les problèmes GTU et FTU respectivement.

Pour le problème GTU on a alors :

$$\mathbf{Q} = \langle \mathbf{q}(\mathbf{x}) \rangle = \langle -\mathbf{k}(\mathbf{x}) \nabla T(\mathbf{x}) \rangle = \langle -\mathbf{k}(\mathbf{x}) \mathbf{A}_{th}(\mathbf{x}) \mathbf{G} \rangle \quad (3.35)$$

Soit :

$$\mathbf{Q} = \langle -\mathbf{k}(\mathbf{x}) \mathbf{A}_{th}(\mathbf{x}) \rangle \mathbf{G} \quad (3.36)$$

On peut donc définir le tenseur de conductivité thermique homogénéisée :

$$\mathbf{k}_G^{Hom} = \langle -\mathbf{k}(\mathbf{x}) \mathbf{A}_{th}(\mathbf{x}) \rangle \quad (3.37)$$

Pour le problème FTU on a :

$$\nabla T(\mathbf{x}) = -(\mathbf{k}(\mathbf{x}))^{-1} (\mathbf{B}_{th}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{Q}) \quad (3.38)$$

D'où :

$$\langle \nabla T(\mathbf{x}) \rangle = \left\langle -(\mathbf{k}(\mathbf{x}))^{-1} (\mathbf{B}_{th}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{Q}) \right\rangle = \left\langle (\mathbf{k}(\mathbf{x}))^{-1} (\mathbf{B}_{th}(\mathbf{x})) \right\rangle \mathbf{Q} \quad (3.39)$$

D'où :

$$\mathbf{Q} = \frac{\langle \nabla T(\mathbf{x}) \rangle}{-\langle (\mathbf{k}(\mathbf{x}))^{-1} (\mathbf{B}_{th}(\mathbf{x})) \rangle} = \mathbf{k}_Q^{Hom} \langle \nabla T(\mathbf{x}) \rangle \quad (3.40)$$

On définit donc pour le problème FTU la conductivité thermique homogénéisée par :

$$\mathbf{k}_Q^{Hom} = \frac{1}{-\langle (\mathbf{k}(\mathbf{x}))^{-1} (\mathbf{B}_{th}(\mathbf{x})) \rangle} \quad (3.41)$$

Homogénéisation en mécanique

La loi de comportement étant élastique, il n'est pas nécessaire d'utiliser les conditions limites en déplacements macroscopiques pour homogénéiser le tenseur de comportement du matériau dans le domaine microscopique Λ .

Le problème à résoudre pour l'homogénéisation en mécanique dans le domaine microscopique Λ , à l'instant t s'écrit :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \text{div}(\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t)) = 0 & \forall \mathbf{x} \in \Lambda \\ \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{C}(\mathbf{x}, t) : \left(\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{x}, t) - \left(\boldsymbol{\epsilon}^{th}(\mathbf{x}, t) + \boldsymbol{\epsilon}^{crist}(\mathbf{x}, t) \right) \right) & \forall \mathbf{x} \in \Lambda \\ \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2} \left(\nabla \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) + \nabla \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)^T \right) & \forall \mathbf{x} \in \Lambda \\ \boldsymbol{\epsilon}^{th}(\mathbf{x}, t) = \boldsymbol{\alpha}^{th}(\mathbf{x}, t) \Delta T(\mathbf{x}, t) & \forall \mathbf{x} \in \Lambda \\ \boldsymbol{\epsilon}^{crist}(\mathbf{x}, t) = \left(\frac{\rho(\mathbf{x}, t - dt)}{\rho(\mathbf{x}, t)} \right)^{\frac{1}{3}} - 1 & \forall \mathbf{x} \in \Lambda \\ \langle \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{x}, t) \rangle = \frac{1}{|\Lambda|} \int_{\Lambda} \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{x}, t) d\Lambda = \mathbf{E}(t) & \end{array} \right. \quad (3.42)$$

Le comportement homogène équivalent est alors défini par la relation suivante entre grandeurs moyennes :

$$\langle \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t) \rangle = \frac{1}{|\Lambda|} \int_{\Lambda} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t) d\Lambda = \mathbf{C}^{Hom}(t) : \left(\mathbf{E}(t) - \boldsymbol{\alpha}^{Hom}(t) \Delta T^{Hom}(t) - \mathbf{E}^{crist}(t) \right) \quad (3.43)$$

Découplage du problème

Compte-tenu de la linéarité du comportement, on peut appliquer le principe de superposition. La résolution du problème peut être décomposée en deux étapes relativement aux chargements élémentaires suivants (figure 3.5) :

1. $\mathbf{E}(t) \neq 0, \Delta T^{Hom}(t) = 0, \mathbf{E}^{crist}(t) = 0$ qui correspond à un chargement mécanique pur imposé,
2. $\mathbf{E}(t) = 0, \Delta T^{Hom}(t) \neq 0, \mathbf{E}^{crist}(t) = 0$ qui correspond à un chargement thermique pur imposé sans calculer le terme de cristallisation

Ainsi, on effectue successivement :

- $\mathbf{E}(t) \neq 0, \Delta T^{Hom}(t) = 0, \mathbf{E}^{crist}(t) = 0$ chargement mécanique pur imposé

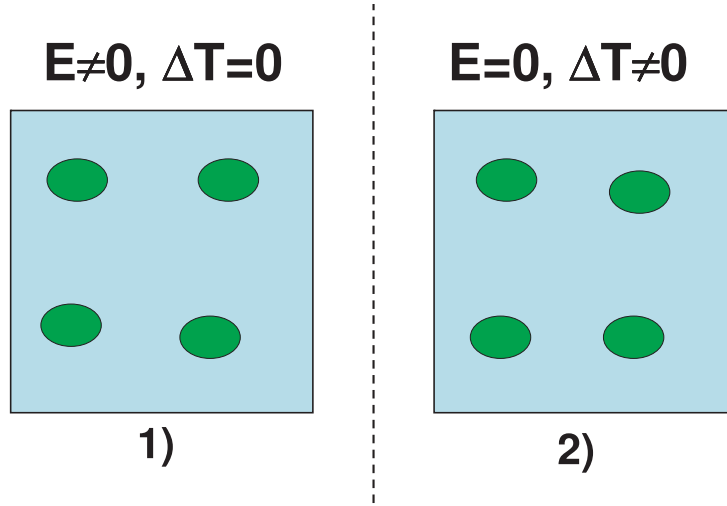


FIGURE 3.5 – Homogénéisation du tenseur de comportement (1) et du tenseur de dilatation thermique (2) : découplage du problème

Dans un premier temps, la résolution du problème se fait donc pour un chargement purement mécanique, et permet d'obtenir le tenseur de comportement homogénéisé $\mathbf{C}^{Hom}(t)$ par la relation :

$$\Sigma^e = \langle \sigma^e \rangle = \frac{1}{|\Lambda|} \int_{\Lambda} \sigma^e(\mathbf{x}, t) d\Lambda = \mathbf{C}^{Hom}(t) : \mathbf{E}(t) \quad (3.44)$$

où $\sigma^e(\mathbf{x}, t)$ est la solution du problème n°1 associé $\Delta T^{Hom}(t) = 0$ et $\mathbf{E}^{cris}(t) = 0$. On introduit alors le tenseur de localisation du 4ème ordre, $\mathbf{A}(\mathbf{x}, t)$ défini par :

$$\epsilon^e(\mathbf{x}, t) = \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) : \mathbf{E}(t) \quad \forall \mathbf{x} \in \Lambda \quad (3.45)$$

où $\epsilon^e(\mathbf{x}, t)$ est la déformation solution du problème n°1 associé à un chargement mécanique. La relation de comportement homogène équivalente s'écrit alors :

$$\Sigma^e(t) = \frac{1}{|\Lambda|} \int_{\Lambda} \epsilon^e(\mathbf{x}, t) d\Lambda = \langle \mathbf{C}(\mathbf{x}, t) : \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) : \mathbf{E}(t) \rangle = \mathbf{C}^{Hom}(t) : \mathbf{E}(t) \quad (3.46)$$

On a alors la relation suivante :

$$\mathbf{C}^{Hom}(t) = \langle \mathbf{C}(\mathbf{x}, t) : \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) \rangle \quad (3.47)$$

On applique ensuite le deuxième chargement :

- $\mathbf{E}(t) = 0, \Delta T^{Hom}(t) \neq 0, \mathbf{E}^{cris}(t) = 0$ chargement thermique pur imposé sans calculer le terme de cristallisation

La résolution du problème avec $\mathbf{E}(t) = 0, \Delta T^{Hom}(t) \neq 0, \mathbf{E}^{cris}(t) = 0$ permet de caractériser le tenseur de dilatation thermique homogénéisé $\alpha^{Hom}(t)$ avec :

$$\Sigma^{th}(t) = \frac{1}{|\Lambda|} \int_{\Lambda} \sigma^{th}(\mathbf{x}, t) d\Lambda = -\mathbf{C}^{Hom}(t) : \alpha^{Hom}(t) \Delta T \quad (3.48)$$

où $\sigma^{th}(\mathbf{x}, t)$ est la solution du problème n°2.

3.2 Description de la méthode de modélisation

Nous présentons la démarche de modélisation [CAL⁺08, LBLC07, LBB⁺06, LBC07a, LBC07b, LBB⁺07, CAL⁺07]. Il est à noter que la méthode a été entièrement développée en langage C au cours de la thèse.

3.2.1 Motivations

L'objectif de la démarche est de permettre une modélisation aux deux échelles microscopique et macroscopique du problème de l'apparition des contraintes résiduelles. Le calcul à l'échelle microscopique va nous permettre de réaliser le transfert de l'information microscopique du matériau à l'échelle macroscopique, par l'utilisation d'une méthode d'homogénéisation des propriétés thermomécaniques du matériau.

3.2.2 Hypothèses

On considère que les temps de relaxation visqueux sont supérieurs au temps caractéristiques du procédé. Ainsi, une loi de comportement thermoélastique est utilisée dans le modèle développé. On réalise l'analyse avec l'hypothèse des déformations planes. En effet, comme on le verra dans le chapitre 4, la direction perpendiculaire au plan d'analyse peut être considérée comme infiniment grande.

3.2.3 Principes généraux

La simulation du procédé à l'échelle macroscopique requiert la connaissance des paramètres thermiques homogénéisés à chaque point du domaine et à chaque pas de temps. Par ailleurs, une modélisation microscopique est nécessaire pour calculer les propriétés thermomécaniques homogénéisées (qui seront utilisées dans l'analyse macroscopique) de même que pour calculer l'évolution des champs thermomécaniques microscopiques permettant de déterminer le critère de l'apparition de défauts. Ainsi, les analyses aux échelles microscopiques et macroscopiques doivent être effectuées simultanément : l'analyse macroscopique dans l'ensemble du domaine macroscopique et l'analyse microscopique dans certains domaines représentatifs, à partir desquels les propriétés homogénéisées pourront être interpolées dans l'ensemble du domaine macroscopique. De ce fait, la stratégie proposée n'est pas uniquement une technique d'homogénéisation, mais une analyse multi-échelle où l'analyse microscopique permet également de calculer les propriétés thermomécaniques homogénéisées (et ainsi les propriétés thermomécaniques à l'échelle macroscopique). Cette modélisation est moins fine qu'une analyse entièrement microscopique comme celle développée dans ([LLD01, LN03, FR91]) en utilisant un calcul à haute performance (calcul par décomposition de domaine sur des plateformes parallèles). D'un autre côté, la méthode se différencie également des techniques d'homogénéisation multi-échelles classiques pour lesquelles le domaine microscopique est utilisé uniquement pour calculer les propriétés homogénéisées mais pas pour définir l'évolution dans le temps complète des champs microscopiques. De plus il est bien connu que ces dernières techniques ont de sérieuses difficultés pour représenter les conditions aux limites réelles. Dans la technique présentée ici les domaines microscopiques sont connectés fortement au maillage macroscopique, en fait ils sont construits à partir de certains éléments finis du maillage macroscopique. Ainsi, la connexion entre les deux échelles est très simple. Bien sûr dans le cas d'une éventuelle incompatibilité entre les maillages microscopique et macroscopique, l'utilisation de l'approche Arlequin [BD98b] ou de n'importe quelle méthode de superposition

(S-FEM) [TO04] pourrait être utilisée. Il faut noter que le choix particulier de domaines microscopiques permet de réaliser :

- i l'imposition des conditions aux limites réelles sur leurs frontières ;
- ii calculer l'évolution en temps complète des champs thermomécaniques microscopiques ;
- iii calculer les propriétés thermomécaniques homogénéisées relatives aux éléments allouant les domaines microscopiques, pour lesquels ces paramètres peuvent être interpolés n'importe où dans le domaine macroscopique.

3.2.4 Description géométrique

Les zones microscopiques doivent être représentatives, et de ce fait elles doivent contenir au moins le ruban qui sera déposé et le précédent (figure 3.6).

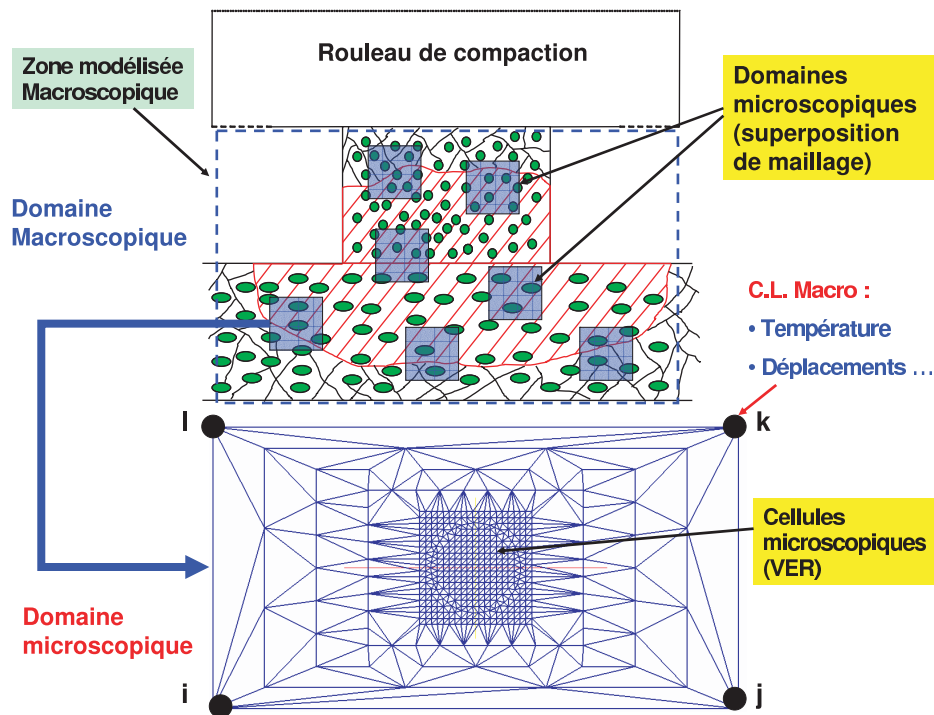


FIGURE 3.6 – Définition de la zone modélisée

Premièrement, on définit les emplacements des domaines microscopiques qui nous permettrons de décrire l'état microscopique du composite durant le procédé. Un maillage est assigné à chaque domaine microscopique. L'importante différence de densité nodale entre les zones microscopique et macroscopique est prise en compte par l'utilisation de la méthode « éléments naturels » considérée pour l'interpolation des différents champs [SMB98, YCLR05, YRLC04]. Les domaines microscopiques sont couplés aux domaines macroscopiques par l'intermédiaire de leurs frontières. Soit Ω le domaine d'intérêt, *i.e.* le domaine macroscopique entier. On définit dans ce domaine macroscopique les éléments $Z_{i=1...N}$ pour lesquels on définit un domaine microscopique étendu dans le but de déterminer l'état microscopique et les propriétés thermomécaniques homogénéisées (figure 3.7a). Un maillage indépendant $\Gamma_{i=1...N}$ (domaine microscopique étendu) est construit pour chaque élément macroscopique $Z_{i=1...N}$ au moyen de la méthode des éléments naturels contraints (C-NEM) (figure 3.7b). Un modèle microscopique $(\Lambda_i)_{i=1...N}$ est construit dans

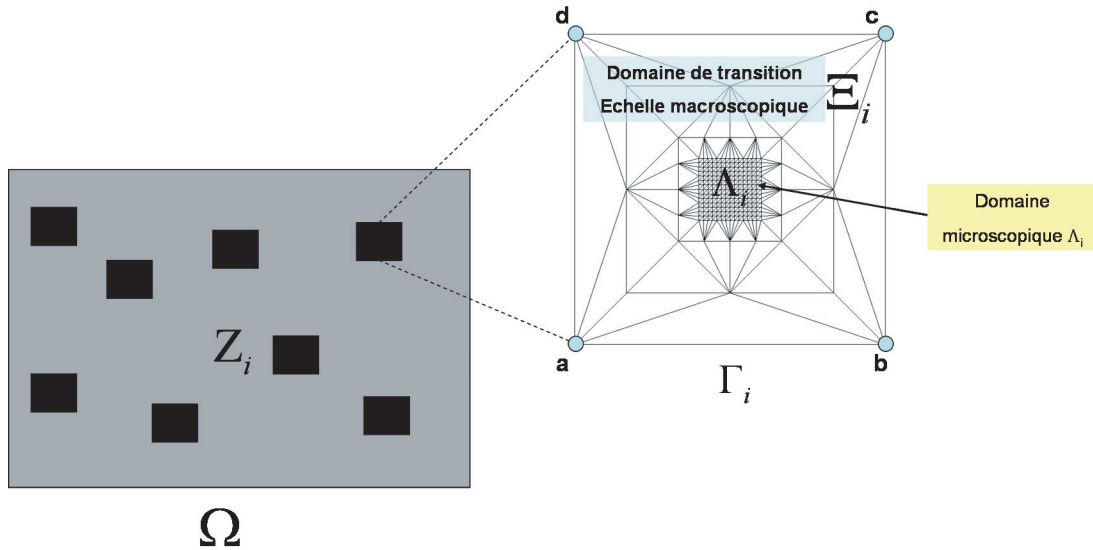


FIGURE 3.7 – Définition des domaines

chaque maillage $\Gamma_{i=1\dots N}$. Chaque Λ_i est un domaine microscopique. Ces domaines sont entourés d'un domaine de transition Ξ_i (figure 3.7b). Le transfert entre l'échelle macroscopique et l'échelle microscopique est réalisé par les quatre nœuds de l'élément macroscopique Z_i (figure 3.7b) et le domaine de transition $\Xi_{i=1\dots N}$ qui entoure le volume élémentaire représentatif $(\Lambda_i)_{i=1\dots N}$. Les propriétés thermomécaniques sont supposées être parfaitement définies à l'échelle microscopique dans chacun des domaines microscopiques (Λ_i). Dans le domaine de transition on suppose que les variations spatiales des propriétés thermomécaniques moyennées (ou macroscopiques) sont suffisamment faibles.

3.2.5 Couplage entre les échelles macroscopique et microscopique : méthode multi-pas en temps

On réalise un couplage entre les échelles microscopique et macroscopique au moyen d'une méthode multi-pas en temps. Les approches multi-pas en temps permettent le couplage de différentes grilles temporelles [BYM79, BSL84, LB82, GC01].

Principe de la méthode

Après chaque calcul macroscopique, on réalise une partition temporelle de l'échelle microscopique dans l'intervalle de temps macroscopique considéré. Ainsi, si le calcul macroscopique a été effectué dans l'intervalle de temps $\{t_i, t_i + \Delta t_{Macro}\}$, $i \in [1, \dots, N_{Macro}]$, on réalise une partition de l'intervalle de temps macroscopique $\{t_i, t_i + \Delta t_{Macro}\}$, $i \in [1, \dots, N_{Macro}]$ en p_{micro} intervalles de temps microscopiques définis par le pas de temps Δt_{micro} tel que :

$$p_{micro} \Delta t_{micro} = \Delta t_{Macro} \quad (3.49)$$

Le principe de la partition temporelle de l'échelle microscopique est représenté figure 3.8.

Couplage entre les deux échelles

La méthode multi-pas en temps permet de réaliser un couplage entre les échelles microscopique et macroscopique.

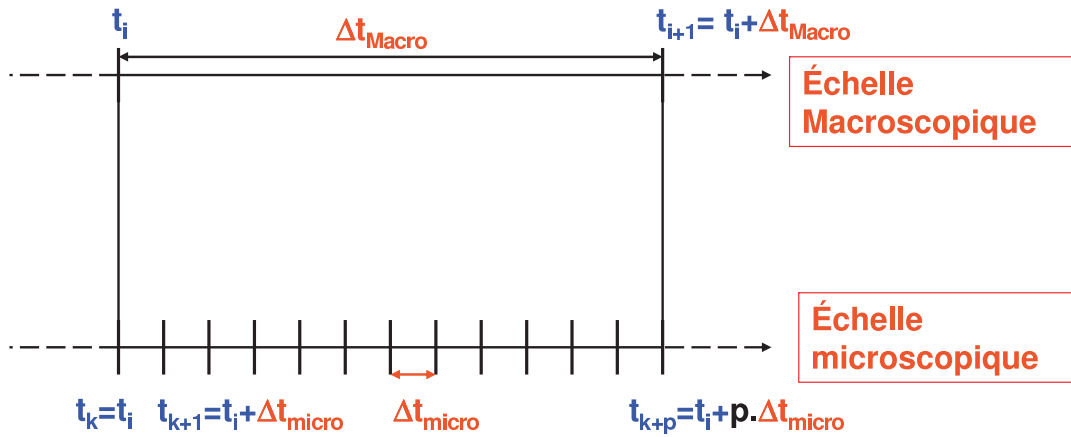


FIGURE 3.8 – Méthode à multi-pas de temps

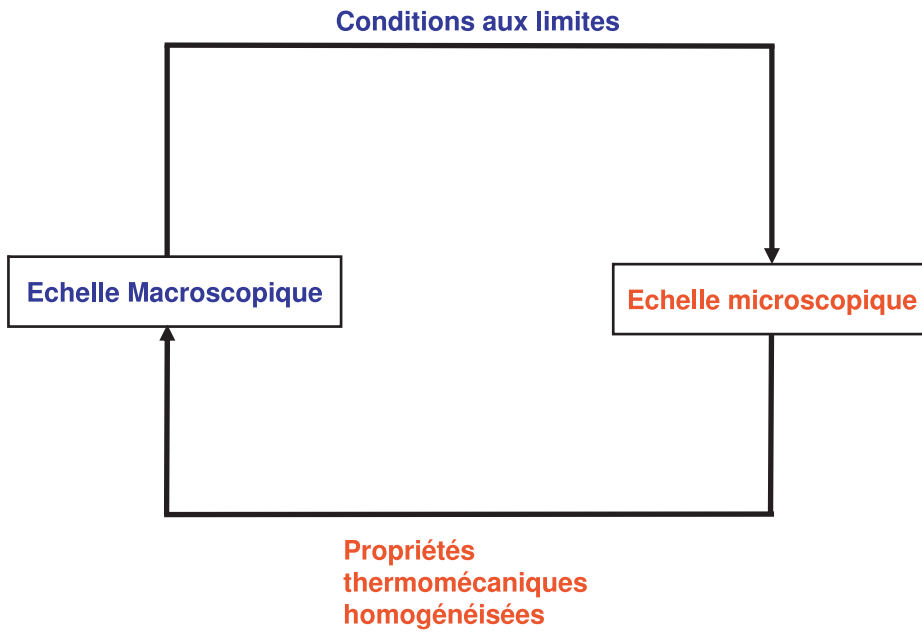


FIGURE 3.9 – Couplage entre les échelles microscopique et macroscopique

En effet, le calcul macroscopique est utilisé pour la modélisation à l'échelle microscopique par :

- l'introduction des conditions aux limites macroscopiques aux bornes de chaque domaine microscopique étendu Γ_i , $i \in \{N_{micro}\}$

Le calcul à l'échelle microscopique est utilisé pour la modélisation à l'échelle macroscopique par :

- l'homogénéisation des propriétés thermomécaniques du matériau pour en vue de leur introduction à l'échelle macroscopique

3.2.6 Schéma général

L'algorithme général de calcul réalise une description aux échelles macroscopique et microscopique du matériau par la réalisation des calculs successifs dans les domaines microscopique étendus Γ_i , $i \in \{1, \dots, N_{micro}\}$, après chaque calcul à l'échelle macroscopique. L'algorithme général de la démarche est présenté dans la section 3.6.

Dans la section suivante nous détaillons les différentes étapes de la modélisation :

- Modélisation à l'échelle macroscopique ;
- Modélisation à l'échelle microscopique ;
- Stratégie d'homogénéisation utilisée ;
- Description du schéma algorithmique.

3.3 Modélisation à l'échelle macroscopique

Dans cette section nous présentons la démarche de modélisation à l'échelle macroscopique. Le matériau considéré est le composite APC-2, comme présenté dans le chapitre 1 du manuscrit.

3.3.1 Description géométrique

Comme nous l'avons expliqué dans l'introduction, la machine de drapage et de consolidation en continu de thermoplastiques ATP permet de fabriquer des pièces composites à matrice thermoplastique par soudage de plis pré-imprégnés les uns sur les autres.

Le procédé permet de souder en continu les plis pré-imprégnés pour fabriquer des plaques. La tête de la machine (figure 3.10) permet de déposer les bandes les unes à côté des autres (avec un recouvrement possible) pour former une couche aux dimensions choisies puis poursuit la fabrication de la plaque en superposant plusieurs bandes dans l'épaisseur (figure 3.11). La bobine de pré-imprégné se déroule et passe au travers d'un guide avant que la bande ne soit déposée sur l'outillage plan. Deux torches qui soufflent de l'azote chaud permettent de chauffer le pré-imprégné au niveau de sa surface de contact avec la plaque au moment où il est déposé. Un rouleau presseur fixé sur la tête de la machine passe alors en continu sur la bande qui vient d'être posée. Les paramètres ajustables de la machine sont : la vitesse de dépose du pli, la température des torches, la température du rouleau, le flux d'azote et la pression exercée par le rouleau. Pour modéliser l'apparition des contraintes résiduelles, on s'intéresse à la phase de refroidissement des rubans de préimprégné, après le passage de la torche. On modélise perpendiculairement au sens de la dépose. En effet, on peut tenir compte ainsi de l'anisotropie de l'empilement. De plus, la surface soumise au refroidissement est très faible.

Un ruban de préimprégné d'APC2 est généralement de longueur 1 pouce=2.54 cm et d'épaisseur 150 μm (figures 3.12, 3.13 et 3.14).

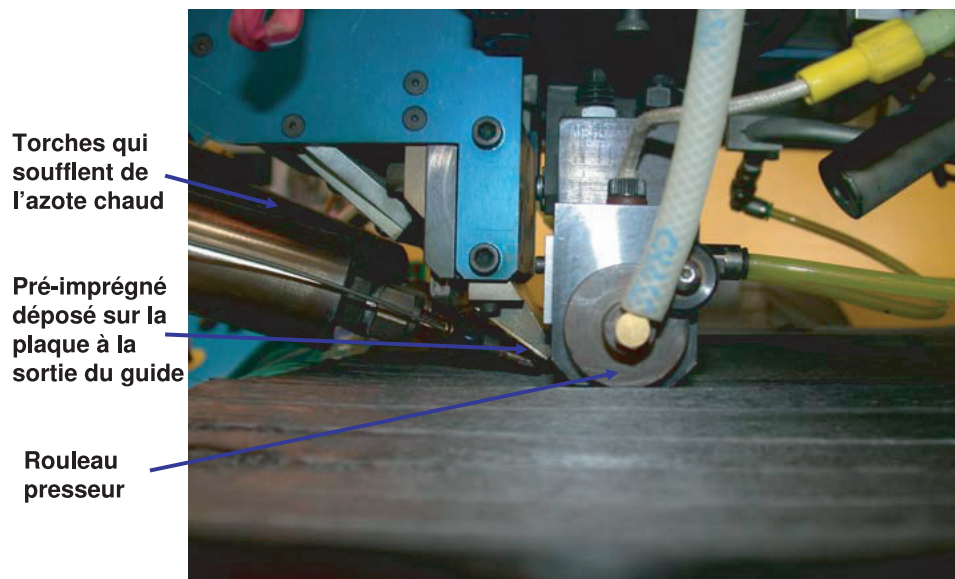


FIGURE 3.10 – Tête de la machine

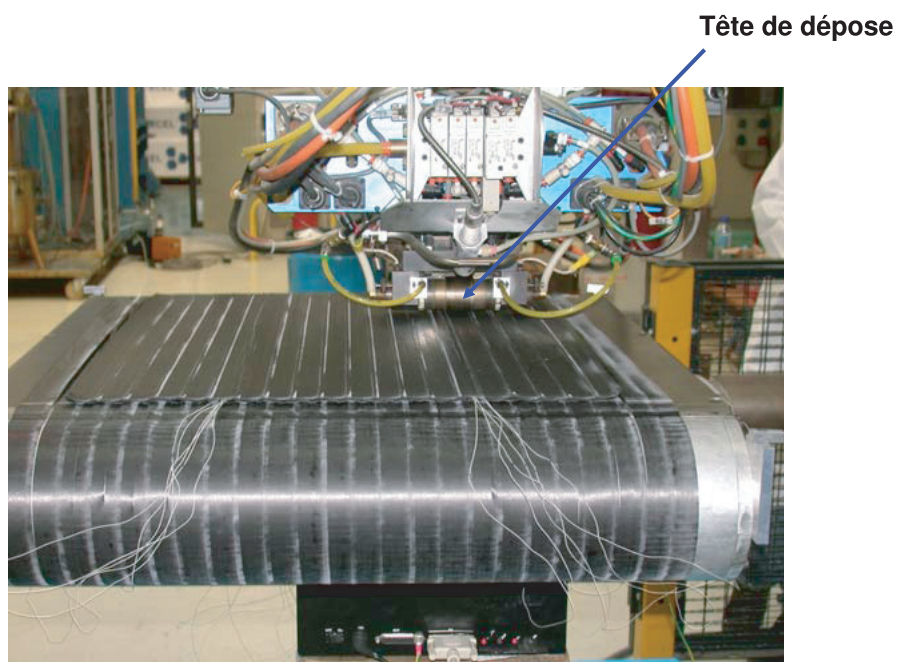


FIGURE 3.11 – Machine en fonctionnement [Nic05]



FIGURE 3.12 – Rouleau de composite APC-2



FIGURE 3.13 – Ruban de composite APC-2

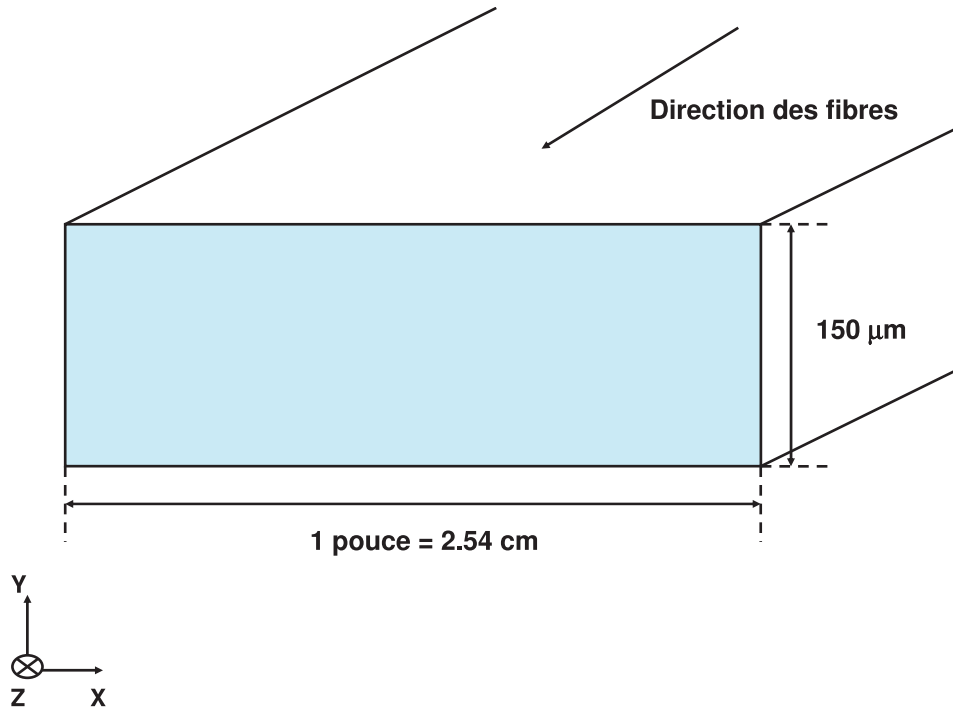


FIGURE 3.14 – Dimensions d'un pli de préimprégné dans le sens des fibres de carbone

3.3.2 Modélisation thermique

La modélisation thermique va nous permettre de simuler l'évolution des champs de température dans une pièce lors de sa fabrication avec le procédé Drapcocot, plus précisément durant la phase de refroidissement. Notamment, l'histoire thermique à l'interface entre deux plis sera prédite en fonction des paramètres du procédé.

Cette modélisation thermique prendra en compte les phénomènes de cristallisation et de fusion du matériau. L'évolution du taux de cristallinité en un point quelconque de la pièce pourra alors être suivie. La variation du taux de cristallinité final dans un pli est difficile à suivre expérimentalement, le modèle peut ainsi permettre de quantifier les éventuelles inhomogénéités dans l'épaisseur d'un pli.

L'équation thermique à résoudre a été présentée dans (3.15). Les expressions de $\Pi_{cristallisation}$ et de Π_{fusion} à l'échelle macroscopique sont présentées ci-après.

Expression de $\Pi_{cristallisation}$

Le terme source $\Pi_{cristallisation}$ s'exprime sous la forme :

$$\Pi_{cristallisation} = \frac{\partial h_c}{\partial t} \quad (3.50)$$

où $\frac{\partial h_c}{\partial t}$ est l'énergie libérée par le système lors de la cristallisation.

Il faut donc connaître à chaque moment l'énergie apportée ou libérée par le système en fonction de l'état de cristallisation. Ce terme peut être écrit de la façon suivante :

$$\frac{\partial h_c}{\partial t} = \rho(X_c) H_{lf} X_c^{max} \frac{\partial X_c(T, t)}{\partial t} \quad (3.51)$$

où $\rho(X_c)$ est la densité du matériau, fonction du taux de cristallisation ;
 H_{lf} est la chaleur latente de fusion ;
 X_c^{\max} est le taux maximal de cristallisation qui peut être atteint ;
 $X_c(T, t)$ est le taux de cristallisation relatif à l'instant t et à la température T .

A l'échelle macroscopique, dans le cas du composite, on doit ajouter également un coefficient dans l'équation (3.51) correspondant au taux en masse de matrice comprise dans le composite (soit $X_{\text{matrice}} = 0.32$ dans notre cas).

Une loi de type Avrami a été utilisée pour modéliser l'évolution de la cristallisation en fonction du temps :

$$X_c(T, t) = 1 - \exp(-K(T) t_c^n) \quad (3.52)$$

avec

$$K(T) = K_0 \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \quad (3.53)$$

où E_a est l'énergie d'activation du phénomène ;

n est l'exposant d'Avrami ;

t_c le temps à partir duquel le polymère cristallise.

Cette expression mathématique présente l'avantage d'être relativement simple. Il est à noter que l'application d'un modèle de type Ozawa [Oza71] est rendu difficile d'un point de vue numérique. En effet, l'interdépendance de la température et de sa dérivée rend la convergence de l'algorithme de Newton-Raphson souvent chaotique. Ce problème a déjà été mentionné dans la littérature [Vin99]. L'avantage de la modélisation en temps d'Avrami est qu'elle permet de s'affranchir de ces problèmes puisqu'il n'y a pas de couplage de la température avec sa dérivée.

Les coefficients des équations 3.52 et 3.53 sont donnés dans le tableau 3.1.

K_0	10^{30}
E_a (J/mol)	285000
n	2.6

TABLE 3.1 – Coefficient de l'équation de type Avrami obtenu à l'aide de mesures pyrométriques pour le PEEK [Lam04]

Expression de Π_{fusion}

Comme le montre par exemple un thermogramme obtenu en analyse enthalpique différentielle, la fusion d'un polymère apparaît de façon progressive, et non à une température constante, malgré des vitesses de chauffe lentes. Ainsi il est nécessaire, dans un modèle thermique, d'introduire progressivement le terme endothermique de fusion. D'où l'idée de « cinétique de fusion ». En effet il est généralement considéré que la fusion se décompose en deux phases (deux phénomènes physiques). Le premier terme est un terme thermodynamique qui traduit la destruction des cristaux c'est-à-dire l'éloignement des chaînes macromoléculaires les unes des autres. Le second est un terme de diffusion représentatif du réarrangement aléatoire des chaînes, c'est-à-dire leur perte d'orientation pour revenir à un état complètement amorphe. Malheureusement il est très difficile d'observer expérimentalement ces phénomènes et on peut espérer peut-être une compréhension très précise des phénomènes à l'échelle macromoléculaire grâce à la dynamique moléculaire.

Dans la littérature, les travaux s'intéressant à la cinétique de fusion sont très rares. Le modèle de Maffezzoli [MKN89] propose de décrire la cinétique de fusion des entités cristallines du PEEK sous la forme :

$$C_v(t) = C_v(t_{ini}) \left[1 - 0.5 \int_{t_{ini}}^t K dt \right]^2 \quad (3.54)$$

Avec t_{ini} le temps initial et C_v le taux de cristallinité volumique. K est décrit par la loi d'Arrhenius (3.53).

Maffezzoli et coll. [MKN89] utilisent alors cette équation entre 320°C et 345°C et les paramètres cinétiques sont déterminés pour l'APC-2 [DL85]. L'énergie d'activation relative à la fusion est $E_a = 397 \text{ kJ/mol}$ et la constante cinétique est $K = \exp(73) \text{ s}^{-1}$.

On utilise les notations suivantes :

$$\alpha = \frac{C_v(t)}{C_v(t_{ini})} = [1 - 0.5 K_0 A(t)]^2 \quad (3.55)$$

Avec :

$$A(t) = \int_{t_{ini}}^t \exp\left(\frac{-E_a}{R} \frac{1}{T(t)}\right) dt \quad (3.56)$$

Le taux de cristallinité relatif α décrit par le modèle doit varier entre 0 et 1. Pour que le modèle soit correct, il doit satisfaire à l'inégalité : $0.5 \cdot K_0 \cdot A(t) < 2$, c'est à dire $A(t) < 4/K_0$. En utilisant les valeurs numériques prédites par l'article, cette condition se traduit par $A(t) < 7.92 \cdot 10^{-32}$. Nous avons alors calculé à l'aide du logiciel *Mathematica* des valeurs de $A(t)$ pour différentes vitesses de chauffe. Pour une vitesse de chauffe de 40°C/min par exemple, nous constatons que cette condition n'est plus vérifiée à partir de $t = 2.24 \text{ min}$. Les calculs montrent que, après avoir diminué, le paramètre α augmente de façon injustifiée après un certain temps. On comprend alors que cette formulation n'est pas valable dans tous les cas. Ce modèle de cinétique de fusion est alors difficilement utilisable, nous n'en tiendrons pas compte.

Faute de modèle de fusion à notre connaissance dans la littérature, nous pouvons alors introduire au modèle thermique un terme source endothermique cohérent avec des données expérimentales sur le composite, comme présenté dans [Nic05].

Le pic de fusion est ainsi modélisé par une fonction de Laplace-Gauss pour décrire l'évolution de $d\alpha/dT$ en fonction de la température - i.e pour représenter les variations d'épaisseur des lamelles-. Elle est décrite par :

$$\frac{d\alpha}{dT} = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\Pi}} \exp\left(\frac{-(T-m)^2}{2\sigma^2}\right) \quad (3.57)$$

La loi de Gauss décrit bien l'évolution du pic de fusion avec les valeurs des constantes suivantes : $m = 343 \text{ K}$ et $\sigma = 7.9 \text{ K}$.

Le terme Π_{fusion} est alors calculé à partir de l'équation (3.57).

Conditions aux limites

Les conditions aux limites de ce problème thermique sur la frontière $\partial\Omega$ peuvent être de trois types différents. Elles résultent des phénomènes physiques de transfert de chaleur. On décompose la frontière du domaine en plusieurs parties disjointes :

$$\partial\Omega = \partial\Omega_{convection} \cup \partial\Omega_{rayonnement} \cup \partial\Omega_{temp} \quad (3.58)$$

- Convection sur $\partial\Omega_{\text{convection}}$

De la chaleur est échangée sur les surfaces libres $\partial\Omega_{\text{convection}}$ à cause du phénomène de convection. L'échange dû à la convection est quantifié par la relation :

$$(-kgradT) \cdot n = h_{\text{conv}} (T - T_{\text{ext}}) \text{ sur } \partial\Omega_{\text{convection}} \quad (3.59)$$

où h_{conv} est le coefficient de transfert de convection et T_{ext} la température extérieure.

- Rayonnement sur $\partial\Omega_{\text{rayonnement}}$

L'échange dû au rayonnement est quantifié par la relation :

$$(-kgradT) \cdot n = \epsilon\sigma (T^4 - T_{\text{ext}}^4) \text{ sur } \partial\Omega_{\text{rayonnement}} \quad (3.60)$$

- Température imposée sur $\partial\Omega_{\text{temp}}$

On peut enfin tout simplement imposer une température T_{imp} sur une partie $\partial\Omega_{\text{temp}}$ du bord du domaine :

$$T = T_{\text{imp}} \text{ sur } \partial\Omega_{\text{temp}} \quad (3.61)$$

Dans notre problème, lors de la phase de refroidissement, les conditions aux limites peuvent être modélisées comme présenté figure 3.15 :

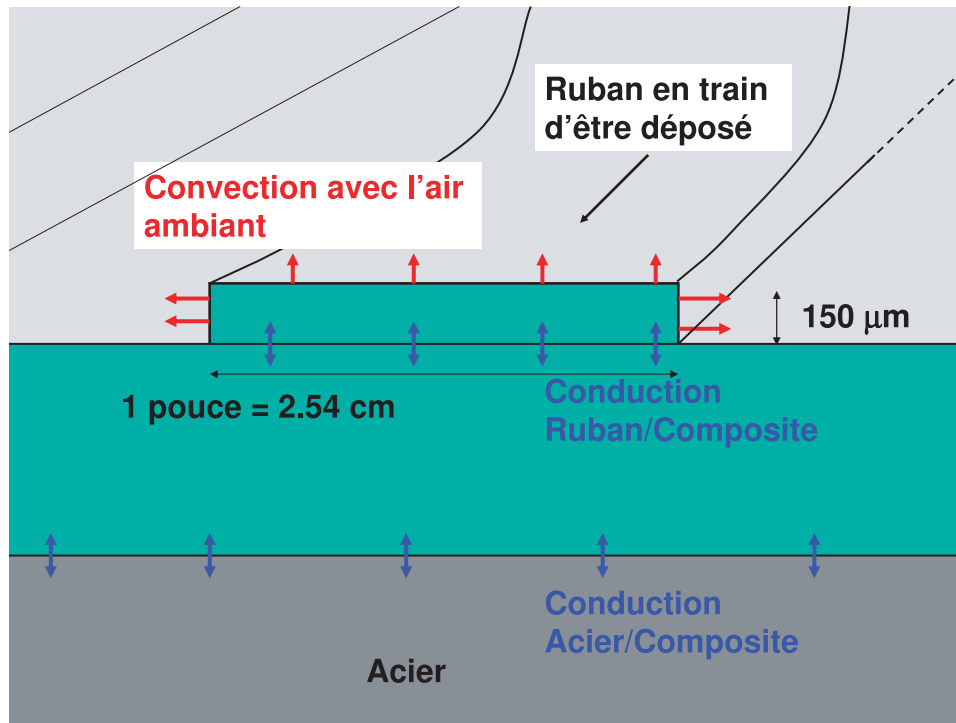


FIGURE 3.15 – Modélisation des conditions aux limites du problème thermique

Les conditions aux limites dans le cas de la phase de refroidissement se limitent donc à :

- Convection entre le ruban de préimprégné et l'air ambiant ;

- Conduction entre le ruban de préimprégné et le composite ;
- Conduction entre le composite et la couche d'acier de l'outillage.

En ce qui concerne le flux à la surface inférieure de la plaque, nous devons étudier en détail la modélisation des échanges thermiques entre la plaque et la couche d'acier de l'outillage.

L'outillage de Drapcocot est formé d'une plaque d'acier non chauffée sur laquelle le premier pli de composite va être posé. Les échanges thermiques entre l'acier et le pli à la surface duquel se déplace la torche peuvent être modélisés suivant deux méthodes.

La première consiste à modéliser le pli composite ainsi que la plaque d'acier en considérant que la température ambiante est imposée à la surface inférieure de l'acier. Nous réalisons alors un maillage classique (figure 3.16) pour le système (acier + composite) avec une condition de conduction entre les deux matériaux. Dans cette première méthode, le temps de calcul sera important

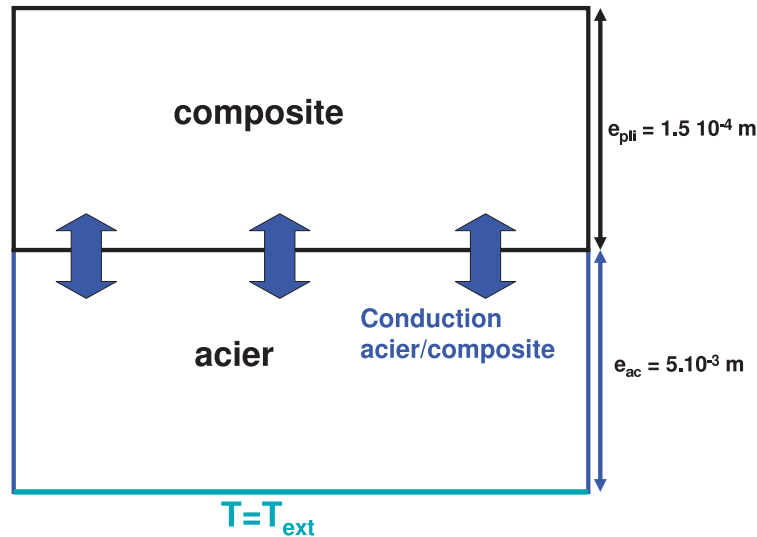


FIGURE 3.16 – Méthode I, maillage du système (acier + composite)

à cause de la conductivité élevée de l'acier. Pour pallier à cet inconvénient, nous proposons une seconde méthode qui consiste à supprimer la couche d'acier et à la remplacer par une condition de convection à l'interface composite/acier (figure 3.17). Le problème est alors de trouver une

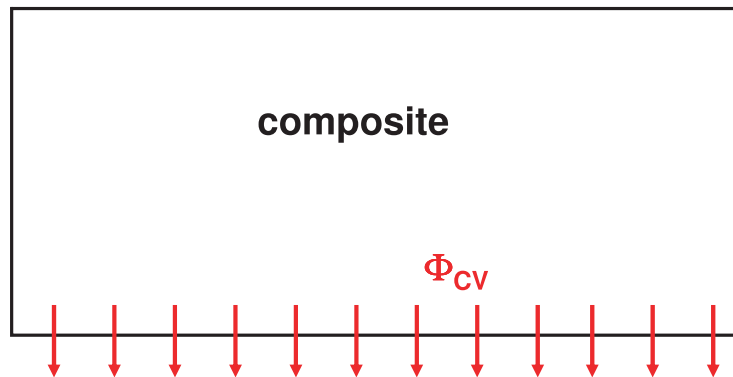


FIGURE 3.17 – Méthode II, l'acier est remplacé par un flux de convection

valeur de coefficient de convection h adéquate pour modéliser l'interface composite/acier. Nous allons donc, dans un premier temps, appliquer la première méthode afin de connaître le flux réel en conduction entre le composite et l'acier. L'objectif est alors de déterminer une valeur de $h_{acier/composite}$ réaliste pour appliquer par la suite la seconde méthode.

La figure 3.18 nous donne l'allure de ce flux en fonction de la température à l'interface acier/composite. On constate alors que lorsque la torche l'approche, la température à l'interface augmente et le flux du composite vers l'acier augmente de plus en plus c'est à dire que l'acier absorbe la chaleur. Puis, lorsque la torche s'éloigne, la température à l'interface diminue, le flux diminue alors jusqu'à devenir négatif. A ce moment on a donc un léger flux dirigé cette fois-ci de l'acier vers le composite, l'acier réchauffe alors le composite. On comprend alors que remplacer les échanges

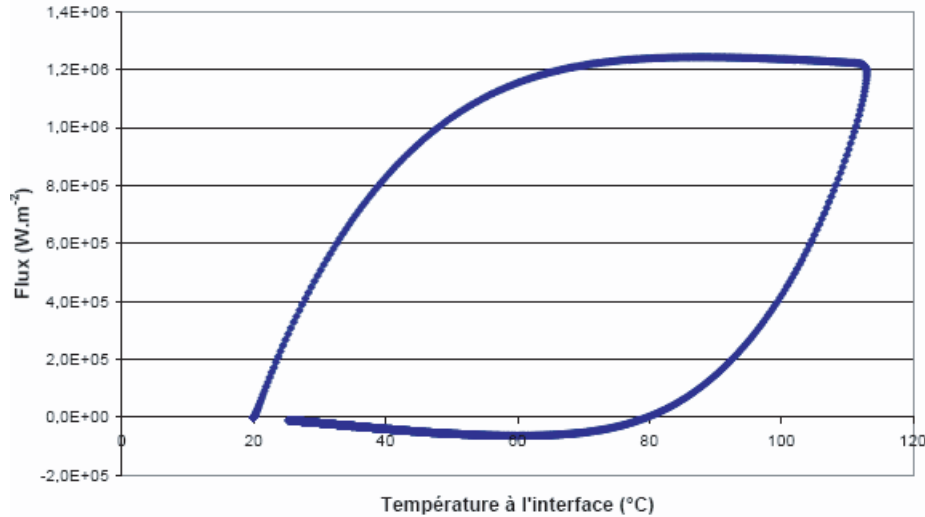


FIGURE 3.18 – Flux à l'interface acier/composite en fonction de la température [Nic05]

entre le composite et l'acier par un flux de convection avec un coefficient d'échange h , même s'il dépend de la température, n'est pas facile. De plus, dans la pratique, du fait des déformations induites par le procédé, une fine couche d'air se forme au cours du procédé entre le composite et le stratifié. L'évaluation de coefficients équivalents pour modéliser cette couche d'air est donc très difficile

A la vue de résultats expérimentaux, on s'aperçoit que dès que l'épaisseur de la plaque dépasse quelques plis, la plaque reste à une température moyenne d'environ 70°C . Il sera donc raisonnable de considérer dans notre modèle que la température initiale de la plaque est de $T_{ini} = 70^{\circ}\text{C}$.

Discretisation spatiale

Pour trouver le champ de température inconnu solution de (3.21), on remplace le domaine Ω par un ensemble de Nel éléments Ω_e (des triangles dans le cas bidimensionnel) construits à partir des points du domaine, les noeuds. Ceci permet de remplacer les intégrales des équations (3.21) par une sommation sur les éléments :

$$\int_{\Omega} () d\Omega = \sum_{e=1}^{Nel} \int_{\Omega_e} () d\Omega_e \text{ où } () \text{ représente la fonction à intégrer.}$$

De même, $\int_{\Gamma} () d\Gamma = \sum_{e=1}^{Nel} \int_{\Gamma_e} () d\Gamma_e$ où la partie de la frontière Γ_e correspond à l'ensemble des

faces extérieures appartenant à l'élément Ω_e , c'est à dire $\Gamma_e = \sum_{\text{face}_{ext} \in \Omega_e} \text{face}_{ext}$.

La formulation par éléments finis permet d'exprimer la température T à l'instant t en un point quelconque \mathbf{x} de la pièce sur Ω par rapport à des fonctions d'interpolation N_i associée au noeud i et de valeurs connues aux noeuds du domaine discrétisé Ω_h (température T_i au noeud i).

La température est donc approchée par :

$$T(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^{nbnoe} N_i(\mathbf{x}) T_i(t) \quad (3.62)$$

où $nbnoe$ correspond au nombre de noeuds du domaine maillé Ω_h et N_i sont les fonctions de base valant 1 au noeud i et nulle aux autres noeuds. Dans le cas d'une interpolation linéaire

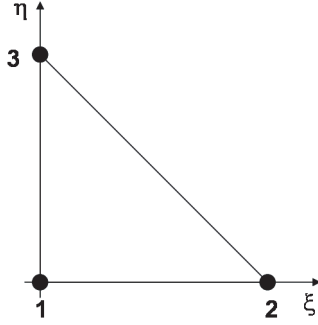


FIGURE 3.19 – Élément triangulaire à 3 noeuds

sur l'élément triangulaire Ω_e , les fonctions N_i sont des polynômes de degré 1 ($N_i \in P_1$) avec 3 inconnues T_i par élément Ω_e (cf. figure 3.19). Le problème discrétisé (3.21) se met alors sous la forme matricielle suivante :

$$\mathbf{C}_c \frac{\partial \mathbf{T}}{\partial t} + \mathbf{K}_c \mathbf{T} = \mathbf{Q} \quad (3.63)$$

- \mathbf{T} représente le vecteur solution, regroupant tous les noeuds à l'exception de ceux où T_i est imposée sur le bord Γ_1 .
- \mathbf{C}_c est la matrice de capacité, symétrique définie positive, définie par :

$$[C_c]_{ij} = \sum_{e=1}^{Nel} \int_{\Omega_e} \rho C_p N_i N_j d\Omega_e \quad (3.64)$$

- \mathbf{K}_c est la matrice de conductivité définie positive telle que :

$$[K_c]_{ij} = \sum_{e=1}^{Nel} \left(\int_{\Omega_e} k \text{grad} N_i \cdot \text{grad} N_j d\Omega_e + \int_{\partial\Omega_{conv}} h_{conv} N_i N_j d\partial\Omega_{conv} \right) \quad (3.65)$$

- \mathbf{Q} est le vecteur chargement :

$$Q_i = \sum_{e=1}^{Nel} \left(\int_{\Omega_e} \Pi_{cristallisation} N_i d\Omega_e + \int_{\partial\Omega_{conv}} h_{conv} T_{ext} d\partial\Omega_{conv} + \int_{\partial\Omega_{ray}} \epsilon \sigma (T_{ext} - T^4) d\partial\Omega_{ray} \right) \quad (3.66)$$

L'application de la méthode des éléments finis nous amène donc à résoudre le système (3.63) formé de $(nbnoe)$ équations à $(nbnoe)$ inconnues. Nous remarquons que cette équation différentielle du premier ordre est non linéaire avec les matrices $\mathbf{C}_c, \mathbf{K}_c$ (essentiellement au niveau des termes surfaciques) et le vecteur \mathbf{Q} thermo-dépendants.

Pour approcher la solution de ce système d'équations différentielles (3.63), il faut donc mettre en oeuvre un schéma numérique d'intégration en temps, nécessaire pour exprimer les dérivées temporelles.

Intégration temporelle

La résolution du système différentiel (3.63) est réalisée en considérant un schéma aux différences finies à trois pas de temps du second ordre, développée dans [Soy90]. Une présentation succincte de ce schéma est abordée ici ; le lecteur intéressé pourra se référer à la thèse de [Soy90] pour de plus amples détails. Le système (3.63) est discrétisé à l'instant t^* :

$$t^* = \alpha_1.t_{n-1} + \alpha_2.t_n + \alpha_3.t_{n+1} \quad (3.67)$$

où t_{n-1}, t_n, t_{n+1} sont trois pas de temps successifs séparés par les durées : $\Delta t_1 = t_n - t_{n-1}$ et $\Delta t_2 = t_{n+1} - t_n$. Les coefficients α_i sont choisis arbitrairement de manière à avoir la condition $\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 = 1$.

La température d'un point \mathbf{T}^* va s'écrire :

$$\mathbf{T}^* = \alpha_1 \mathbf{T}_{n-1} + \alpha_2 \mathbf{T}_n + \alpha_3 \mathbf{T}_{n+1} \quad (3.68)$$

La dérivée de \mathbf{T} est également exprimée à l'instant t^* avec un schéma à trois niveaux :

$$\frac{\partial \mathbf{T}^*}{\partial t} = \frac{\beta_1 \mathbf{T}_{n-1} + \beta_2 \mathbf{T}_n}{\Delta t_1} + \frac{\gamma_1 \mathbf{T}_n + \gamma_2 \mathbf{T}_{n+1}}{\Delta t_2} \quad (3.69)$$

Pour que $\frac{\partial \mathbf{T}^*}{\partial t}$ soit réellement l'expression d'une dérivée temporelle, il faut une relation entre les coefficients β et γ :

$$\gamma_1 = -\gamma_2 \text{ et } \beta_1 = -\beta_2 = \gamma_2 - 1 \quad (3.70)$$

Ce qui nous conduit à réécrire la dérivée :

$$\frac{\partial \mathbf{T}^*}{\partial t} = (1 - \gamma_2) \frac{\mathbf{T}_n - \mathbf{T}_{n-1}}{\Delta t_1} + \gamma_2 \frac{\mathbf{T}_{n+1} - \mathbf{T}_n}{\Delta t_2} \quad (3.71)$$

Nécessairement l'existence d'un schéma stable et consistant à l'ordre deux impose des relations entre les coefficients α, β et γ :

– Le schéma est inconditionnellement stable si :

$$\gamma_2 \geq \frac{1}{2} \text{ et } \alpha_1 \geq \frac{1}{2}(1 - \gamma_2) \quad (3.72)$$

– et consistant pour :

$$\begin{cases} \alpha_2 = \frac{3}{2} - 2.\alpha_1 - \gamma_2 \\ \alpha_3 = \alpha_1 + \gamma_2 - \frac{1}{2} \end{cases} \quad (3.73)$$

Comme les matrices \mathbf{C}_c , \mathbf{K}_c et les vecteurs \mathbf{Q} sont thermo-dépendants, une relation analogue doit être également introduite :

$$\mathbf{C}_c^* = \alpha_1 [\mathbf{C}_c]_{n-1} + \alpha_2 [\mathbf{C}_c]_n + \alpha_3 [\mathbf{C}_c]_{n+1} \quad (3.74)$$

Finalement, l'équation à résoudre (3.63) se ramène à l'écriture du système différencié en temps suivant :

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_c^* \frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{K}_c^* T^* &= \mathbf{Q}^* \\ \mathbf{C}_c^* \left[(1 - \gamma_2) \frac{T_n - T_{n-1}}{\Delta t_1} + \gamma_2 \frac{T_{n+1} - T_n}{\Delta t_2} \right] + \mathbf{K}_c^* (\alpha_1 T^{n-1} + \alpha_2 T^n + \alpha_3 T^{n+1}) &= \mathbf{Q}^* \\ \left(\mathbf{C}_c^* \frac{\gamma_2}{\alpha_3 \Delta t_2} + \mathbf{K}_c^* \right) T^* &= \mathbf{Q}^* + \mathbf{C}_c^* \left[\left(\frac{\alpha_1 \gamma_2}{\alpha_3 \Delta t_2} - \frac{\beta_1}{\Delta t_1} \right) T^{n-1} + \left(\frac{\alpha_2 \gamma_2}{\alpha_3 \Delta t_2} - \frac{\beta_2}{\Delta t_1} - \frac{\gamma_1}{\Delta t_2} \right) T^n \right] \end{aligned} \quad (3.75)$$

Grâce à la formulation générale (3.75), nous pouvons utiliser divers schémas d'intégration numérique, stables et consistants à l'ordre 2. Le Tableau 3.2 en dresse un récapitulatif. Nous choisissons le schéma de Dupont Implicite. Notons que l'initialisation se fait à l'aide du schéma de Crank-Nicholson, à un pas de temps.

	α_1	α_2	α_3	γ_2	β_1
Lees	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$
Dupont-Dupont	$\frac{1}{4}$	0	$\frac{3}{4}$	1	0
Dupont Implicite	0	0	1	$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$
Crank-Nicholson	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	1	0

TABLE 3.2 – Divers schémas numériques

Résolution numérique du système non linéaire

Le système (3.63) étant non linéaire, il peut être résolu par la méthode itérative de type Newton-Raphson [Fac03]. Le système (3.75) devant être résolu au temps $t = t^*$, nous avons avec $\mathbf{T} \equiv \mathbf{T}_{n+1}$:

$$\mathbf{R}^* = \mathbf{C}_c^* \left[(1 - \gamma_2) \frac{T_n - T_{n-1}}{\Delta t_1} + \gamma_2 \frac{T - T_n}{\Delta t_2} \right] + \mathbf{K}_c^* T^* - \mathbf{Q}^* = 0 \quad (3.76)$$

La méthode de Newton-Raphson implique la solution itérative de l'équation ci-dessus [Fac03]. L'inconnue température \mathbf{T} est calculée à chaque itération k :

$$\mathbf{T}^k = \mathbf{T}^{k-1} + \Delta\mathbf{T} \quad (3.77)$$

avec la correction $\Delta\mathbf{T}$ telle que :

$$\Delta\mathbf{T} = - [\mathbf{J}^{k-1}]^{-1} \mathbf{R}^{*(k-1)} \quad (3.78)$$

\mathbf{J} représente la matrice jacobienne définie par :

$$\mathbf{J} = \frac{\partial \mathbf{R}^*}{\partial \mathbf{T}} = \frac{\gamma_2}{\Delta t_2} \left[\mathbf{C}_c^* + \frac{d\mathbf{C}_c^*}{d\mathbf{T}} (\mathbf{T} - \mathbf{T}_n) \right] + \alpha_3 \mathbf{K}_c^* + \frac{d\mathbf{K}_c^*}{d\mathbf{T}} \mathbf{T}^* \quad (3.79)$$

puisque $\mathbf{T}^* = \alpha_1 \mathbf{T}_{n-1} + \alpha_2 \mathbf{T}_n + \alpha_3 \mathbf{T}_{n+1}$.

Le terme source \mathbf{Q} est supposé indépendant de la température et :

$$\left\{ \begin{array}{l} \left[\frac{d\mathbf{C}_c^*}{d\mathbf{T}} \right]_{ijk} = \frac{d[C_c^*]_{ik}}{dT_j} = \alpha_3 \frac{d[C_c]_{ik}}{dT_j} \\ \left[\frac{d\mathbf{K}_c^*}{d\mathbf{T}} \right]_{ijk} = \frac{d[K_c^*]_{ik}}{dT_j} = \alpha_3 \frac{d[K_c]_{ik}}{dT_j} \end{array} \right. \quad (3.80)$$

Accélération des temps de calcul

Les temps de calcul peuvent être réduits en utilisant la méthode de réduction vu dans les sections 2.2.2 et 2.2.3.

On suppose l'évolution du champ de température $[\mathbf{T}^*](\mathbf{x}, t)$ connue dans l'intervalle de temps $]0, t_s]$. Ce champ est défini aux noeuds \mathbf{x}_i d'un maillage spatial et aux temps $t^m = m \times \Delta t$, avec $i \in [1, \dots, N]$ et $m \in [0, \dots, s]$. On introduit la notation $[\mathbf{T}^*](\mathbf{x}_i, t^m) = [\mathbf{T}^*]^m(\mathbf{x}_i) \equiv [\mathbf{T}^*]_i^m(t^m)$. $[\mathbf{T}^*]^m$ définit le vecteur contenant les degrés de liberté aux noeuds (températures) au temps t^m . Si on définit la matrice \mathbf{Q} contenant l'histoire du champ discrétisé :

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} [\mathbf{T}^*]_1^1 & [\mathbf{T}^*]_1^2 & \dots & [\mathbf{T}^*]_1^M \\ [\mathbf{T}^*]_2^1 & [\mathbf{T}^*]_2^2 & \dots & [\mathbf{T}^*]_2^M \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ [\mathbf{T}^*]_N^1 & [\mathbf{T}^*]_N^2 & \dots & [\mathbf{T}^*]_N^M \end{pmatrix} \quad (3.81)$$

On construit la matrice de covariance \mathbf{Cov} :

$$\mathbf{Cov} = \mathbf{Q}\mathbf{Q}^T \quad (3.82)$$

$$\tilde{\phi}^T \mathbf{Cov} \phi = \alpha \tilde{\phi}^T \phi; \forall \tilde{\phi} \Rightarrow \mathbf{Cov} \phi = \alpha \phi \quad (3.83)$$

On résout le problème aux valeurs propres définie par l'équation (3.83) en sélectionnant les fonctions de forme ϕ_k associées aux valeurs propres appartenant à l'intervalle défini par la plus grande valeur propre et cette valeur divisée par une valeur suffisamment grande (par exemple 10^8). En pratique n est beaucoup plus petit que N . Ainsi, on peut essayer d'utiliser ces n fonctions de forme ϕ_k pour approximer la solution $[\mathbf{T}^*]^m(\mathbf{x})$, $\forall m$. Pour ceci on a besoin de définir la matrice $\mathbf{B} = [\phi_1 \dots \phi_n]$:

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} \phi_1(\mathbf{x}_1) & \phi_2(\mathbf{x}_1) & \dots & \phi_n(\mathbf{x}_1) \\ \phi_1(\mathbf{x}_2) & \phi_2(\mathbf{x}_2) & \dots & \phi_n(\mathbf{x}_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_1(\mathbf{x}_N) & \phi_2(\mathbf{x}_N) & \dots & \phi_n(\mathbf{x}_N) \end{pmatrix} \quad (3.84)$$

On suppose l'évolution du champ $[\mathbf{T}^*]$ décrite exactement dans l'intervalle de temps $]0, t_s]$ en utilisant la base réduite \mathbf{B} . Maintenant, on calcule l'évolution de la solution dans l'intervalle de temps $]t_s, t_{s+1}]$ en résolvant l'équation (2.35) et en utilisant la base d'approximation réduite définie par la matrice \mathbf{B} . En exprimant :

$$[\mathbf{T}^*]^{m+1} = \sum_{i=1}^{i=n} \zeta_i^{m+1} \phi_i = \mathbf{B}\zeta^{m+1} \quad (3.85)$$

l'équation (2.32) devient :

$$\mathbf{G}^m \mathbf{T}^{*m+1} = \mathbf{H}^m \Rightarrow \mathbf{G}^m \mathbf{B}\zeta^{m+1} = \mathbf{H}^m \quad (3.86)$$

Et en multipliant les deux termes par \mathbf{B}^T on obtient :

$$\mathbf{B}^T \mathbf{G}^m \mathbf{B}\zeta^{m+1} = \mathbf{B}^T \mathbf{H}^m \quad (3.87)$$

Où la taille de $\mathbf{B}^T \mathbf{G}^m \mathbf{B}$ est égale à $n \times n$, au lieu de $N \times N$. Lorsque $n \ll N$, comme lorsque c'est le cas dans les modèles physiques numériques, la solution de l'équation (3.87) est préférée du fait de sa taille réduite.

$$\zeta^{m+1} = (\mathbf{B}^T \mathbf{G}^m \mathbf{B})^{-1} \mathbf{B}^T \mathbf{H}^m \quad (3.88)$$

Lorsque le temps t_{s+1} est atteint, une étape de contrôle est effectuée dans le but d'évaluer l'exactitude de la solution calculée à l'aide de la base réduite. L'étape de contrôle est effectuée seulement à la fin de chaque intervalle de temps.

On suppose que $t_{s+1} - t_s = M \times \Delta t$ et par conséquent le résidu à t_{s+1} , \mathbf{R}^M , peut être calculé par :

$$\mathbf{R}^M = \mathbf{G}^{M-1} \mathbf{B}\zeta^m - \mathbf{H}^{M-1} \quad (3.89)$$

Si la norme du résidu est suffisamment faible $\|\mathbf{R}^M\| < \epsilon \|\mathbf{B}\zeta^m\|$ (ϵ étant un paramètre suffisamment petit) la solution calculée peut être considérée bonne, et on poursuit l'intégration en temps dans l'intervalle $]t_{s+1}, t_{s+2}]$ en utilisant l'équation (2.38) sans modifier la base d'approximation réduite.

Au contraire, si $\|\mathbf{R}^M\| \geq \epsilon \|\mathbf{B}\zeta^m\|$, alors l'approximation doit être améliorée. Dans ce but, on propose d'enrichir la base d'approximation réduite en introduisant le résidu qui vient d'être calculé (ou bien des sous-espaces de Krylov générés par le résidu, comme proposé dans [Ryc05]) :

$$\mathbf{B} \leftarrow [\mathbf{B}\mathbf{R}^M] \quad (3.90)$$

et ainsi, l'évolution est recalculée dans l'intervalle de temps $]t_s, t_{s+1}]$ en utilisant l'équation (2.38) avec la base réduite \mathbf{B} mise à jour. Lorsque le critère de convergence est satisfait (i.e. $\|\mathbf{R}^M\| < \epsilon \|\mathbf{B}\zeta^m\|$) on applique la DOP sur toute l'histoire passée $]0, t_{s+1}]$ pour définir la base réduite capable de représenter l'ensemble de l'évolution passée du champ inconnu, qui résulte d'une base réduite \mathbf{B} actualisée qui peut être considérée comme la base réduite optimale pour décrire l'évolution du champ inconnu dans l'intervalle de temps $]0, t_{s+1}]$. En utilisant la base réduite \mathbf{B} actualisée, l'évolution en temps donnée par l'équation (3.88) est calculée dans $]t_{s+1}, t_{s+2}]$ et l'exactitude de la solution est vérifiée à $t = t_{s+2}$.

Si un enrichissement de la base a été nécessaire à la fin de l'intervalle de temps précédent,

à $t = t_{s+1}$, alors la longueur de l'intervalle de temps actuel est réduit en effectuant $t_{s+2} - t_{s+1} = (t_{s+1} - t_s) / 2$, et si aucun enrichissement n'a été nécessaire, alors la longueur de l'intervalle de temps est augmentée selon $t_{s+2} - t_{s+1} = 2(t_{s+1} - t_s)$ (se reporter à [ARCK06] pour des détails supplémentaires sur l'adaptation de la longueur de l'intervalle de temps).

Une fois $[\mathbf{T}^*]^{m+1}$ calculée, on calcule $[\mathbf{T}_{n+1}]^{m+1}$ par la relation :

$$[\mathbf{T}_{n+1}]^{m+1} = \frac{1}{\alpha_3} [\mathbf{T}^*]^{m+1} - \left(\alpha_1 [\mathbf{T}_{n-1}]^{m+1} + \alpha_2 [\mathbf{T}_n]^{m+1} \right) \quad (3.91)$$

3.3.3 Modélisation mécanique

Le problème mécanique à résoudre est donné dans (3.1.2).

Formulation variationnelle

On considère qu'aucune force extérieure et aucun déplacement ne sont appliqués à la pièce durant la phase de refroidissement. Ainsi la formulation variationnelle du problème est :

Trouver $\mathbf{u} \in U^{ca}$ tel que

$$\forall \mathbf{u}^* \in U_0^{ca} \quad \int_{\Omega} \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u}) : \mathbf{C} : \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u}^*) d\Omega - \int_{\Omega} \boldsymbol{\epsilon}^{th} : \mathbf{C} : \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u}^*) d\Omega - \int_{\Omega} \boldsymbol{\epsilon}^{crist} : \mathbf{C} : \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u}^*) d\Omega \quad \forall \mathbf{u}^* \in U^{ca} \quad (3.92)$$

avec U^{ca} l'ensemble des déplacements cinématiquement admissibles à zéro.

Discretisation spatiale

Pour trouver le champ de déplacement inconnu solution de (3.14), on remplace le domaine Ω par un ensemble de N_{el} éléments Ω_e (des triangles dans le cas bidimensionnel) construits à partir des points du domaine, les noeuds. Ceci permet de remplacer les intégrales des équations (3.14) par une sommation sur les éléments :

$$\int_{\Omega} () d\Omega = \sum_{e=1}^{N_{el}} \int_{\Omega_e} () d\Omega_e \quad \text{où } () \text{ représente la fonction à intégrer.}$$

De même, $\int_{\partial\Omega} () d\partial\Omega = \sum_{e=1}^{N_{el}} \int_{\partial\Omega_e} () d\partial\Omega_e$ où la partie de la frontière $\partial\Omega_e$ correspond à l'ensemble

des faces extérieures appartenant à l'élément $\partial\Omega_e$, c'est à dire $\partial\Omega_e = \sum_{\text{face}_{ext} \in \partial\Omega_e} \text{face}_{ext}$.

La formulation par éléments finis permet d'exprimer le champ de déplacement \mathbf{u} à l'instant t en un point quelconque \mathbf{x} de la pièce sur Ω par rapport à des fonctions d'interpolation N_i associée au noeud i et de valeurs connues aux noeuds du domaine discrétisé Ω_h (déplacement \mathbf{u}_i au noeud i).

Le champ de déplacement est donc approché par :

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^{nbnoe} N_i(\mathbf{x}) \mathbf{u}_i(t) \quad (3.93)$$

où $nbnoe$ correspond au nombre de noeuds du domaine maillé Ω_h et N_i sont les fonctions de base valant 1 au noeud i et nulle aux autres noeuds.

Le champ de déformation est approché par :

$$\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^{nbnoe} \mathbf{B}_i(\mathbf{x}) \mathbf{u}_i(t) \quad (3.94)$$

avec $\mathbf{B}_i(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial N_i}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial N_i}{\partial y} \\ \frac{\partial N_i}{\partial y} & \frac{\partial N_i}{\partial x} \end{bmatrix}$. Dans le cas d'une interpolation linéaire sur l'élément triangulaire Ω_e , les fonctions N_i sont des polynômes de degré 1 ($N_i \in P_1$) avec 4 inconnues \mathbf{u}_i par élément Ω_e (cf. figure 3.19). Le problème discrétisé (3.14) se met alors sous la forme matricielle suivante :

$$\mathbf{K}_r \mathbf{U}(t) = \mathbf{F}(t) \quad (3.95)$$

avec

- \mathbf{U} représente le vecteur solution, regroupant tous les noeuds.
- \mathbf{K}_r est la matrice de rigidité telle que :

$$[K_r]_{ij} = \sum_{e=1}^{Nel} \left(\int_{\Omega_e} \mathbf{B}_i^T \mathbf{C} \mathbf{B}_j d\Omega_e \right) \quad (3.96)$$

- \mathbf{F} est vecteur force équivalent aux charges réparties :

$$\mathbf{F}_i = \sum_{e=1}^{Nel} \left(\int_{\Omega_e} \mathbf{B}_i^T \mathbf{C} \boldsymbol{\epsilon}^{th} d\Omega_e + \int_{\Omega_e} \mathbf{B}_i^T \mathbf{C} \boldsymbol{\epsilon}^{cris} d\Omega_e \right) \quad (3.97)$$

L'application de la méthode des éléments finis nous amène donc à résoudre le système (3.95) formé de $(2nbnoe)$ équations à $(2nbnoe)$ inconnues.

3.3.4 Calcul des contraintes

Comme on l'a vu dans la section 1.5, il y a nécessité de calculer les tenseurs incréments de contraintes et de déformations au cours du calcul pour estimer correctement les champs de contrainte et de déformation, du fait des variations des propriétés thermomécaniques du matériau au cours du procédé. Les champ de contraintes et de déformations totales à l'instant t sont alors obtenus en sommant les tenseurs incréments de contraintes et de déformations pour tous les pas de temps du calcul :

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t) = \sum_{p=0}^{p=N} \Delta \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, p\Delta t) \quad (3.98)$$

Et

$$\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{x}, t) = \sum_{p=0}^{p=N} \Delta \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{x}, p\Delta t) \quad (3.99)$$

tels que $t = N\Delta t_{Macro}$.

Contraintes thermiques

Le tenseur incrément de déformation thermique en un point \mathbf{x} du domaine macroscopique et à l'instant t s'exprime par :

$$\Delta\epsilon_{macro}^{th}(\mathbf{x}, t) = \alpha_{macro}^{th}(\mathbf{x}, t) (T(\mathbf{x}, t) - T(\mathbf{x}, t - dt)) \quad (3.100)$$

avec $\alpha_{macro}^{th}(\mathbf{x}, t)$ le tenseur de dilatation thermique au point \mathbf{x} et à l'instant t , $T(\mathbf{x}, t)$ et $T(\mathbf{x}, t - dt)$ la température au point \mathbf{x} et à l'instant t et $t - dt$ respectivement.

Le tenseur incrément de contrainte thermique au point \mathbf{x} du domaine macroscopique et à l'instant t s'exprime par :

$$\Delta\sigma_{macro}^{th}(\mathbf{x}, t) \equiv \mathbf{C}_{macro}(\mathbf{x}, t) : \Delta\epsilon_{macro}^{th}(\mathbf{x}, t) \quad (3.101)$$

avec $\mathbf{C}_{macro}(\mathbf{x}, t)$ le tenseur de comportement du matériau au point \mathbf{x} et à l'instant t .

Le tenseur incrément de contraintes thermiques induit des forces nodales dans le domaine microscopique qui sont exprimées par :

$$\mathbf{F}_{macro}^{th} = \int_{\Omega_{macro}} \mathbf{B}_{macro}^T \Delta\sigma_{macro}^{th} d\Omega_{macro} \quad (3.102)$$

où \mathbf{B}_{macro} est la matrice qui contient les dérivées des fonctions de forme.

Contraintes induites par la cristallisation

Le tenseur incrément de déformation induite par la cristallisation en un point \mathbf{x} du domaine microscopique et à l'instant t s'exprime par :

$$\Delta\epsilon_{macro}^{cris}(\mathbf{x}, t) = \begin{bmatrix} \left(\left(\frac{\rho_{macro}(\mathbf{x}, t-dt)}{\rho_{macro}(\mathbf{x}, t)} \right)^{\frac{1}{3}} - 1 \right) \\ \left(\left(\frac{\rho_{macro}(\mathbf{x}, t-dt)}{\rho_{macro}(\mathbf{x}, t)} \right)^{\frac{1}{3}} - 1 \right) \\ 0 \end{bmatrix} \quad (3.103)$$

A l'échelle macroscopique, seule la densité de la matrice varie. La densité de la phase amorphe ρ_a et la densité de la phase cristalline ρ_c étant supposées connues, la densité du matériau en un point \mathbf{x} du domaine macroscopique et à l'instant t s'exprime par :

$$\rho_{macro}(\mathbf{x}, t) = \chi_{macro}(\mathbf{x}, t) \rho_c + (1 - \chi_{macro}(\mathbf{x}, t)) \rho_a \quad (3.104)$$

avec $\chi_{macro}(\mathbf{x}, t)$ le degré de cristallinité au point \mathbf{x} et à l'instant t .

Le tenseur incrément de contraintes induites par la cristallisation au point \mathbf{x} du domaine microscopique et à l'instant t s'exprime par :

$$\Delta\sigma_{macro}^{cris}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{C}_{macro}(\mathbf{x}, t) : \Delta\epsilon_{macro}^{cris}(\mathbf{x}, t) \quad (3.105)$$

Le tenseur incrément de contraintes induites par la cristallisation induit des forces nodales dans le domaine microscopique Ω_{macro} qui peuvent s'exprimer comme :

$$\mathbf{F}_{macro}^{cris} = \int_{\Omega_{macro}} \mathbf{B}_{macro}^T \Delta\sigma_{macro}^{cris} d\Omega_{macro} \quad (3.106)$$

avec \mathbf{B}_{macro} est la matrice qui contient les dérivées des fonctions de forme.

Contraintes globales

Le tenseur incrément contraintes globales est calculé en un point \mathbf{x} du domaine macroscopique et à l'instant t par :

$$\Delta\sigma_{macro}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{C}_{macro}(\mathbf{x}, t) : \left(\Delta\epsilon_{macro}(\mathbf{x}, t) - \Delta\epsilon_{macro}^{th}(\mathbf{x}, t) - \Delta\epsilon_{macro}^{cris}(\mathbf{x}, t) \right) \quad (3.107)$$

avec $\Delta\epsilon_{macro}(\mathbf{x}, t)$ le tenseur incrément de déformation dans le domaine macroscopique Ω_{macro} . Le tenseur incrément de déformation macroscopique $\Delta\epsilon_{macro}(\mathbf{x}, t)$ est calculée par la relation :

$$\Delta\epsilon_{macro}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{B}_{macro}\mathbf{U}_{macro}(\mathbf{x}, t) \quad (3.108)$$

avec $\mathbf{U}_{macro}(\mathbf{x}, t)$ le champ de déplacement global au point \mathbf{x} et à l'instant t , obtenu en résolvant l'équation :

$$\mathbf{K}_{macro}\mathbf{U}_{macro} = \mathbf{F}_{macro} \quad (3.109)$$

avec :

$$\mathbf{K}_{macro} = \int_{\Omega_{macro}} \mathbf{B}_{macro}^T \mathbf{C}_{macro} \mathbf{B}_{macro} d\Omega_{macro} \quad (3.110)$$

$$\mathbf{F}_{macro} = \int_{\Omega_{macro}} \mathbf{B}_{macro}^T \Delta\sigma_{macro}^{th} d\Omega_{macro} + \int_{\Omega_{macro}} \mathbf{B}_{macro}^T \Delta\sigma_{macro}^{cris} d\Omega_{macro} \quad (3.111)$$

Relaxation des contraintes

Nous prenons en compte dans la modélisation la relaxation des contraintes au dessus d'une certaine température $T_{relax} = 180^\circ C$.

En effet, lors du dépôt et du chauffage des plis suivants, les plis précédemment déposés et refroidit sont réchauffés. Il va donc se former des zones dans lesquelles la température va s'élever au dessus de la température de relaxation des contraintes.

Ainsi, si au cours d'une phase de chauffage la température du noeud i passe au-dessus de T_{relax} , alors la contrainte globale au noeud i , qui est égale à la somme des tenseurs incréments de contraintes globales au noeud i , est réinitialisée à 0.

$$T(i, t) \geq T_{relax} \Rightarrow \sigma(i, t) = \sum_{t'=0}^{t'=t} \Delta\sigma(i, t) = \mathbf{0} \quad (3.112)$$

3.4 Modélisation à l'échelle microscopique

Dans cette section nous présentons la démarche de modélisation qui a été développée à l'échelle microscopique.

3.4.1 Objectifs

Nous voulons assurer la transition entre l'échelle macroscopique et l'échelle microscopique. Pour cela on a besoin d'utiliser un domaine de transition entre les deux échelles, qui permet d'assurer le transfert des conditions aux limites macroscopiques à la cellule microscopique (figure 3.20). On veut également conserver une taille d'élément macroscopique raisonnable. Ceci nous conduit à utiliser une méthode de discrétisation spatiale « sans maillage ». On utilise de ce fait la méthode des éléments naturels contraints (CNEM). Ceci nous permet d'utiliser des éléments très aplatis pour discrétiser le domaine de transition.

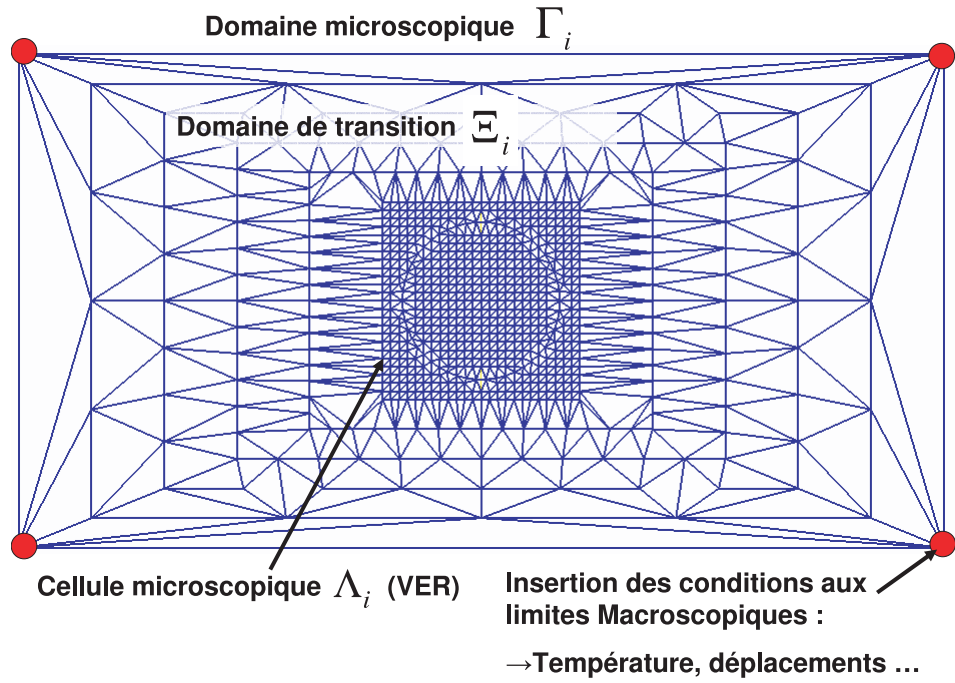


FIGURE 3.20 – Définition d'une cellule microscopique

On assemble les différentes matrices (rigidité, masse) et vecteurs issus des formulations variationnelles sur chaque sous-domaine de la cellule microscopique (figure 3.21), puis on réalise l'assemblage globale de chaque matrice et vecteur à l'aide de guides d'assemblage permettant de passer de chaque sous-domaine au domaine global.

L'intégration stabilisée permet d'associer un gradient unique au sous-domaine ω_i . C'est ce gradient qui sera utilisé par la suite pour le calcul des déformations et contraintes moyennes associées à chaque noeud du domaine. Cette démarche permet, dans un contexte de grandes transformations, d'éviter la projection de champs entre deux configurations lors d'une réactualisation, toutes les variables (déplacement, déformation, contrainte, ...) étant définies aux noeuds (colocation). Aux noeuds n_i situés à l'interface de deux cellules de Voronoï Ω_1 et Ω_2 de propriétés thermomécaniques différentes (figure 3.22), on peut définir chaque variable λ (déplacement, déformation, contrainte, gradient thermique ...) sous la forme d'une valeur moyenne égale à la somme des variables prise dans chaque sous-domaine pondérée par l'aire des cellules de Voronoï associées et divisée par la somme des aires des cellules de Voronoï associées :

$$\lambda_{n_i \Omega_1 / \Omega_2} = \frac{\lambda_{n_i \Omega_1} \|n_{i \Omega_1}\| + \lambda_{n_i \Omega_2} \|n_{i \Omega_2}\|}{\|n_{i \Omega_1}\| + \|n_{i \Omega_2}\|} \quad (3.113)$$

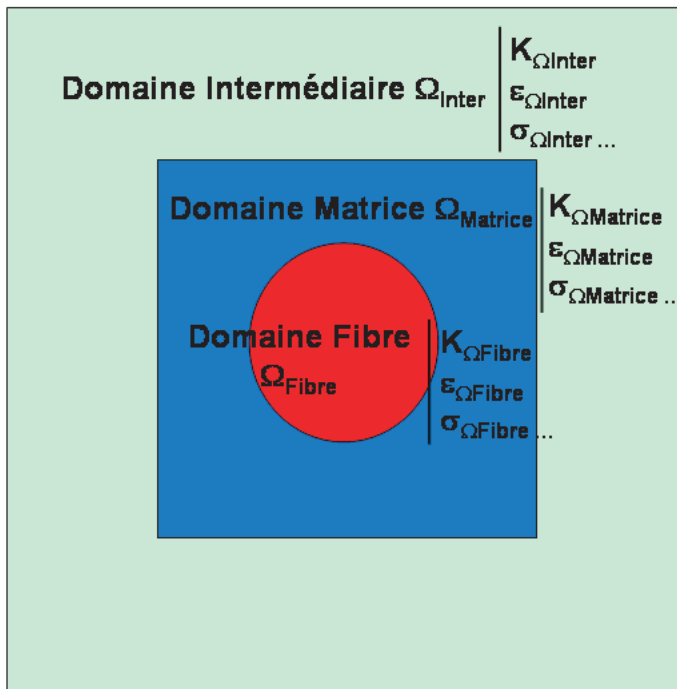


FIGURE 3.21 – Décomposition de la cellule microscopique en sous-domaine

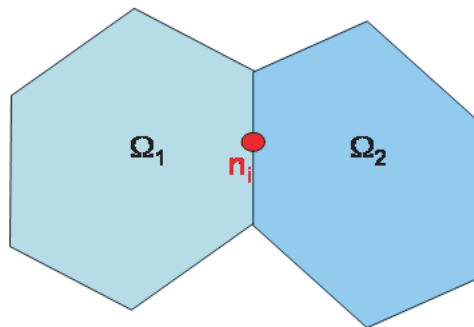


FIGURE 3.22 – Noeud à l'interface de deux cellules de Voronoï Ω_1 et Ω_2

3.4.2 Types d'orientation de fibre

Nous modélisons deux types d'orientation de fibre :

- fibres à 90° (figure 3.23) ;
- fibres à 0° (figure 3.24).

Chaque ruban macroscopique est composé d'un seul type domaine microscopique (fibres à 0° ou 90°).

De cette manière on prend en compte à l'échelle macroscopique de l'orientation des plis. On peut ainsi modéliser des composites pour différents types de séquence d'empilement (par exemple $[0^\circ/90^\circ/0^\circ]_1$).

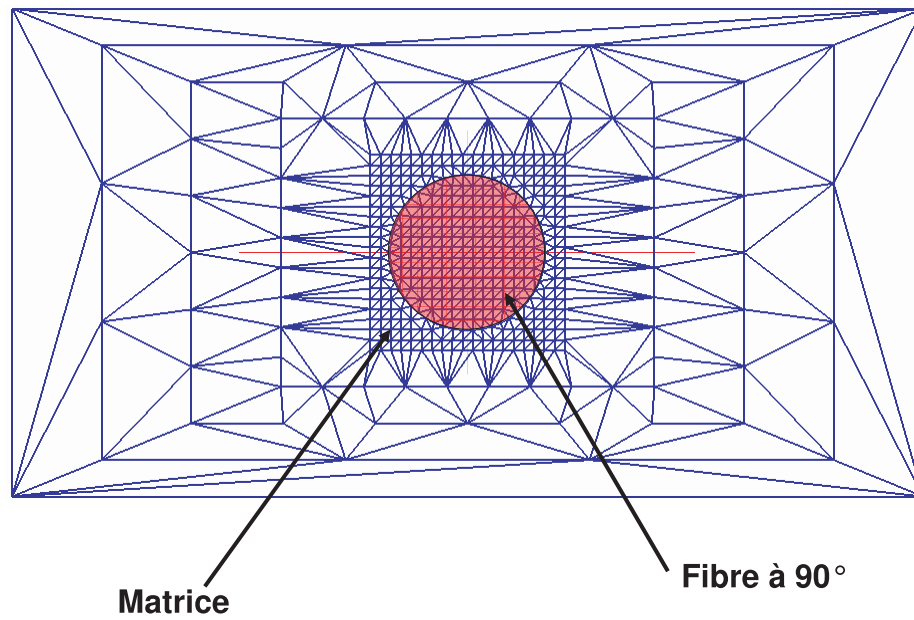


FIGURE 3.23 – Maillage CNEM d'un domaine microscopique à fibre disposée à 90°

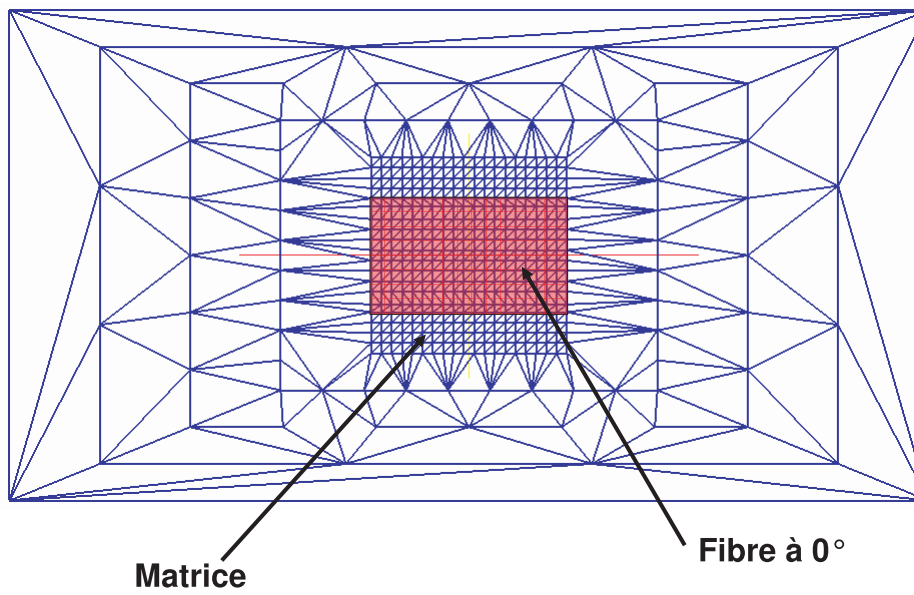


FIGURE 3.24 – Maillage CNEM d'un domaine microscopique à fibre disposée à 0°

3.4.3 Emplacements des domaines microscopiques

Premièrement, on définit les emplacements des domaines microscopiques qui nous permettrons de décrire l'état microscopique du composite durant le procédé. Un maillage est assigné à chaque domaine microscopique. L'importante différence de densité nodale entre les zones microscopique et macroscopique est prise en compte par l'utilisation de la méthode « éléments naturels » considérée pour l'interpolation des différents champs [SMB98, YCLR05, YRLC04]. Les domaines microscopiques sont couplés aux domaines macroscopiques par l'intermédiaire de leurs frontières. Soit Ω le domaine d'intérêt, *i.e.* le domaine macroscopique entier. On définit dans ce domaine macroscopique les éléments $Z_{i=1\dots N}$ pour lesquels on définit un domaine microscopique étendu dans le but de déterminer l'état microscopique et les propriétés thermomécaniques homogénéisées (figure 3.7a). Un maillage indépendant $\Gamma_{i=1\dots N}$ (domaine microscopique étendu) est construit pour chaque élément macroscopique $Z_{i=1\dots N}$ au moyen de la méthode des éléments naturels contraints (C-NEM) (figure 3.25). Un modèle microscopique $(\Lambda_i)_{i=1\dots N}$ est construit

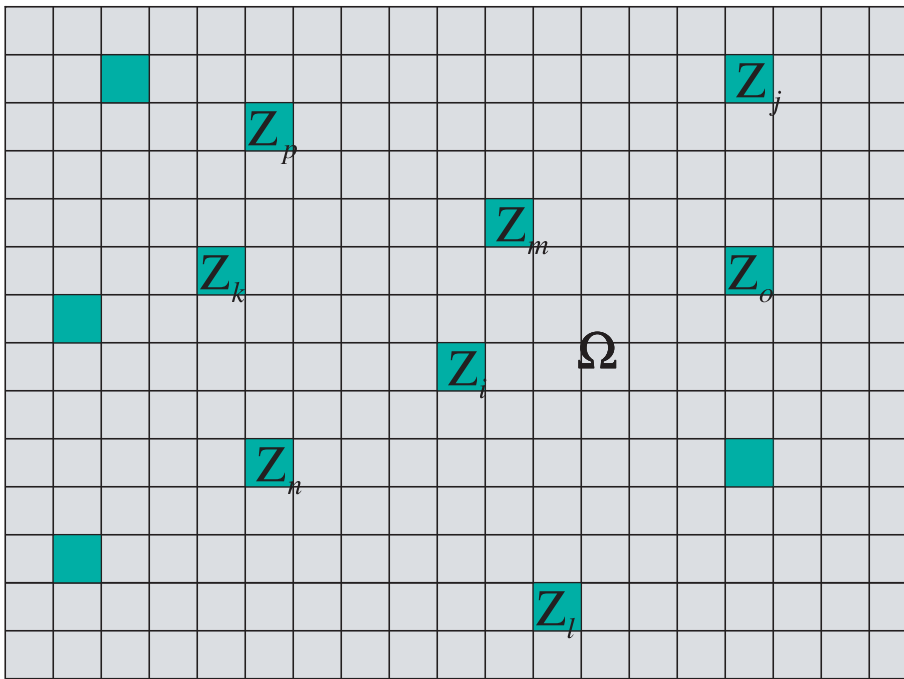


FIGURE 3.25 – Choix des éléments macroscopiques parents dans le domaine macroscopique Ω

dans chaque maillage $\Gamma_{i=1\dots N}$. Chaque Λ_i est un domaine microscopique. Ces domaines sont entourés d'un domaine de transition Ξ_i (figure 3.7b). Le transfert entre l'échelle macroscopique et l'échelle microscopique est réalisé par les quatre noeuds de l'élément macroscopique Z_i (figure 3.7b) et le domaine de transition $\Xi_{i=1\dots N}$ qui entoure le volume élémentaire représentatif $(\Lambda_i)_{i=1\dots N}$. Les propriétés thermomécaniques sont supposées être parfaitement définies à l'échelle microscopique dans chacun des domaines microscopiques (Λ_i) . Dans le domaine de transition on suppose que les variations spatiales des propriétés thermomécaniques moyennées (ou macroscopiques) sont suffisamment faibles.

Remarques : Dans le cas d'un raffinement plus important du domaine macroscopique Ω , on peut associer un domaine microscopique à groupe d'éléments et non plus à un seul élément

(figure 3.26).

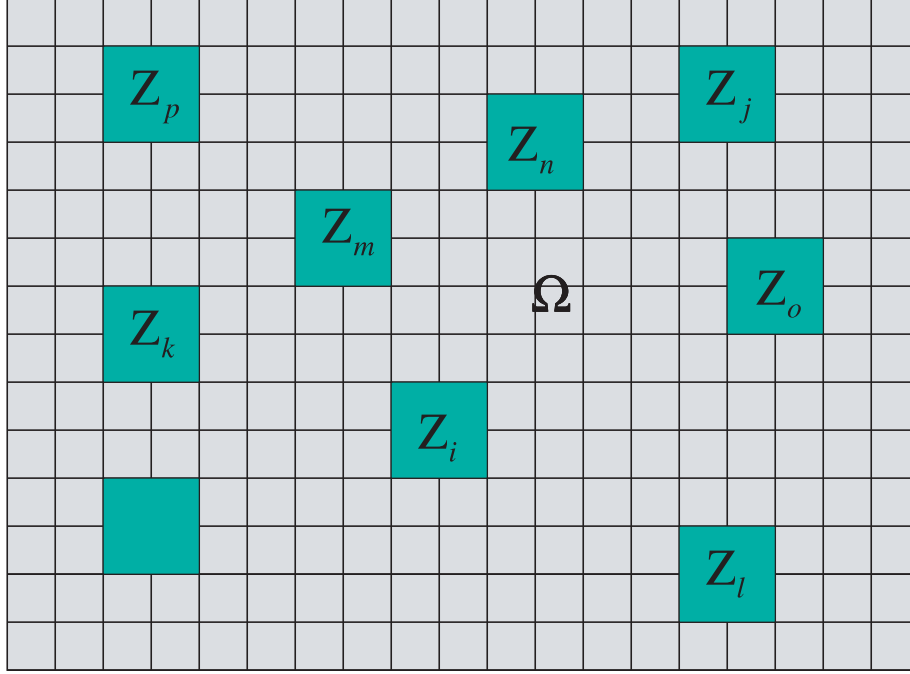


FIGURE 3.26 – Choix des groupes d'éléments macroscopiques parents dans le domaine macroscopique Ω

3.4.4 Modélisation thermique

Conditions aux limites appliquées au domaine

La discrétisation spatiale implique de connaître le type de conditions aux limites appliqués au domaine de transition. Le champ de température macroscopique étant supposé connu lorsque l'on effectue le calcul thermique à l'échelle microscopique on introduit les températures macroscopiques interpolées aux bornes du domaine de transition. Sur la frontière de chaque cellule microscopique considérée pour le calcul microscopique on calcule la température à partir des températures connues aux quatre noeuds définissant cette cellule à $t_n = n\Delta t_{Macro}$ et $t_{n+1} = (n+1)\Delta t_{Macro}$, en supposant une évolution linéaire en espace -sur la frontière de la cellule- et en temps. Ainsi, au temps $t = t_n + i\Delta t_{micro}$, pour un point \mathbf{x} situé sur le segment défini par les noeuds k et l on a :

$$\begin{cases} T_k^i = T_k^n + \frac{i\Delta t_{micro}}{\Delta t_{Macro}} (T_k^{n+1} - T_k^n) \\ T_l^i = T_l^n + \frac{i\Delta t_{micro}}{\Delta t_{Macro}} (T_l^{n+1} - T_l^n) \\ T^i(\mathbf{x}) = T_k^i + \frac{s}{L_{kl}} (T_l^i - T_k^i) \end{cases} \quad (3.114)$$

où s est la distance entre le point considéré et le noeud k et L_{kl} est la distance entre les deux noeuds. On suppose que le pas de temps macroscopique Δt_{Macro} correspond à p pas

de temps microscopiques, *i.e.* $\Delta t_{Macro} = p\Delta t_{micro}$. Dans ce contexte la solution du problème thermique offre le champ $T(\mathbf{X}, \mathbf{x}, t = t^n + i\Delta t_{micro})$, $i \in [1, \dots, p]$, où \mathbf{X} représente la position macroscopique relative au domaine microscopique (centre de gravité de la cellule microscopique) et \mathbf{x} un point du domaine microscopique.

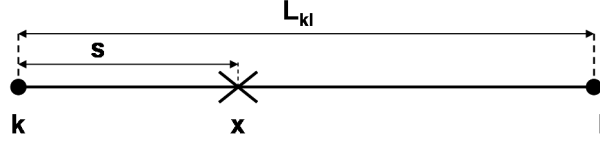


FIGURE 3.27 – Définition des distances s et L_{kl}

Formulation variationnelle

L'équation de la chaleur (3.15) enrichie des conditions aux limites précédemment définies s'écrit sous forme variationnelle :

$$\text{Trouver } T \in \Theta \text{ tel que} \quad (3.115)$$

$$\forall T^* \in \Theta_0, \begin{cases} \int_{\Omega} \rho C_p \frac{dT}{dt} T^* d\Omega + \int_{\Omega} k \text{grad}(T) \text{grad}(T^*) d\Omega \\ - \int_{\Omega} \Pi_{\text{cristallisation}} T^* d\Omega - \int_{\Omega} \Pi_{\text{fusion}} T^* d\Omega = 0 \end{cases}$$

Avec $\Theta = \{T \in \Omega / T = T_{imp} \text{ sur } \partial\Omega_{temp}\}$ et $\Theta_0 = \{T \in \Omega / T = 0 \text{ sur } \partial\Omega_{temp}\}$. L'expression de $\Pi_{\text{cristallisation}}$ et de Π_{fusion} varie en fonction de la localisation du point \mathbf{x} dans le domaine.

Expression de $\Pi_{\text{cristallisation}}$ et de Π_{fusion}

A l'échelle microscopique, les termes $\Pi_{\text{cristallisation}}$ et de Π_{fusion} ne concernent que la matrice. Ils sont nuls dans la fibre de carbone.

Les expressions pour ces deux termes sont les mêmes que pour l'échelle macroscopique ($\Pi_{\text{cristallisation}}$ est exprimé par (3.51) et Π_{fusion} à partir de (3.57)), excepté que l'on doit enlever dans les expressions la multiplication par le taux de matrice dans le composite.

Discrétisation spatiale

On utilise une discrétisation à l'aide de la méthode CNEM. La température est donc approchée par :

$$T(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^V \varphi_i^C(\mathbf{x}) T_i(t) \quad (3.116)$$

où V représente le nombre de voisins naturels visibles depuis le point \mathbf{x} et φ_i^C les fonctions de forme éléments naturels contraintes. Ainsi, le problème discrétisé (3.115) se met alors sous la forme matricielle suivante :

$$\mathbf{C}_{micro} \frac{\partial \mathbf{T}}{\partial t} + \mathbf{K}_{micro} \mathbf{T} = \mathbf{Q}_{micro} \quad (3.117)$$

- \mathbf{T} représente le vecteur solution, regroupant tous les noeuds.

- C_{micro} est la matrice de capacité, symétrique définie positive, définie par :

$$[C_{micro}]_{ij} = \sum_{e=1}^V \int_{\Omega_e} \rho_{micro} C_{p_{micro}} \varphi_i^C \varphi_j^C d\Omega_e \quad (3.118)$$

- K_{micro} est la matrice de conductivité définie positive telle que :

$$[K_{micro}]_{ij} = \sum_{e=1}^V \left(\int_{\Omega_e} k_{grad} \varphi_i^C \cdot grad \varphi_j^C d\Omega_e \right) \quad (3.119)$$

- Q_{micro} est le vecteur chargement :

$$Q_i = \sum_{e=1}^{Nel} \left(\int_{\Omega_e} \Pi_{cristallisation} \varphi_i^C d\Omega_e \right) \quad (3.120)$$

Il faut différencier les zones dans lesquels se situe le point \boldsymbol{x} considéré. En effet, le point \boldsymbol{x} peut se situer :

- dans le domaine de transition, les propriétés thermomécaniques sont celles de l'élément macroscopique parent ;
- dans la cellule microscopique :
 - dans la matrice
 - dans une fibre

Domaine de transition

Dans le domaine de transition, les propriétés thermomécaniques sont celles de l'élément macroscopique parent. Les termes de conductivité thermique, de densité du matériau, de dilatation thermique, de capacité thermique sont les mêmes que celles de l'élément macroscopique parent. Le terme $\Pi_{cristallisation}$ est exprimé par (3.51). Le terme Π_{fusion} est exprimé à partir de (3.57).

Cellule microscopique

Dans la cellule microscopique, le point \boldsymbol{x} peut se situer soit dans la matrice soit dans une fibre.

Intégration temporelle

L'intégration temporelle est réalisée à l'aide de la méthode à 3 pas de temps du second ordre comme décrite dans la section 3.3.2.

Accélération des temps de calcul

Les temps de calcul peuvent être accélérés par la même méthode que décrite dans la section 3.3.2.

3.4.5 Modélisation mécanique

Conditions aux limites appliquées au domaine

Sur la frontière de chaque cellule microscopique considérée pour le calcul microscopique on calcule le champ de déplacement à partir des déplacements connus aux quatre noeuds définissant cette cellule à $t_n = n\Delta t_{Macro}$ et $t_{n+1} = (n+1)\Delta t_{Macro}$, en supposant une évolution linéaire en espace -sur la frontière de la cellule- et en temps. Ainsi, au temps $t = t_n + i\Delta t_{micro}$, pour un point \mathbf{x} situé sur le segment défini par les noeuds k et l on a :

$$\begin{cases} \mathbf{u}_k^i = \mathbf{u}_k^n + \frac{i\Delta t_{micro}}{\Delta t_{Macro}} (\mathbf{u}_k^{n+1} - \mathbf{u}_k^n) \\ \mathbf{u}_l^i = \mathbf{u}_l^n + \frac{i\Delta t_{micro}}{\Delta t_{Macro}} (\mathbf{u}_l^{n+1} - \mathbf{u}_l^n) \\ \mathbf{u}^i(\mathbf{x}) = \mathbf{u}_k^i + \frac{s}{L_{kl}} (\mathbf{u}_l^i - \mathbf{u}_k^i) \end{cases} \quad (3.121)$$

où s est la distance entre le point considéré et le noeud k et L_{kl} est la distance entre les deux noeuds. On suppose que le pas de temps macroscopique Δt_{Macro} correspond à p pas de temps microscopiques, *i.e.* $\Delta t_{Macro} = p\Delta t_{micro}$. Dans ce contexte la solution du problème thermique offre le champ $T(\mathbf{X}, \mathbf{x}, t = t^n + i\Delta t_{micro})$, $i \in [1, \dots, p]$, où \mathbf{X} représente la position macroscopique relative au domaine microscopique (centre de gravité de la cellule microscopique) et \mathbf{x} un point du domaine microscopique.

Formulation variationnelle

L'évolution du solide dans les conditions ainsi définies et dans l'intervalle temporel $[t, t + \Delta t_{micro}]$ choisi a priori est gouverné par les équations locales :

$$\begin{array}{lll} \boldsymbol{\epsilon} = \frac{1}{2} (\text{grad} \mathbf{u} + \text{grad}^T \mathbf{u}) & \text{dans } \Omega \times [t, t + \Delta t_{micro}] & \text{compatibilité} \\ \text{div} \boldsymbol{\sigma} = 0 & \text{dans } \Omega \times [t, t + \Delta t_{micro}] & \text{équilibre} \\ \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C} \left(\boldsymbol{\epsilon}(x, t) - \boldsymbol{\epsilon}^{th}(x, t) - \boldsymbol{\epsilon}^{cris}(x, t) \right) & \text{dans } \Omega \times [t, t + \Delta t_{micro}] & \text{comportement} \\ \mathbf{u} = \mathbf{u}_{imp} & \text{sur } \partial\Omega_u \times [t, t + \Delta t_{micro}] & \text{déplacements imposés} \\ \mathbf{F} = \mathbf{0} & \text{sur } \partial\Omega_F \times [t, t + \Delta t_{micro}] & \text{efforts imposés} \end{array} \quad (3.122)$$

La formulation variationnelle du problème est obtenue par multiplication des équations de conservation par des fonctions tests, puis par intégration sur le domaine. On obtient l'expression faible du problème (3.4.5) :

$$\begin{array}{l} \text{Trouver } \mathbf{u} \in U^{ca} \text{ tel que} \\ \forall \mathbf{u}^* \in U_0^{ca} \quad \int_{\Omega} \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u}) : \mathbf{C} : \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u}^*) d\Omega - \int_{\Omega} \boldsymbol{\epsilon}^{th} : \mathbf{C} : \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u}^*) d\Omega - \int_{\Omega} \boldsymbol{\epsilon}^{cris} : \mathbf{C} : \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u}^*) d\Omega \quad \forall \mathbf{u}^* \in U^{ca} \end{array} \quad (3.123)$$

avec U^{ca} l'ensemble des déplacements cinématiquement admissibles à zéro.

Discretisation spatiale

On utilise une discrétisation à l'aide de la méthode CNEM. Le champ de déplacement est donc approché par :

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^V \varphi_i^C(\mathbf{x}) \mathbf{u}_i(t) \quad (3.124)$$

où V représente le nombre de voisins naturels visibles depuis le point \mathbf{x} et φ_i^C les fonctions de forme éléments naturels contraintes. Ainsi, le problème discrétisé (3.123) se met alors sous la forme matricielle suivante :

$\int_{\Omega} () d\Omega = \sum_{e=1}^V \int_{\Omega_e} () d\Omega_e$ où $()$ représente la fonction à intégrer.

De même, $\int_{\partial\Omega} () d\partial\Omega = \sum_{e=1}^V \int_{\partial\Omega_e} () d\partial\Omega_e$ où la partie de la frontière $\partial\Omega_e$ correspond à l'ensemble des faces extérieures appartenant à l'élément $\partial\Omega_e$, c'est à dire $\partial\Omega_e = \sum_{f_{\text{ext}} \in \partial\Omega_e} f_{\text{ext}}$.

La formulation par éléments finis permet d'exprimer le champ de déplacement \mathbf{u} à l'instant t en un point quelconque (x) de la pièce sur Ω par rapport à des fonctions d'interpolation N_i associée au noeud i et de valeurs connues aux noeuds du domaine discrétisé Ω_h (déplacement u_i au noeud i).

Le champ de déplacement est donc approché par :

$$\mathbf{u}(x, t) = \sum_{i=1}^{nbnoe} N_i(x) \mathbf{u}_i(t) \quad (3.125)$$

où $nbnoe$ correspond au nombre de noeuds du domaine maillé Ω_h et N_i sont les fonctions de base valant 1 au noeud i et nulle aux autres noeuds.

Le champ de déformation est approché par :

$$\boldsymbol{\epsilon}(x, t) = \sum_{i=1}^{nbnoe} \mathbf{B}_i(x) \mathbf{u}_i(t) \quad (3.126)$$

avec $\mathbf{B}_i(x) = \begin{bmatrix} \frac{\partial N_i}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial N_i}{\partial y} \\ \frac{\partial N_i}{\partial y} & \frac{\partial N_i}{\partial x} \end{bmatrix}$. Dans le cas d'une interpolation linéaire sur l'élément triangulaire

Ω_e , les fonctions N_i sont des polynômes de degré 1 ($N_i \in P_1$) avec 4 inconnues \mathbf{u}_i par élément Ω_e (cf. figure 3.19). Le problème discrétisé (3.123) se met alors sous la forme matricielle suivante :

$$\mathbf{K}_{micro} \mathbf{U}(t) = \mathbf{F}_{micro}(t) \quad (3.127)$$

avec

- \mathbf{U} représente le vecteur solution, regroupant tous les noeuds.
- \mathbf{K}_{micro} est la matrice de rigidité telle que :

$$[K_{micro}]_{ij} = \sum_{e=1}^{Nel} \left(\int_{\Omega_e} \mathbf{B}_{micro_i}^T \mathbf{C}_{micro} \mathbf{B}_{micro_j} d\Omega_e \right) \quad (3.128)$$

- \mathbf{F}_{micro} est vecteur force équivalent aux charges réparties :

$$[F_{micro}]_i = \sum_{e=1}^{Nel} \left(\int_{\Omega_e} \mathbf{B}_{micro_i}^T \mathbf{C}_{micro} \boldsymbol{\epsilon}^{th} d\Omega_e + \int_{\Omega_e} \mathbf{B}_{micro_i}^T \mathbf{C}_{micro} \boldsymbol{\epsilon}^{cris} d\Omega_e \right) \quad (3.129)$$

3.4.6 Calcul des contraintes

Les déformations et les contraintes peuvent être évaluées dans la cellule microscopique, dans le but de prédire une éventuelle décohésion fibre/matrice, ou pour introduire un critère de rupture. Les déformations peuvent être calculées sur chaque triangle de Delaunay par la méthode éléments finis classiques ou bien par l'approximation éléments naturels (NEM).

Comme pour le calcul macroscopique, on calcule à chaque pas de temps les tenseurs incréments de contraintes et de déformations.

La contrainte et la déformation totale à l'instant t sont obtenues en sommant les tenseurs incréments de contraintes et déformations sur tous les pas de temps microscopiques :

$$\boldsymbol{\sigma}_{micro}(\mathbf{x}, t) = \sum_{p=0}^{p=N} \Delta \boldsymbol{\sigma}_{micro}(\mathbf{x}, p\Delta t) \quad (3.130)$$

Et

$$\boldsymbol{\epsilon}_{micro}(\mathbf{x}, t) = \sum_{p=0}^{p=N} \Delta \boldsymbol{\epsilon}_{micro}(\mathbf{x}, p\Delta t) \quad (3.131)$$

tels que $t = N\Delta t_{micro}$.

Contraintes thermiques

Le tenseur incrément de déformation thermique en un point \mathbf{x} du domaine microscopique et à l'instant t s'exprime par :

$$\Delta \boldsymbol{\epsilon}_{micro}^{th}(\mathbf{x}, t) = \boldsymbol{\alpha}_{micro}^{th}(\mathbf{x}, t) (T(\mathbf{x}, t) - T(\mathbf{x}, t - dt)) \quad (3.132)$$

avec $\boldsymbol{\alpha}_{micro}^{th}(\mathbf{x}, t)$ le tenseur de dilatation thermique au point \mathbf{x} et à l'instant t , $T(\mathbf{x}, t)$ et $T(\mathbf{x}, t - dt)$ la température au point \mathbf{x} et à l'instant t et $t - dt$.

Le tenseur incrément de contrainte thermique au point \mathbf{x} du domaine microscopique et à l'instant t s'exprime par :

$$\Delta \boldsymbol{\sigma}_{micro}^{th}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{C}_{micro}(\mathbf{x}, t) : \Delta \boldsymbol{\epsilon}_{micro}^{th}(\mathbf{x}, t) \quad (3.133)$$

avec $\mathbf{C}_{micro}(\mathbf{x}, t)$ le tenseur de comportement du matériau au point \mathbf{x} et à l'instant t .

Le tenseur incrément de contraintes thermiques induit des forces nodales dans le domaine microscopique qui sont exprimées par :

$$\mathbf{F}_{micro}^{th} = \int_{\Omega_{micro}} \mathbf{B}_{micro}^T \Delta \boldsymbol{\sigma}_{micro}^{th} d\Omega_{micro} \quad (3.134)$$

où \mathbf{B}_{micro} est la matrice qui contient les dérivées des fonctions de forme.

Contraintes induites par la cristallisation

Le tenseur incrément de déformation induite par la cristallisation en un point \mathbf{x} du domaine microscopique et à l'instant t s'exprime par :

$$\Delta \boldsymbol{\epsilon}_{micro}^{crist}(\mathbf{x}, t) = \begin{bmatrix} \left(\left(\frac{\rho_{micro}(\mathbf{x}, t-dt)}{\rho_{micro}(\mathbf{x}, t)} \right)^{\frac{1}{3}} - 1 \right) \\ \left(\left(\frac{\rho_{micro}(\mathbf{x}, t-dt)}{\rho_{micro}(\mathbf{x}, t)} \right)^{\frac{1}{3}} - 1 \right) \\ 0 \end{bmatrix} \quad (3.135)$$

A l'échelle microscopique, seule la densité de la matrice varie. La densité de la phase amorphe ρ_a et la densité de la phase cristalline ρ_c étant supposées connues, la densité du matériau en un point \mathbf{x} du domaine microscopique et à l'instant t s'exprime par :

$$\rho_{micro}(\mathbf{x}, t) = \chi_{micro}(\mathbf{x}, t) \rho_c + (1 - \chi_{micro}(\mathbf{x}, t)) \rho_a \quad (3.136)$$

avec $\chi_{micro}(\mathbf{x}, t)$ le degré de cristallinité au point \mathbf{x} et à l'instant t .

Le tenseur incrément de contraintes induites par la cristallisation au point \mathbf{x} du domaine microscopique et à l'instant t s'exprime par :

$$\Delta\sigma_{micro}^{cris}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{C}_{micro}(\mathbf{x}, t) : \Delta\epsilon_{micro}^{cris}(\mathbf{x}, t) \quad (3.137)$$

Le tenseur incrément de contraintes induites par la cristallisation induit des forces nodales dans le domaine microscopique Ω_{micro} qui peuvent s'exprimer comme :

$$\mathbf{F}_{micro}^{cris} = \int_{\Omega_{micro}} \mathbf{B}_{micro}^T \Delta\sigma_{micro}^{cris} d\Omega_{micro} \quad (3.138)$$

avec \mathbf{B}_{micro} est la matrice qui contient les dérivées des fonctions de forme.

Contraintes globales

Le tenseur incrément de contraintes est calculé en un point \mathbf{x} du domaine microscopique et à l'instant t par :

$$\Delta\sigma_{micro}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{C}_{micro}(\mathbf{x}, t) : \left(\Delta\epsilon_{micro}(\mathbf{x}, t) - \Delta\epsilon_{micro}^{th}(\mathbf{x}, t) - \Delta\epsilon_{micro}^{cris}(\mathbf{x}, t) \right) \quad (3.139)$$

avec $\Delta\epsilon_{micro}(\mathbf{x}, t)$ le tenseur incrément déformation globale dans le domaine microscopique Ω_{micro} .

Le tenseur incrément de déformation microscopique globale $\Delta\epsilon_{micro}(\mathbf{x}, t)$ est calculée par la relation :

$$\Delta\epsilon_{micro}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{B}_{micro} \mathbf{U}_{micro}(\mathbf{x}, t) \quad (3.140)$$

avec $\mathbf{U}_{micro}(\mathbf{x}, t)$ le champ de déplacement global au point \mathbf{x} et à l'instant t , obtenu en résolvant l'équation :

$$\mathbf{K}_{micro} \mathbf{U}_{micro} = \mathbf{F}_{micro} \quad (3.141)$$

avec :

$$\mathbf{K}_{micro} = \int_{\Omega_{micro}} \mathbf{B}_{micro}^T \mathbf{C}_{micro} \mathbf{B}_{micro} d\Omega_{micro} \quad (3.142)$$

$$\mathbf{F}_{micro} = \int_{\Omega_{micro}} \mathbf{B}_{micro}^T \Delta\sigma_{micro}^{th} d\Omega_{micro} + \int_{\Omega_{micro}} \mathbf{B}_{micro}^T \Delta\sigma_{micro}^{cris} d\Omega_{micro} \quad (3.143)$$

Relaxation des contraintes

De la même manière qu'à l'échelle macroscopique, nous prenons en compte dans la modélisation la relaxation des contraintes au dessus d'une certaine température $T_{relax} = 180^\circ C$.

En effet, lors du dépôt et du chauffage des plis suivants, les plis précédemment déposés et refroidit sont réchauffés. Il va donc se former des zones dans lesquelles la température va s'élever au dessus de la température de relaxation des contraintes. La température moyenne dans un domaine microscopique situé dans cette zone sera ainsi supérieure à T_{relax} .

Ainsi, si au cours d'une phase de chauffage la température du noeud i passe au-dessus de T_{relax} , alors la contrainte globale au noeud i , qui est égale à la somme des tenseurs incréments de contraintes globales au noeud i , est réinitialisée à 0.

$$T(i, t) \geq T_{relax} \Rightarrow \sigma(i, t) = \sum_{t'=0}^{t'=t} \Delta\sigma(i, t) = \mathbf{0} \quad (3.144)$$

3.5 Homogénéisation : transfert de l'information de l'échelle microscopique à l'échelle macroscopique

La stratégie d'homogénéisation développée dans cette étude est présentée dans cette section. Une des contributions du présent travail est le calcul des propriétés thermomécaniques homogénéisées par l'application de la méthode de réduction de modèle présentée dans la section 2.2. Cette méthode permet d'utiliser les conditions aux limites réelles pour calculer les propriétés homogénéisées. Les propriétés thermomécaniques sont alors étendues au domaine macroscopique en utilisant une méthode d'interpolation.

3.5.1 Les différentes échelles de modélisation

La modélisation utilisée fait apparaître trois zones :

- le domaine macroscopique Ω
- les domaines microscopiques étendus Γ_i , $i \in \{1, \dots, N\}$, eux mêmes composés chacun :
 - d'un domaine de transition Ξ_i
 - d'un domaine microscopique Λ_i

Il est donc nécessaire de différencier les différentes échelles :

- **l'échelle macroscopique** (domaine Ω). Dans notre cas, il s'agit de l'échelle du composite.
- **l'échelle mésoscopique** (domaine de transition Ξ_i). C'est l'échelle intermédiaire entre l'échelle macroscopique (domaine Ω) et l'échelle microscopique (domaine microscopique Λ_i).
- **l'échelle microscopique**. C'est l'échelle locale du domaine microscopique Λ_i . Il peut s'agir de l'échelle fibre/matrice si la matrice est considérée homogène, ou celle du grain de matrice si l'on prend en compte le comportement polycristallin de la matrice.

Le but des approches présentées dans cette section est de décrire le comportement thermomécanique macroscopique par un passage micro-macro, ceci en vue d'un calcul de structure. On cherche à relier, pour le calcul des contraintes résiduelles, la contrainte macroscopique à la déformation macroscopique.

Les propriétés thermomécaniques dans les différents domaines sont :

Domaine microscopique Λ_i

Le domaine microscopique Λ_i est le Volume Élémentaire Représentatif (VER) où l'homogénéisation des propriétés thermomécaniques du matériau est réalisée. Dans le domaine microscopique

Λ_i , les propriétés thermomécaniques sont supposées être connues en tout point \mathbf{x} et à tout instant t .

On désigne par $\widehat{\Upsilon}_i$ la propriété thermomécanique homogénéisée dans le domaine microscopique Λ_i .

Domaine de transition Ξ_i

Dans le domaine de transition Ξ_i on suppose que les variations spatiales des propriétés thermomécaniques moyennées (ou macroscopiques) sont suffisamment faibles. Ainsi on considère que pour tout point \mathbf{x} et à tout instant t dans le domaine de transition :

$$\Upsilon(\mathbf{x}, t) \approx \widehat{\Upsilon}_i(t) \quad \forall \mathbf{x} \in \Xi_i, \forall t \quad (3.145)$$

avec $\widehat{\Upsilon}_i$ la propriété thermomécanique homogénéisée dans le domaine microscopique Λ_i .

Domaine macroscopique Ω

Une façon simple pour définir la propriété thermomécanique en un point quelconque du domaine macroscopique Ω (non dans le voisinage d'un domaine microscopique Λ_i) consiste en l'emploi d'une interpolation des comportements des domaines microscopiques les plus proches. Ceci nous oblige à définir une notion de voisinage, chose que l'on obtient naturellement en utilisant une interpolation C-NEM construite sur la base du diagramme de Voronoï lié au nuage des points comprenant le centre de la gravité des domaines microscopiques, *i.e.* le centre de gravité des éléments parents Z_i .

Soit $\tilde{\psi}_i$ la fonction de forme associée au centre de gravité de Z_i . $\tilde{\psi}_i$ est parfaitement définie dans le domaine entier Ω . Ainsi, la propriété thermomécanique Υ dans le domaine macroscopique Ω est :

$$\tilde{\Upsilon}(\mathbf{X}, t) = \sum_{i=1}^{i=V} \tilde{\psi}_i(\mathbf{X}) \widehat{\Upsilon}_i(\mathbf{X}, t) \quad \forall \mathbf{X} \in \Omega, \forall t \quad (3.146)$$

où V est le nombre de voisins naturels visibles du point \mathbf{X} .

De cette manière les propriétés thermomécaniques sont connues en tout point des différents domaines et à tout instant.

Principe du passage micro-macro

Comme il a été vu dans la section 3.1, les passages micro-macro reposent sur deux étapes :

- La localisation :
 - pour le problème thermique : on cherche la relation entre le gradient thermique (ou le flux thermique) macroscopique et le gradient thermique (ou le flux thermique) dans chacune des sous-phases (éléments du domaine microscopique Λ_i).
 - pour le problème mécanique : on cherche la relation entre la déformation (ou la contrainte) macroscopique et la déformation (ou la contrainte) dans chacune des sous-phases (éléments du domaine microscopique Λ_i).

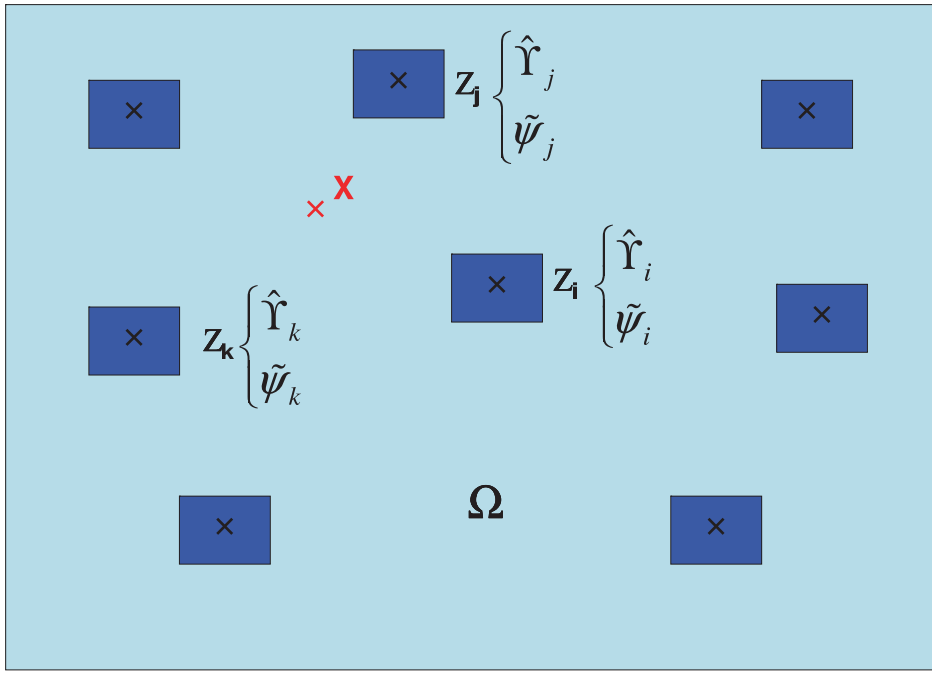


FIGURE 3.28 – Interpolation des propriétés thermomécaniques homogénéisées dans le domaine macroscopique Ω au point \mathbf{X}

- L'homogénéisation :

- pour le problème thermique : on cherche la relation entre le flux thermique (ou le gradient thermique) dans chacune des sous-phases (éléments du domaine microscopique Λ_i) et le flux thermique (ou le gradient thermique) macroscopique.
- pour le problème mécanique : on cherche la relation entre la contrainte (ou la déformation) dans chacune des sous-phases (éléments du domaine microscopique Λ_i) et la contrainte (ou la déformation) macroscopique.

L'étape d'homogénéisation est assez simple puisque l'on définit les grandeurs macroscopiques (contrainte Σ , déformation \mathbf{E} , flux thermique Φ_{th} , gradient thermique \mathbf{G}) à partir de leurs homologues microscopiques par leurs moyennes volumiques sur le VER (dans le cas où il n'y a pas d'endommagement) :

$$\Sigma = \langle \sigma(\mathbf{x}) \rangle = \frac{1}{|\Lambda_i|} \int_{\Lambda_i} \sigma(\mathbf{x}) d\Lambda_i \quad (3.147)$$

$$\mathbf{E} = \langle \epsilon(\mathbf{x}) \rangle = \frac{1}{|\Lambda_i|} \int_{\Lambda_i} \epsilon(\mathbf{x}) d\Lambda_i \quad (3.148)$$

$$\Phi_{th} = \langle \phi_{th}(\mathbf{x}) \rangle = \frac{1}{|\Lambda_i|} \int_{\Lambda_i} \phi_{th}(\mathbf{x}) d\Lambda_i \quad (3.149)$$

$$\mathbf{G} = \langle \mathbf{g}(\mathbf{x}) \rangle = \frac{1}{|\Lambda_i|} \int_{\Lambda_i} \mathbf{g}(\mathbf{x}) d\Lambda_i \quad (3.150)$$

La réelle difficulté réside dans l'étape de localisation qui est délicate dans le cas de matériaux possédant un comportement thermomécanique non linéaire.

3.5.2 Stratégie d'homogénéisation

Dans cette section nous présentons la méthode d'homogénéisation développée et utilisée dans l'étude. L'originalité de notre méthode d'homogénéisation est l'utilisation de la post-réduction du champ thermique de l'échelle microscopique pour le calcul de la conductivité thermique homogénéisée.

Utilisation de la post-réduction pour obtenir un champ moyen

Influence des conditions aux bords sur la solution homogénéisée

Nous avons présenté dans la section 2.3 les problèmes liés à l'homogénéisation. Plus précisément, le fait que le problème mécanique soit mal posé dans le sens où on doit résoudre un problème de structure sans véritables conditions aux limites. Dans la pratique, on doit traiter des problèmes bien posés équivalents à ceux initiaux avec des conditions de moyenne sur les variables locales. Pour cela traditionnellement on a recours à trois approches :

- Problèmes avec condition de contrainte homogène au contour (CH) ;
- Problèmes avec condition de déformation homogène au contour (DH) ;
- Problèmes avec condition de périodicité (#).

Ces trois approches sont théoriquement équivalentes au problème initial avec des conditions de moyenne sur les variables locales. Cependant en pratique on constate que les résultats peuvent varier considérablement.

Afin d'illustrer ceci considérons le problème (inspiré d'un problème qu'on peut trouver sur [BBG01]) d'homogénéisation de la structure figure 3.29 composée d'éléments de base quadrilatères percés en leur centre, le matériau constitutif a un comportement élastique isotrope. Cette structure est délibérément périodique de manière à avoir une solution exacte (#) qui servira de référence. On applique les trois approches (CH, DH, #) aux sous structures 1,2 et 3, et on

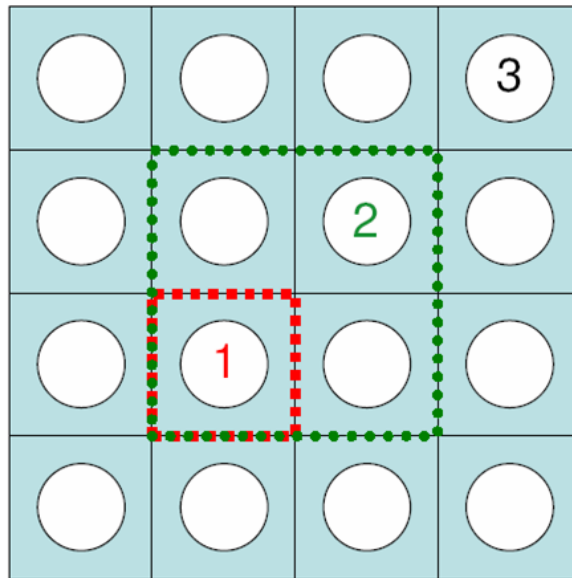


FIGURE 3.29 – Structure périodique, les différents problèmes traités

détermine pour chaque structure les modules de Young et les coefficients de Poisson correspondants. Les résultats sont synthétisés sur les courbes figures 3.30 et 3.31.

On observe une convergence des résultats des trois approches pour des structures de plus en plus grandes et contenant de plus en plus d'éléments de base. On peut montrer [Suq82] que :

$$\lim_{N \rightarrow +\infty} C_{DH} = \lim_{N \rightarrow +\infty} C_{CH} = C_{\#} \quad (3.151)$$

Avec N le nombre d'éléments de base. On note une sensibilité assez grande du comportement

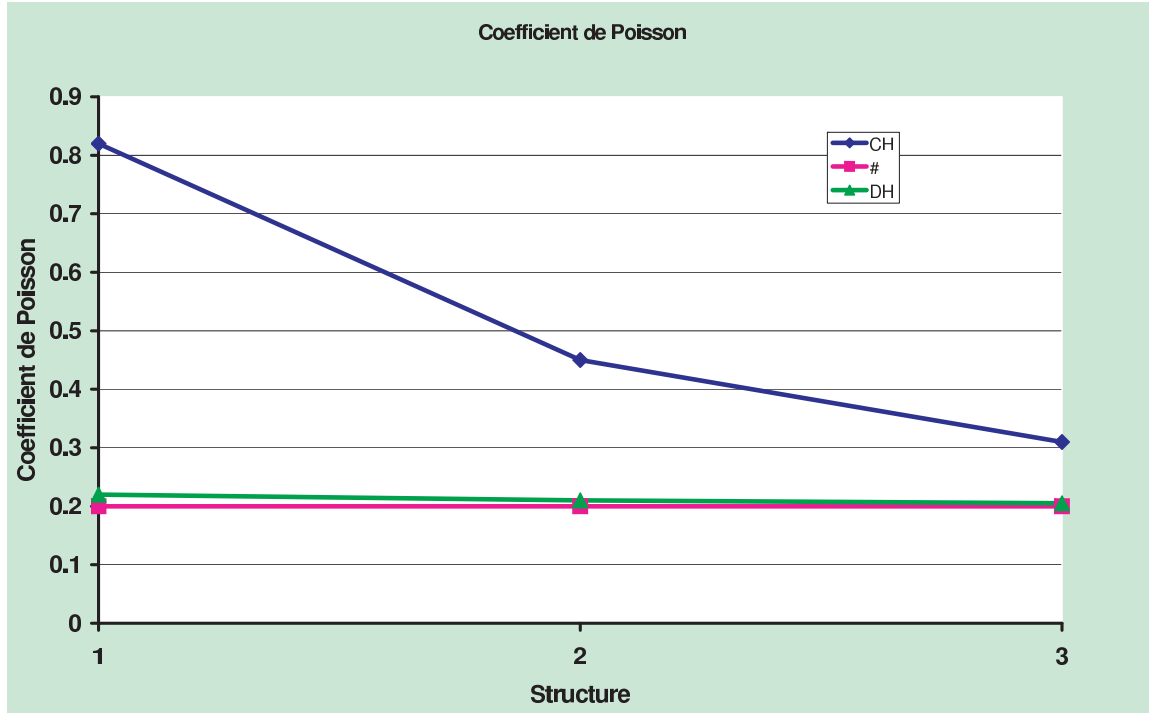


FIGURE 3.30 – Coefficient de Poisson homogénéisé

homogénéisé vis-à-vis des conditions aux limites. Le cas idéal serait de pouvoir avoir les conditions aux limites réelles sur la frontière des domaines microscopiques et donc une réponse et un comportement homogénéisé plus réalistes que ceux calculés sur la base des problèmes DH, CH, #.

Cependant, cette connaissance des conditions aux limites réelles reste insuffisante pour définir le tenseur d'élasticité. En général on doit résoudre 3 problèmes indépendants pour avoir toutes les composantes du tenseur d'élasticité dans le cas 2D. On peut toutefois exploiter cette information pour minimiser l'erreur commise sur l'estimation du comportement homogénéisé. Dans la méthode que nous proposons, nous exploitons l'information issue des conditions aux limites réelles pour obtenir construire le nombre de champs nécessaires pour effectuer l'homogénéisation.

Utilisation de la post-réduction

La méthode de post-réduction présentée dans la section 2.2 est appliquée pour obtenir un champ moyen dans le domaine microscopique Λ_i , dans chaque intervalle de temps de calcul microscopique

$$\{t_i, t_i + p_{micro}\Delta t_{micro} = t_i + \Delta t_{Macro}\}, \quad i \in [0, \dots, N_{Macro} - 1]$$

Avec $t_i = t_0 + i\Delta t_{Macro}$, $i \in [0, \dots, N_{Macro} - 1]$.

On suppose connu le champ $\mathbf{v}(\mathbf{X}, \mathbf{x}, t = t_i + k\Delta t_{micro})$, $k \in [0, \dots, p_{micro}]$ où \mathbf{X} représente

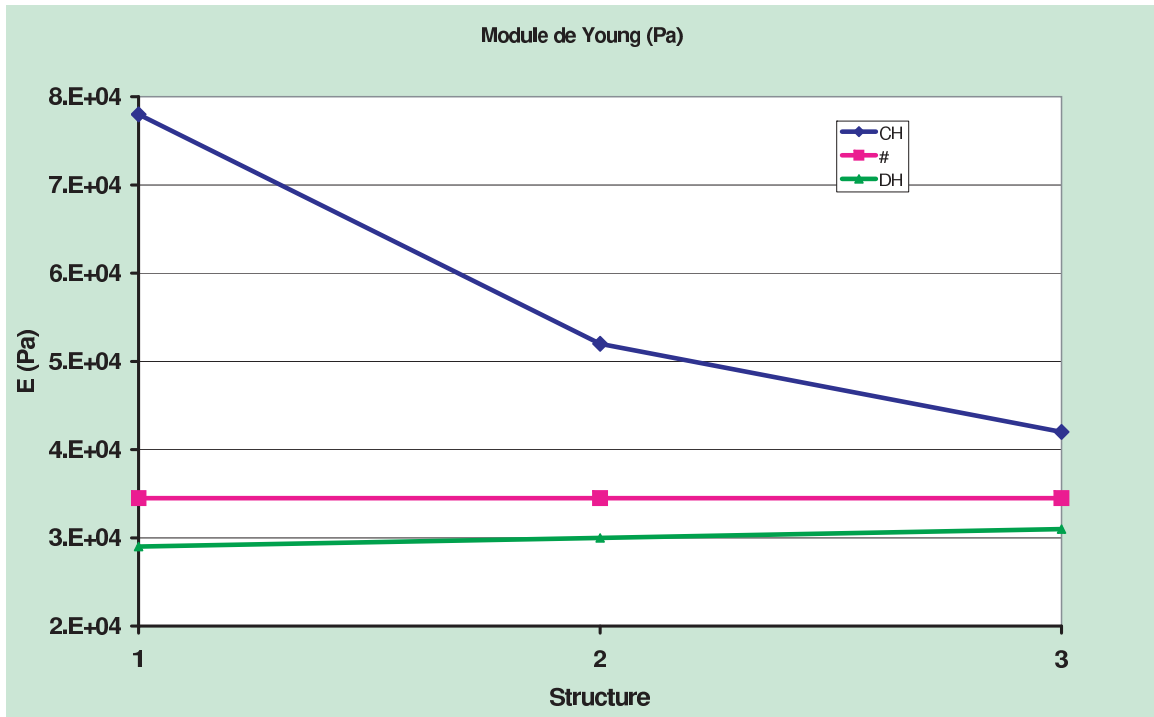


FIGURE 3.31 – Module de Young homogénéisé

la position macroscopique relative au domaine microscopique (centre de gravité de la cellule microscopique) et \mathbf{x} le point du domaine microscopique. On construit la matrice \mathbf{Q}_v comme présenté dans l'équation la section 2.2 :

$$\mathbf{Q}_v = \begin{pmatrix} v_{1|_1}(t_1) & v_{1|_1}(t_2) & \dots & \dots & v_{1|_1}(t_p) \\ v_{2|_1}(t_1) & v_{2|_1}(t_2) & \dots & \dots & v_{2|_1}(t_p) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ v_{r|_1}(t_1) & v_{r|_1}(t_2) & \dots & \dots & v_{r|_1}(t_p) \\ \hline v_{1|_2}(t_1) & v_{1|_2}(t_2) & \dots & \dots & v_{1|_2}(t_p) \\ v_{2|_2}(t_1) & v_{2|_2}(t_2) & \dots & \dots & v_{2|_2}(t_p) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ v_{r|_2}(t_1) & v_{r|_2}(t_2) & \dots & \dots & v_{r|_2}(t_p) \\ \hline \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \hline v_{1|_N}(t_1) & v_{1|_N}(t_2) & \dots & \dots & v_{1|_N}(t_p) \\ v_{2|_N}(t_1) & v_{2|_N}(t_2) & \dots & \dots & v_{2|_N}(t_p) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ v_{r|_N}(t_1) & v_{r|_N}(t_2) & \dots & \dots & v_{r|_N}(t_p) \end{pmatrix} \quad (3.152)$$

On construit alors la matrice de covariance spatiale \mathbf{Cov}_v associée :

$$\mathbf{Cov}_v = \mathbf{Q}_v \mathbf{Q}_v^T \quad (3.153)$$

La matrice de covariance spatiale \mathbf{Cov}_v est de taille $Nbddl \times Nbddl$ avec $Nbddl$ le nombre de degré de liberté défini par :

$$Nbddl = r \times N$$

On résout alors le problème aux valeurs propres :

$$\mathbf{Cov}_v \phi_v = \lambda_v \phi_v \quad (3.154)$$

Qui donne les $Nbddl$ valeurs propres λ_{v_i} associées aux $Nbddl$ vecteurs propres ou fonctions de forme ϕ_{v_i} .

On sélectionne alors les $r + 1$ fonctions de forme les plus représentatives ϕ_i , $i \in [1, \dots, r + 1]$ telles que $\lambda_{v_1} > \lambda_{v_2} > \dots > \lambda_{v_{r+1}} \geq 10^{-8} \lambda_{v_1}$, λ_1 désignant la plus grande valeur propre.

Ainsi, dans une première approximation l'évolution du champ \mathbf{v} au niveau microscopique dans l'intervalle de temps $\{t_k, t_k + p_{micro} \Delta t_{micro} = t_k + \Delta t_{Macro}\}$ peut être approximée par :

$$\mathbf{v}_{moyen}(\mathbf{x}) \approx \sum_{i=1}^{i=r+1} \beta_i \phi_i(\mathbf{x}) \quad (3.155)$$

où les coefficients β_i , $i \in [1, \dots, r + 1]$ peuvent être calculés par :

$$\left\{ \begin{array}{l} E(\beta_i, i \in [1, \dots, r + 1]) = \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\Omega_i} \left[\mathbf{v}_{moyen}(\mathbf{x}) - \sum_{j=1}^{j=r+1} \beta_j \phi_j(\mathbf{x}) \right]^2 d\Omega dt \\ \forall i \in [1, \dots, r + 1] \frac{\partial E(\beta_j, j \in [1, \dots, r + 1])}{\partial \beta_i} = 0 \end{array} \right. \quad (3.156)$$

Ainsi, avec les coefficients beta calculés précédemment on peut définir les $r + 1$ contributions Φ_i , $i \in [1, \dots, r + 1]$ du champ \mathbf{v}_{moyen} telles que :

$$\forall i \in [1, \dots, r + 1] \quad \Phi_i(\mathbf{x}) = \beta_i \phi_i(\mathbf{x}) \quad (3.157)$$

et

$$\mathbf{v}_{moyen}(\mathbf{x}) \approx \sum_{i=1}^{i=r+1} \Phi_i(\mathbf{x}) \quad (3.158)$$

Remarque :

Dans le but de gagner en espace mémoire et donc en temps de calcul on peut construire la matrice de covariance temporelle $\mathbf{CovTemp}_v$ définie par :

$$\mathbf{CovTemp}_v = \mathbf{Q}_v^T \mathbf{Q}_v \quad (3.159)$$

Cette matrice de covariance temporelle $\mathbf{CovTemp}_v$ est en effet de taille $p \times p$ avec p le nombre de pas de temps utilisés pour le calcul microscopique, $p \ll Nbddl$.

3.5.3 Homogénéisation de la conductivité thermique

Cas général

On suppose connu le champ de température $T(\mathbf{X}, \mathbf{x}, t = t_n + k\Delta t_{micro})$, $k \in [0, \dots, p_{micro}]$, $n \in [0, \dots, N_{Macro} - 1]$, où \mathbf{X} représente la position macroscopique relative au domaine microscopique étendu Γ_i (centre de gravité de l'élément macroscopique parent Z_i) et \mathbf{x} le point du domaine microscopique. On construit la matrice \mathbf{Q}_T comme présenté dans l'équation (3.160) :

$$\mathbf{Q}_T = \begin{pmatrix} T_1(t_1) & T_1(t_2) & \dots & T_1(t_p) \\ T_2(t_1) & T_2(t_2) & \dots & T_2(t_p) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ T_N(t_1) & T_N(t_2) & \dots & T_N(t_p) \end{pmatrix} \quad (3.160)$$

On construit la matrice de covariance \mathbf{Cov}_T :

$$\mathbf{Cov}_T = \mathbf{Q}_T \mathbf{Q}_T^T \quad (3.161)$$

Après application de la méthode de réduction de modèle présentée dans la section 2.2.2, on sélectionne les N fonctions de forme ϕ_{T_i} les plus représentatives, c'est à dire associées aux valeurs propres λ_i telles que $\lambda_i \geq 10^{-8} \lambda_1$, où λ_1 désigne la plus grande valeur propre. Supposons que l'on soit dans le cas $N = 2$, c'est à dire que la post-réduction permet d'extraire deux fonctions de forme les plus représentatives ϕ_{T_1} et ϕ_{T_2} (relatives aux deux plus grandes valeurs propres $\lambda_1 > \lambda_2 \geq 10^{-8} \lambda_1$). Ainsi, dans un première approximation l'évolution de la température au niveau microscopique dans l'intervalle de temps $\{t_n, t_n + p_{micro} \Delta t_{micro} = t_n + \Delta t_{Macro}\}$ peut être approximée comme :

$$\mathbf{T}_{moyen}(\mathbf{x}) \approx \beta_{T_1} \phi_{T_1}(\mathbf{x}) + \beta_{T_2} \phi_{T_2}(\mathbf{x}) \quad (3.162)$$

où les coefficients β_{T_1} et β_{T_2} peuvent être calculés en minimisant l'intégrale :

$$\begin{cases} E(\beta_{T_1}, \beta_{T_2}) = \int_{t_n}^{t_n + 1} \int_{\Lambda_i} [\mathbf{T}_{moyen}(\mathbf{x}) - \beta_{T_1} \phi_{T_1}(\mathbf{x}) - \beta_{T_2} \phi_{T_2}(\mathbf{x})]^2 d\Lambda_i dt \\ \frac{\partial E(\beta_{T_1}, \beta_{T_2})}{\partial \beta_{T_1}} = 0 \\ \frac{\partial E(\beta_{T_1}, \beta_{T_2})}{\partial \beta_{T_2}} = 0 \end{cases} \quad (3.163)$$

Ainsi, avec les coefficients beta calculés précédemment on peut définir la première et la deuxième contribution en température respectivement Φ_{T_1} et Φ_{T_2} , avec $\Phi_{T_1} = \beta_{T_1} \phi_{T_1}$ et $\Phi_{T_2} = \beta_{T_2} \phi_{T_2}$. On définit les gradients thermiques locaux correspondants :

$$\begin{cases} \mathbf{g}_{T_1}(\mathbf{x}) = \mathbf{Grad} \Phi_{T_1}(\mathbf{x}) \\ \mathbf{g}_{T_2}(\mathbf{x}) = \mathbf{Grad} \Phi_{T_2}(\mathbf{x}) \end{cases} \quad (3.164)$$

Et les gradients locaux moyens :

$$\begin{cases} \mathbf{G}_{T_1}(\mathbf{X}) = \frac{1}{|\Lambda_i|} \int_{\Lambda_i} \mathbf{g}_{T_1}(\mathbf{x}) \\ \mathbf{G}_{T_2}(\mathbf{X}) = \frac{1}{|\Lambda_i|} \int_{\Lambda_i} \mathbf{g}_{T_2}(\mathbf{x}) \end{cases} \quad (3.165)$$

Le tenseur de transfert d'échelle $\mathbf{M}_T(\mathbf{X}, \mathbf{x})$ est alors défini par :

$$\mathbf{g}_T(\mathbf{x}) = \mathbf{M}_T(\mathbf{X}, \mathbf{x}) \mathbf{G}_T(\mathbf{X}) \quad (3.166)$$

Et en appliquant cette expression aux deux gradients, les quatre composantes du tenseur $\mathbf{M}_T(\mathbf{X}, \mathbf{x})$ en chaque point $\mathbf{x} \in \Lambda_i$ peuvent être calculés :

$$\begin{cases} \mathbf{g}_{T_1}(\mathbf{x}) &= \mathbf{M}_T(\mathbf{X}, \mathbf{x}) \mathbf{G}_{T_1}(\mathbf{X}) \\ \mathbf{g}_{T_2}(\mathbf{x}) &= \mathbf{M}_T(\mathbf{X}, \mathbf{x}) \mathbf{G}_{T_2}(\mathbf{X}) \end{cases} \quad (3.167)$$

où \mathbf{X} permet de localiser Γ_i dans Ω . Finalement, le tenseur de conductivité homogénéisée correspondant au domaine microscopique Λ_i est déduit :

$$\widehat{\mathbf{k}}_{\Lambda_i}(\mathbf{X}) = \frac{1}{|\Lambda_i|} \int_{\Lambda_i} \mathbf{k}_{\Lambda_i}(\mathbf{x}) \mathbf{M}(\mathbf{X}, \mathbf{x}) d\Lambda_i \quad (3.168)$$

où $\mathbf{k}(\mathbf{x})$ est la conductivité thermique en tout point du domaine microscopique Λ_i .

Remarque : dans le cas où le nombre N de fonctions de forme les plus représentatives est supérieur à 2 (dans le cas par exemple d'un champ thermique fortement non-linéaire), on se ramène alors à deux fonctions de forme en réalisant une combinaison linéaire des fonctions de forme les plus représentatives.

Domaine de transition Ξ_i

La conductivité thermique en un point \mathbf{x} du domaine de transition Ξ_i du domaine microscopique étendu Γ_i est :

$$\mathbf{k}_{\Xi_i}(\mathbf{x}) \approx \widehat{\mathbf{k}}_{\Lambda_i} \quad (3.169)$$

Extension au domaine macroscopique Ω

Comme il a été vu dans l'introduction de la section, la manière la plus simple de définir la conductivité thermique en n'importe quel point du domaine macroscopique Ω consiste à utiliser l'interpolation C-NEM construite sur la base du diagramme de Voronoï relatif au nuage de points des centres de gravité des éléments macroscopiques Z_i . Soit $\tilde{\psi}_i$ la fonction de forme relative au centre de gravité de Z_i qui est parfaitement définie dans l'ensemble du domaine Ω . Ainsi, la conductivité thermique en tout point \mathbf{X} du domaine macroscopique Ω s'écrit :

$$\mathbf{k}_{\Omega}(\mathbf{X}) = \sum_{i=1}^{i=V} \tilde{\psi}_i(\mathbf{X}) \widehat{\mathbf{k}}_{\Lambda_i} \quad (3.170)$$

Par conséquent la conductivité thermique est parfaitement définie en tout point \mathbf{X} du domaine macroscopique Ω .

Cas où la 2^{ème} fonction de forme n'est pas significative : $\lambda_2 < 10^{-8} \lambda_1$

Si la deuxième fonction de forme ϕ_{T_2} n'est pas significative, *i.e.* $\lambda_2 < 10^{-8} \lambda_1$, alors l'évolution de la température au niveau microscopique dans l'intervalle de temps

$$\{t_n, t_n + p_{micro} \Delta t_{micro} = t_n + \Delta t_{Macro}\}$$

peut être approximée comme :

$$\mathbf{T}_{moyen}(\mathbf{x}) \approx \beta_{T_1} \phi_{T_1}(\mathbf{x}) \quad (3.171)$$

Dans ce cas le gradient thermique microscopique \mathbf{g}_{T_2} et le gradient thermique macroscopique \mathbf{G}_{T_2} ne sont pas définis. On doit donc construire un gradient thermique microscopique $\mathbf{g}_{T_2}(\mathbf{x})$ en tout point \mathbf{x} du domaine microscopique Λ_i et un gradient thermique macroscopique associée $\mathbf{G}_{T_2}(\mathbf{X})$ pour calculer les composantes du tenseur de transfert d'échelle $\mathbf{M}_T(\mathbf{X}, \mathbf{x})$. En effet l'équation (3.167) conduit à :

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_T(\mathbf{X}, \mathbf{x}) &= \mathbf{G}_T^{-1}(\mathbf{X}) \times \mathbf{g}_T(\mathbf{x}) = \\ &= \begin{bmatrix} G_{T1X}(\mathbf{X}) & G_{T1Y}(\mathbf{X}) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & G_{T1X}(\mathbf{X}) & G_{T1Y}(\mathbf{X}) \\ G_{T2X}(\mathbf{X}) & G_{T2Y}(\mathbf{X}) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & G_{T2X}(\mathbf{X}) & G_{T2Y}(\mathbf{X}) \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} g_{T1x}(\mathbf{x}) \\ g_{T1y}(\mathbf{x}) \\ g_{T2x}(\mathbf{x}) \\ g_{T2y}(\mathbf{x}) \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (3.172)$$

Le tenseur $\mathbf{G}_T(\mathbf{X})$ doit être inversible, *i.e.*

$$\det[\mathbf{G}_T(\mathbf{X})] \neq 0 \quad (3.173)$$

soit :

$$G_{T1X}(\mathbf{X}) \cdot G_{T2Y}(\mathbf{X}) \neq G_{T1Y}(\mathbf{X}) \cdot G_{T2X}(\mathbf{X}) \quad (3.174)$$

On définit pour ceci un gradient thermique microscopique $\mathbf{g}_{T_2}(\mathbf{x})$ en tout point \mathbf{x} du domaine microscopique Λ_i tel que :

$$\mathbf{g}_{T_2}(\mathbf{x}) \perp \mathbf{g}_{T_1}(\mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{x} \in \Lambda_i \Leftrightarrow \mathbf{g}_{T_2}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{g}_{T_1}(\mathbf{x}) = 0 \quad \forall \mathbf{x} \in \Lambda_i \quad (3.175)$$

Ainsi on peut calculer le tenseur de transfert d'échelle $\mathbf{M}_T(\mathbf{X}, \mathbf{x})$ en tout point \mathbf{x} du domaine microscopique Λ_i et la conductivité thermique homogénéisée $\hat{\mathbf{k}}_{\Lambda_i}$ sur le domaine microscopique Λ_i au moyen de l'équation (3.168).

Homogénéisation au moyen des gradients thermiques

On suppose connu le champ de température $T(\mathbf{X}, \mathbf{x}, t = t_n + k\Delta t_{micro})$, $k \in [0, \dots, p_{micro}]$, $n \in [0, \dots, N_{Macro} - 1]$, où \mathbf{X} représente la position macroscopique relative au domaine microscopique étendu Γ_i (centre de gravité de l'élément macroscopique parent Z_i) et \mathbf{x} le point du domaine microscopique Λ_i .

On construit le gradient thermique microscopique $\nabla T(\mathbf{X}, \mathbf{x}, t = t_n + k\Delta t_{micro})$, $k \in [0, \dots, p_{micro}]$, $n \in [0, \dots, N_{Macro} - 1]$ en chaque point \mathbf{x} du domaine microscopique Λ_i . En 2D, on a :

$$\nabla T(\mathbf{x}, t) = \begin{bmatrix} \frac{\partial T(\mathbf{x}, t)}{\partial x} \\ \frac{\partial T(\mathbf{x}, t)}{\partial y} \end{bmatrix} \quad (3.176)$$

On construit la matrice des gradients thermiques microscopiques $\mathbf{Q}_{\nabla T}$ comme présenté dans l'équation (3.177) :

$$\mathbf{Q}_{\nabla T} = \begin{pmatrix} \nabla T_1(t_1) & \nabla T_1(t_2) & \dots & \nabla T_1(t_p) \\ \nabla T_2(t_1) & \nabla T_2(t_2) & \dots & \nabla T_2(t_p) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \nabla T_N(t_1) & \nabla T_N(t_2) & \dots & \nabla T_N(t_p) \end{pmatrix} \quad (3.177)$$

puis la matrice de covariance spatiale $\mathbf{Cov}_{\nabla T}$:

$$\mathbf{Cov}_{\nabla T} = \mathbf{Q}_{\nabla T} \mathbf{Q}_{\nabla T}^T \quad (3.178)$$

On résout alors le problème aux valeurs propres :

$$\mathbf{Cov}_{\nabla T} \phi_{\nabla T} = \lambda_{\nabla T} \phi_{\nabla T} \quad (3.179)$$

On sélectionne alors les deux fonctions de forme les plus représentatives $\phi_{\nabla T_1}$ et $\phi_{\nabla T_2}$ (relatives aux deux plus grandes valeurs propres $\lambda_{\nabla T_1} > \lambda_{\nabla T_2}$).

Deux cas peuvent alors se présenter :

- Cas où $\lambda_{\nabla T_1} > \lambda_{\nabla T_2} \geq 10^{-8} \lambda_{\nabla T_1}$

Dans une première approximation l'évolution du gradient de température au niveau microscopique dans l'intervalle de temps $\{t_n, t_n + p_{micro} \Delta t_{micro} = t_n + \Delta t_{Macro}\}$ peut être approximée comme :

$$\nabla T_{moyen}(\mathbf{x}) \approx \beta_{\nabla T_1} \phi_{\nabla T_1}(\mathbf{x}) + \beta_{\nabla T_2} \phi_{\nabla T_2}(\mathbf{x}) \quad (3.180)$$

où les coefficients $\beta_{\nabla T_1}$ et $\beta_{\nabla T_2}$ peuvent être calculés en minimisant l'intégrale :

$$\begin{cases} E(\beta_{\nabla T_1}, \beta_{\nabla T_2}) = \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\Lambda_i} [\nabla T_{moyen}(\mathbf{x}) - \beta_{\nabla T_1} \phi_{\nabla T_1}(\mathbf{x}) - \beta_{\nabla T_2} \phi_{\nabla T_2}(\mathbf{x})]^2 d\Lambda_i dt \\ \frac{\partial E(\beta_{\nabla T_1}, \beta_{\nabla T_2})}{\partial \beta_{\nabla T_1}} = 0 \\ \frac{\partial E(\beta_{\nabla T_1}, \beta_{\nabla T_2})}{\partial \beta_{\nabla T_2}} = 0 \end{cases} \quad (3.181)$$

Ainsi, avec les coefficients beta calculés précédemment on peut définir la première et la deuxième contribution en gradient de température respectivement $\Phi_{\nabla T_1}$ et $\Phi_{\nabla T_2}$, avec $\Phi_{\nabla T_1} = \beta_{\nabla T_1} \phi_{\nabla T_1}$ et $\Phi_{\nabla T_2} = \beta_{\nabla T_2} \phi_{\nabla T_2}$. On définit alors les gradients thermiques locaux moyens :

$$\begin{cases} \mathbf{G}_{\nabla T_1}(\mathbf{X}) = \frac{1}{|\Lambda_i|} \int_{\Lambda_i} \Phi_{\nabla T_1}(\mathbf{x}) \\ \mathbf{G}_{\nabla T_2}(\mathbf{X}) = \frac{1}{|\Lambda_i|} \int_{\Lambda_i} \Phi_{\nabla T_2}(\mathbf{x}) \end{cases} \quad (3.182)$$

Le tenseur de transfert d'échelle $\mathbf{M}_{\nabla T}(\mathbf{X}, \mathbf{x})$ est alors défini par :

$$\Phi_{\nabla T}(\mathbf{x}) = \mathbf{M}_{\nabla T}(\mathbf{X}, \mathbf{x}) \mathbf{G}_{\nabla T}(\mathbf{X}) \quad (3.183)$$

Et en appliquant cette expression aux deux gradients, les quatre composantes du tenseur $\mathbf{M}_{\nabla T}(\mathbf{X}, \mathbf{x})$ en chaque point $\mathbf{x} \in \Lambda_i$ peuvent être calculés :

$$\begin{cases} \Phi_{\nabla T_1}(\mathbf{x}) = \mathbf{M}_{\nabla T}(\mathbf{X}, \mathbf{x}) \mathbf{G}_{\nabla T_1}(\mathbf{X}) \\ \Phi_{\nabla T_2}(\mathbf{x}) = \mathbf{M}_{\nabla T}(\mathbf{X}, \mathbf{x}) \mathbf{G}_{\nabla T_2}(\mathbf{X}) \end{cases} \quad (3.184)$$

où \mathbf{X} permet de localiser Γ_i dans Ω . Finalement, le tenseur de conductivité thermique homogénéisée $\hat{\mathbf{k}}_{\Lambda_i}$ correspondant au domaine microscopique Λ_i est déduit :

$$\hat{\mathbf{k}}_{\Lambda_i}(\mathbf{X}) = \frac{1}{|\Lambda_i|} \int_{\Lambda_i} \mathbf{k}_{\Lambda_i}(\mathbf{x}) \mathbf{M}_{\nabla T}(\mathbf{X}, \mathbf{x}) d\Lambda_i \quad (3.185)$$

où $\mathbf{k}(\mathbf{x})$ est la conductivité thermique en tout point du domaine microscopique Λ_i .

- Cas où $\lambda_{\nabla T_2} < 10^{-8} \lambda_{\nabla T_1}$

Si la deuxième fonction de forme $\phi_{\nabla T_2}$ n'est pas significative, *i.e.* $\lambda_{\nabla T_2} < 10^{-8} \lambda_{\nabla T_1}$, alors l'évolution de la température au niveau microscopique dans l'intervalle de temps

$$\{t_n, t_n + p_{micro} \Delta t_{micro} = t_n + \Delta t_{Macro}\}$$

peut être approximée comme :

$$\nabla T_{moyen}(\mathbf{x}) \approx \beta_{\nabla T_1} \phi_{\nabla T_1}(\mathbf{x}) \quad (3.186)$$

Dans ce cas le gradient thermique microscopique $\mathbf{g}_{\nabla T_2}$ et le gradient thermique macroscopique $\mathbf{G}_{\nabla T_2}$ ne sont pas définis. On doit donc construire un gradient thermique microscopique $\mathbf{g}_{\nabla T_2}(\mathbf{x})$ en tout point \mathbf{x} du domaine microscopique Λ_i et un gradient thermique macroscopique associée $\mathbf{G}_{\nabla T_2}(\mathbf{X})$ pour calculer les composantes du tenseur de transfert d'échelle $\mathbf{M}_{\nabla T}(\mathbf{X}, \mathbf{x})$. On définit pour ceci un gradient thermique microscopique $\mathbf{g}_{\nabla T_2}(\mathbf{x})$ en tout point \mathbf{x} du domaine microscopique Λ_i tel que :

$$\mathbf{g}_{\nabla T_2}(\mathbf{x}) \perp \mathbf{g}_{\nabla T_1}(\mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{x} \in \Lambda_i \Leftrightarrow \mathbf{g}_{\nabla T_2}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{g}_{\nabla T_1}(\mathbf{x}) = 0 \quad \forall \mathbf{x} \in \Lambda_i \quad (3.187)$$

Ainsi on peut calculer le tenseur de transfert d'échelle $\mathbf{M}_{\nabla T}(\mathbf{X}, \mathbf{x})$ en tout point \mathbf{x} du domaine microscopique Λ_i et la conductivité thermique homogénéisée $\widehat{\mathbf{k}}_{\Lambda_i}$ sur le domaine microscopique Λ_i au moyen de l'équation (3.185).

3.5.4 Homogénéisation du problème mécanique

Homogénéisation du comportement du matériau

L'homogénéisation du tenseur de comportement du matériau est réalisé en imposant un chargement mécanique pur au domaine microscopique Λ_i : $\mathbf{E}(t) \neq 0, \Delta T^{Hom}(t) = 0, \mathbf{E}^{crist}(t) = 0$.

On suppose le tenseur de comportement $\mathbf{C}(\mathbf{x}, t)$ parfaitement défini sur le domaine microscopique Λ_i (le tenseur de comportement dépend de la température). On note $\partial \Lambda_i$ le bord du domaine Λ_i . Le tenseur de comportement dépendant de la température, il convient de définir une température dans l'intervalle de temps $\{t_n, t_n + p_{micro} \Delta t_{micro} = t_n + \Delta t_{Macro}\}$ pour laquelle on effectue l'homogénéisation. On choisit naturellement la température moyenne obtenue après application de la méthode de post-réduction et définie par l'équation (3.171).

Cas linéaire

On utilise dans ce cas une méthode d'homogénéisation classique avec condition de déformation homogène au contour (DH) : on applique les trois champs de déplacement représentés dans la figure 3.32. Il est simple de démontrer (par le théorème de Stokes) que le fait d'appliquer les champs de déplacement :

$$\begin{aligned} \mathbf{U}_d(\mathbf{x} \in \partial \Lambda_i) &= \begin{pmatrix} x \\ 0 \end{pmatrix}, \mathbf{U}_d(\mathbf{x} \in \partial \Lambda_i) = \begin{pmatrix} 0 \\ y \end{pmatrix}, \\ \mathbf{U}_d(\mathbf{x} \in \partial \Lambda_i) &= \begin{pmatrix} y \\ x \end{pmatrix}, \text{ sur } \partial \Lambda_i \end{aligned}$$

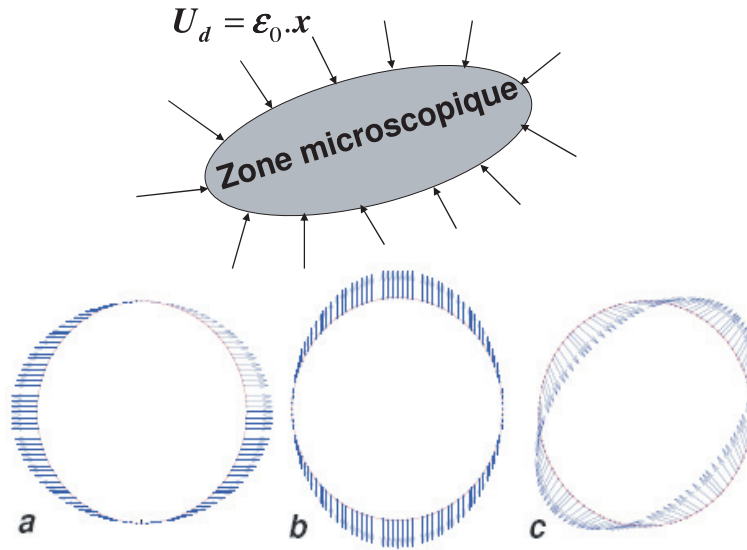


FIGURE 3.32 – Condition de déformation homogène au contour

donne respectivement les déformations moyennes :

$$\langle \epsilon \rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ dans } \Lambda_i. \quad \langle \epsilon \rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ dans } \Lambda_i. \quad \langle \epsilon \rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \text{ dans } \Lambda_i.$$

A chaque cas de conditions aux limites correspond des champs de contrainte et de déformation solution du problème élastique ainsi défini. Les valeurs moyennes des contraintes et des déformations, évaluées sur Λ_i sont notées $\langle \sigma \rangle_{\Lambda_i}$ et $\langle \epsilon \rangle_{\Lambda_i}$ respectivement :

$$\langle \sigma \rangle_{\Lambda_i}^{DH} = \frac{1}{|\Lambda_i|} \int_{\Lambda_i} \sigma(\mathbf{x}) d\Lambda_i \quad (3.188)$$

$$\langle \epsilon \rangle_{\Lambda_i}^{DH} = \frac{1}{|\Lambda_i|} \int_{\Lambda_i} \epsilon(\mathbf{x}) d\Lambda_i \quad (3.189)$$

où $|\Lambda_i|$ est l'aire (volume en 3D) de Λ_i .

La technique d'homogénéisation classique (DH) employée définit le tenseur élastique homogénéisé $\widehat{\mathbf{C}}_{\Lambda_i}^{DH}$ tel que :

$$\langle \sigma \rangle_{\Lambda_i}^{DH} = \widehat{\mathbf{C}}_{\Lambda_i}^{DH} \langle \epsilon \rangle_{\Lambda_i}^{DH} \quad (3.190)$$

On note ainsi que les valeurs moyennes des contraintes $\langle \sigma \rangle_{\Lambda_i}$ associées aux solutions du problème élastique décrit par la figure 3.32 définissent les colonnes de la matrice représentative du tenseur de comportement homogénéisé $\widehat{\mathbf{C}}_{\Lambda_i}^{DH}$. On considère donc que le tenseur de comportement homogénéisé associé au domaine microscopique Λ_i est :

$$\widehat{\mathbf{C}}_{\Lambda_i} \equiv \widehat{\mathbf{C}}_{\Lambda_i}^{DH} \quad (3.191)$$

Remarque : homogénéisation du comportement dans le cas non-linéaire

Dans le cas d'un comportement du matériau non-linéaire, on peut appliquer la même méthode

que celle utilisée pour l'homogénéisation de la conductivité thermique.

On suppose connu le champ de déplacement $\mathbf{U}(\mathbf{X}, \mathbf{x}, t = t_n + k\Delta t_{micro})$, $k \in [0, \dots, p_{micro}]$, $n \in [0, \dots, N_{Macro} - 1]$, où \mathbf{X} représente la position macroscopique relative au domaine microscopique étendu Γ_i (centre de gravité de l'élément macroscopique parent Z_i) et \mathbf{x} le point du domaine microscopique. On construit la matrice \mathbf{Q}_U :

$$\mathbf{Q}_U = \begin{pmatrix} U_{X_1^1} & U_{X_1^2} & \dots & U_{X_1^M} \\ U_{Y_2^1} & U_{Y_2^2} & \dots & U_{Y_2^M} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ U_{X_N^1} & U_{X_N^2} & \dots & U_{X_N^M} \\ U_{Y_N^1} & U_{Y_N^2} & \dots & U_{Y_N^M} \end{pmatrix} \quad (3.192)$$

On construit la matrice de covariance \mathbf{Cov}_U :

$$\mathbf{Cov}_U = \mathbf{Q}_U \mathbf{Q}_U^T \quad (3.193)$$

On sélectionne alors les trois fonctions de forme les plus représentatives ϕ_{U_1} , ϕ_{U_2} et ϕ_{U_3} (relatives aux trois plus grandes valeurs propres $\lambda_{U_1} > \lambda_{U_2} > \lambda_{U_3} \geq 10^{-8} \lambda_{U_1}$). Ainsi, dans une première approximation l'évolution du champ de déplacement au niveau microscopique dans l'intervalle de temps $\{t_n, t_n + p_{micro}\Delta t_{micro} = t_n + \Delta t_{Macro}\}$ peut être approximée comme :

$$\mathbf{U}_{moyen}(\mathbf{x}) \approx \beta_{U_1} \phi_{U_1}(\mathbf{x}) + \beta_{U_2} \phi_{U_2}(\mathbf{x}) + \beta_{U_3} \phi_{U_3}(\mathbf{x}) \quad (3.194)$$

où les coefficients β_{U_1} , β_{U_2} et β_{U_3} peuvent être calculés en minimisant l'intégrale :

$$E(\beta_{U_1}, \beta_{U_2}, \beta_{U_3}) = \int_{t_n}^{t_n + \Delta t} \int_{\Omega_i} [\mathbf{U}(\mathbf{x}, t) - \beta_{U_1} \phi_{U_1}(\mathbf{x}) - \beta_{U_2} \phi_{U_2}(\mathbf{x}) - \beta_{U_3} \phi_{U_3}(\mathbf{x})]^2 d\Omega dt \quad (3.195)$$

Ainsi, avec les coefficients beta calculés précédemment on peut définir la première, la deuxième contribution et la troisième contribution en déplacement respectivement Φ_{U_1} , Φ_{U_2} et Φ_{U_3} , avec :

$$\begin{aligned} \Phi_{U_1} &= \beta_{U_1} \phi_{U_1} \\ \Phi_{U_2} &= \beta_{U_2} \phi_{U_2} \\ \Phi_{U_3} &= \beta_{U_3} \phi_{U_3} \end{aligned} \quad (3.196)$$

On définit la déformation locale ϵ_U associée au champ de déplacement $\Phi_U = \begin{pmatrix} \Phi_{U_x} \\ \Phi_{U_y} \end{pmatrix}$ par :

$$\epsilon_U = \begin{pmatrix} \frac{\partial \Phi_{U_x}}{\partial x} \\ \frac{\partial \Phi_{U_y}}{\partial y} \\ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \Phi_{U_x}}{\partial y} + \frac{\partial \Phi_{U_y}}{\partial x} \right) \end{pmatrix} \quad (3.197)$$

On définit les déformations moyennes associées (on a le droit car la déformation ϵ_U dérive du champ de déplacement Φ_U) :

$$\begin{cases} \mathbf{E}_{U_1}(\mathbf{X}) = \frac{1}{|\Omega_i|} \int_{\Omega_i} \epsilon_{U_1}(\mathbf{x}) \\ \mathbf{E}_{U_2}(\mathbf{X}) = \frac{1}{|\Omega_i|} \int_{\Omega_i} \epsilon_{U_2}(\mathbf{x}) \\ \mathbf{E}_{U_3}(\mathbf{X}) = \frac{1}{|\Omega_i|} \int_{\Omega_i} \epsilon_{U_3}(\mathbf{x}) \end{cases} \quad (3.198)$$

Le tenseur de transfert d'échelle $\mathbf{M}_U(\mathbf{X}, \mathbf{x})$ est alors défini par :

$$\boldsymbol{\epsilon}_U(\mathbf{x}) = \mathbf{M}_U(\mathbf{X}, \mathbf{x}) \mathbf{E}_U(\mathbf{X}) \quad (3.199)$$

Et en appliquant cette expression aux trois déformations, les neuf composantes du tenseur $\mathbf{M}_U(\mathbf{X}, \mathbf{x})$ en chaque point $\mathbf{x} \in \Omega_i$ du domaine microscopique Λ_i peuvent être calculés :

$$\begin{cases} \boldsymbol{\epsilon}_{U_1}(\mathbf{x}) = \mathbf{M}_U(\mathbf{X}, \mathbf{x}) \mathbf{E}_{U_1}(\mathbf{X}) \\ \boldsymbol{\epsilon}_{U_2}(\mathbf{x}) = \mathbf{M}_U(\mathbf{X}, \mathbf{x}) \mathbf{E}_{U_2}(\mathbf{X}) \\ \boldsymbol{\epsilon}_{U_3}(\mathbf{x}) = \mathbf{M}_U(\mathbf{X}, \mathbf{x}) \mathbf{E}_{U_3}(\mathbf{X}) \end{cases} \quad (3.200)$$

où \mathbf{X} permet de localiser Λ_i dans le domaine macroscopique Ω . Finalement, le tenseur de comportement homogénéisé $\widehat{\mathbf{C}}_{\Lambda_i}$ correspondant au domaine microscopique Λ_i est déduit :

$$\widehat{\mathbf{C}}_{\Lambda_i}(\mathbf{X}) = \frac{1}{|\Lambda_i|} \int_{\Lambda_i} \mathbf{C}(\mathbf{x}) \mathbf{M}_U(\mathbf{X}, \mathbf{x}) d\Lambda_i \quad (3.201)$$

Domaine de transition Ξ_i

On suppose les variations spatiales faibles dans le domaine de transition Ξ_i du domaine microscopique étendu Γ_i .

Par conséquent le tenseur de comportement du matériau en un point \mathbf{x} du domaine de transition Ξ_i du domaine microscopique étendu Γ_i est :

$$\mathbf{C}_{\Xi_i}(\mathbf{x}) \approx \widehat{\mathbf{C}}_{\Lambda_i} \quad (3.202)$$

Extension au domaine macroscopique Ω

Comme il a été vu dans l'introduction de la section, la manière la plus simple de définir la conductivité thermique en n'importe quel point du domaine macroscopique Ω consiste à utiliser l'interpolation C-NEM construite sur la base du diagramme de Voronoï relatif au nuage de points des centres de gravité des éléments macroscopiques Z_i . Soit $\tilde{\psi}_i$ la fonction de forme relative au centre de gravité de Z_i qui est parfaitement définie dans l'ensemble du domaine Ω . Ainsi, le tenseur de comportement du matériau en tout point \mathbf{X} du domaine macroscopique Ω s'écrit :

$$\mathbf{C}_\Omega(\mathbf{X}) = \sum_{i=1}^{i=V} \tilde{\psi}_i(\mathbf{X}) \widehat{\mathbf{C}}_{\Lambda_i} \quad (3.203)$$

Par conséquent le tenseur de comportement du matériau est parfaitement défini en tout point \mathbf{X} du domaine macroscopique Ω .

Homogénéisation du tenseur de dilatation thermique

Comme on l'a vu dans la section 3.1.5, l'homogénéisation du tenseur de dilatation thermique est effectué en considérant un problème thermique pur sur le domaine microscopique Λ_i : $\mathbf{E}(t) = 0$, $\Delta T^{Hom}(t) \neq 0$, $\mathbf{E}^{cris}(t) = 0$, ce qui correspond à un chargement thermique pur imposé sans calculer le terme de cristallisation.

Pour effectuer le calcul d'homogénéisation, il faut définir une variation de température ΔT constante sur le domaine microscopique Λ_i dans l'intervalle de temps

$\{t_n, t_n + p_{micro}\Delta t_{micro} = t_n + \Delta t_{Macro}\}$.

On choisit naturellement de définir cette variation de température ΔT par :

$$\Delta T = \widehat{T} - T_{ref} \quad (3.204)$$

avec T_{ref} la température pour laquelle il n'y a pas de dilatation thermique et \widehat{T} la température moyenne sur le domaine microscopique Λ_i dans l'intervalle de temps

$\{t_n, t_n + p_{micro}\Delta t_{micro} = t_n + \Delta t_{Macro}\}$ définie par :

$$\widehat{T} = \langle \mathbf{T}_{moyen} \rangle = \frac{1}{|\Lambda_i|} \int_{\Lambda_i} \mathbf{T}_{moyen}(\mathbf{x}) d\Lambda_i \quad (3.205)$$

avec $\mathbf{T}_{moyen}(\mathbf{x})$ la température moyenne calculée après application de la méthode de post-réduction et donnée par l'équation (3.162).

Domaine de transition Ξ_i

On suppose les variations spatiales faibles dans le domaine de transition Ξ_i du domaine microscopique étendu Γ_i .

Par conséquent le tenseur de dilatation thermique en un point \mathbf{x} du domaine de transition Ξ_i du domaine microscopique étendu Γ_i est :

$$\alpha_{\Xi_i}(\mathbf{x}) \approx \widehat{\alpha}_{\Lambda_i} \quad (3.206)$$

Extension au domaine macroscopique Ω

Comme il a été vu dans l'introduction de la section, la manière la plus simple de définir la conductivité thermique en n'importe quel point du domaine macroscopique Ω consiste à utiliser l'interpolation C-NEM construite sur la base du diagramme de Voronoï relatif au nuage de points des centres de gravité des éléments macroscopiques Z_i . Soit $\widetilde{\psi}_i$ la fonction de forme relative au centre de gravité de Z_i qui est parfaitement définie dans l'ensemble du domaine Ω . Ainsi, le tenseur de dilatation thermique en tout point \mathbf{X} du domaine macroscopique Ω s'écrit :

$$\alpha_{\Omega}(\mathbf{X}) = \sum_{i=1}^{i=V} \widetilde{\psi}_i(\mathbf{X}) \widehat{\alpha}_{\Lambda_i} \quad (3.207)$$

Par conséquent le tenseur de dilatation thermique est parfaitement défini en tout point \mathbf{X} du domaine macroscopique Ω .

Homogénéisation de la densité du matériau

La densité moyenne du matériau dans le domaine microscopique Λ_i dans l'intervalle de temps $\{t_n, t_n + p_{micro}\Delta t_{micro} = t_n + \Delta t_{Macro}\}$ est définie par :

$$\langle \rho \rangle_{\Lambda_i} = \frac{1}{|\Lambda_i|} \int_{\Lambda_i} \rho(\mathbf{x}) \quad (3.208)$$

Domaine de transition Ξ_i

On suppose les variations spatiales faibles dans le domaine de transition Ξ_i du domaine microscopique étendu Γ_i .

Par conséquent la densité du matériau en un point \mathbf{x} du domaine de transition Ξ_i du domaine microscopique étendu Γ_i est :

$$\rho_{\Xi_i}(\mathbf{x}) \approx \hat{\rho}_{\Lambda_i} \quad (3.209)$$

Extension au domaine macroscopique Ω

Comme il a été vu dans l'introduction de la section, la manière la plus simple de définir la conductivité thermique en n'importe quel point du domaine macroscopique Ω consiste à utiliser l'interpolation C-NEM construite sur la base du diagramme de Voronoï relatif au nuage de points des centres de gravité des éléments macroscopiques Z_i . Soit $\tilde{\psi}_i$ la fonction de forme relative au centre de gravité de Z_i qui est parfaitement définie dans l'ensemble du domaine Ω . Ainsi, la densité du matériau en tout point \mathbf{X} du domaine macroscopique Ω s'écrit :

$$\rho_{\Omega}(\mathbf{X}) = \sum_{i=1}^{i=V} \tilde{\psi}_i(\mathbf{X}) \hat{\rho}_{\Lambda_i} \quad (3.210)$$

Par conséquent la densité du matériau est parfaitement défini en tout point \mathbf{X} du domaine macroscopique Ω .

3.6 Description du schéma algorithmique utilisé

3.6.1 Schéma algorithmique général

Le schéma algorithmique général est présenté ci-dessous (figure 3.33).

Le calcul est divisé ainsi en 4 étapes :

1. Initialisation du calcul : choix de la géométrie à l'échelle macroscopique, choix du nombre et de l'emplacement des domaines microscopiques ;
2. La résolution du problème couplé thermique, mécanique et cinétique (cristallisation) à l'échelle macroscopique, en se plaçant dans l'intervalle de temps $\{t_i, t_i + \Delta t_{Macro}\}$, $i \in [1, \dots, N_{Macro}]$;
3. La résolution du problème couplé thermique, mécanique et cinétique (cristallisation) à l'échelle microscopique, en se plaçant dans les intervalles de temps : $\{t_i + (q - 1) \Delta t_{micro}, t_i + q \Delta t_{micro}\}$, $q \in [1, \dots, p_{micro}]$, avec $p_{micro} \Delta t_{micro} = \Delta t_{Macro}$ (partition temporelle) ;
4. L'homogénéisation des propriétés thermomécaniques du matériau : tenseur de comportement , tenseur de conductivité thermique, tenseur de dilatation thermique et densité.

3.6.2 Initialisation du calcul

L'initialisation du calcul débute par la définition du domaine macroscopique (Etape 1, figure 3.34) :

- Nombre de plis ;
- Orientations des plis ;

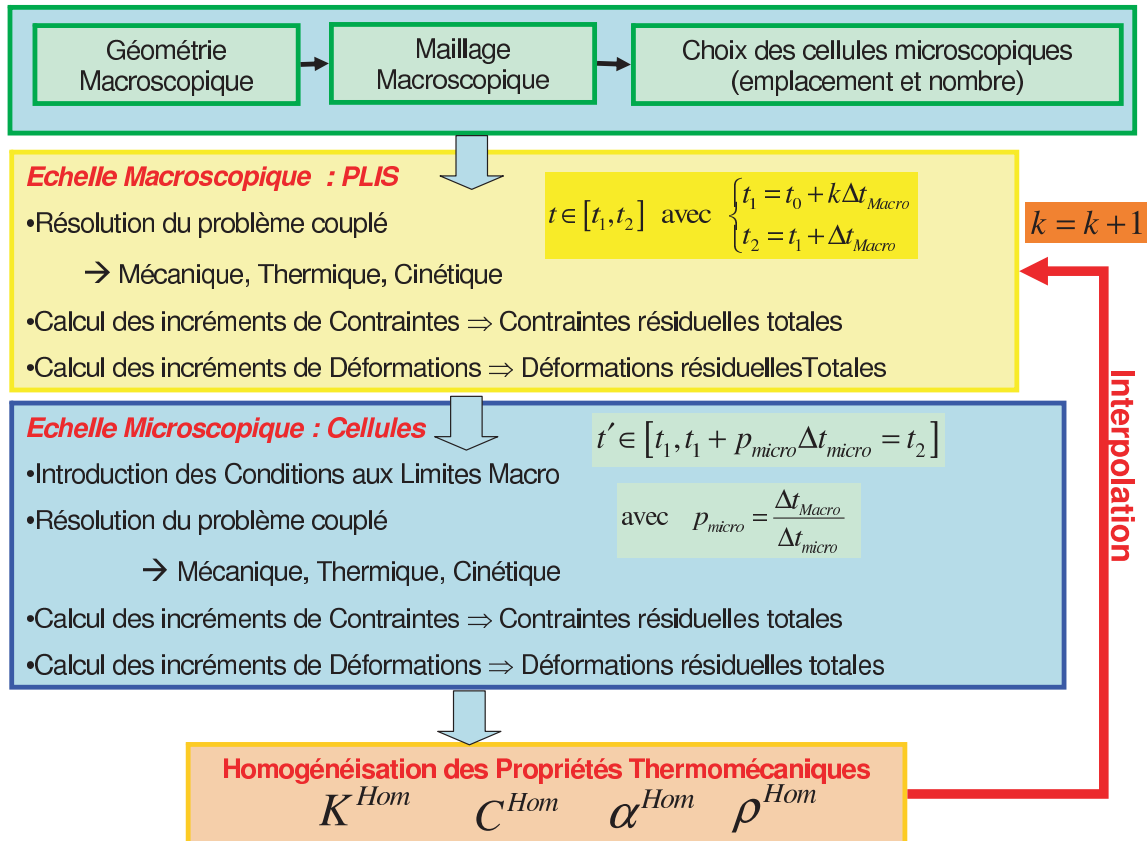


FIGURE 3.33 – Schéma algorithmique général

– Définition des Conditions Limites.

L'étape 2 (figure 3.34) de l'initialisation du calcul consiste à définir le nombre et l'orientation des cellules microscopiques dans chaque pli. Dans notre modèle, nous prenons en compte les

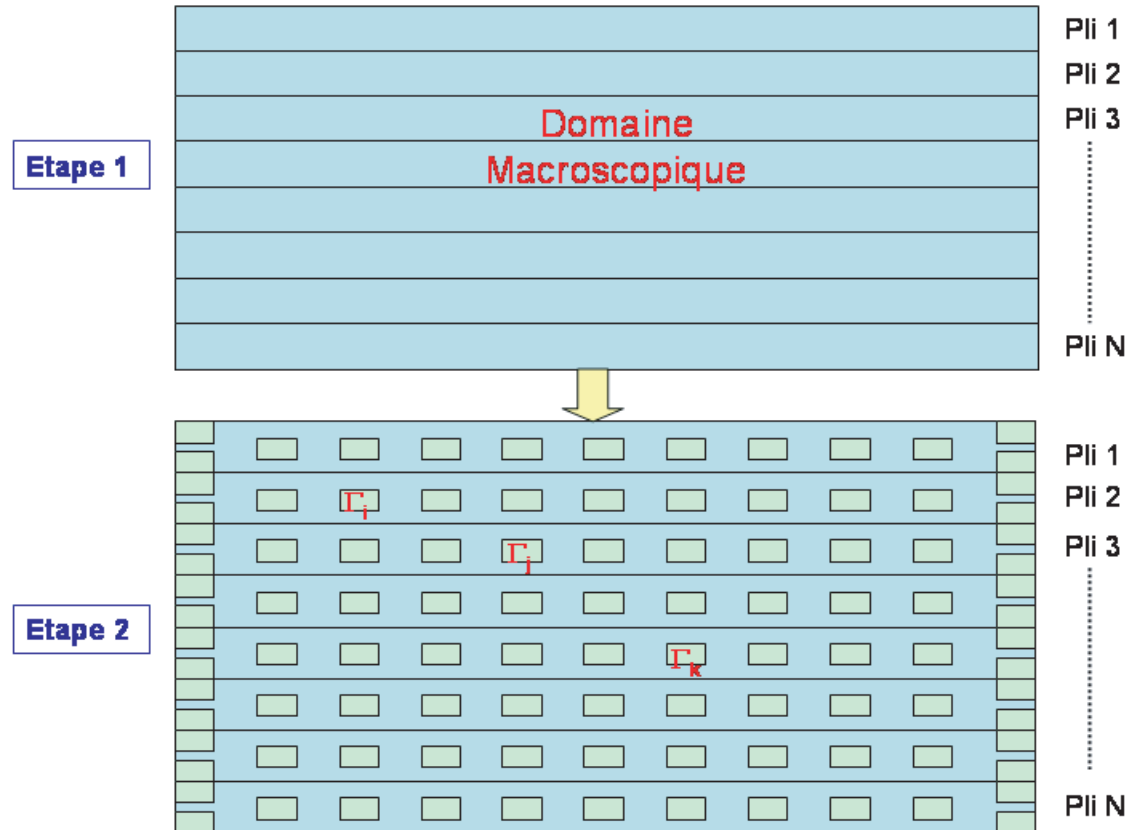


FIGURE 3.34 – Etapes d'initialisation du calcul

variations des propriétés thermomécaniques du matériau avec la température et le degré de cristallinité. Nous présentons les différentes propriétés thermomécaniques insérées dans notre modèle dans la section suivante.

3.6.3 Variation des propriétés thermomécaniques du matériau : insertion dans le modèle

Nous présentons ci-après les différentes propriétés thermomécaniques insérées dans le modèle développé :

- comportement du matériau ;
- chaleur spécifique ;
- densité ;
- conductivité thermique ;
- dilatation thermique.

Comportement du matériau

Les paramètres du comportement des fibres de carbone sont donnés dans le tableau 3.3 et de la matrice PEEK sont donnés dans le tableau 3.4.

Modules	
E_1 Module de traction axial (GPa)	227
E_2 Module de traction transverse (GPa)	15
G_{12} Module de cisaillement axial(GPa)	20
G_{23} Module de torsion (GPa)	5
Coefficients de Poisson	
ν_{12} Contraction transverse avec extension axiale	0.25
ν_{23} Contraction transverse avec extension transverse	0.40
ν_{21} Contraction axiale avec extension transverse	0.013

TABLE 3.3 – Modules et coefficients de Poisson des fibres de carbone [Cog92]

Modules	
Températures (°C)	E Module d'Young (MPa)
20 – 143	3.6×10^3
143 – 300	360
300 – 340	3.6
340 – 500	> 0.5
Coefficients de Poisson	
ν Coefficient de Poisson	0.33

TABLE 3.4 – Modules et coefficients de Poisson du PEEK [Cog92]

L'évolution du module d'Young de la matrice PEEK en fonction de la température est illustrée sur la figure 3.35.

Chaleur spécifique

Les chaleurs spécifiques du matériau composite APC-2 ,de la matrice PEEK et des fibres de carbone sont données respectivement sur les tableaux 3.5, 3.6 et 3.7. L'évolution du module des

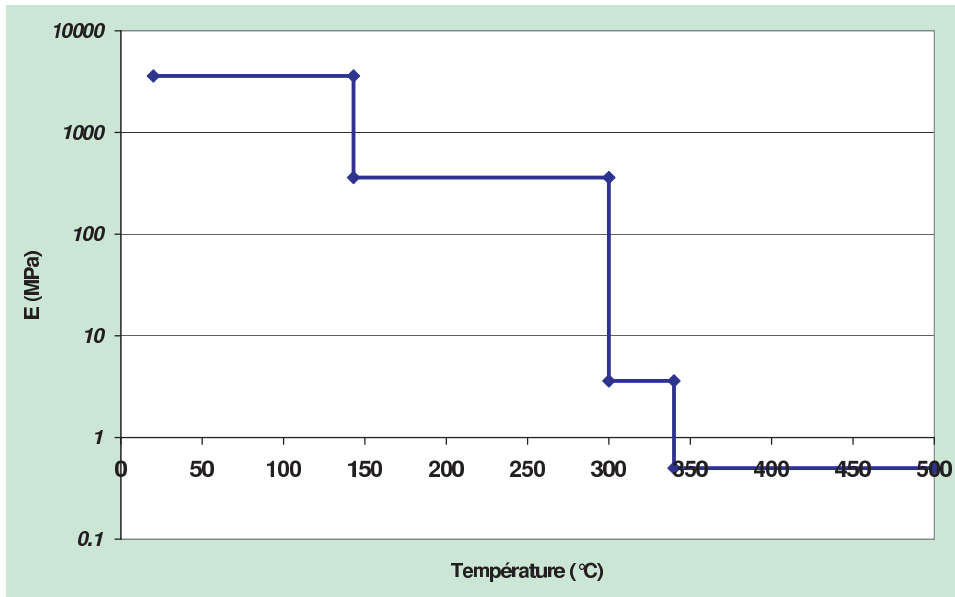


FIGURE 3.35 – Module du PEEK (GPa) en fonction de la température (°C)

$$C_p (J.kg^{-1}.^{\circ}C^{-1}) = 2.31 \times T + 831.$$

TABLE 3.5 – Cp de l'APC-2

chaleurs spécifiques du matériau composite APC-2 ,de la matrice PEEK et des fibres de carbone sont données respectivement sur les figures 3.36, 3.37 et 3.7.

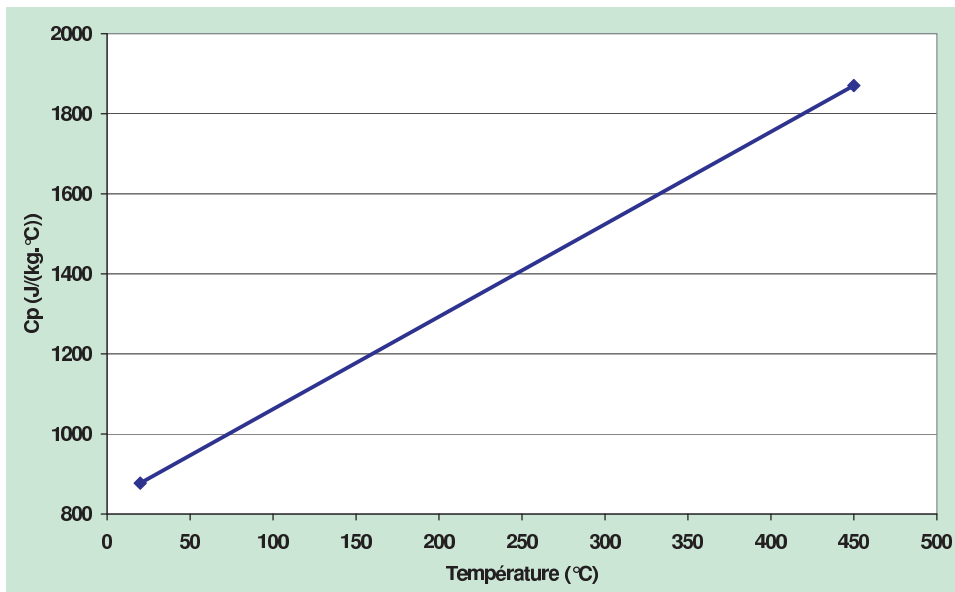
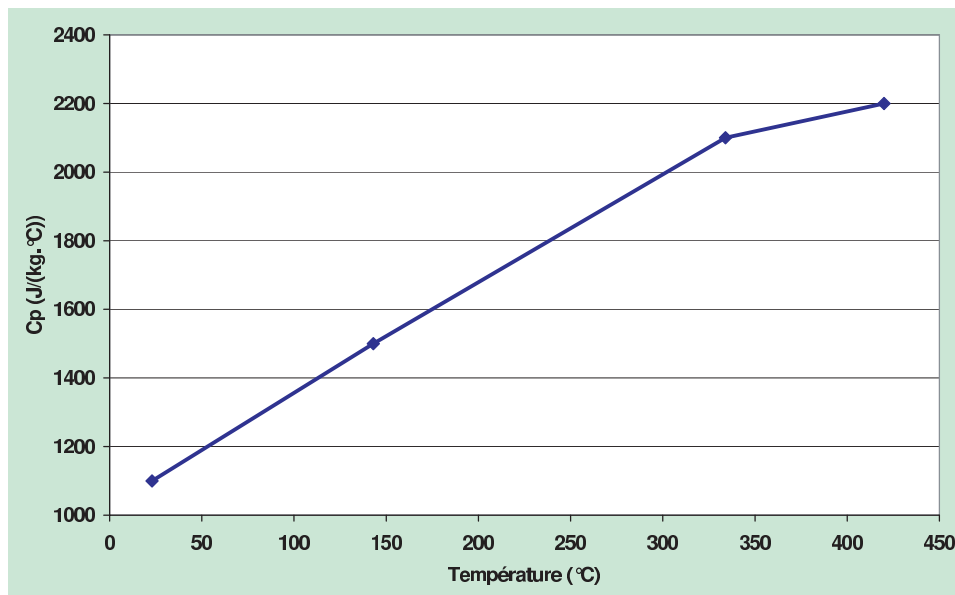


FIGURE 3.36 – Chaleur spécifique de l'APC-2 ($J.kg^{-1}.^{\circ}C^{-1}$) en fonction de la température (°C)

Temperature ($^{\circ}C$)	Cp ($J.kg^{-1}.^{\circ}C^{-1}$)
23	1100
143	1500
334	2100
420	2200

TABLE 3.6 – Cp du PEEK

FIGURE 3.37 – Chaleur spécifique du PEEK ($Jkg^{-1}^{\circ}C^{-1}$) en fonction de la température ($^{\circ}C$)

Temperature ($^{\circ}C$)	Cp ($J.kg^{-1}.^{\circ}C^{-1}$)
23	750
143	990
380	1420

TABLE 3.7 – Cp des Fibres de carbone

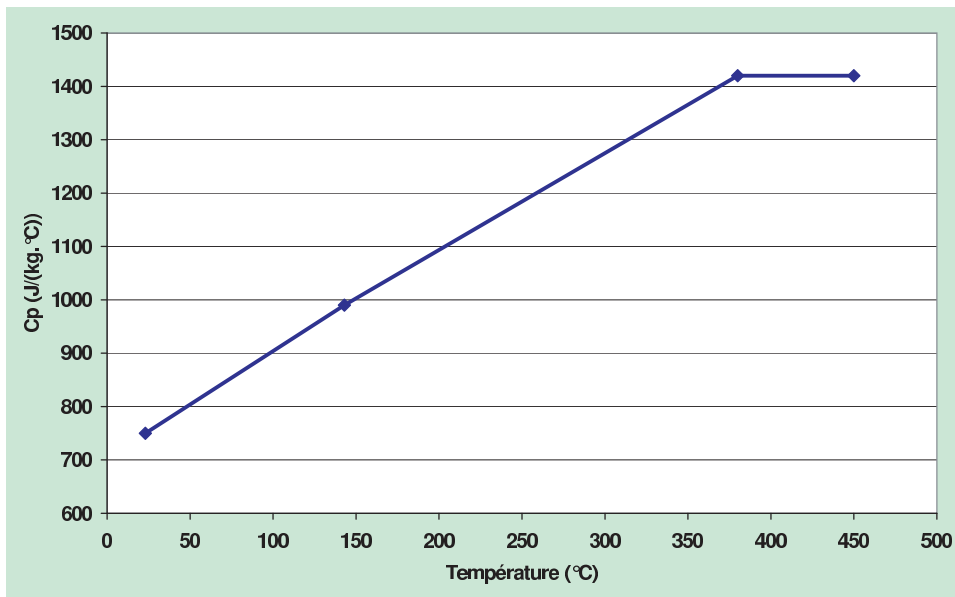


FIGURE 3.38 – Chaleur spécifique des fibres de carbone ($J.kg^{-1}.^{\circ}C^{-1}$) en fonction de la température ($^{\circ}C$)

Conductivité thermique

Les conductivités thermiques de la matrice PEEK et des fibres de carbone sont données respectivement sur les tableaux 3.8 et 3.9. L'évolution de la conductivité thermique du PEEK

k_L ($W.m^{-1}.^{\circ}C^{-1}$)	k_T ($W.m^{-1}.^{\circ}C^{-1}$)
16	3

TABLE 3.8 – Conductivité des fibres de carbone

($W.m^{-1}.^{\circ}C^{-1}$) en fonction de la température ($^{\circ}C$) est illustrée sur la figure 3.39.

Température ($^{\circ}C$)	k ($W.m^{-1}.^{\circ}C^{-1}$)
27	0.22
200	0.21
250	0.23
300	0.29
400	0.29

TABLE 3.9 – Conductivité du PEEK

Densité

Les densités de la matrice PEEK et des fibres de carbone sont données respectivement sur les tableaux 3.10 et 3.11.

L'évolution de la densité de PEEK ($kg.m^{-3}$) en fonction du degré de cristallinité est illustrée sur la figure 3.40.

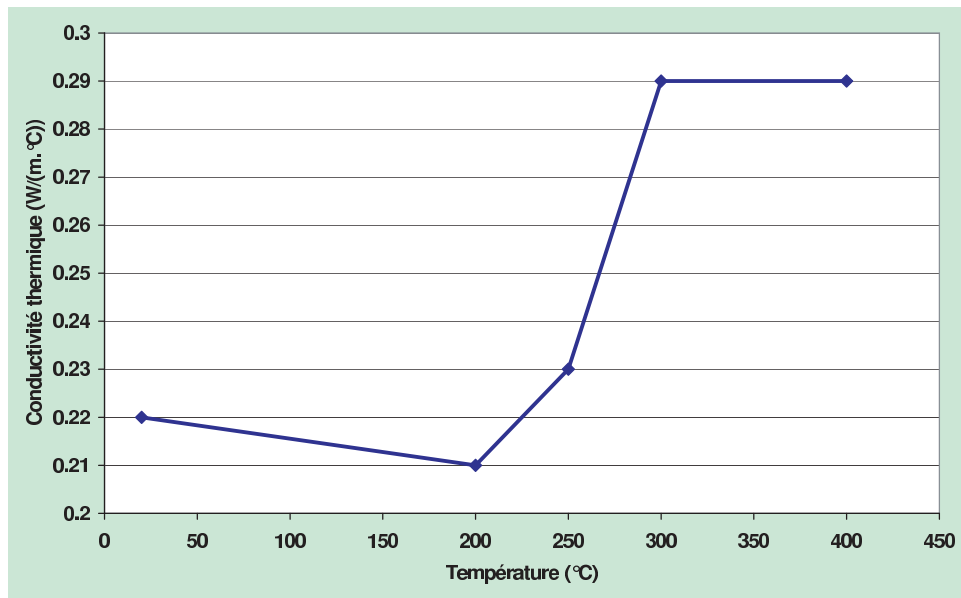


FIGURE 3.39 – Conductivité thermique du PEEK ($W.m^{-1}.^{\circ}C^{-1}$) en fonction de la température ($^{\circ}C$)

Densité ρ ($kg.m^{-3}$)
1780

TABLE 3.10 – Densité des fibres de carbone

Degré de cristallinité	ρ ($kg.m^{-3}$)
0	1264
0.2	1291
0.4	1318
1	1400

TABLE 3.11 – Densité du PEEK

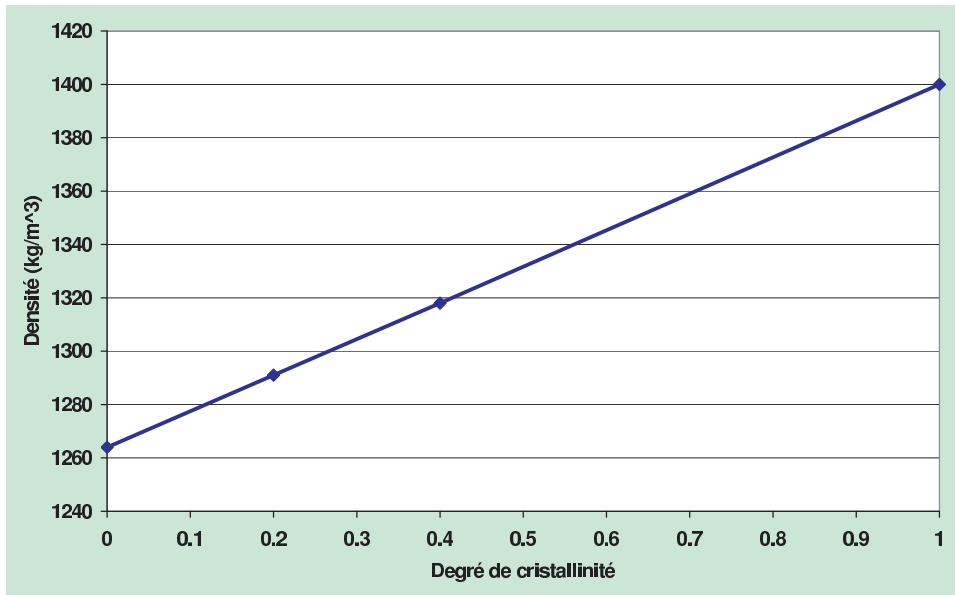


FIGURE 3.40 – Densité du PEEK ($kg.m^{-3}$) en fonction du degré de cristallinité

Dilatation thermique

Les dilatations thermiques de la matrice PEEK et des fibres de carbone sont données respectivement sur les tableaux 3.12 et 3.13.

α_L ($^{\circ}C^{-1}$)	α_T ($^{\circ}C^{-1}$)
-1.2×10^{-6}	12×10^{-6}

TABLE 3.12 – Coefficient de dilatation thermique des fibres de carbone

Température ($^{\circ}C$)	α ($^{\circ}C^{-1}$)
23 – 143	47×10^{-6}
143 – 334	108×10^{-6}
334 – 420	120×10^{-6}

TABLE 3.13 – Coefficient de dilatation thermique du PEEK

L'évolution de la dilatation thermique du PEEK ($^{\circ}C^{-1}$) en fonction de la température ($^{\circ}C$) est illustrée sur la figure 3.41.

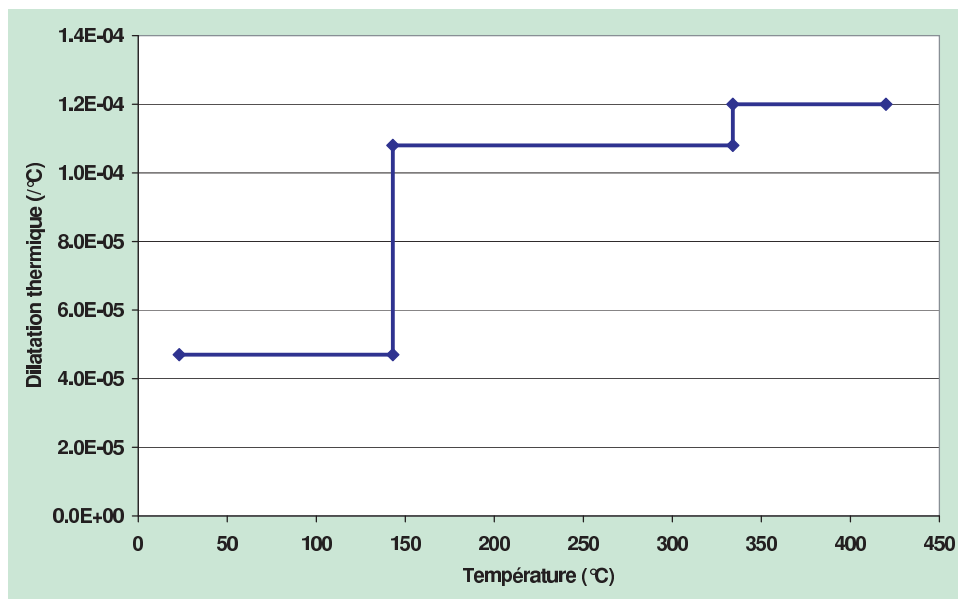


FIGURE 3.41 – Dilatation thermique du PEEK ($^{\circ}C^{-1}$) en fonction de la température ($^{\circ}C$)

Chapitre 4

VALIDATION ET APPLICATION DE LA METHODE

Sommaire

4.1	Validation de la méthode de modélisation développée	154
4.1.1	Influence du raffinement du maillage microscopique	154
4.1.2	Validation de la méthode d'homogénéisation	154
4.1.3	Étude des contraintes à l'échelle microscopique	162
4.1.4	Influence du nombre de domaines microscopiques sur l'état de contraintes macroscopiques	163
4.2	Simulation du dépôt multiples de plis	165
4.2.1	Initialisation du calcul : choix du nombre et de l'emplacement des domaines microscopiques	175
4.2.2	Séquence d'empilement de type $0^\circ/90^\circ/90^\circ$	176
4.2.3	Séquence d'empilement de type $90^\circ/0^\circ/90^\circ$	220
4.2.4	Conclusions	227

Dans ce chapitre, nous présentons la validation et l'application de notre méthode.

Dans un premier temps, nous allons étudier la validation de notre méthode :

- étude de l'influence du raffinement des maillages sur les états de contraintes microscopiques ;
- validation de la méthode d'homogénéisation des propriétés thermomécaniques du matériau ;
- étude des contraintes à l'échelle microscopique ;
- étude de l'influence du nombre de domaines microscopiques sur l'état de contrainte à l'échelle macroscopique.

Puis nous étudierons l'application de la méthode développée à la simulation du refroidissement du dépôt multiples de plis.

4.1 Validation de la méthode de modélisation développée

Dans cette section nous proposons une validation de notre méthode. Tout d'abord, nous étudions l'influence du maillage sur les résultats de calcul à l'échelle microscopique (maillage du domaine intermédiaire et maillage du domaine centrale). Puis nous présentons des résultats obtenus pour le calcul de l'homogénéisation des propriétés thermomécaniques du matériau. Nous étudions ensuite l'apparition des contraintes résiduelles à l'échelle microscopique en étudiant l'influence de 3 paramètres :

- vitesse de refroidissement ;
- anisotropie des rubans ;
- conditions aux limites appliquées au domaine.

Enfin, nous étudions l'influence du nombre de domaines microscopiques sur les états de contraintes à l'échelle macroscopique.

4.1.1 Influence du raffinement du maillage microscopique

Dans cette section nous étudions l'effet du raffinement du domaine intermédiaire et du domaine microscopique sur l'état de contraintes dans le domaine microscopique.

On peut ainsi en déduire les paramètres de raffinement du maillage à utiliser dans nos calculs. On peut pour cela se référer à un la contrainte de Von Mises dont l'expression est en déformations planes :

$$\sigma^{\text{Von Mises}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{(\sigma_{XX} - \sigma_{YY})^2 + (\sigma_{YY} - \sigma_{ZZ})^2 + (\sigma_{ZZ} - \sigma_{XX})^2 + 6(\sigma_{XY})^2} \quad (4.1)$$

On peut choisir comme outil de comparaison soit le maximum de la contrainte de Von Mises dans le domaine microscopique ou bien sa moyenne dans le domaine microscopique (nous sommes dans le cas de phases distinctes). :

$$\langle \sigma^{\text{Von Mises}} \rangle = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{(\sigma_{XX} - \sigma_{YY})^2 + (\sigma_{YY} - \sigma_{ZZ})^2 + (\sigma_{ZZ} - \sigma_{XX})^2 + 6(\sigma_{XY})^2} d\Omega \quad (4.2)$$

Influence du raffinement du domaine intermédiaire

L'écart en % sur la contrainte de Von Mises moyenne en fonction du raffinement du domaine intermédiaire est présenté ci-après. Comme on peut le voir sur la figure 4.1, un raffinement du domaine intermédiaire de 200 noeuds est suffisant.

Influence du raffinement du domaine microscopique

L'écart en % sur la contrainte de Von Mises moyenne en fonction du raffinement du domaine microscopique est présenté ci-après. Comme on peut le voir sur la figure 4.2, un raffinement du domaine microscopique de 600 noeuds est suffisant.

4.1.2 Validation de la méthode d'homogénéisation

Nous étudions dans cette section la validation de la méthode d'homogénéisation proposée.

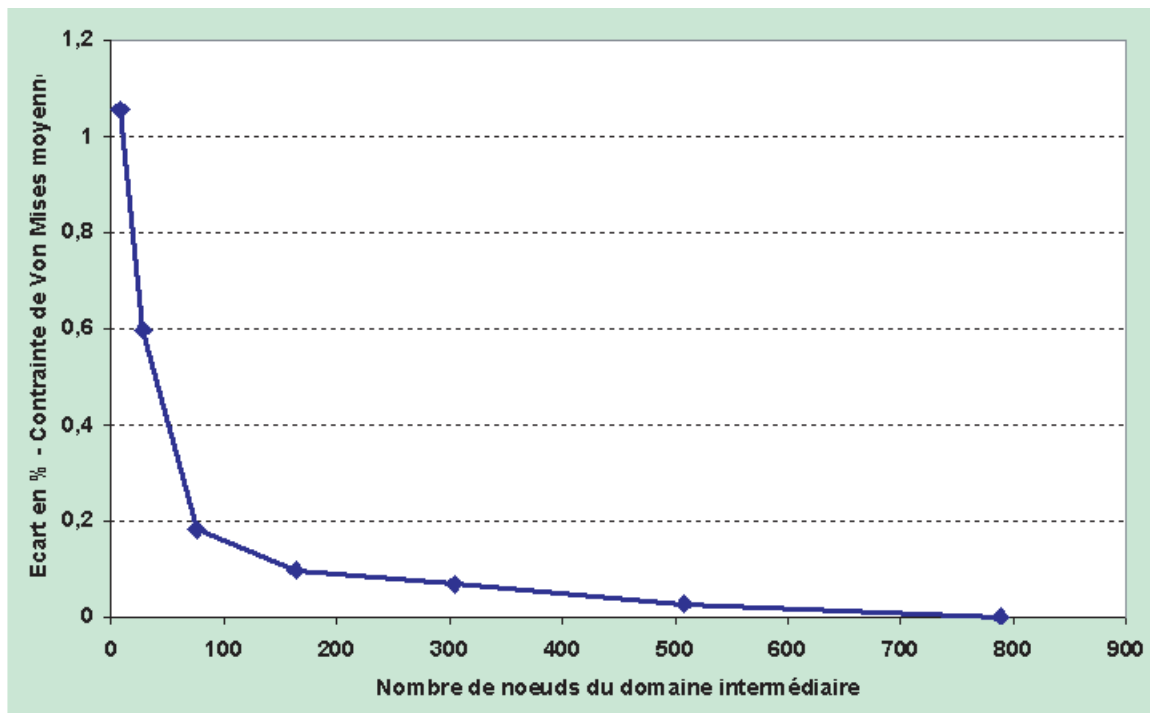


FIGURE 4.1 – Influence du raffinement du domaine intermédiaire sur l'état de contrainte dans le domaine microscopique

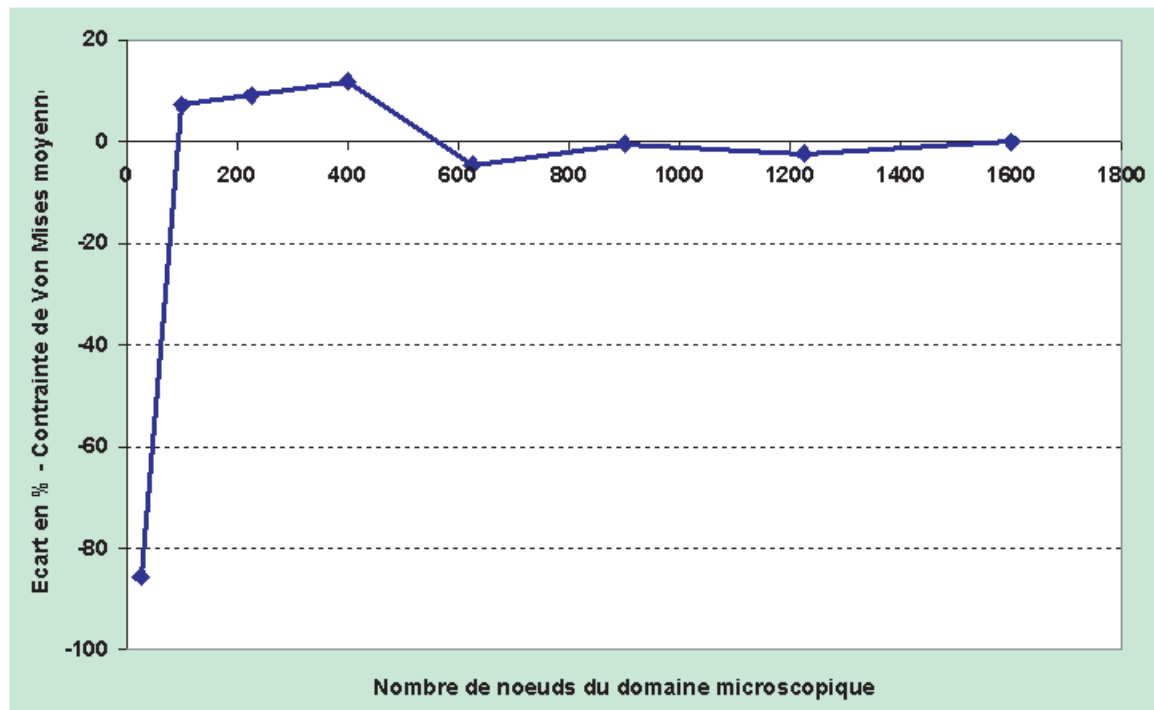


FIGURE 4.2 – Influence du raffinement du domaine intermédiaire sur l'état de contrainte dans le domaine microscopique

Homogénéisation de la conductivité thermique

Afin d'étudier la validité de la méthode d'homogénéisation de la conductivité thermique présentée dans le chapitre 3, nous simulons l'évolution d'un champ thermique dans un domaine microscopique et déterminons les valeurs propres et vecteurs propres associés au problème thermique. Les températures imposées aux 4 noeuds du domaine microscopique sont les suivants :

- noeud 0 : $T=200$ °C
- noeud 1 : $T=250$ °C
- noeud 2 : $T=300$ °C
- noeud 3 : $T=350$ °C

La température initiale partout dans le domaine microscopique est fixée à 300 °C.

Le champ de température obtenu après un temps de simulation de $1.e-1$ s est représenté sur la figure 4.3. L'application de la méthode de post-réduction du champ de température présentée au

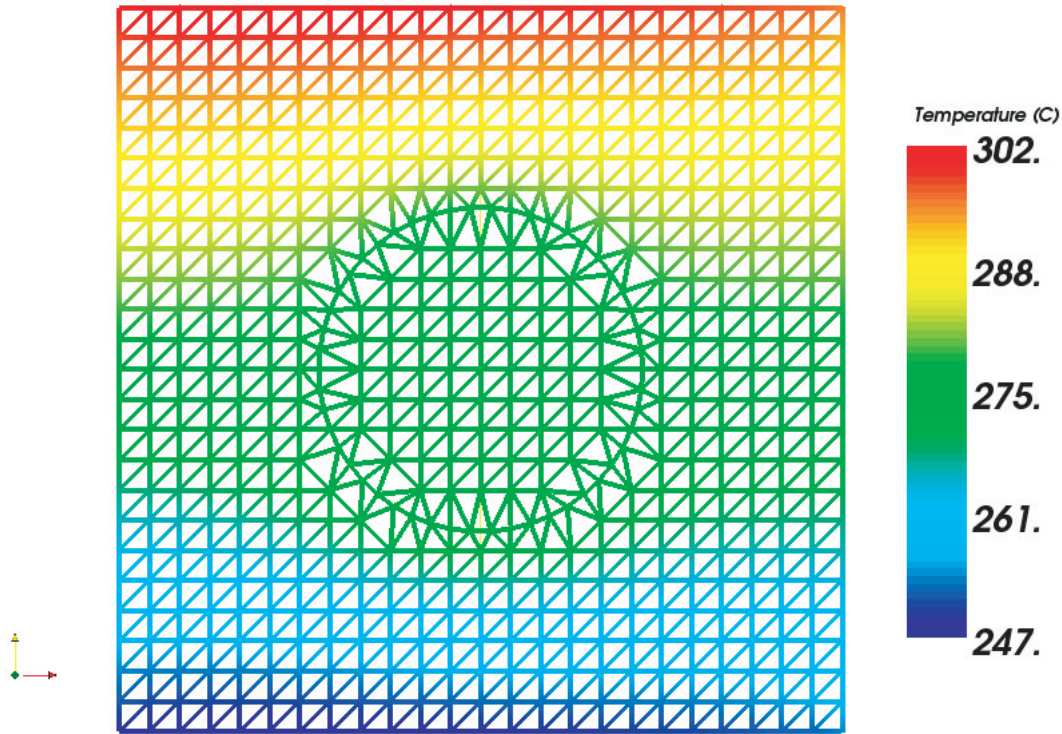


FIGURE 4.3 – Champ de température obtenu après $1.e-1$ s

chapitre 3 permet d'obtenir deux valeurs propres vap_1 et vap_2 et fonctions propres principales telles que :

- $vap_1 = 246089663$
- $vap_2 = 4431$

D'où le rapport entre les valeurs propres $\frac{vap_2}{vap_1} = 1.8 \cdot 10^{-5}$.

Le rapport entre les deux valeurs propres est trop faible pour pouvoir utiliser directement la deuxième fonction propre principale (associée à la valeur propre vap_2) dans le calcul d'homogénéisation de la conductivité thermique. On doit donc construire comme présenté dans la section 3.5 un champ de température microscopique orthogonale au premier.

La conductivité homogénéisée obtenue après calcul est alors de $0.38 \text{ W.m}^{-1}.\text{C}^{-1}$.

En comparaison, la conductivité homogénéisée obtenue à l'aide du modèle série classique est de

$0.30 \text{ W.m}^{-1}.\text{°C}^{-1}$.

Le résultat obtenu est donc satisfaisant.

Nous présentons dans la section suivante les résultats de calcul d'homogénéisation des propriétés thermomécaniques obtenus pour différents cas de chargement thermique et d'orientations de fibres (fibres à 90° et fibres à 0°).

Le taux de fibres est pris égal à 50 %.

La taille de la cellule microscopique est de 20 microns sur 20 microns.

Les domaines de température considérés sont les suivants :

- 250-300 °C ;
- 100-150 °C ;
- 25-75 °C.

Champ de température : 250 - 300 °C

Les champs de température dans les domaines microscopiques à fibres à 90° et à fibres à 0° sont donnés respectivement sur les figures 4.4 et 4.5.

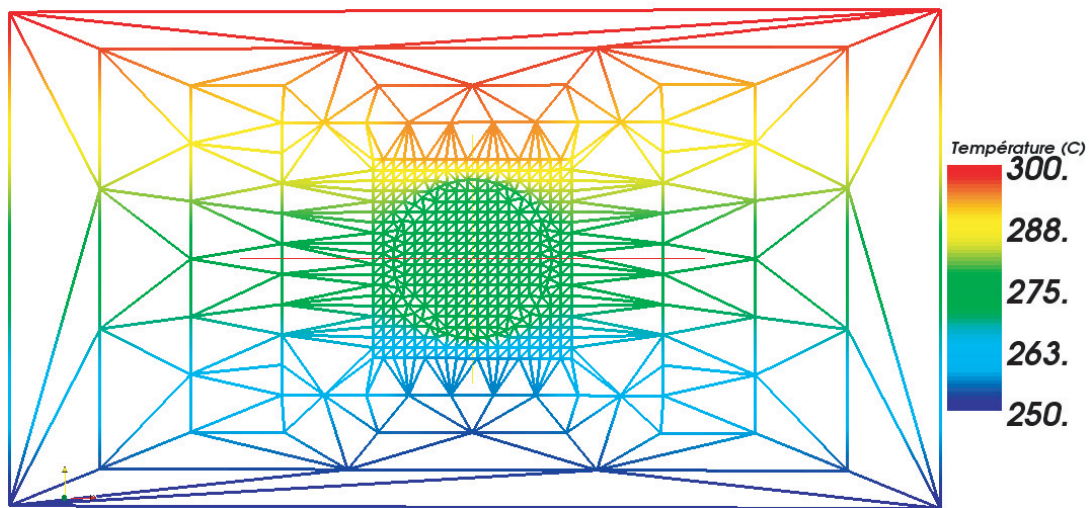


FIGURE 4.4 – Champ de température (°C) dans le domaine microscopique à Fibres à 90°

Les résultats des calculs d'homogénéisation des propriétés thermomécaniques obtenus sont présentés ci-après.

	Tenseur de comportement homogénéisé (Pa)		
Fibres à 90°	2609156427	824353861	0
	824353861	2608931179	0
	0	0	1115389274
Fibres à 0°	114733680625	1521714174	0
	1521714174	4084873661	0
	0	0	12487746330

TABLE 4.1 – Comportement homogénéisé

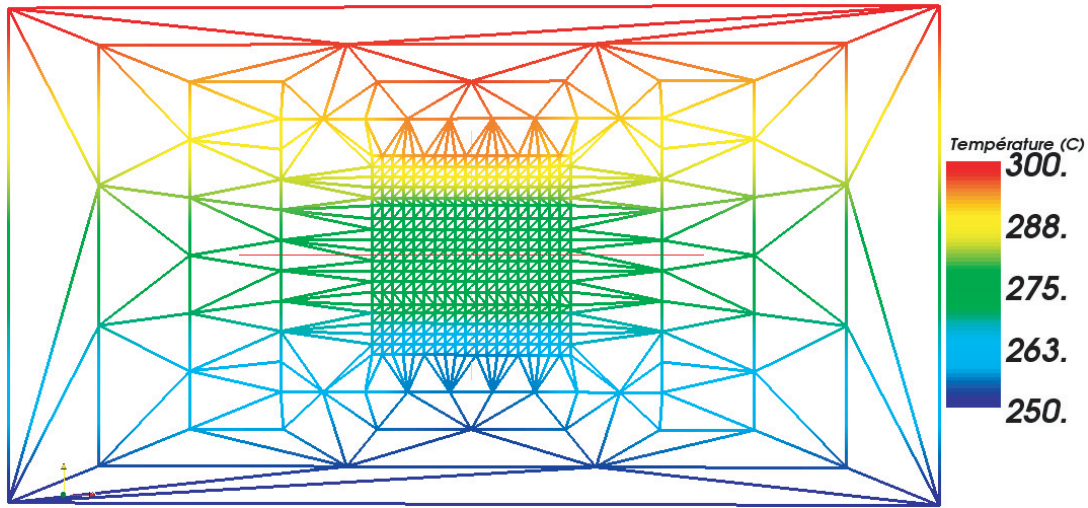


FIGURE 4.5 – Champ de température (°C) dans le domaine microscopique à Fibres à 0°

Conductivité ($W.m^{-1}.°C^{-1}$)	Fibres à 90°	Fibres à 0°
k_{XX}	0.477	1.235
k_{YY}	0.477	0.127

TABLE 4.2 – Conductivité thermique homogénéisée

Dilatation thermique ($°C^{-1}$)	Fibres à 90°	Fibres à 0°
α_{XX}	2.645e-005	-9.484e-007
α_{YY}	2.645e-005	1.508e-007

TABLE 4.3 – Dilatation thermique homogénéisée

Densité ($kg.m^{-3}$)	Fibres à 90°	Fibres à 0°
ρ	1548	1533

TABLE 4.4 – Densité homogénéisée

Champ de température : 100 - 150 °C

Les champs de température dans les domaines microscopiques à fibres à 90° et à fibres à 0° sont donnés respectivement sur les figures 4.6 et 4.7.

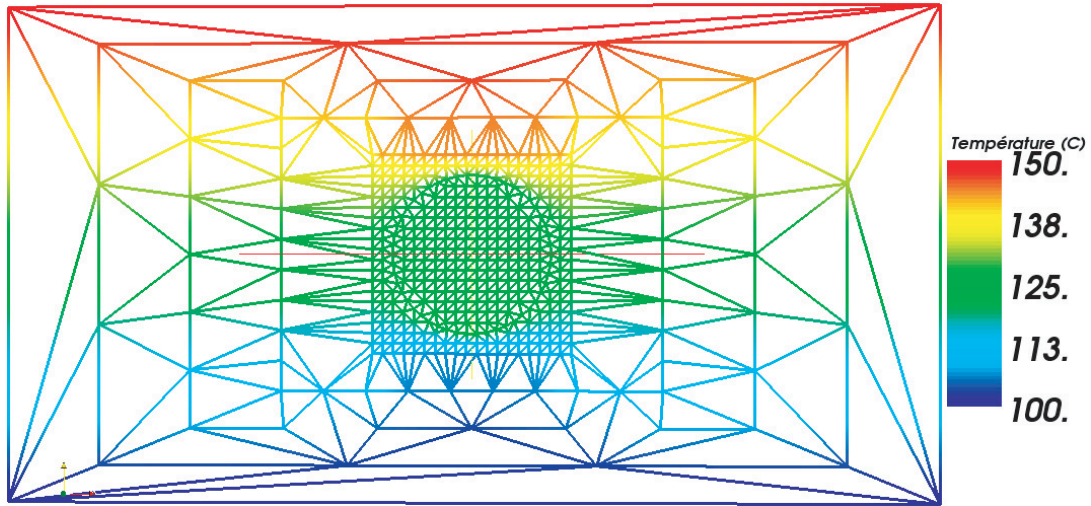


FIGURE 4.6 – Champ de température (°C) dans le domaine microscopique à Fibres à 90°

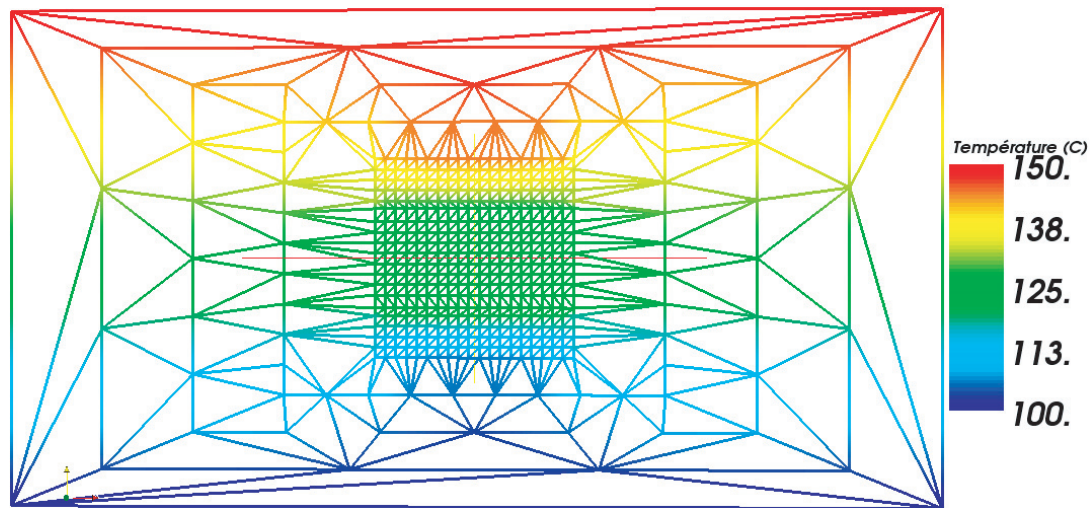


FIGURE 4.7 – Champ de température (°C) dans le domaine microscopique à Fibres à 0°

Les résultats des calculs d'homogénéisation des propriétés thermomécaniques obtenus sont présentés ci-après.

Champ de température : 25 - 75 °C

Les champs de température dans les domaines microscopiques à fibres à 90° et à fibres à 0° sont donnés respectivement sur les figures 4.8 et 4.9.

Les résultats des calculs d'homogénéisation des propriétés thermomécaniques obtenus sont présentés ci-après.

	Tenseur de comportement homogénéisé (Pa)		
Fibres à 90 °	9316898108	3621044332	0
	3621044332	8522260686	0
	0	0	3283613044
Fibres à 0 °	117376486461	3557368396	0
	8815611153	3557368396	0
	0	0	13652384586

TABLE 4.5 – Comportement homogénéisé

Conductivité ($W.m^{-1}.C^{-1}$)	Fibres à 90 °	Fibres à 0 °
k_{XX}	0.398	1.230
k_{YY}	0.398	0.105

TABLE 4.6 – Conductivité thermique homogénéisée

Dilatation thermique ($^{\circ}C^{-1}$)	Fibres à 90 °	Fibres à 0 °
α_{XX}	2.497e-005	-2.794e-007
α_{YY}	2.497e-005	3.082e-005

TABLE 4.7 – Dilatation thermique homogénéisée

Densité ($kg.m^{-3}$)	Fibres à 90 °	Fibres à 0 °
ρ	1548	1533

TABLE 4.8 – Densité homogénéisée

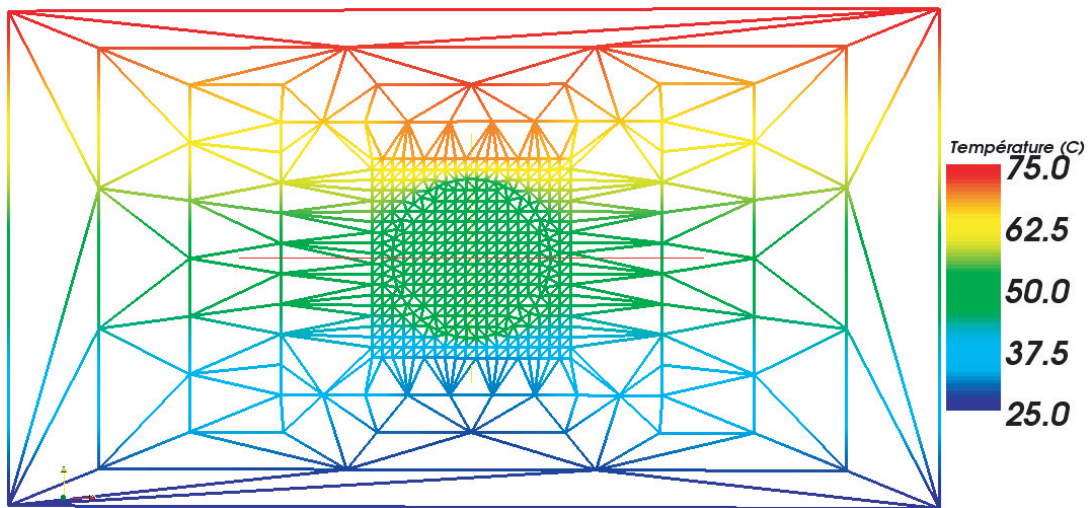


FIGURE 4.8 – Champ de température ($^{\circ}C$) dans le domaine microscopique à Fibres à 90°

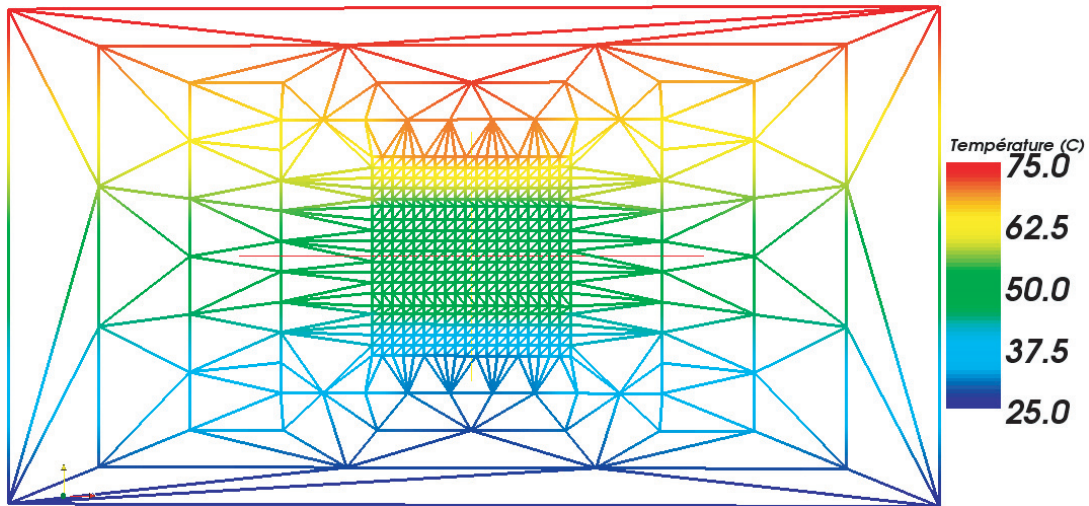


FIGURE 4.9 – Champ de température ($^{\circ}\text{C}$) dans le domaine microscopique à Fibres à 0°

	Tenseur de comportement homogénéisé (Pa)		
Fibres à 90°	9474794472	3918846101	0
	3918846101	9476350079	0
	0	0	3454199472
Fibres à 0°	117564844028	3828717478	0
	9446245801	3828717478	0
	0	0	13743956068

TABLE 4.9 – Comportement homogénéisé

Conductivité ($\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot^{\circ}\text{C}^{-1}$)	Fibres à 90°	Fibres à 0°
k_{XX}	0.407	1.231
k_{YY}	0.407	0.107

TABLE 4.10 – Conductivité thermique homogénéisée

Dilatation thermique ($^{\circ}\text{C}^{-1}$)	Fibres à 90°	Fibres à 0°
α_{XX}	2.518e-005	-2.619e-007
α_{YY}	2.518e-005	2.983e-005

TABLE 4.11 – Dilatation thermique homogénéisée

Densité ($\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$)	Fibres à 90°	Fibres à 0°
ρ	1548	1533

TABLE 4.12 – Densité homogénéisée

Conclusions

Les résultats obtenus en terme de calcul des propriétés thermomécaniques homogénéisées sont tout à fait satisfaisant si on prend comme outil de comparaison les données issus de [Cog92]. La méthode d'homogénéisation des propriétés thermomécaniques du matériau est donc validée. Dans la section suivante nous étudions l'influence des paramètres suivant sur la formation des contraintes à l'échelle microscopique :

- influence de la vitesse de refroidissement ;
- influence de l'anisotropie des plis à l'échelle macroscopique ;
- influence des conditions aux limites appliquées aux plis à l'échelle macroscopique.

4.1.3 Étude des contraintes à l'échelle microscopique

Influence de la vitesse de refroidissement

L'évolution de la température de cristallisation en fonction de la vitesse de refroidissement est donnée sur la figure 4.10. On peut en déduire la relation reliant la température de cristallisation

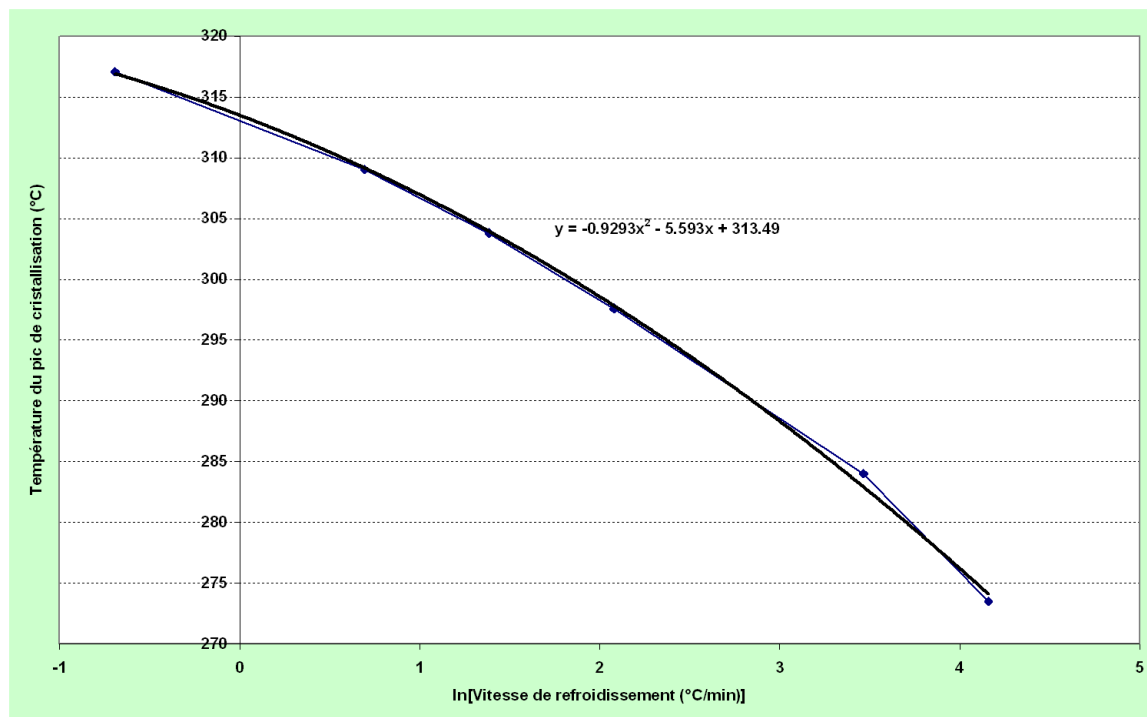


FIGURE 4.10 – Variation de la température du pic de cristallisation du PEEK avec la vitesse de refroidissement

au logarithme népérien de la vitesse de refroidissement (en $^{\circ}C.min^{-1}$) :

$$T_{cristallisation} (^{\circ}C) = -0.9293 [\ln(v)]^2 - 5.593 \ln(v) + 313.49 \quad (4.3)$$

Cette température de cristallisation correspond à la température à partir de laquelle la dilatation thermique se produit.

En théorie la température de cristallisation peut être abaissée jusqu'à la température de transition vitreuse T_g qui est d'environ $145^{\circ}C$ pour l'APC2.

La déformation induite par la thermique peut-être liée à la température de référence T^{ref} par la relation :

$$\epsilon^{th}(x) = \alpha^{th}(x) \left(T(x) - T^{ref} \right) \quad (4.4)$$

où T^{ref} est la température à partir de laquelle la dilatation thermique se produit (i.e. $\epsilon^{th}(T > T^{ref}) = 0$).

Dans notre cas la température de référence est égale à la température de cristallisation : $T^{ref} = T^{crist}$.

On voit donc que dans le cas d'une phase de refroidissement, plus la température de cristallisation est élevée, c'est à dire plus la vitesse de refroidissement est faible, puis les déformations et les contraintes d'origine thermique seront élevées.

L'influence de la vitesse de la refroidissement sur l'état de contraintes au niveau microscopique est illustré ci-après.

On illustre cet effet en déterminant l'état de contraintes thermiques dans le cas d'un pli « libre », c'est-à-dire non soumis à des conditions aux limites mécaniques, et pour 3 vitesses de refroidissement, c'est-à-dire 3 température de cristallisation :

- $T^{crist} = 317^\circ C$
- $T^{crist} = 231^\circ C$
- $T^{crist} = T_g = 145^\circ C$

La température dans le domaine est la température en fin de phase de refroidissement, i.e. la température ambiante de $25^\circ C$.

Le déplacement résultant de l'effet de la thermique à imposer aux 4 noeuds du domaine est le déplacement induit par la déformation thermique de l'élément macroscopique parent, soit dans le cas d'un pli « libre » :

$$\begin{aligned} u_x &= \alpha_x^{Macro} (T - T^{crist}) \times (L_x) \\ u_y &= \alpha_y^{Macro} (T - T^{crist}) \times (L_y) \end{aligned} \quad (4.5)$$

où L_x est la longueur du domaine suivant la direction X et L_y est la longueur du domaine suivant la direction Y.

L'état de contraintes dans le domaine complet pour une température de cristallisation de $317^\circ C$ est donné sur la figure 4.11. L'état de contraintes dans le domaine microscopique seul est donné sur la figure 4.12. Les courbes représentant l'état de contraintes dans le domaine microscopique suivant la ligne médiane dans le sens X sont représentées sur les figures 4.13 et 4.14. L'écart entre les états de contrainte induits par la thermique est ainsi notable en fonction de la vitesse de refroidissement.

Influence de l'anisotropie des plis et des conditions aux limites appliquées aux plis

Dans cette section on illustre l'influence de l'anisotropie macroscopique des plis sur l'état de contraintes microscopiques et également l'influence des conditions aux limites appliqués (encastrement etc.) sur l'état de contraintes microscopiques. L'influence de l'anisotropie des plis et des conditions aux limites appliquées aux plis est illustrée sur la figure 4.18.

On voit que l'effet de l'anisotropie à l'échelle macroscopique est notable sur les contraintes résiduelles à l'échelle microscopique.

4.1.4 Influence du nombre de domaines microscopiques sur l'état de contraintes macroscopiques

Nous étudions l'influence du nombre de cellules microscopiques sur l'état de contraintes macroscopiques. Pour cela, nous allons comparer les états de contrainte pour différents nombres

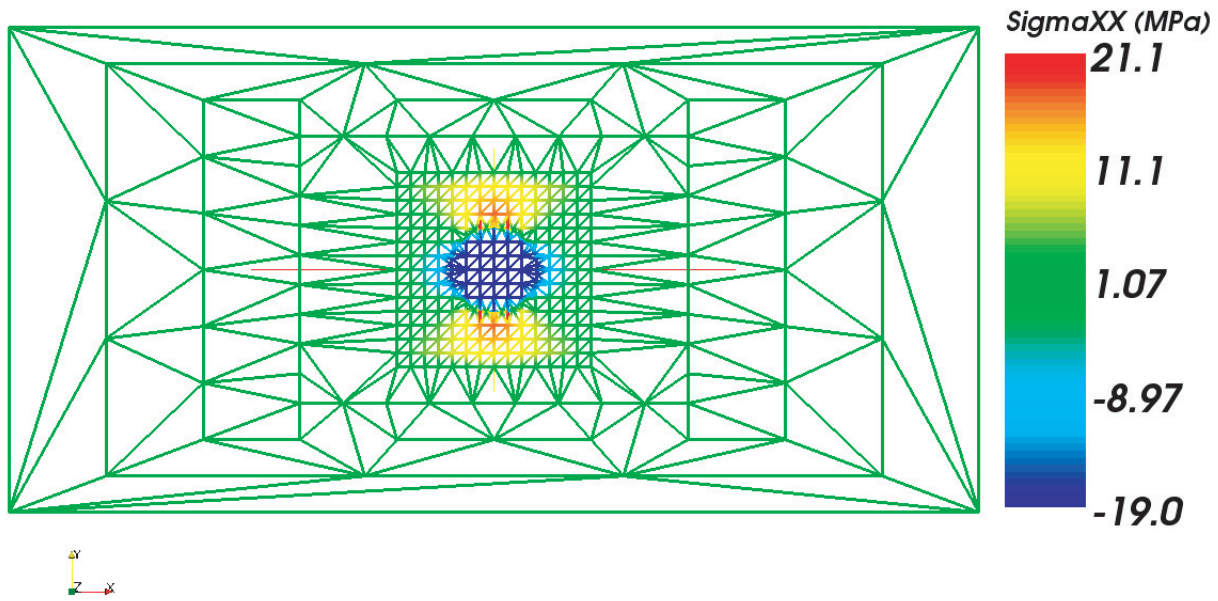


FIGURE 4.11 – État de contraintes microscopiques dans le domaine complet. $T_{\text{cristallisation}} = 317^{\circ}\text{C}, T = T_{\text{ambiante}} = 25^{\circ}\text{C}$

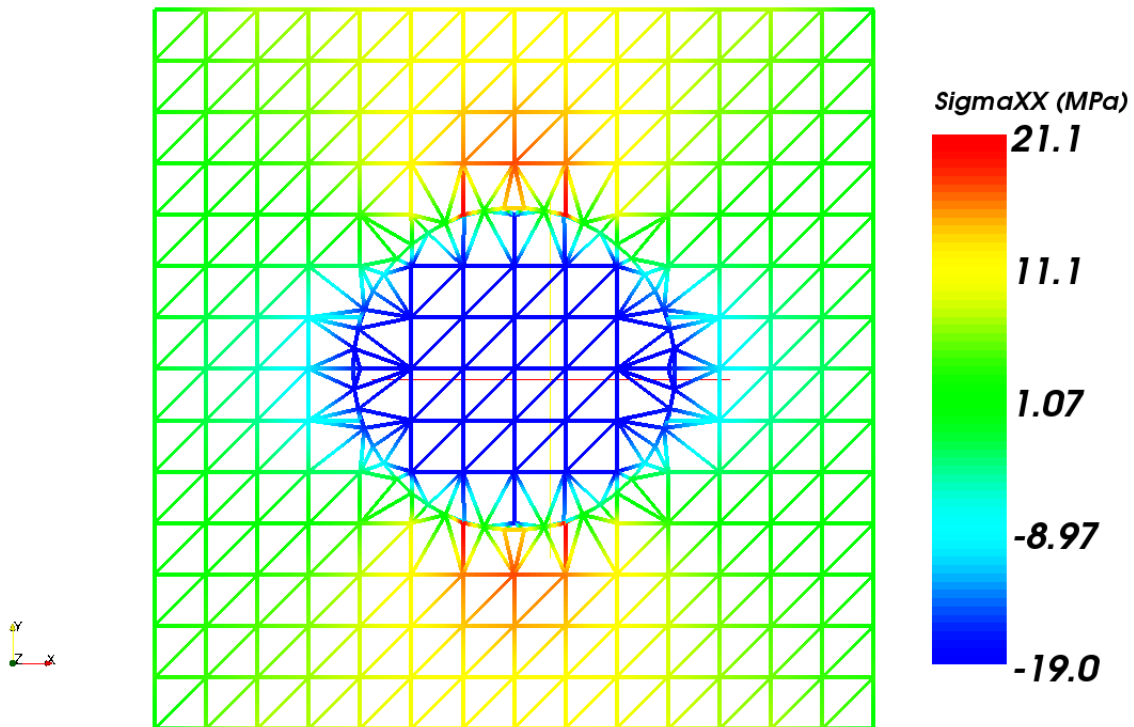


FIGURE 4.12 – État de contraintes microscopiques dans le domaine microscopique. $T_{\text{cristallisation}} = 317^{\circ}\text{C}, T = T_{\text{ambiante}} = 25^{\circ}\text{C}$

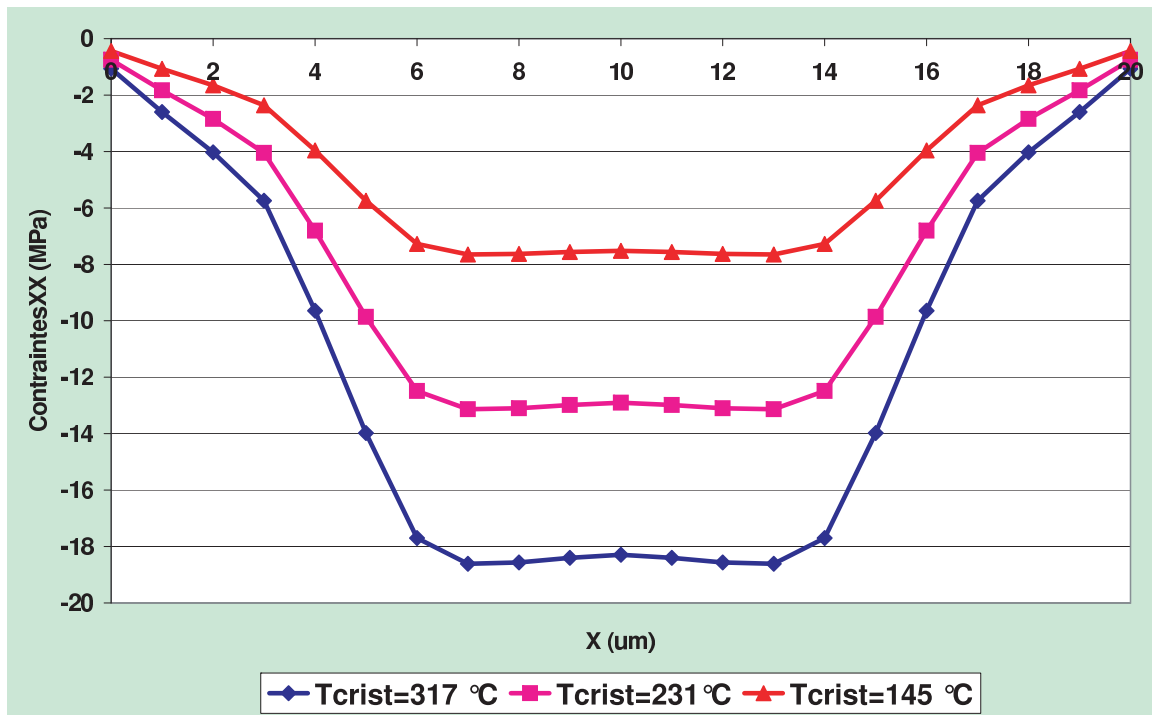


FIGURE 4.13 – Influence de la vitesse de refroidissement sur l'état de contraintes σ_{XX} . $T = T_{\text{ambiante}} = 25^{\circ}\text{C}$

de cellules microscopiques par ruban de préimprégné : 1,5 et 14 cellules par ruban. Le champ de température en fin de phase de refroidissement à $t=10$ s est donné sur la figure 4.19. Les comparaisons des champs de contraintes σ_{XX} , σ_{YY} et σ_{XY} en fin de phase de refroidissement à $t=10$ s pour les 14, 5 et 1 domaine microscopique par ruban sont présentées sur les figures 4.20, 4.21 et 4.22. Comme on peut le constater, dans le cas présent le nombre de cellules microscopiques ne semble pas avoir d'influence sur les champs de contraintes macroscopiques. Les cellules microscopiques permettent de calculer les propriétés thermomécaniques homogénéisées, qui sont insérées à l'échelle macroscopique. Les propriétés thermomécaniques varient avec la température. Or le champ de température est constant selon des lignes horizontales dans le domaine macroscopique. De ce fait le nombre de cellules microscopiques dans la direction de l'épaisseur du pli influencera le calcul macroscopique par les variations des propriétés thermomécaniques homogénéisées dans la direction de l'épaisseur du ruban.

4.2 Simulation du dépôt multiples de plis

Dans le but de simuler la phase de refroidissement du procédé de soudage et consolidation en continu, nous adoptons la démarche de modélisation suivante (figure 4.24).

Initialement, le ruban de préimprégné n°1 a déjà été déposé. Nous simulons le dépôt et le chauffage d'un deuxième ruban (ruban n°2) (étape I, figure 4.24). Le ruban n°2 qui vient d'être déposé est chauffé à son extrémité inférieure. On impose pour cela une température $T_{\text{chauffage}} = 400^{\circ}\text{C}$, afin de provoquer la fusion du ruban (i.e. $T > T_{\text{fusion}}$) (étape I, figure 4.24).

Puis le composite ainsi formé est laissé refroidir avec les conditions aux limites thermiques décrites sur l'étape II de la figure 4.24 :

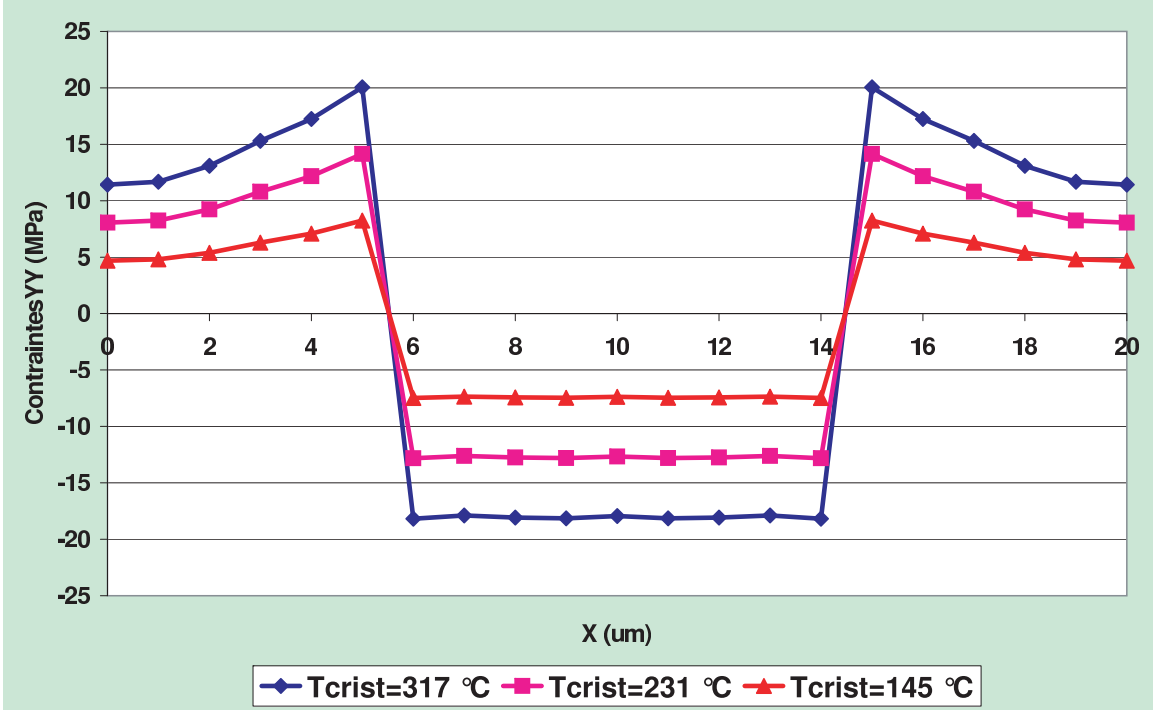


FIGURE 4.14 – Influence de la vitesse de refroidissement sur l'état de contraintes σ_{YY} . $T = T_{\text{ambiante}} = 25\text{ }^{\circ}\text{C}$

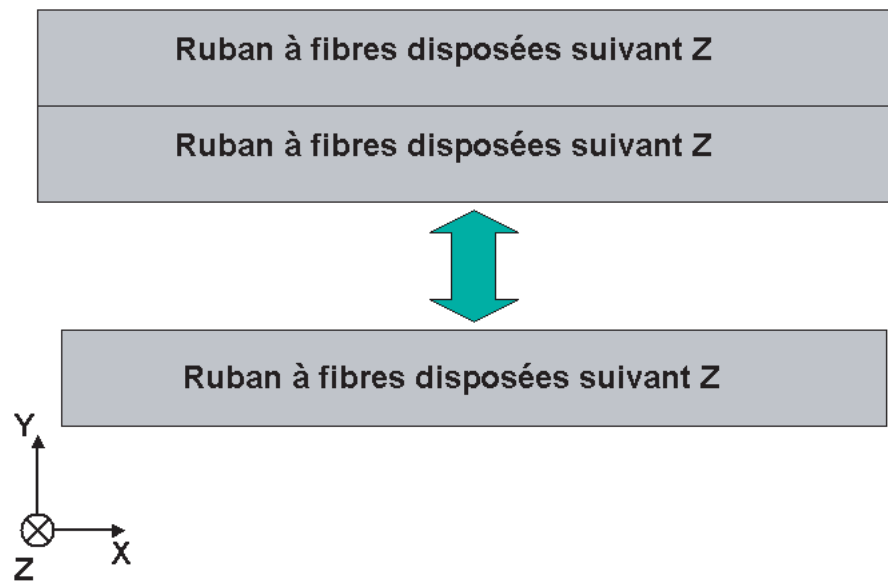


FIGURE 4.15 – 1 pli libre

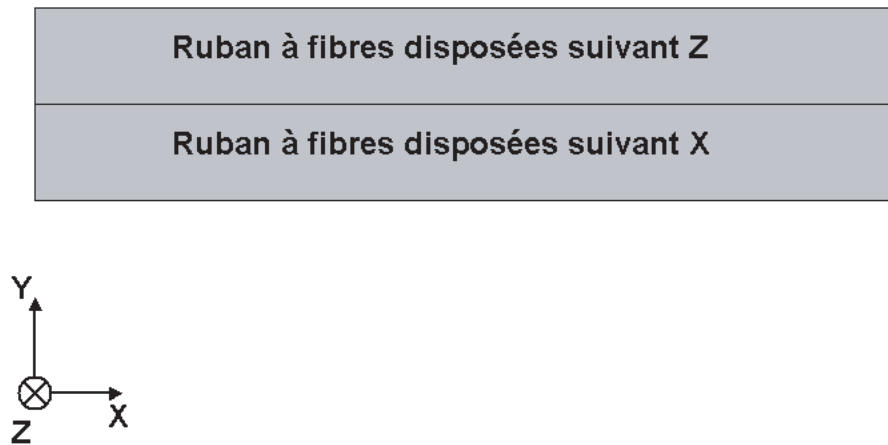


FIGURE 4.16 – 2 plis libres [0/90] - Influence de l'anisotropie

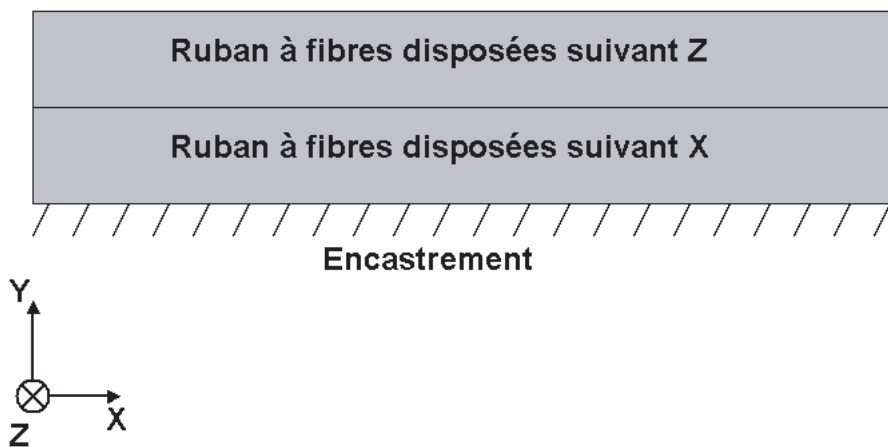


FIGURE 4.17 – 2 plis encastrés [0/90] - Influence de l'anisotropie et des conditions aux limites

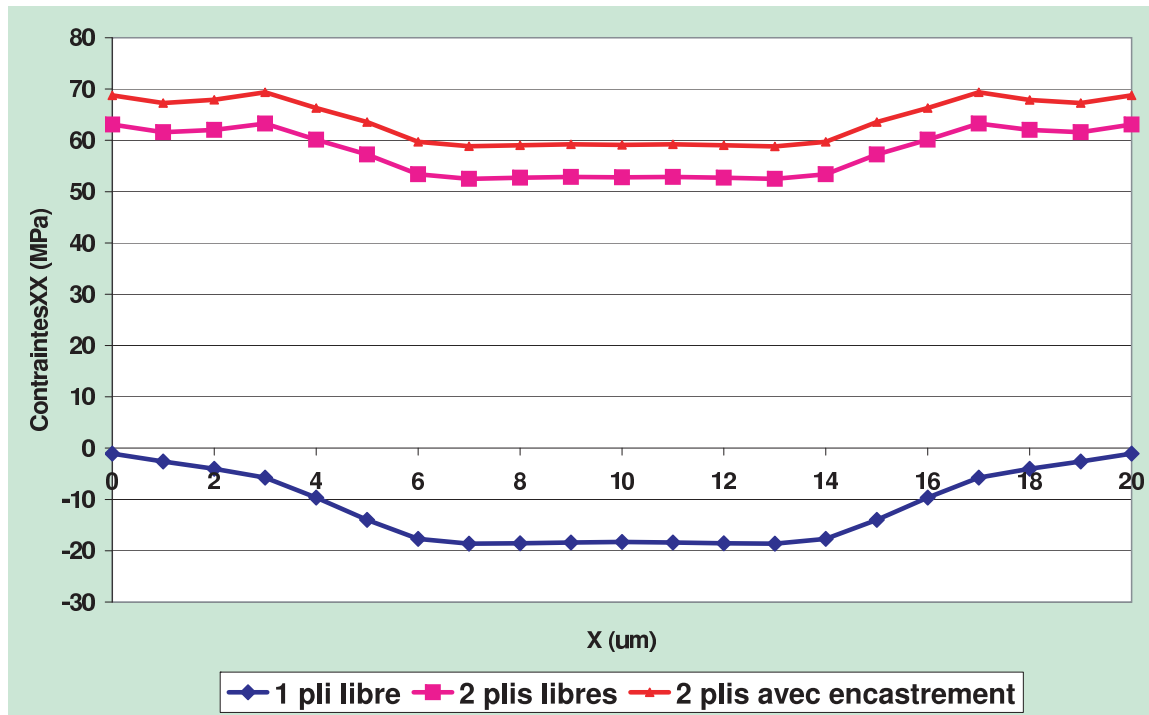


FIGURE 4.18 – Influence de l’anisotropie des plis et des conditions aux limites appliquées aux plis. $T_{crystallisation} = 317^{\circ}C, T = T_{ambiante} = 25^{\circ}C$



FIGURE 4.19 – Champ de température ($^{\circ}C$) en fin de phase de refroidissement, $t=10$ s

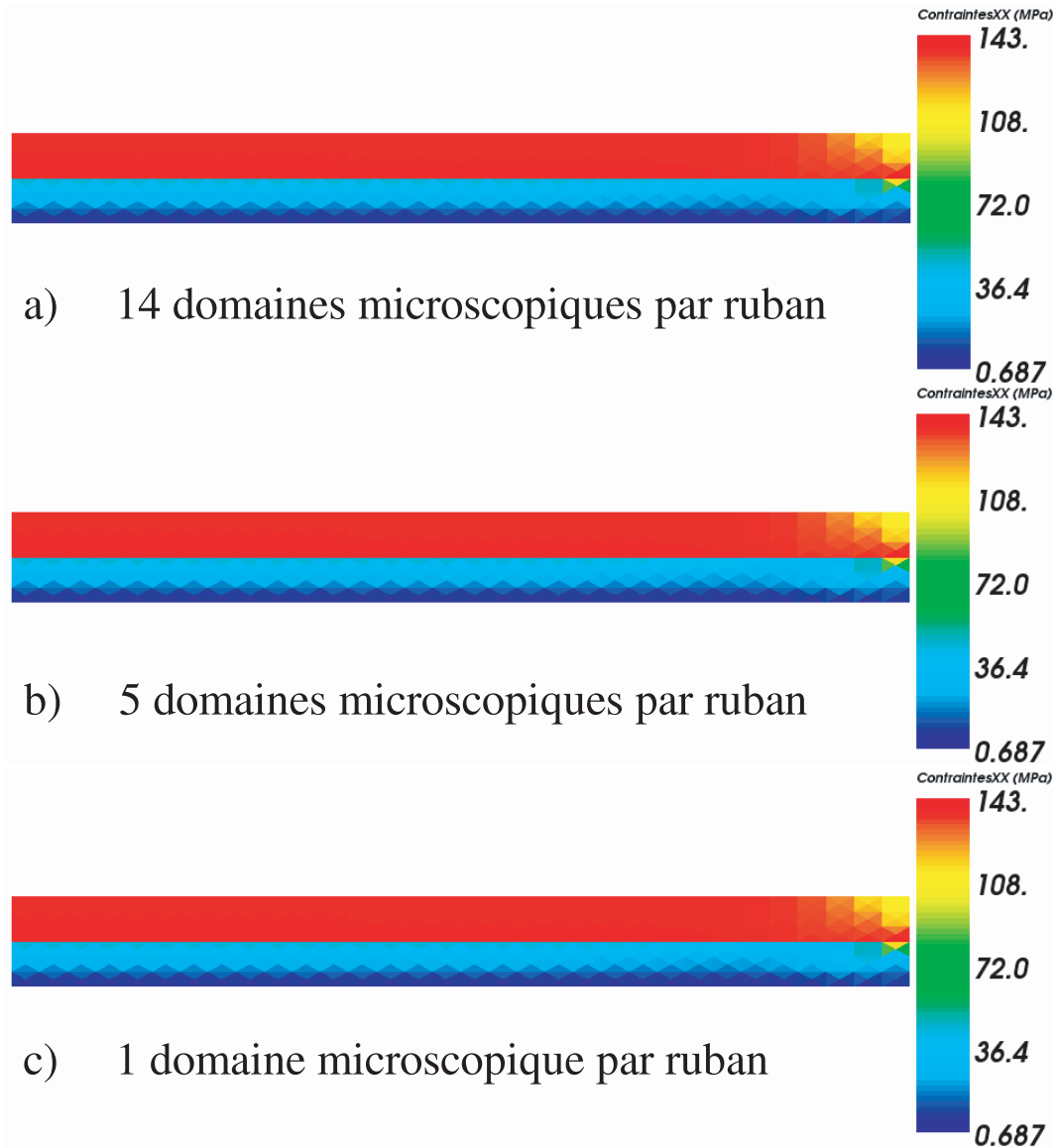


FIGURE 4.20 – Comparaison des champs de contraintes macroscopiques σ_{XX} à $t=10$ s pour 14, 5 et 1 domaines microscopiques par ruban

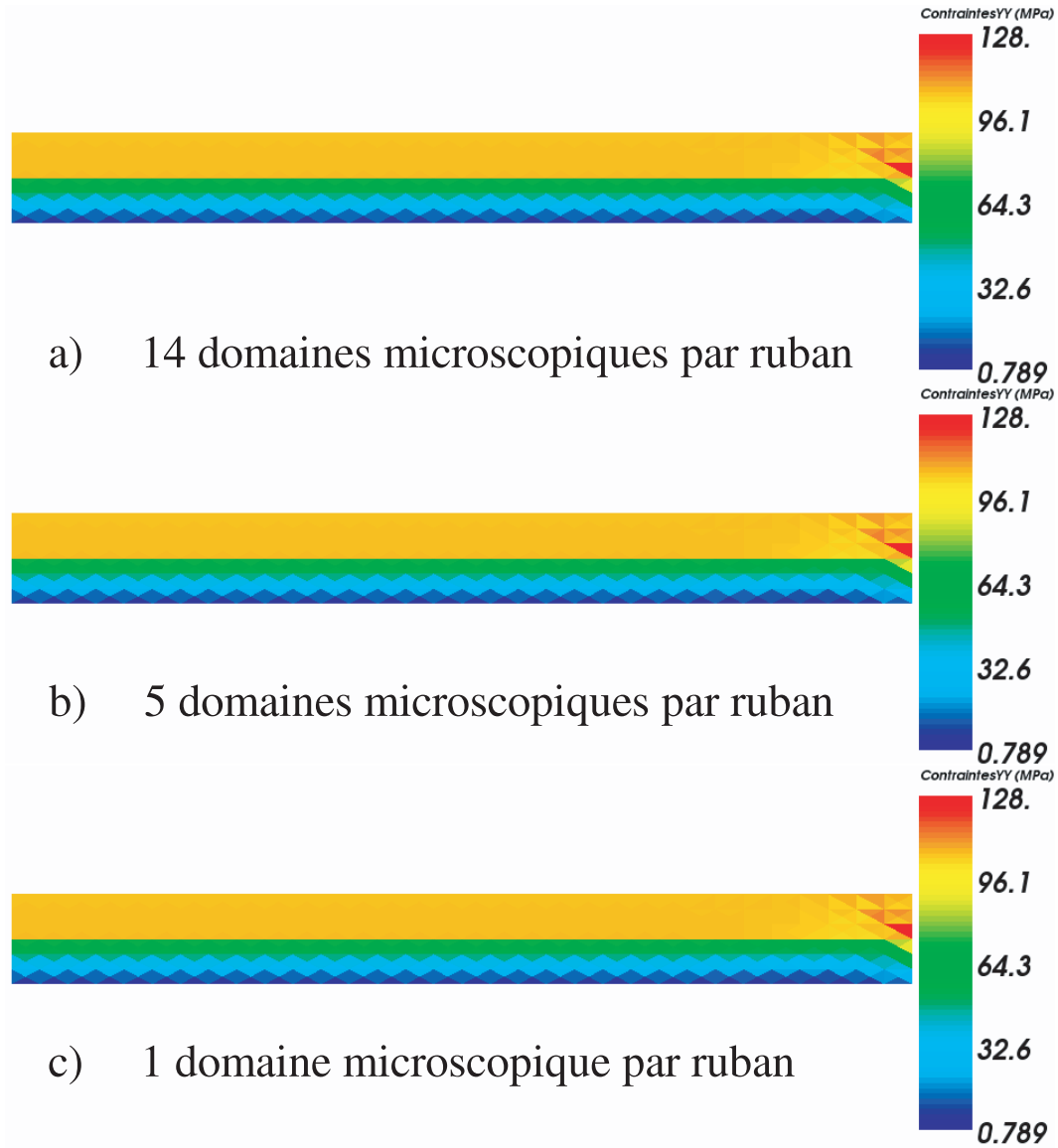


FIGURE 4.21 – Comparaison des champs de contraintes macroscopiques σ_{YY} à $t=10$ s pour 14, 5 et 1 domaines microscopiques par ruban

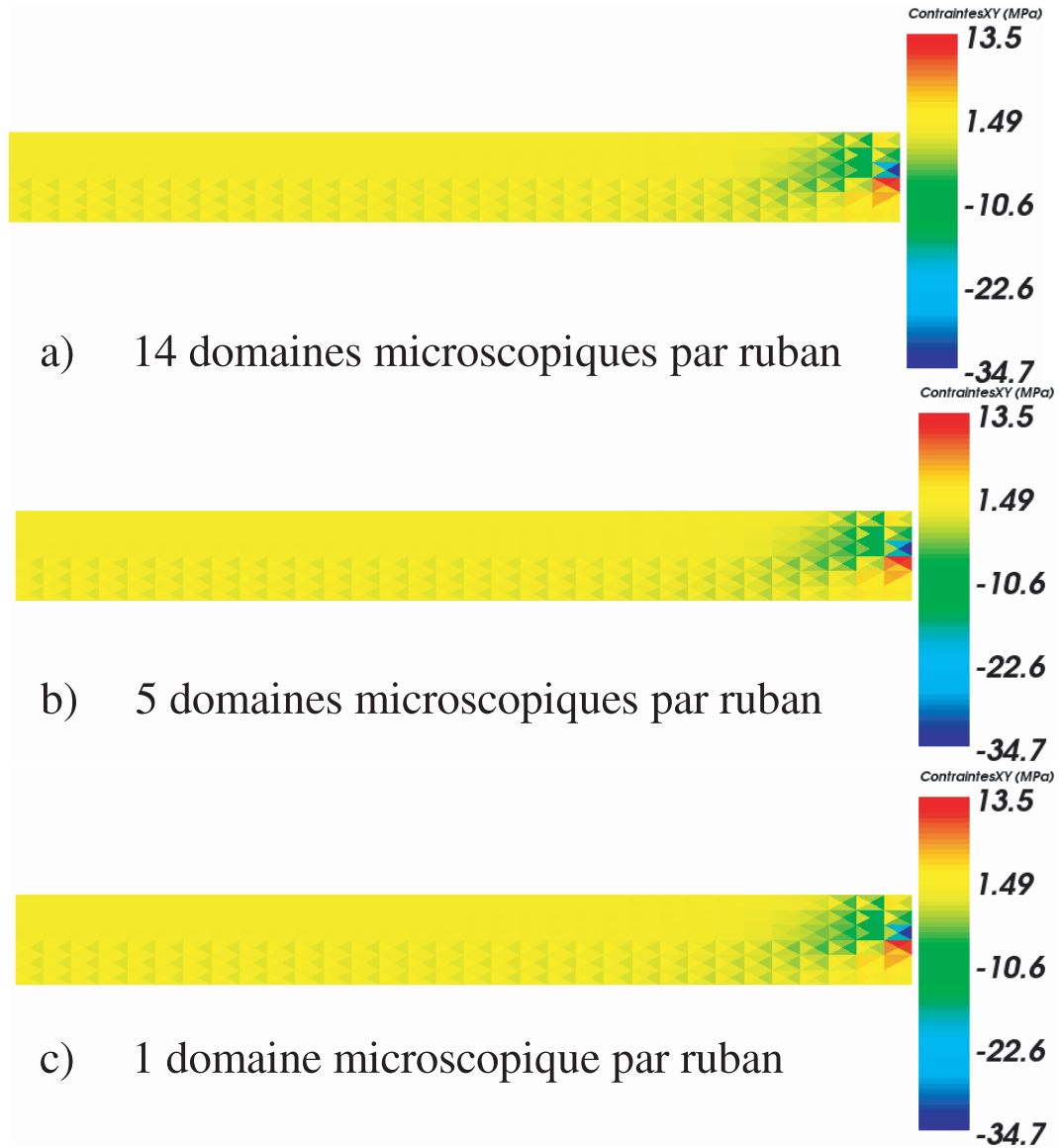


FIGURE 4.22 – Comparaison des champs de contraintes macroscopiques σ_{XY} à $t=10$ s pour 14, 5 et 1 domaines microscopiques par ruban

- flux de convection avec l'air ambiant ($H = 10 \text{ W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$, $T_{ext} = 25^\circ\text{C}$);
- température imposée à l'extrémité inférieure du composite ($T_{imp} = 70^\circ\text{C}$).

Les conditions aux limites mécaniques sont les suivantes :

- symétries par rapport à l'axe Y;
- encastrement à l'extrémité inférieure du composite.

En répétant ces opérations N fois, on simule le dépôt, le chauffage et le refroidissement de N plis de préimprégné (figures 4.25 et 4.26). La longueur du ruban dans le sens de la dépose est

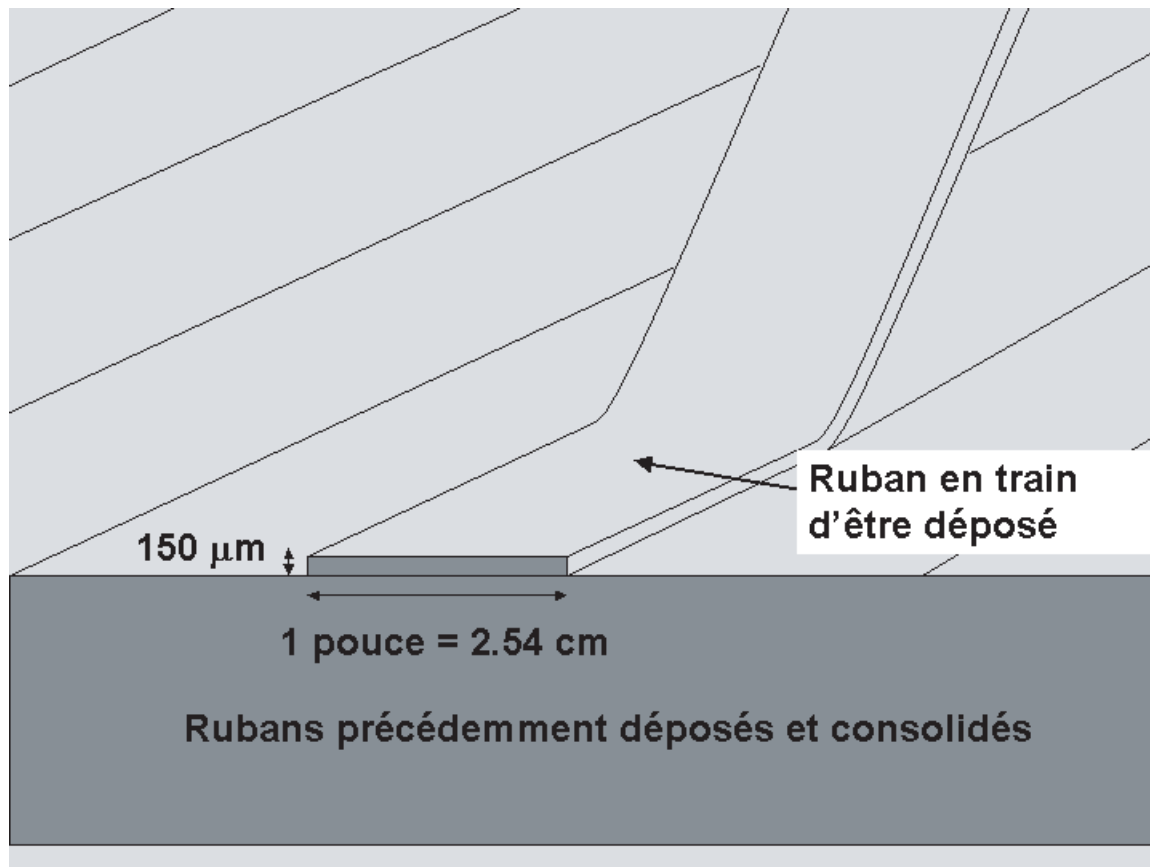


FIGURE 4.23 – Dépôt d'un pli

généralement d'environ 1 pouce, soit 2.54 cm. Cependant, on trouve également dans le commerce des rubans de longueur 6 mm.

Afin de limiter les temps de calcul, nous considérons dans notre étude un ruban de longueur 6 mm. Ainsi, avec la condition de symétrie à l'extrémité gauche du composite, nous ne simulons que le refroidissement d'une pièce de longueur 3 mm.

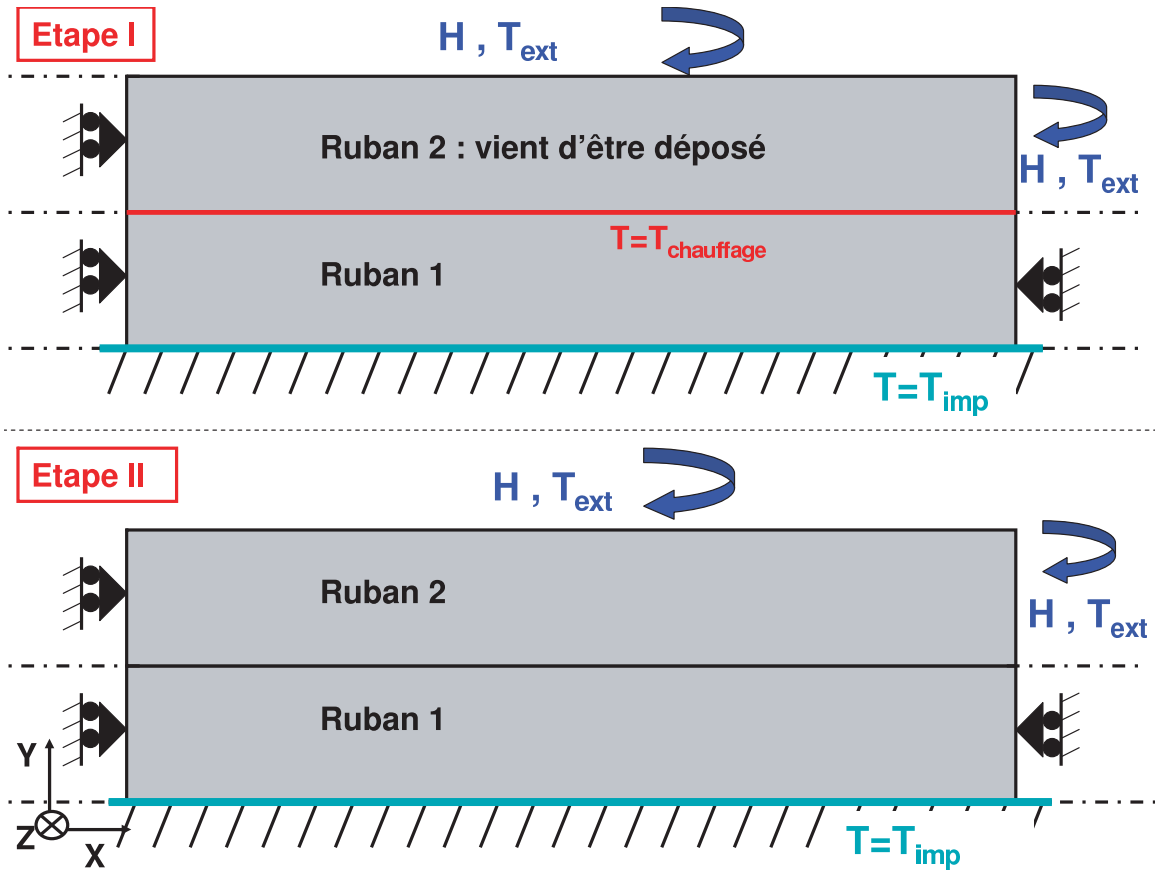


FIGURE 4.24 – Dépôt, chauffage et refroidissement d'un ruban de préimprégné

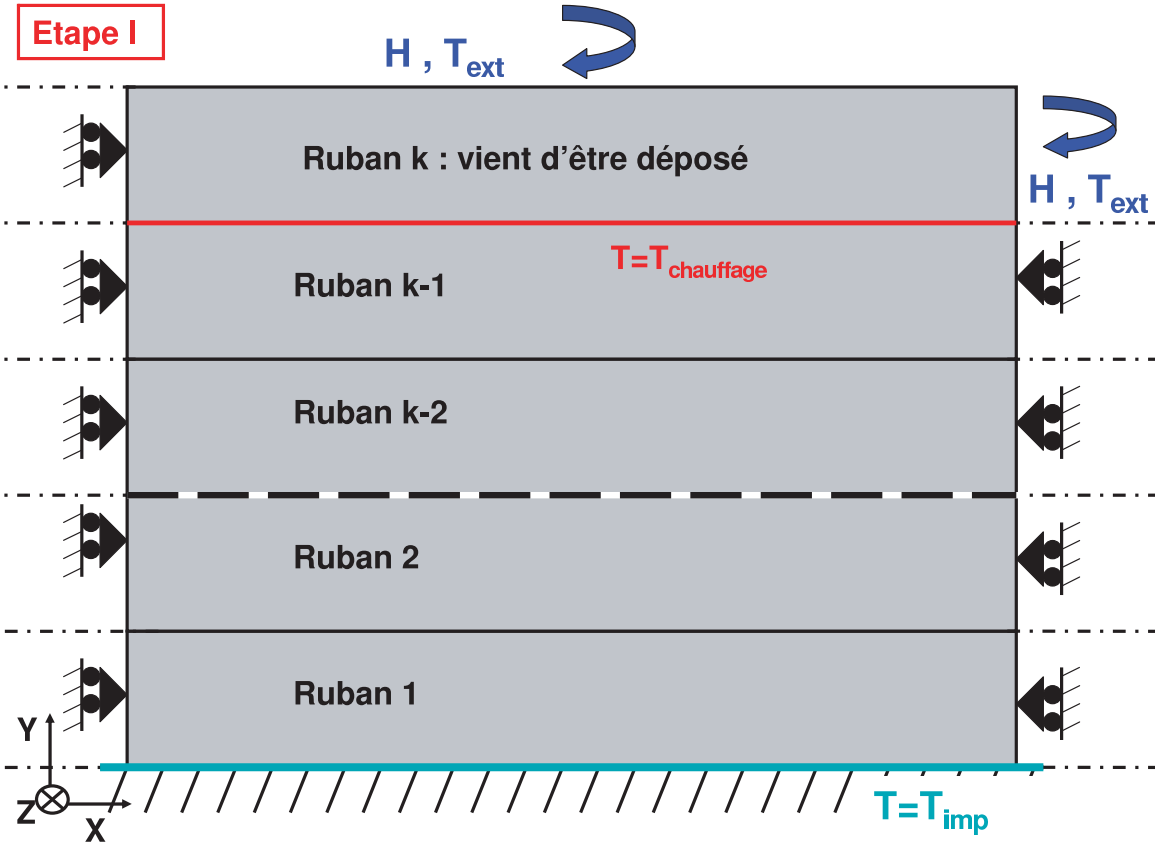


FIGURE 4.25 – Dépot et chauffage d'un ruban de préimprégné sur le composite

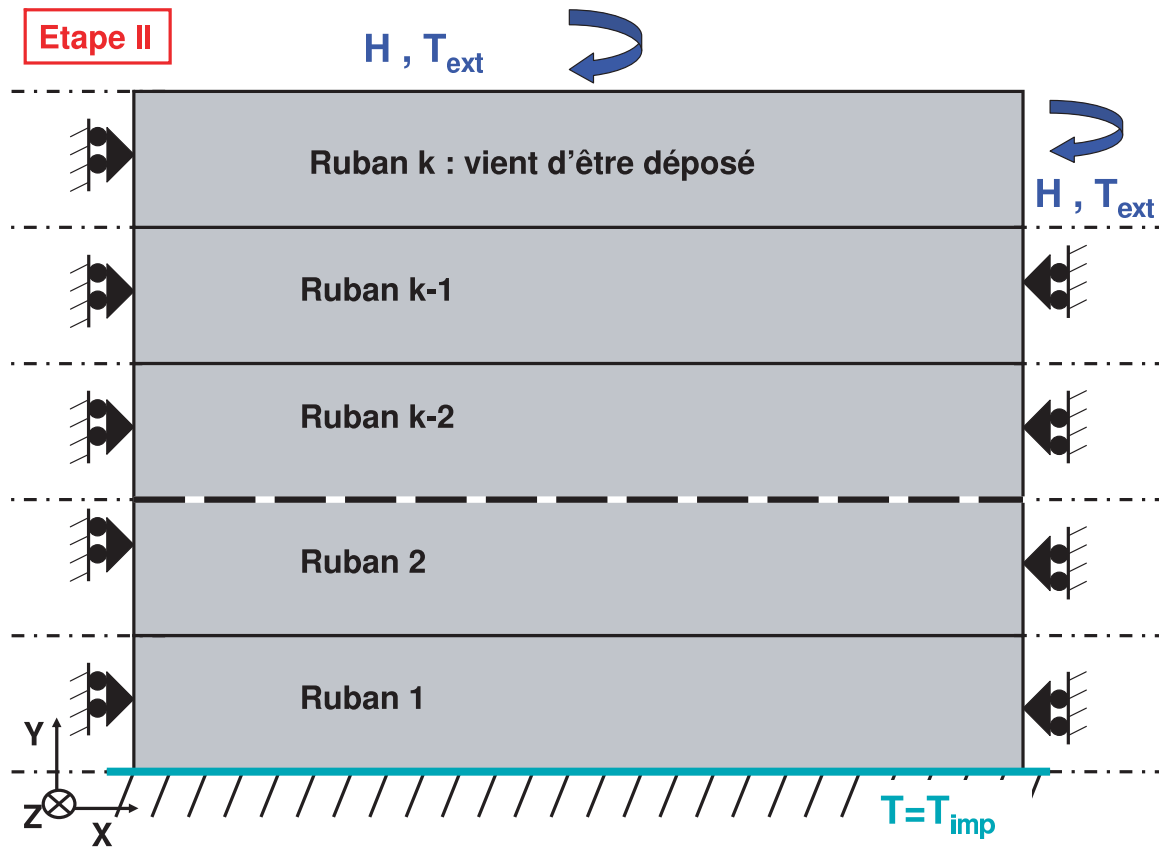


FIGURE 4.26 – Refroidissement d'un ruban de préimprégné sur le composite

Nous présentons ci-après les résultats de calcul obtenus pour la simulation du dépôt de 3 rubans de préimprégné, pour différentes séquences d'empilement :

- empilement de type $[0^\circ/90^\circ/90^\circ]_1$
- empilement de type $[90^\circ/0^\circ/90^\circ]_1$

4.2.1 Initialisation du calcul : choix du nombre et de l'emplacement des domaines microscopiques

Nous devons tout d'abord déterminer le nombre et l'emplacement des domaines microscopiques. Conformément aux conclusions de l'étude menée dans la section 4.1.4, nous nous limitons à un nombre limité de domaines microscopiques par ruban. Dans la simulation, chaque ruban comporte ainsi 5 domaines microscopiques (maillages CNEM indépendants). Ces 5 domaines microscopiques sont disposés dans le ruban comme présenté sur la figure 4.27.

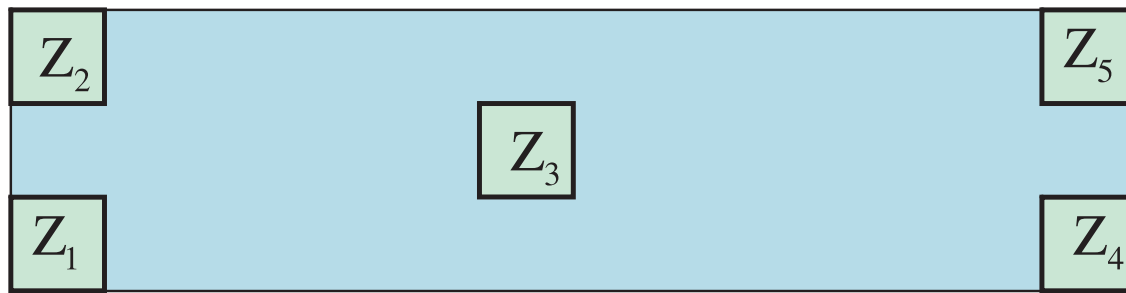


FIGURE 4.27 – Emplacement des 5 domaines microscopiques dans le domaine macroscopique

Nous présentons dans la section suivante les résultats obtenus pour la séquence d'empilement $[0^\circ/90^\circ/90^\circ]_1$.

4.2.2 Séquence d'empilement de type $0^\circ/90^\circ/90^\circ$

Dans une première section, nous présentons les résultats obtenus après le chauffage et le refroidissement des 2 premiers rubans de préimprégné. Puis nous présentons les résultats obtenus après le chauffage et le refroidissement du 3ème ruban de préimprégné

Dépôt, chauffage et refroidissement de 2 rubans de préimprégné

Nous présentons dans cette section les résultats de calcul obtenus après le dépôt de deux rubans de préimprégné (figure 4.24). Nous présentons les résultats obtenus distinctement à l'échelle macroscopique et à l'échelle microscopique.

a) Champ de contraintes à l'échelle macroscopique

Le champ de contraintes en début de phase de refroidissement, après un temps de refroidissement $t=1$ s est représenté sur les figures 4.28 et 4.29. Comme on peut le constater, le champ de contraintes est déjà élevé dans la pièce. Ceci s'explique par le fait que le refroidissement de la pièce de composite est très rapide, comme le montre le champ de température pour un temps de refroidissement de $t=1$ s (figure 4.40). Le champ de contraintes macroscopiques après 5 s est représenté sur les figures 4.30 et 4.31.

Enfin, le champ de contraintes macroscopiques après 10 s de refroidissement est représenté sur les figures 4.32 et 4.33.

Comme on le constate, le maximum des contraintes se forment très rapidement après le début du refroidissement. En effet, la pièce de composite refroidit très vite. De plus, les maximums de contrainte se forment aux extrémités libres de conditions aux limites (extrémité droite du composite). Les courbes représentant les états de contraintes dans le sens de l'abscisse sont données pour différentes ordonnées dans le composite sur les figures 4.34, 4.35, 4.36 et 4.37. Le champ de température en fin de phase de refroidissement est donné sur la figure 4.40. Les champs de température aux instants $t=5$ s et $t=10$ s de la phase de refroidissement sont représentés sur les figures 4.38 et 4.39.

b) Champ de contraintes à l'échelle microscopique

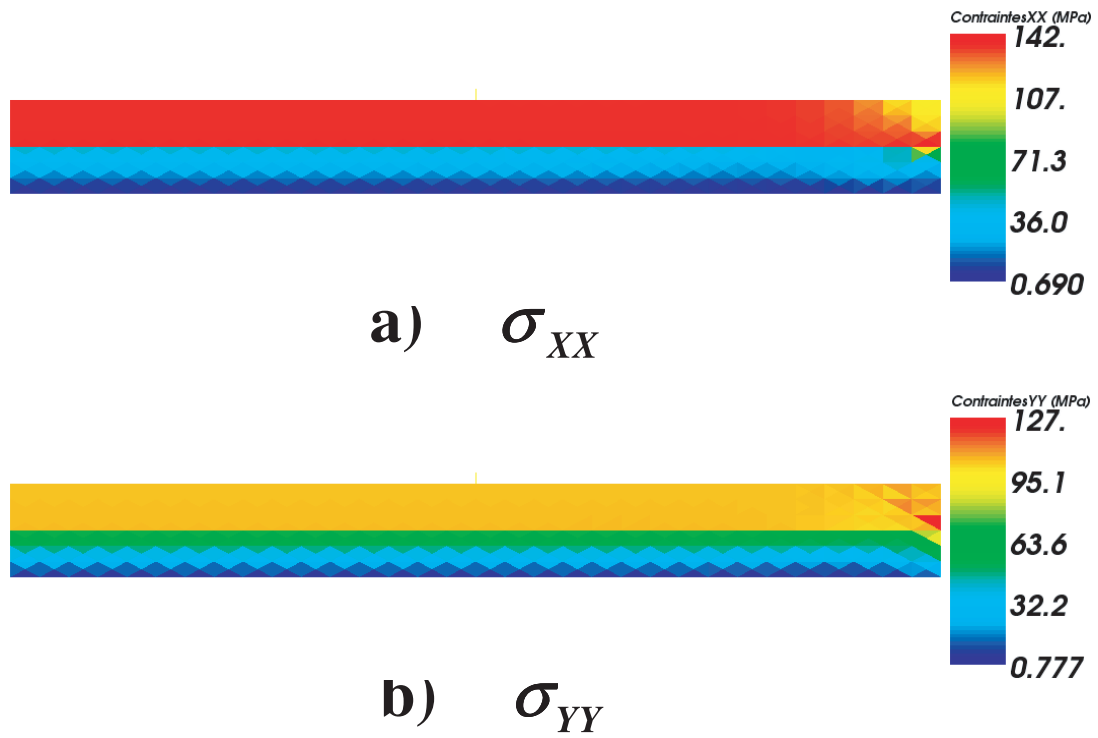


FIGURE 4.28 – Champ de contraintes σ_{XX} et σ_{YY} au début de la phase de refroidissement



FIGURE 4.29 – Champ de contraintes σ_{XY} au début de la phase de refroidissement

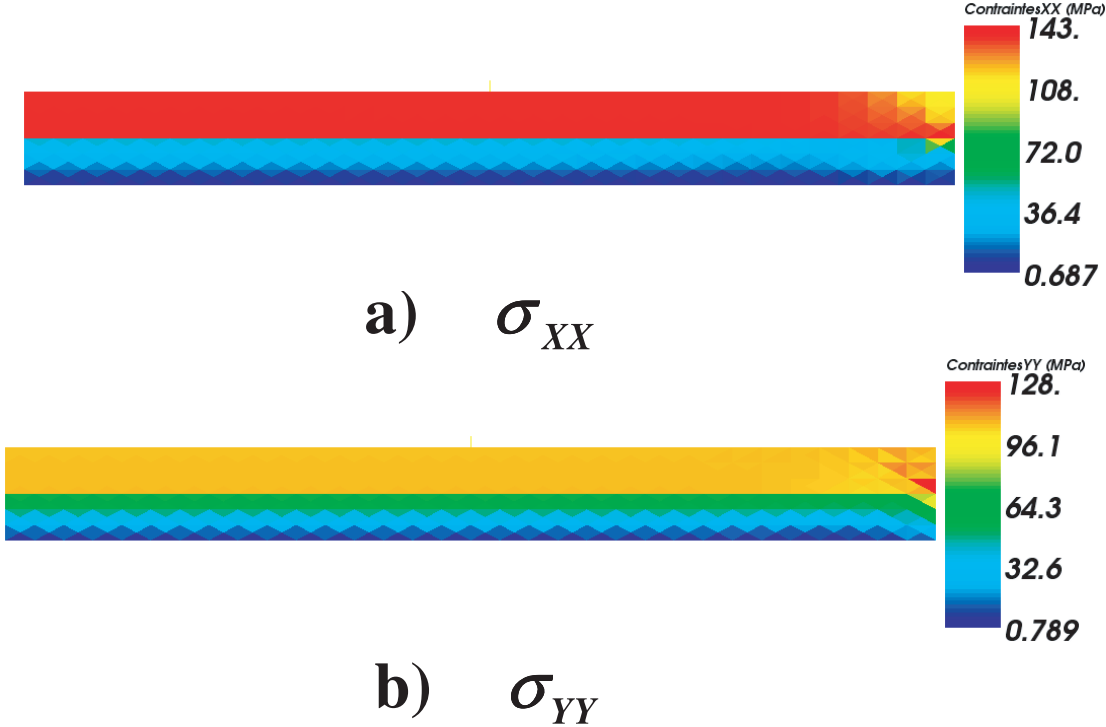


FIGURE 4.30 – Champ de contraintes σ_{XX} et σ_{YY} à $t=5$ s



FIGURE 4.31 – Champ de contraintes σ_{XY} à $t=5$ s

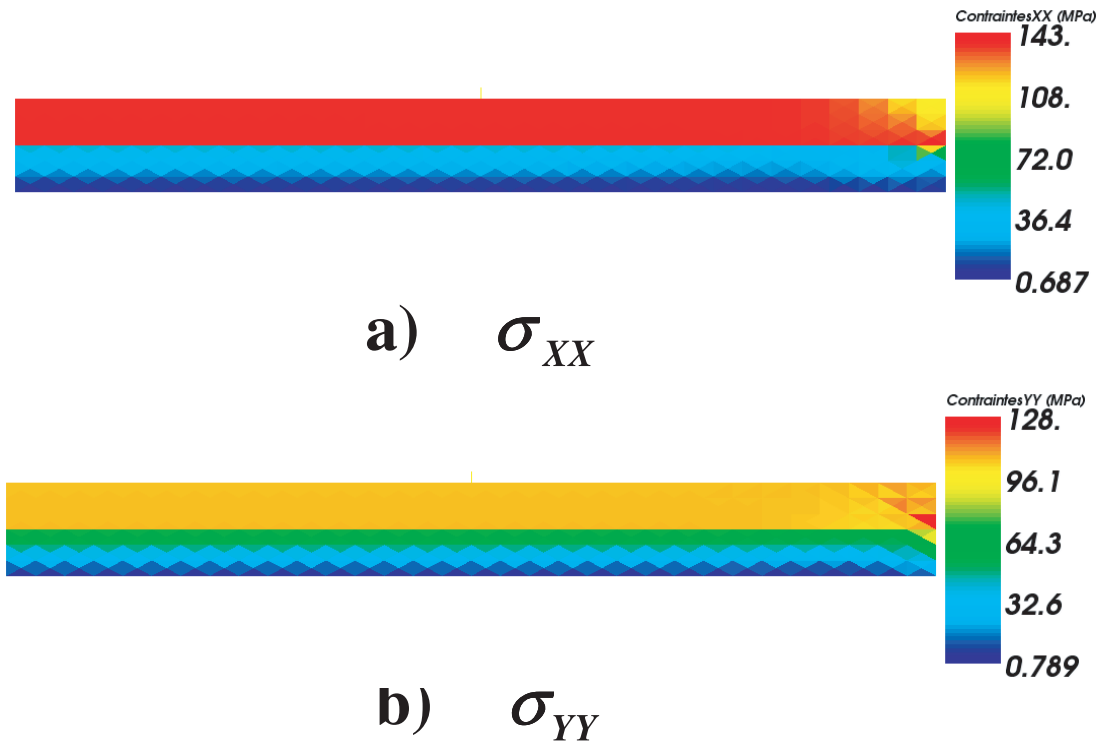


FIGURE 4.32 – Champ de contraintes σ_{XX} et σ_{YY} à $t=10$ s



FIGURE 4.33 – Champ de contraintes σ_{XY} à $t=10$ s

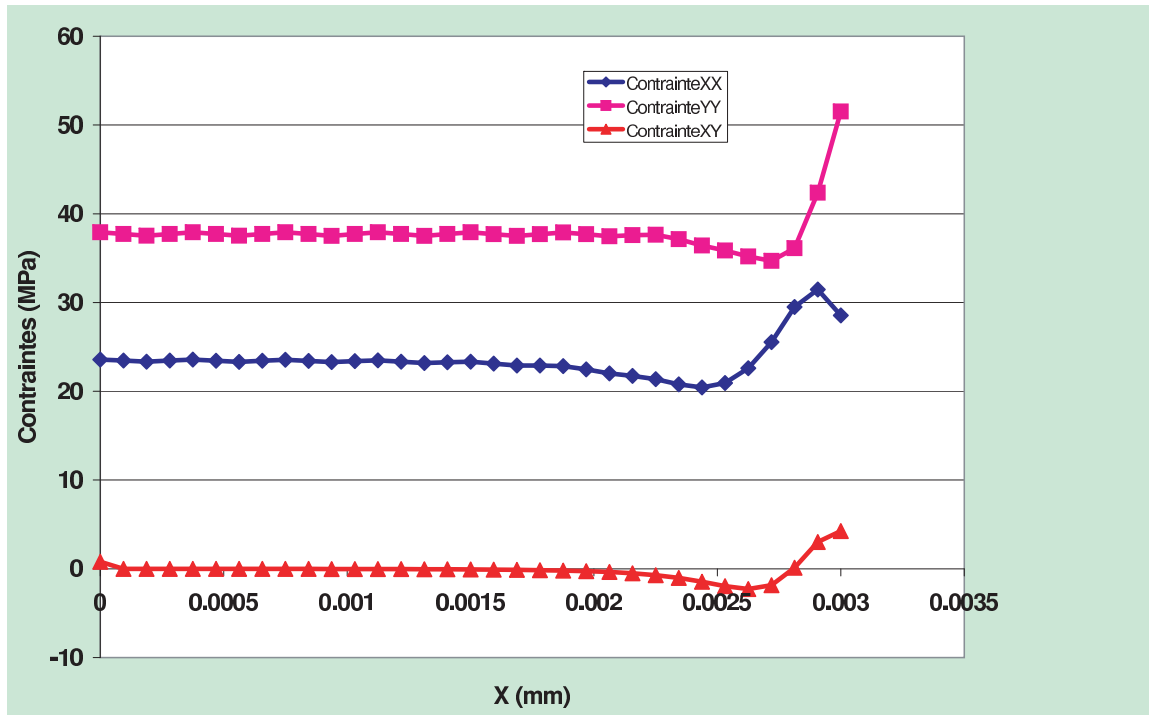


FIGURE 4.34 – Champs de contraintes à $t=10$ s et à l'ordonnée $Y = 75 \mu m$

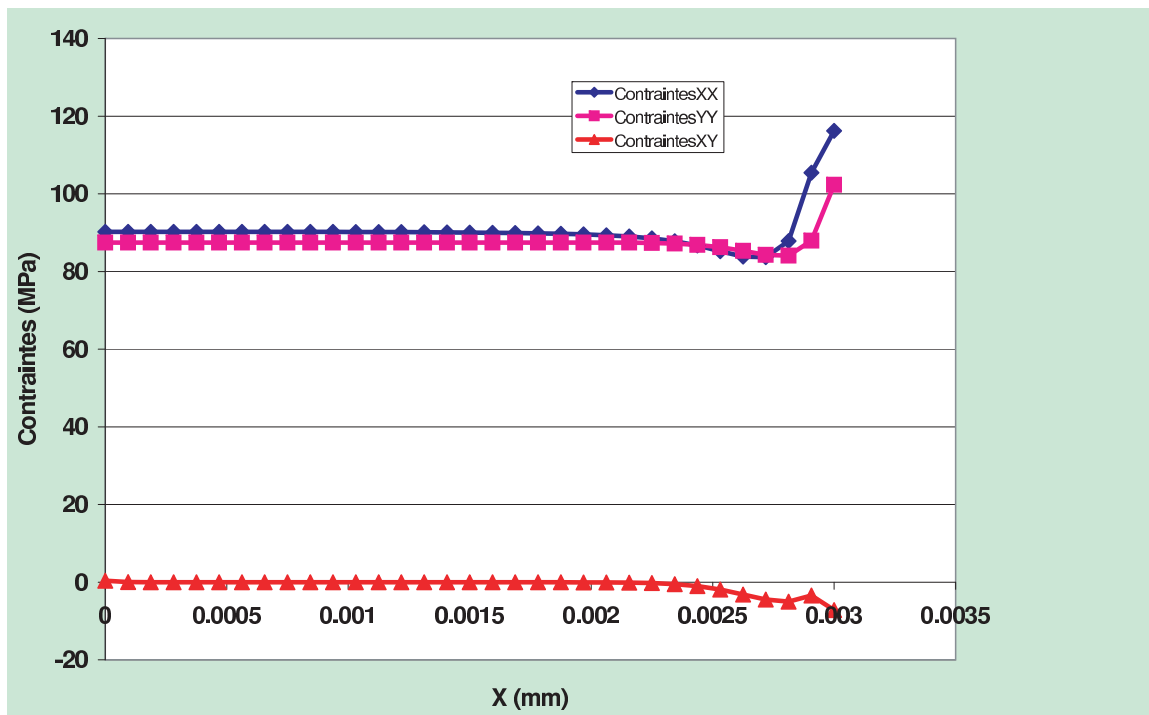


FIGURE 4.35 – Champs de contraintes à $t=10$ s et à l'ordonnée $Y = 150 \mu m$

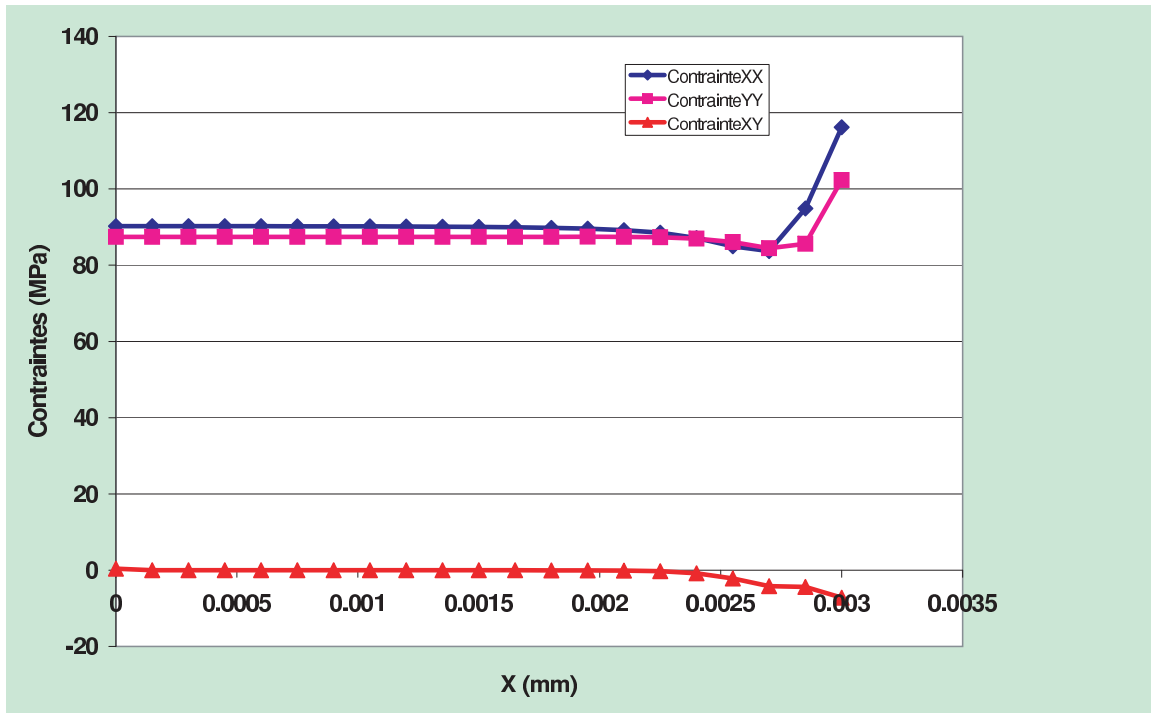
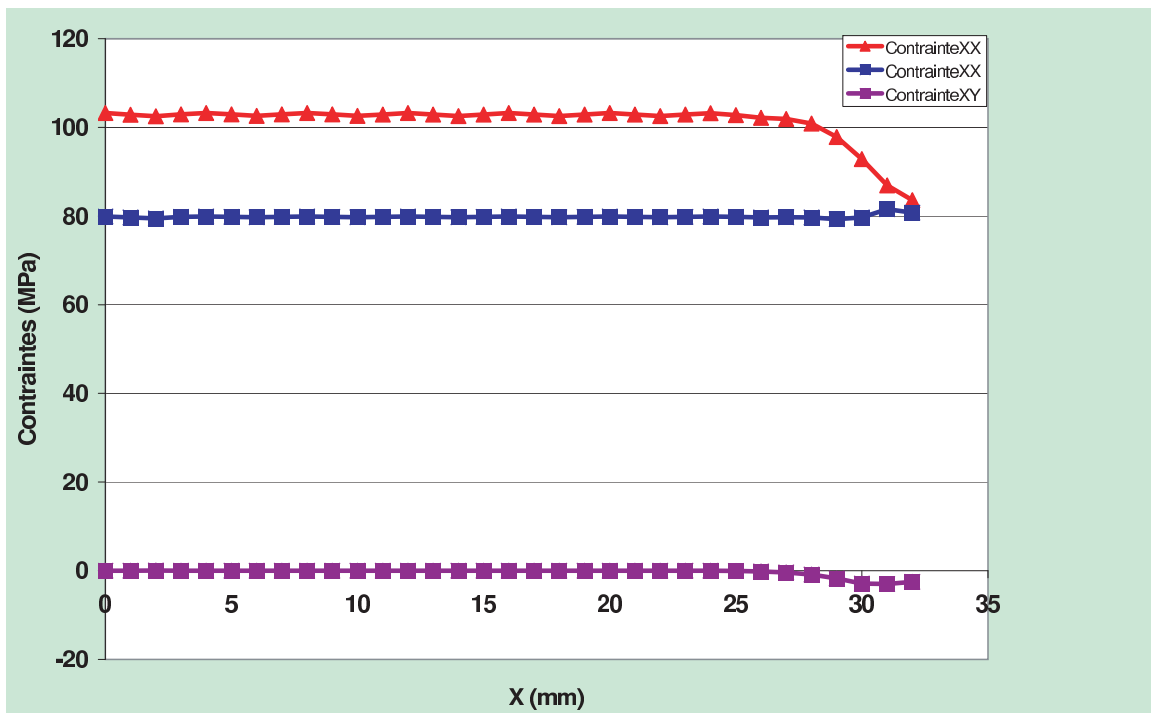
FIGURE 4.36 – Champs de contraintes à $t=10$ s et à l'ordonnée $Y = 225 \mu m$ FIGURE 4.37 – Champs de contraintes à $t=10$ s et à l'ordonnée $Y = 275 \mu m$



FIGURE 4.38 – Champ de température (°C) à t=1 s de la phase de refroidissement

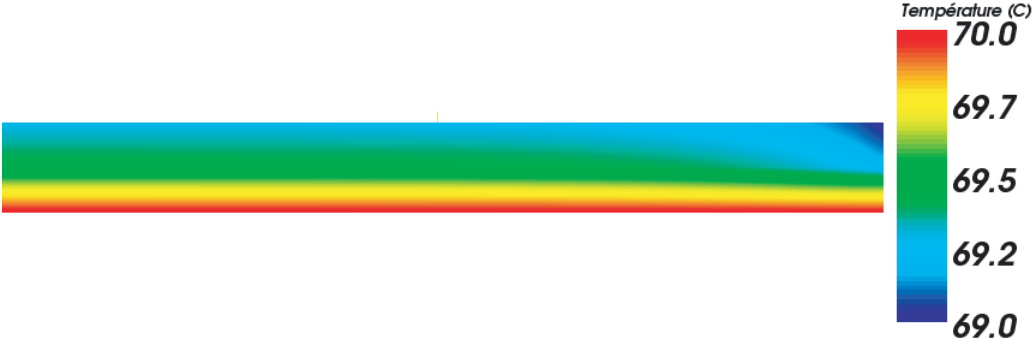


FIGURE 4.39 – Champ de température (°C) à t=5 s de la phase de refroidissement



FIGURE 4.40 – Champ de température (°C) en fin de phase de refroidissement

Dans cette section, nous étudions le champ de contraintes à l'échelle microscopique que nous obtenons au cours de la phase de refroidissement des 2 rubans de préimprégné.

b-1) Calcul de l'incrément de contraintes microscopiques

Comme nous l'avons vu dans la section 1.5 et au chapitre 3, nous devons calculer les incréments de contraintes et de déformation à chaque pas de temps pour obtenir le champ de contraintes globale dans le domaine. Le champ de contrainte obtenu pour un pas de temps du calcul microscopique est représenté sur les figures 4.41, 4.42 et 4.43. Comme on peut le constater, les valeurs de contrainte sont très faible pour un pas de temps donné.

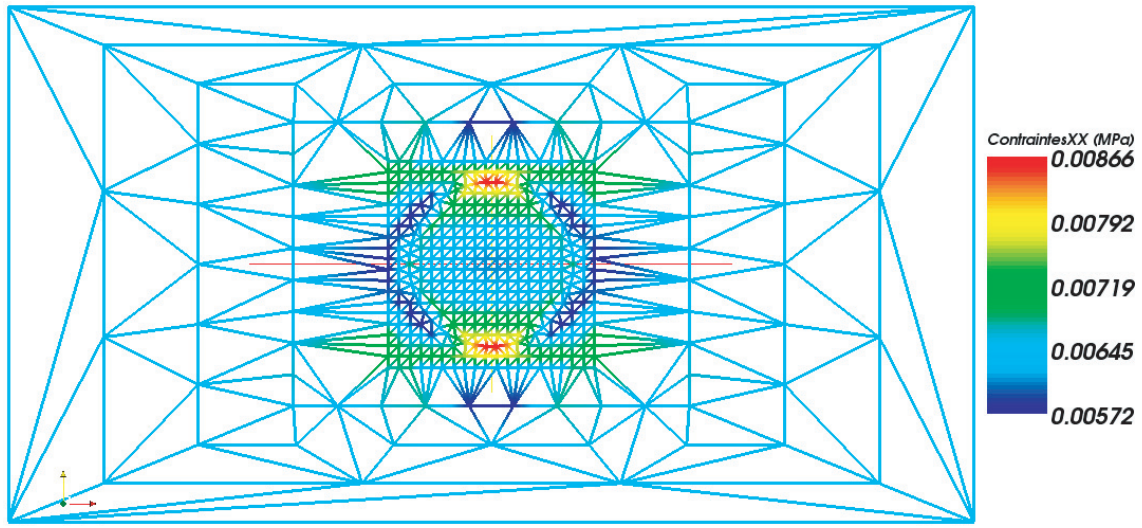


FIGURE 4.41 – Incrément de contraintes σ_{XX} à $t=10$ s

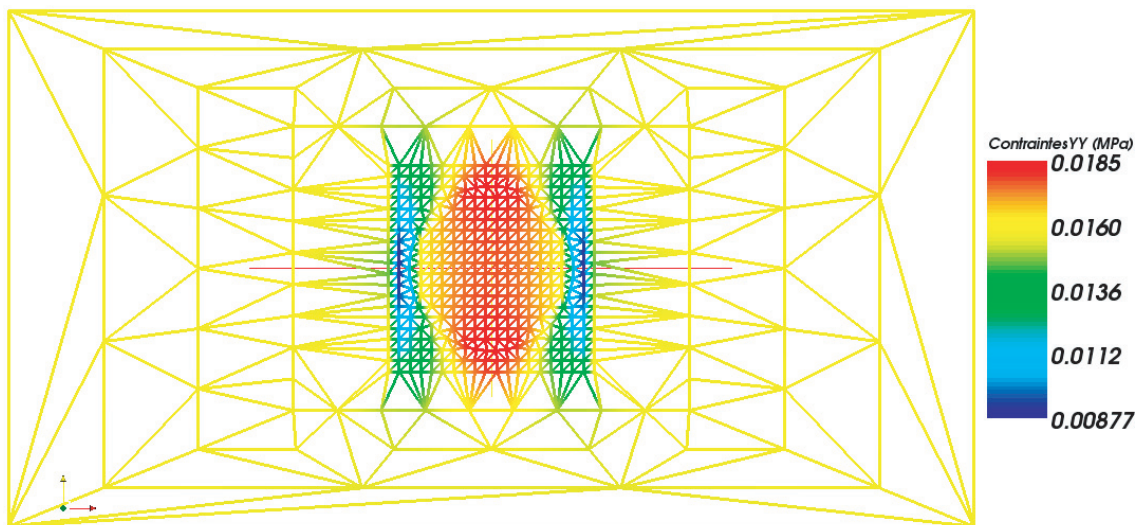


FIGURE 4.42 – Incrément de contraintes σ_{YY} à $t=10$ s

Nous allons maintenant examiner le champs de contraintes microscopiques obtenu dans le ruban à fibres disposées à 0° .

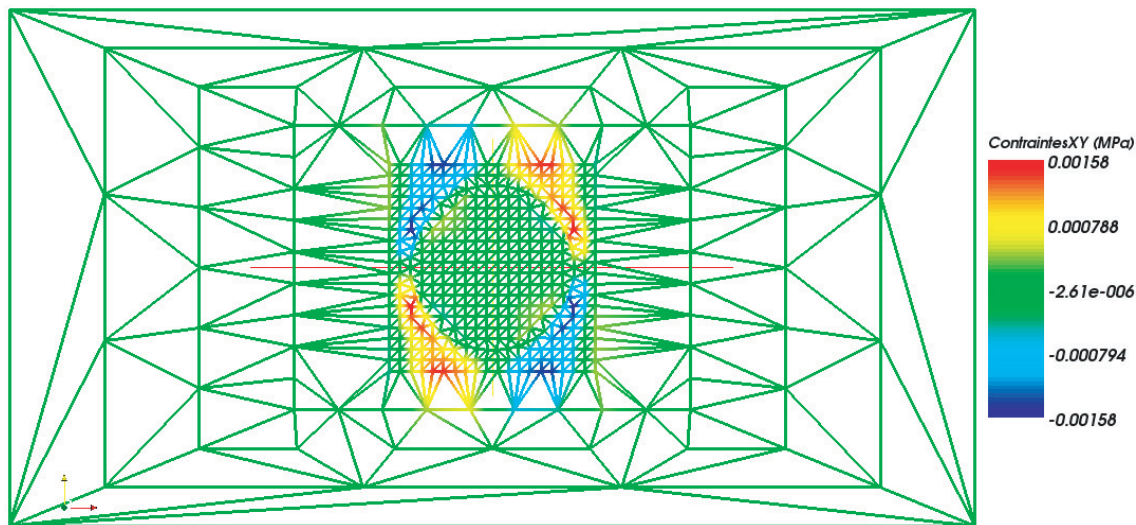


FIGURE 4.43 – Incrément de contraintes σ_{XY} à $t=10$ s

b-2) Champs de contraintes microscopiques dans le ruban à fibres à 0°

Le champs de contrainte microscopique obtenu en fin de phase de refroidissement ($t = 10$ s) dans les cellules microscopiques du ruban à fibres à 0° est représentés dans les domaines microscopiques n°3, n°4 et n°5.

b-2-1) Champs de contraintes microscopiques dans le domaine microscopique n°3

Dans le domaine microscopique n°3, le champ de contrainte obtenu est donné sur les figures 4.44, 4.45 et 4.46. Les valeurs sont maximales dans la cellule microscopique du centre. La fibre présente globalement des valeurs de contraintes plus élevées. On observe une mise en compression de la fibre et l'apparition de contraintes à l'interface fibre/matrice. Dans le cas de la contrainte σ_{XX} (figure 4.44), on observe une mise en compression de la fibre et l'apparition de contraintes à l'interface fibre/matrice.

Dans le cas de la contrainte σ_{XY} (figure 4.44), on observe bien le cisaillement.

Les courbes représentant l'allure des champs de contrainte le long de l'abscisse du plan médian de la cellule microscopique sont données sur la figure 4.47.

b-2-2) Champ de contraintes microscopiques dans le domaine microscopique n°4

Dans le domaine microscopique n°4, le champ de contraintes obtenu est donné sur les figures 4.48, 4.49 et 4.50.

Les courbes représentant l'allure des champs de contrainte le long de l'abscisse du plan médian de la cellule microscopique sont données sur la figure 4.51. L'allure des champs de contraintes dans le domaine microscopique n°4 montre l'influence notable qu'exercent les conditions aux limites macroscopiques sur le champ de contrainte à l'échelle microscopique. en effet, les déplacements macroscopiques dans cette zone de la pièce sont d'amplitude supérieure, du fait des conditions aux limites mécaniques appliquées dans cette zone.

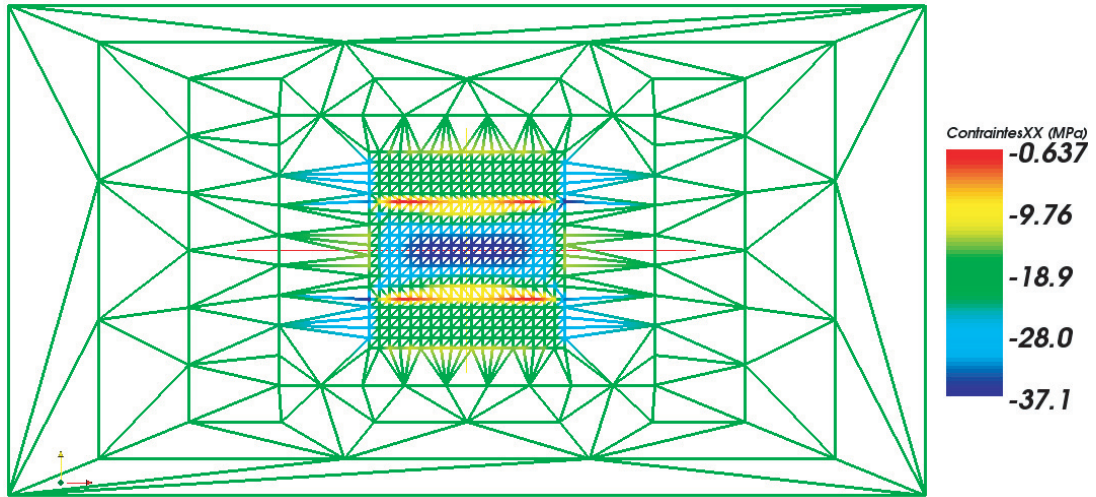


FIGURE 4.44 – Champ de contraintes σ_{XX} à t=10 s

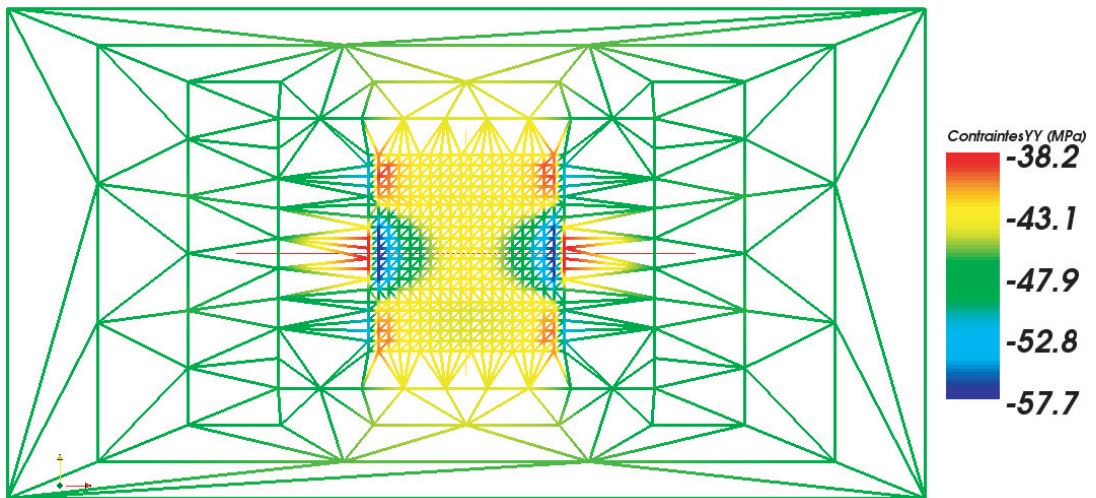


FIGURE 4.45 – Champ de contraintes σ_{YY} à t=10 s

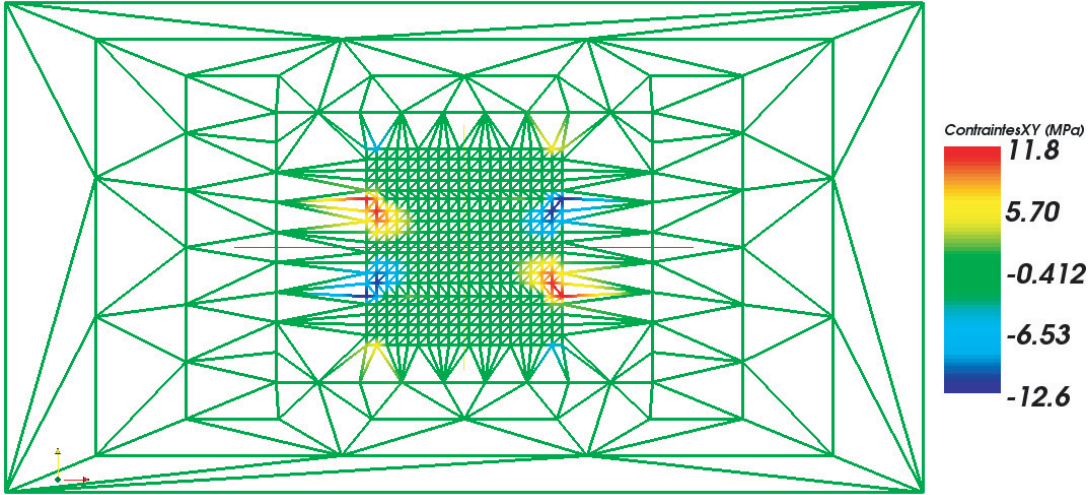


FIGURE 4.46 – Champ de contraintes σ_{XY} à $t=10$ s

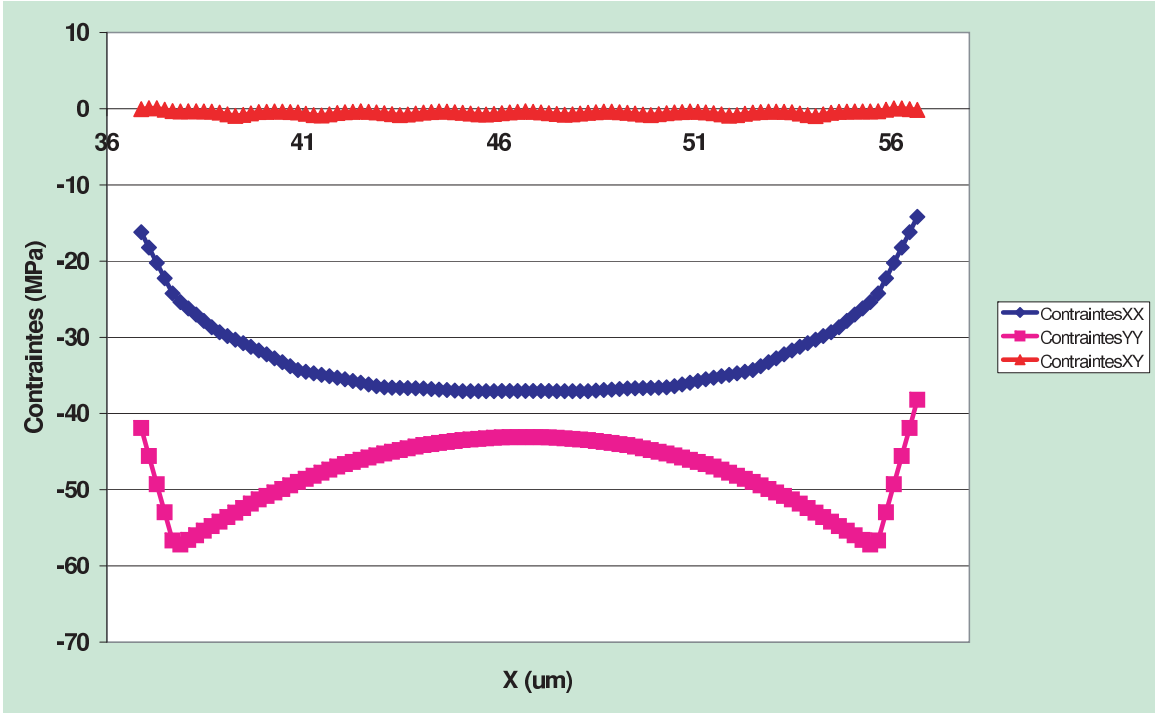


FIGURE 4.47 – Champ de contraintes σ_{XX} , σ_{YY} et σ_{XY} à $t=10$ s

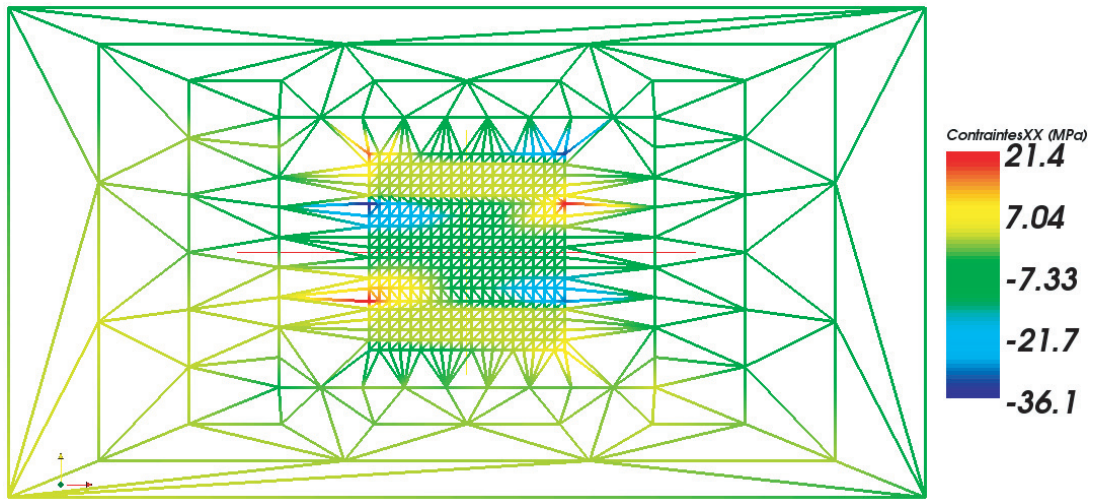


FIGURE 4.48 – Champ de contraintes σ_{XX} à $t=10$ s

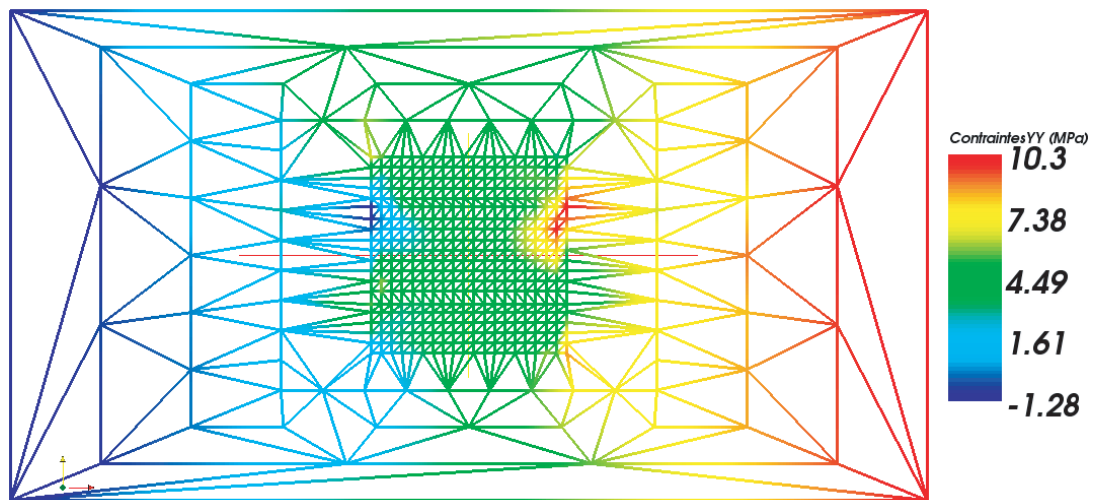


FIGURE 4.49 – Champ de contraintes σ_{YY} à $t=10$ s

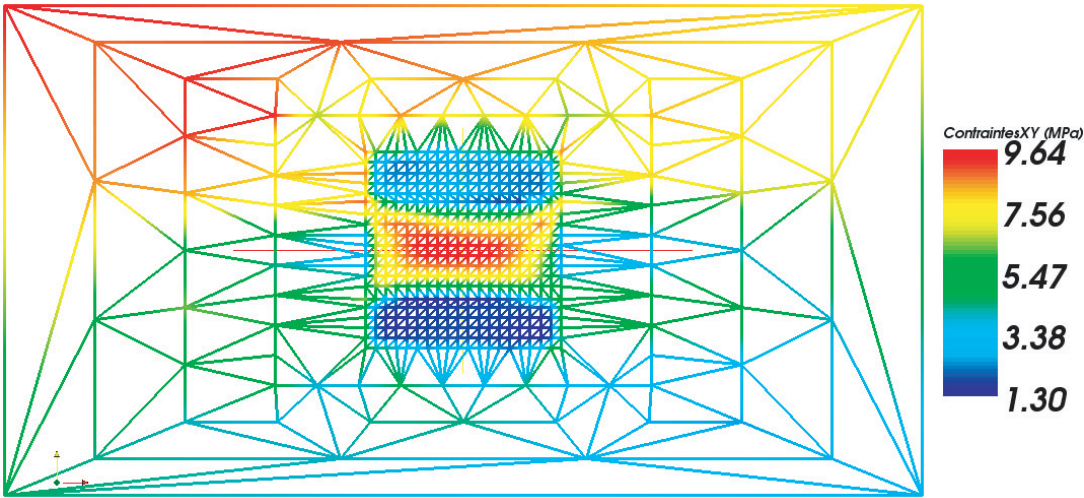


FIGURE 4.50 – Champ de contraintes σ_{XY} à t=10 s

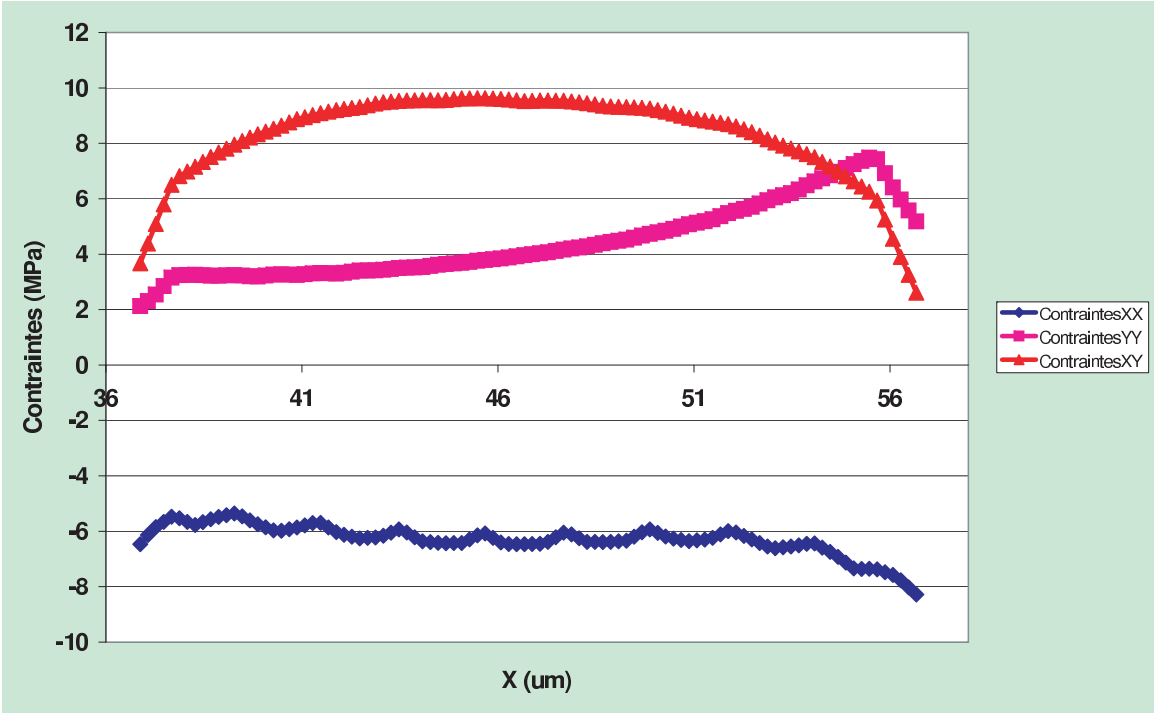


FIGURE 4.51 – Champ de contraintes σ_{XX} , σ_{YY} et σ_{XY} à t=10 s

b-2-3) Champ de contraintes microscopiques dans le domaine microscopique n°5

Dans le domaine microscopique n°5, le champ de contraintes obtenu est donné sur les figures 4.52, 4.54 et 4.54.

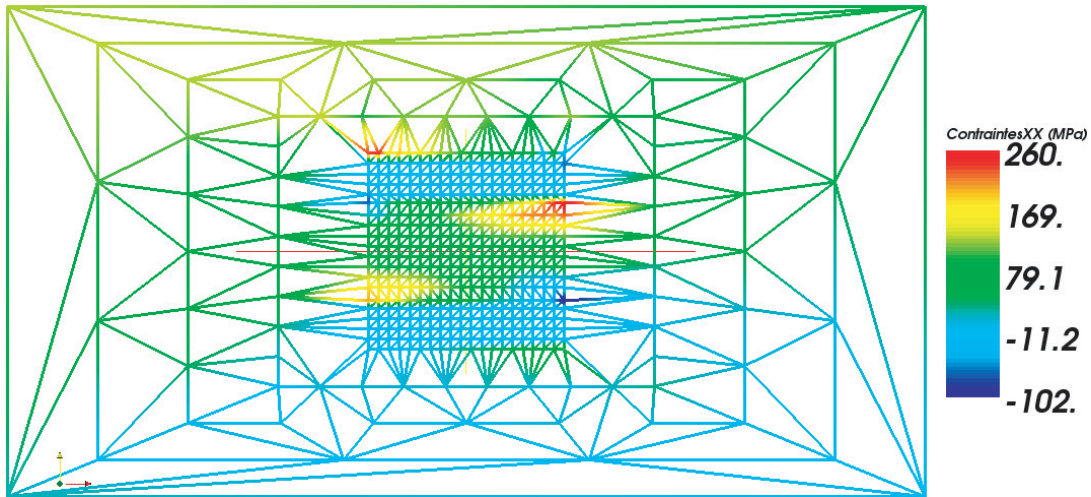


FIGURE 4.52 – Champ de contraintes σ_{XX} à $t=10$ s

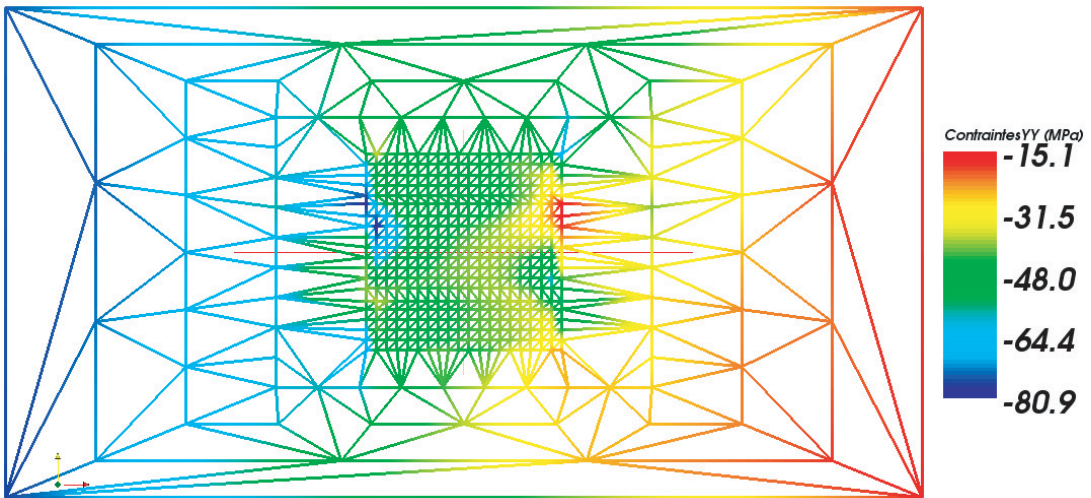


FIGURE 4.53 – Champ de contraintes σ_{YY} à $t=10$ s

Les courbes représentant l'allure des champs de contrainte le long de l'abscisse du plan médian de la cellule microscopique sont données sur la figure 4.55.

Comme on peut le constater, le champ de contraintes est le plus élevé dans le domaine microscopique n°5. En effet, Les conditions aux limites macroscopiques en déplacement appliquées au domaine 5 sont d'amplitude plus élevée. En effet l'élément macroscopique parent est soumis à une condition de symétrie suivant l'axe Y, tandis que le ruban placé au-dessus est libre de conditions aux limites mécaniques.

Nous allons maintenant étudier le champ de contraintes microscopiques dans les domaines mi-

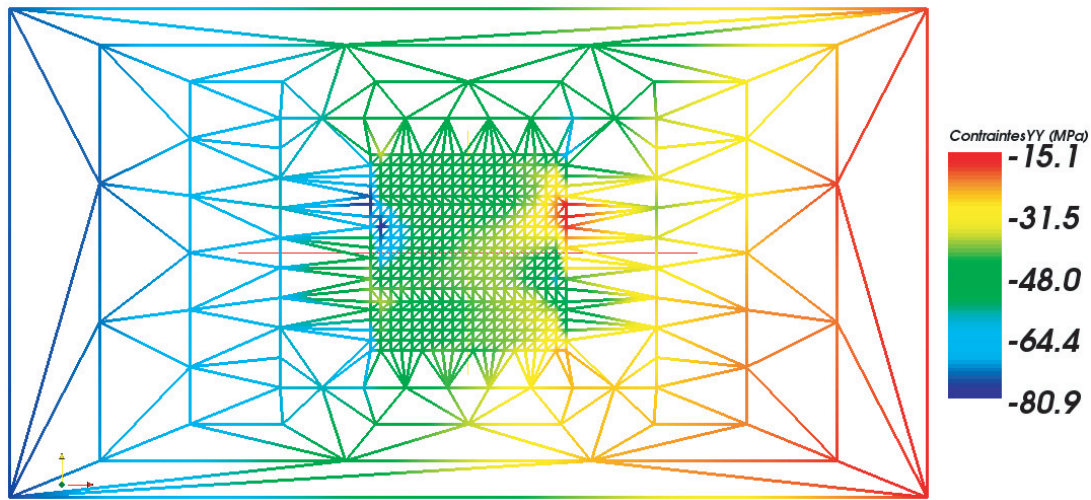


FIGURE 4.54 – Champ de contraintes σ_{XY} à $t=10$ s

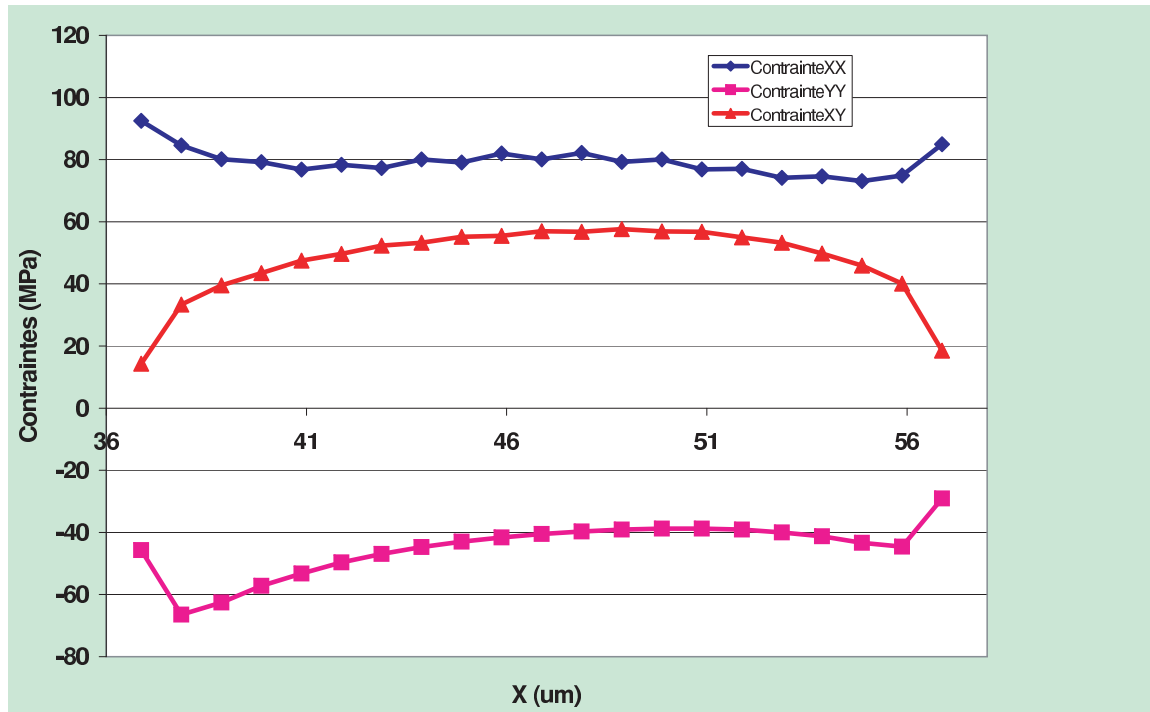


FIGURE 4.55 – Champ de contraintes σ_{XX} , σ_{YY} et σ_{XY} à $t=10$ s

croscopiques situés dans le ruban à fibres à 90° .

b-3) Champs de contraintes microscopiques dans le ruban à fibres à 90°

Le champ de contraintes microscopiques obtenu en fin de phase de refroidissement ($t = 10$ s) dans les cellules microscopiques du ruban à fibres à 90° est donné dans les domaines microscopiques n°3, n°4 et n°5.

b-3-1) Champs de contraintes microscopiques dans le domaine microscopique n°3

Dans le domaine microscopique n°3, le champ de contraintes obtenu est donné sur les figures 4.56, 4.57 et 4.58.

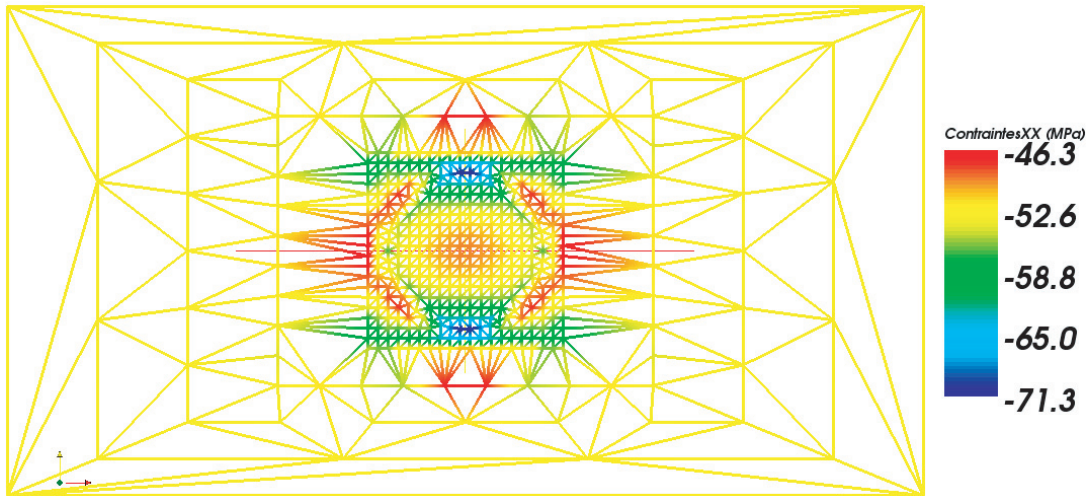


FIGURE 4.56 – Champ de contraintes σ_{XX} à $t=10$ s

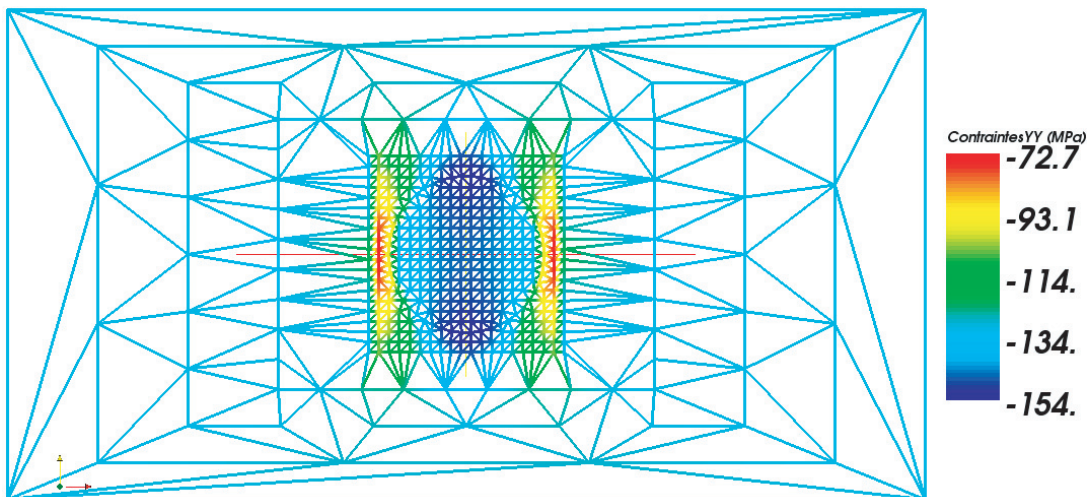


FIGURE 4.57 – Champ de contraintes σ_{YY} à $t=10$ s

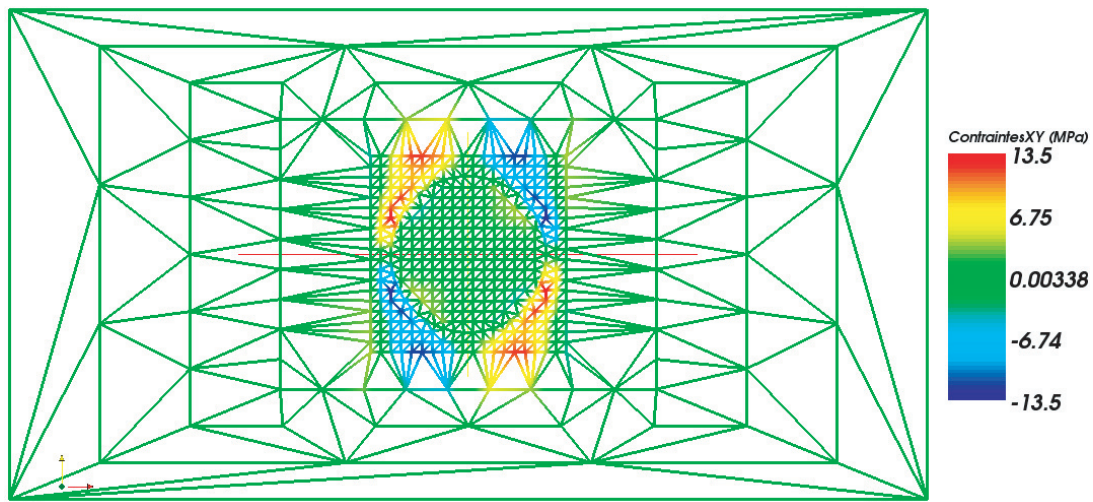


FIGURE 4.58 – Champ de contraintes σ_{XY} à $t=10$ s

On observe une forte concentration de contraintes dans la cellule microscopique. Les courbes représentant l'allure des champs de contrainte le long de l'abscisse du plan médian de la cellule microscopique sont données sur la figure 4.59.

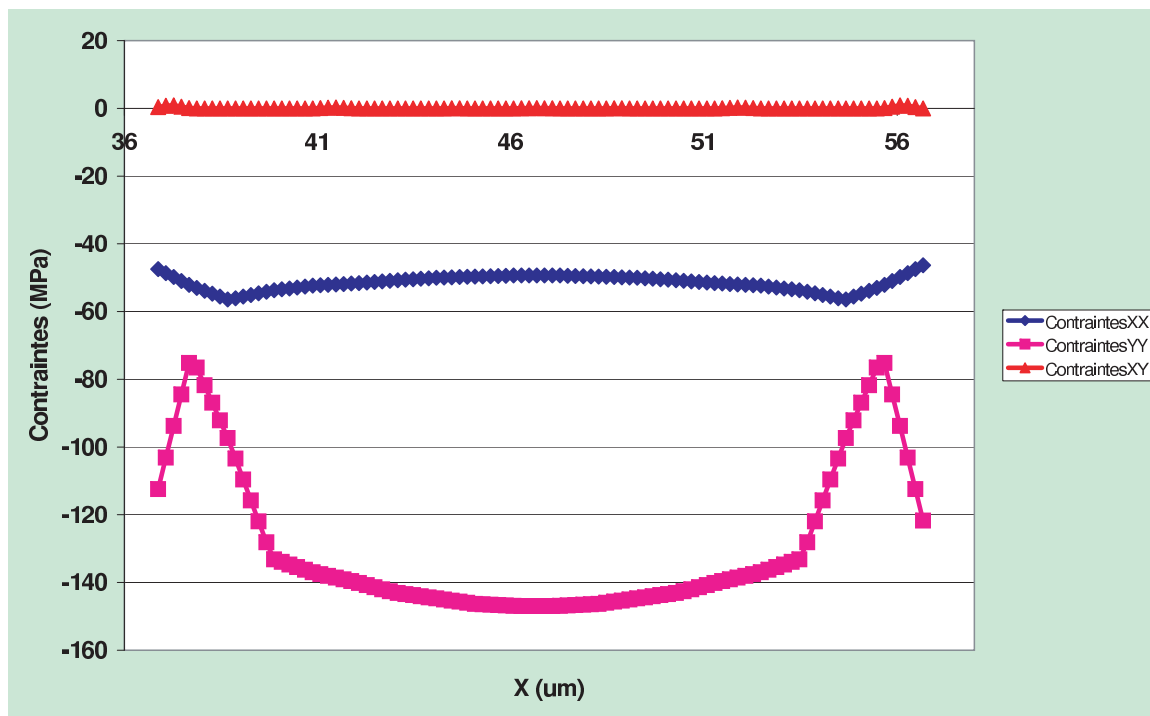


FIGURE 4.59 – Champ de contraintes σ_{XX} , σ_{YY} et σ_{XY} à $t=10$ s

b-3-2) Champs de contraintes microscopiques dans le domaine microscopique n°4

Dans le domaine microscopique n°4, le champ de contraintes obtenu est donné sur les figures 4.60, 4.61 et 4.62.

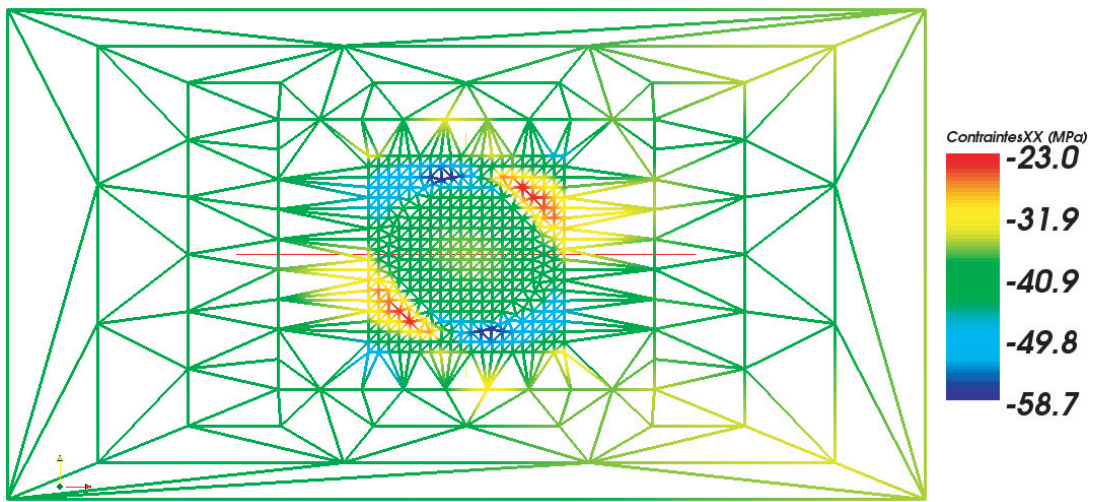


FIGURE 4.60 – Champ de contraintes σ_{XX} à $t=10$ s

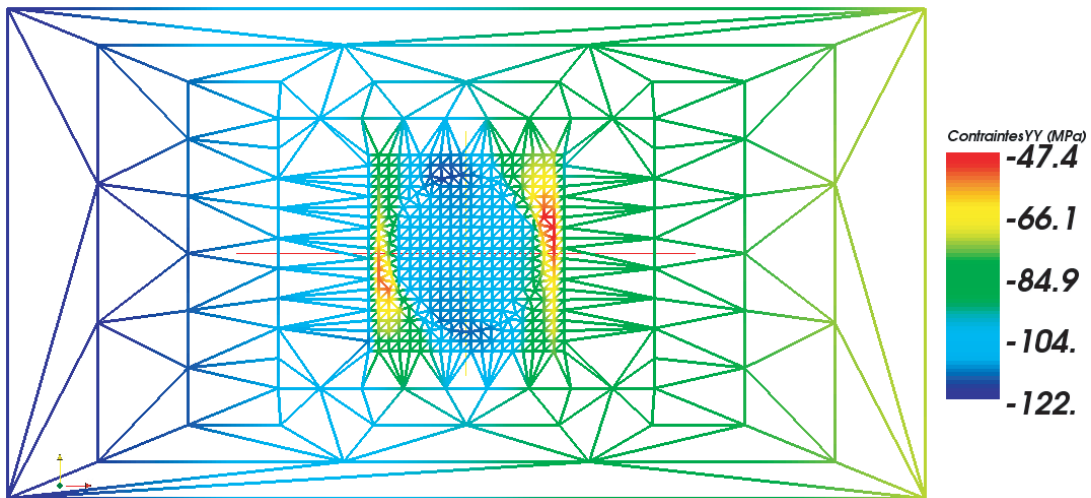


FIGURE 4.61 – Champ de contraintes σ_{YY} à $t=10$ s

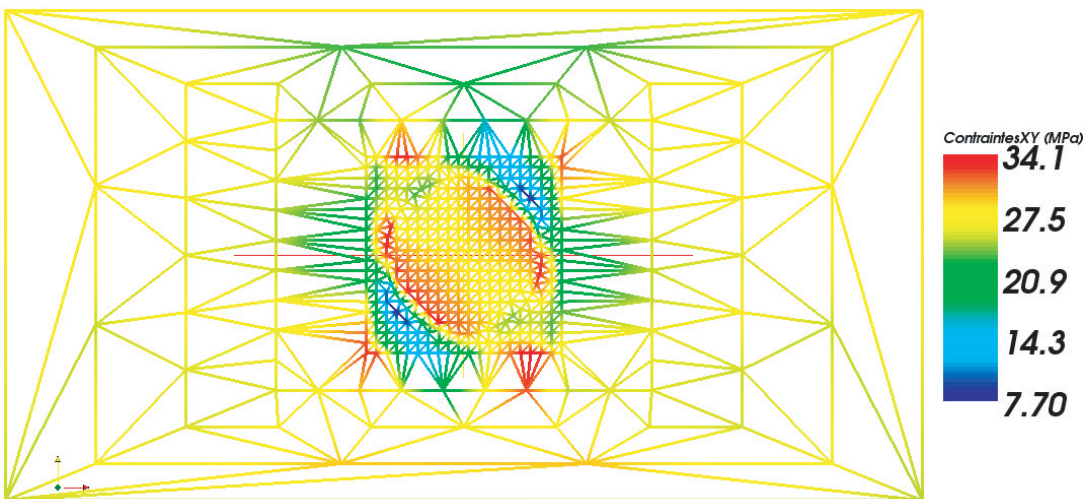


FIGURE 4.62 – Champ de contraintes σ_{XY} à $t=10$ s

Là encore on observe une forte concentration de contraintes dans la cellule microscopique. Les courbes représentant l'allure des champs de contrainte le long de l'abscisse du plan médian de la cellule microscopique sont données sur la figure 4.63.

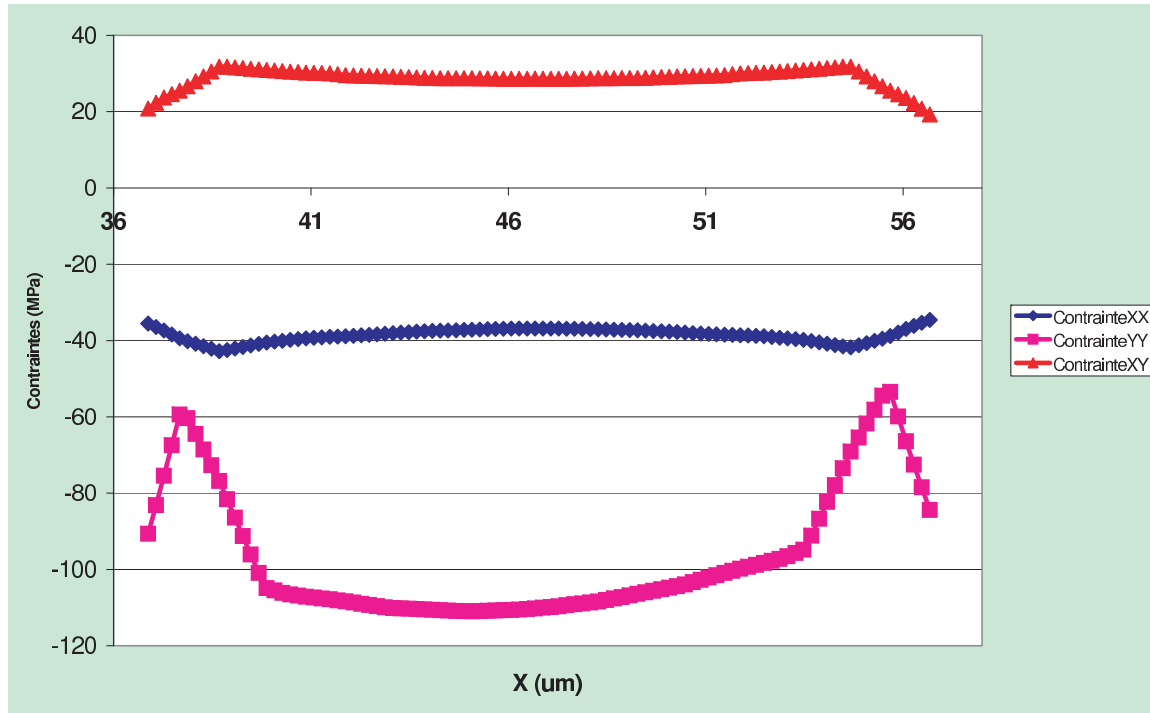


FIGURE 4.63 – Champ de contraintes σ_{XX} , σ_{YY} et σ_{XY} à $t=10$ s

b-3-3) Champs de contraintes microscopiques dans le domaine microscopique n°5

Dans le domaine microscopique n°5, le champ de contraintes obtenu est donné sur les figures 4.64, 4.65 et 4.66.

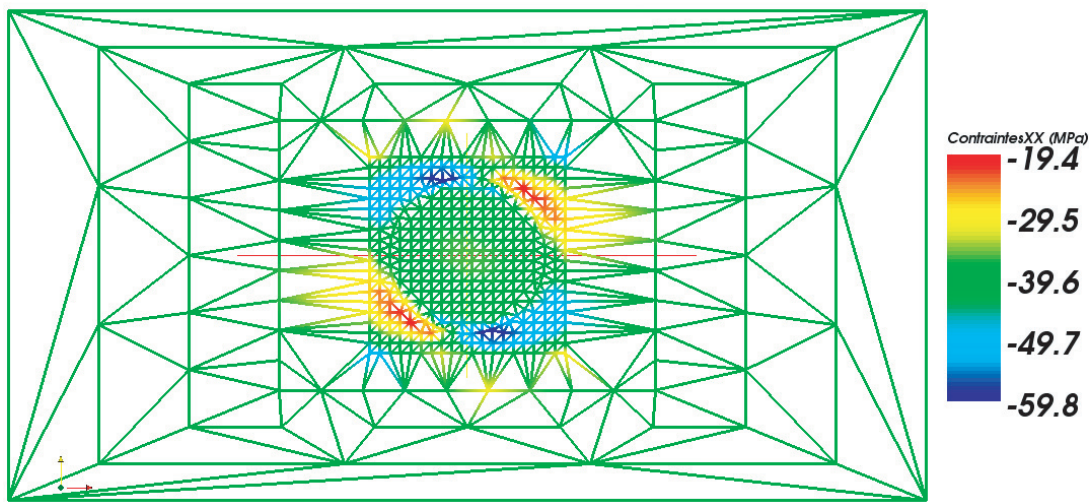
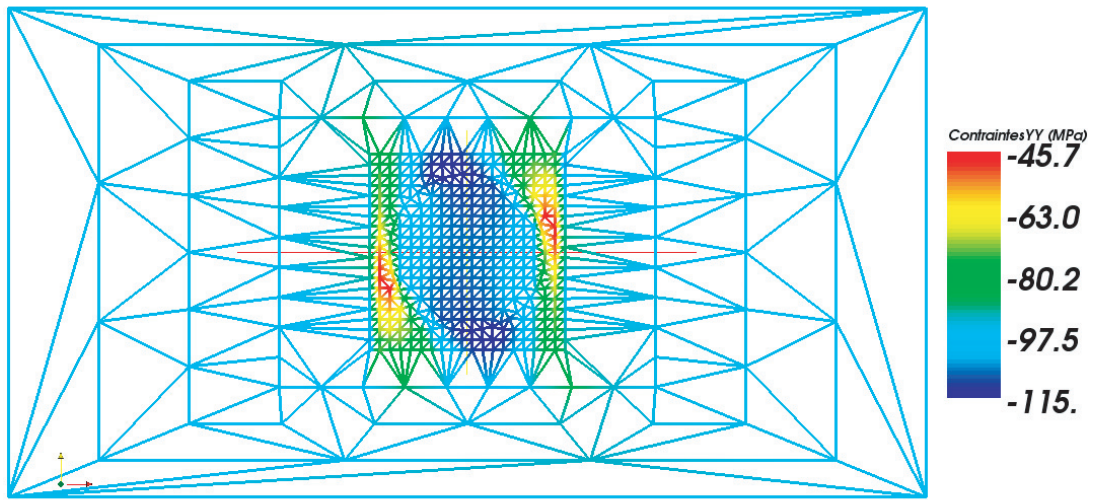
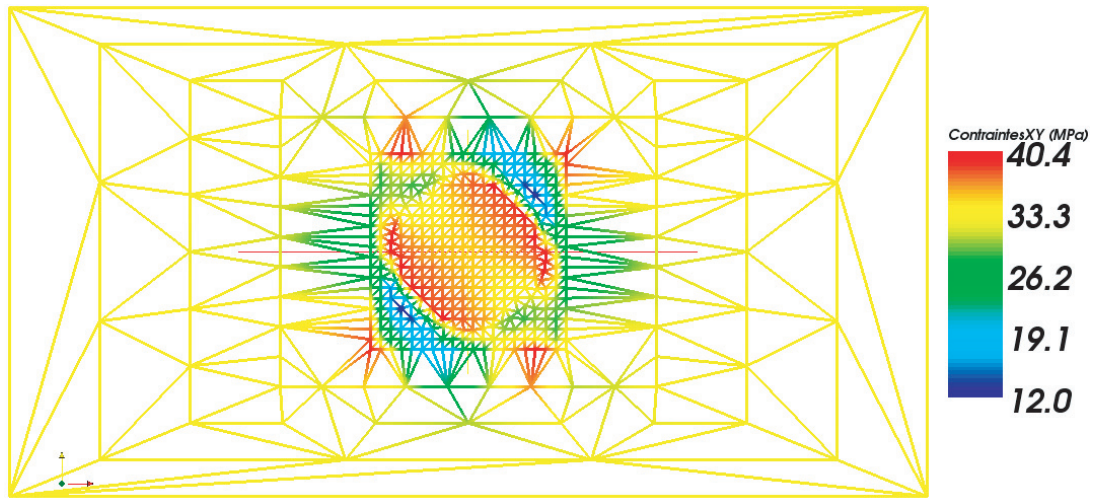


FIGURE 4.64 – Champ de contraintes σ_{XX} à $t=10$ s

FIGURE 4.65 – Champ de contraintes σ_{YY} à $t=10$ sFIGURE 4.66 – Champ de contraintes σ_{XY} à $t=10$ s

L'allure de l'évolution des champs de contrainte en fonction de l'abscisse de la cellule microscopique est donnée sur la figure 4.67.

Comme on peut encore le constater, le champ de contraintes est plus élevé dans les domaines microscopiques 4 et 5. En effet, Les conditions aux limites macroscopiques en déplacement sont d'amplitude plus élevées, car ces domaines microscopiques sont situés sur une frontière libre de conditions aux limites mécaniques. Nous allons maintenant étudier les résultats obtenus après le chauffage et le refroidissement du 3ème ruban de préimprégné.

Dépôt du 3ème ruban

Une fois que les deux rubans de préimprégné ont été refroidit aux conditions ambiantes, on simule le dépôt, le chauffage et le refroidissement d'un 3ème ruban conformément au schéma présenté sur les figures 4.25 et 4.26.

Le champ de température au début de la phase de refroidissement est représenté sur la figure

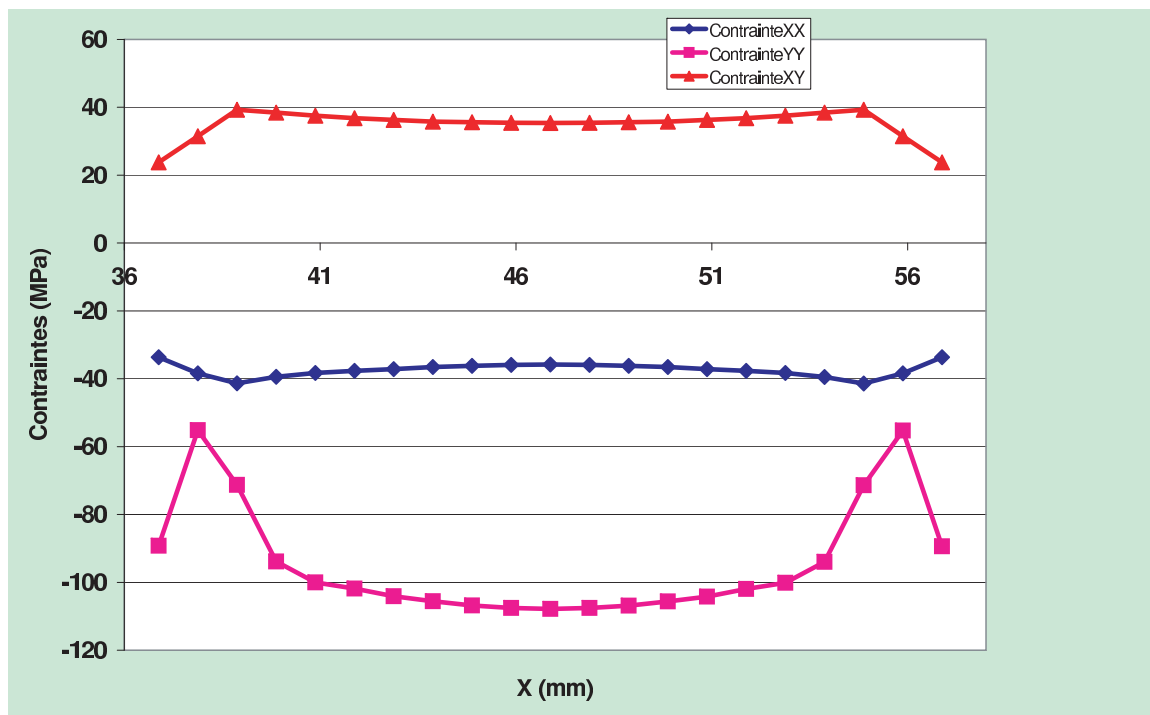


FIGURE 4.67 – Champ de contraintes σ_{XX} , σ_{YY} et σ_{XY} à $t=10$ s

4.68. Nous présentons dans la section suivante le champ de contraintes macroscopiques obtenu



FIGURE 4.68 – Champ de température ($^{\circ}\text{C}$) au début de la phase de refroidissement

au cours de la phase de refroidissement.

a) Champ de contraintes à l'échelle macroscopique

Le champ de contraintes en début de phase de refroidissement après un instant $t=1$ s est représenté sur les figures 4.69 et 4.70. Comme on le voit, le champ de contraintes est déjà élevé dans la pièce.

Comme on le constate sur les figures 4.69 et 4.70, les valeurs des contraintes dans les rubans n°1 et n°2 sont inférieures aux valeurs en fin de refroidissement des deux rubans seuls. En effet, il y a eu relaxation partielle des contraintes dans ces deux rubans du fait du chauffage du 3ème pli, et du passage de la température dans ces zones au dessus de la température de

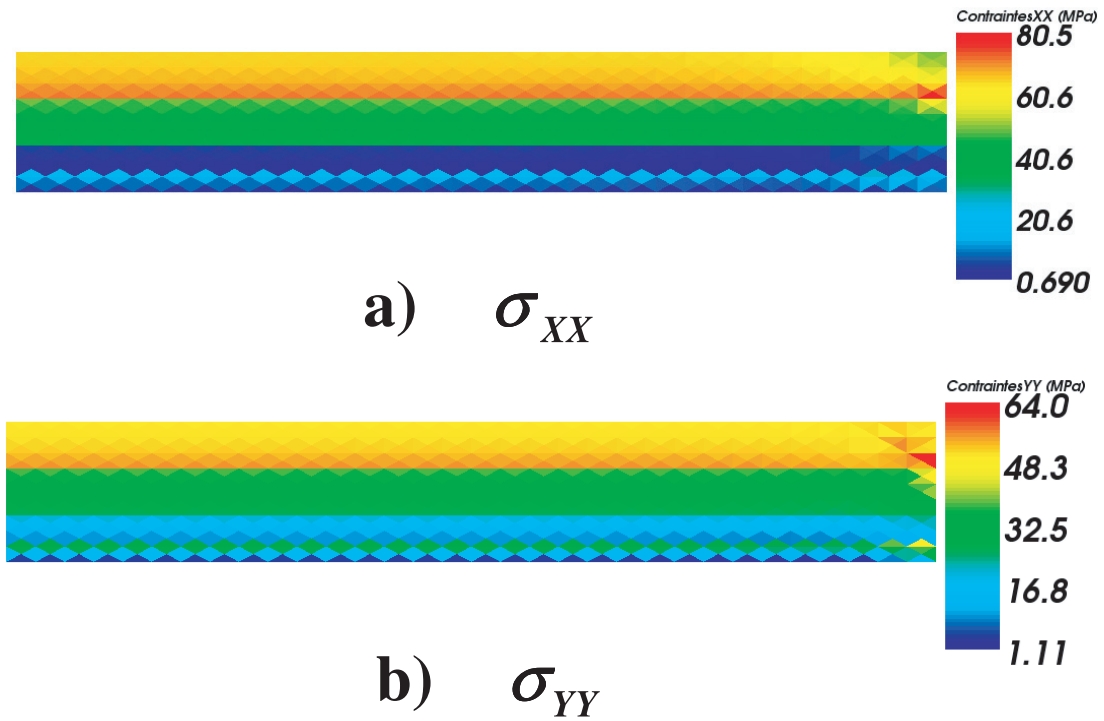


FIGURE 4.69 – Champ de contraintes σ_{XX} et σ_{YY} au début de la phase de refroidissement



FIGURE 4.70 – Champ de contraintes σ_{XY} au début de la phase de refroidissement

relaxation des contraintes (environ 180 °C). Le champ de contraintes macroscopiques après 5 s est représenté sur les figures 4.71 et 4.72. Enfin, le champ de contraintes macroscopiques

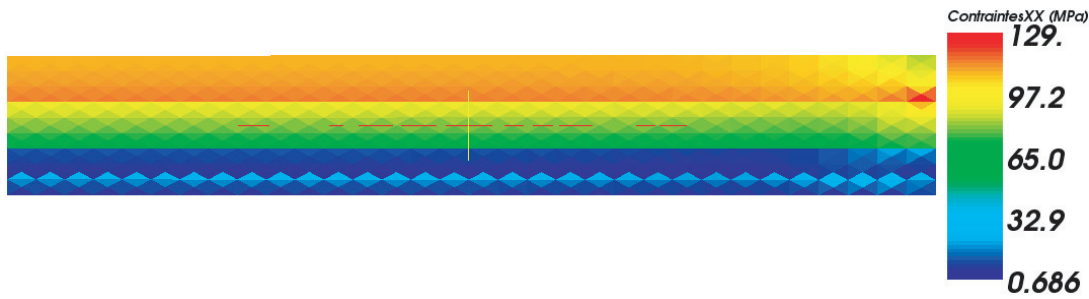


FIGURE 4.71 – Champ de contraintes σ_{XX} et σ_{YY} à $t=5$ s



FIGURE 4.72 – Champ de contraintes σ_{XY} à $t=5$ s

après 10 s de refroidissement est représenté sur les figures 4.73 et 4.74. Comme on le constate, le maximum des contraintes se forment très rapidement après le début du refroidissement. En effet, la pièce de composite refroidit très vite.

Les courbes représentant les états de contraintes dans le sens de l'abscisse sont données pour différentes ordonnées dans le composite sur les figures 4.75, 4.37, 4.76 et 4.77.

Le champ de température en fin de phase de refroidissement est donné sur la figure 4.80. Les champs de température aux instants $t=1$ s et $t=5$ s de la phase de refroidissement sont représentés respectivement sur les figures 4.78 et 4.79.

b) Champ de contraintes à l'échelle microscopique

Dans cette section, nous illustrons le champ de contraintes microscopiques que nous obtenons au cours de la phase de refroidissement.

Nous allons maintenant examiner le champs de contraintes microscopiques obtenu dans le ruban à fibres à 0° .

b-1) Champs de contraintes à l'échelle microscopique dans le ruban à fibres à 0°

Le champs de contrainte microscopique obtenu en fin de phase de refroidissement ($t = 10$ s) dans les cellules microscopiques du ruban à fibres à 0° est donné dans les domaines microscopiques 3, 4 et 5.

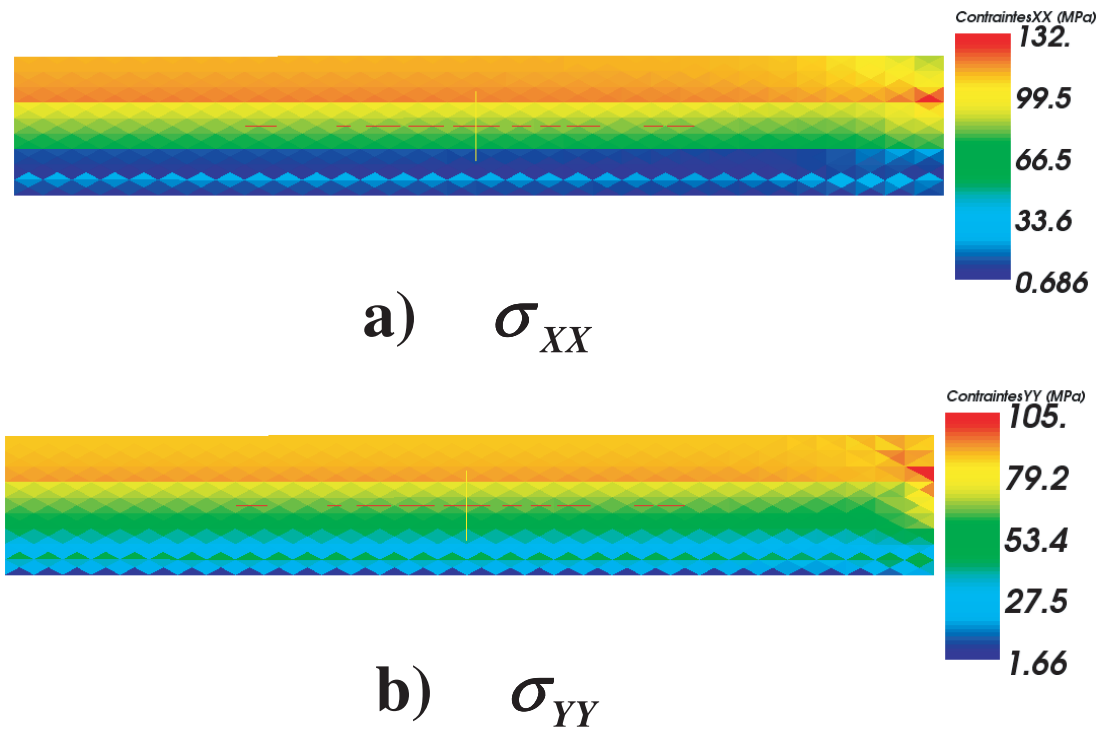


FIGURE 4.73 – Champ de contraintes σ_{XX} et σ_{YY} à $t=10$ s



FIGURE 4.74 – Champ de contraintes σ_{XY} à $t=10$ s

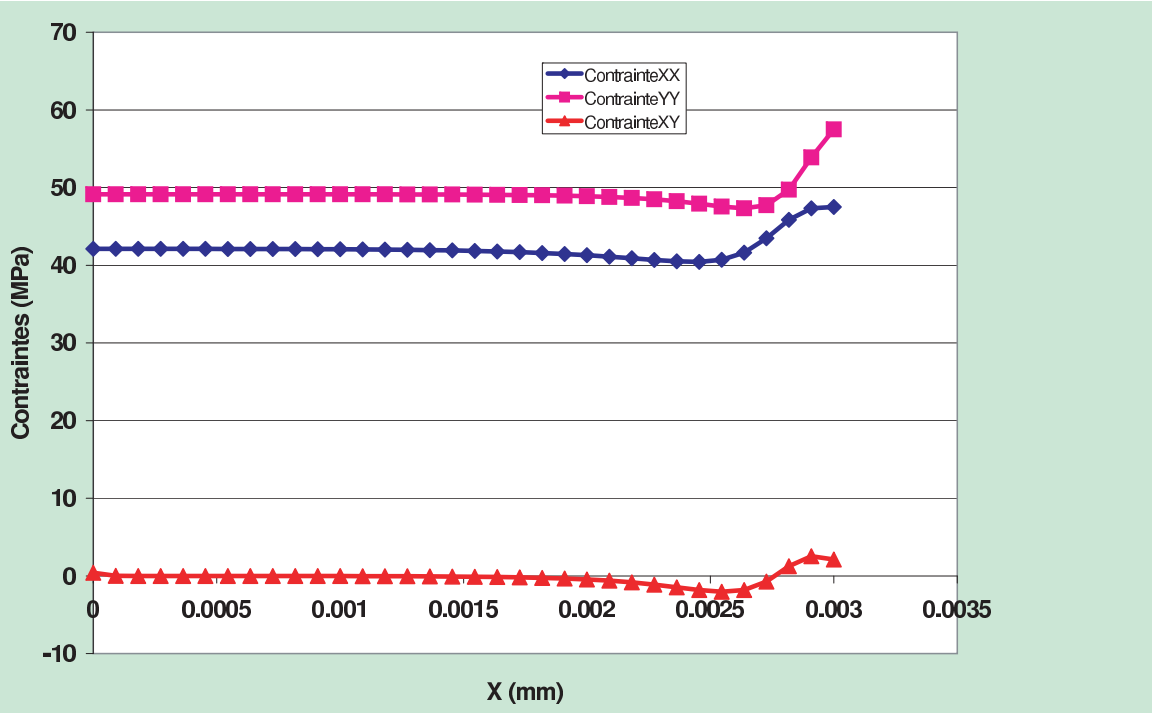


FIGURE 4.75 – Champs de contraintes à t=10 s et à l’ordonnée Y = 150 μm

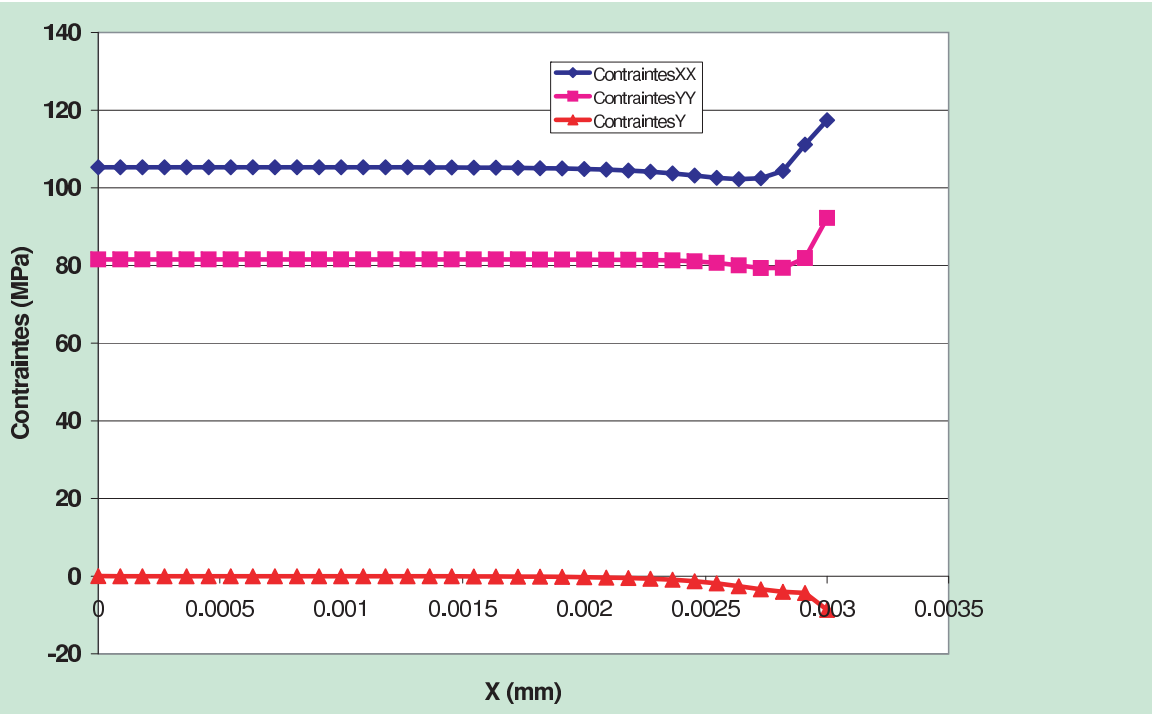


FIGURE 4.76 – Champs de contraintes à t=10 s et à l’ordonnée Y = 300 μm

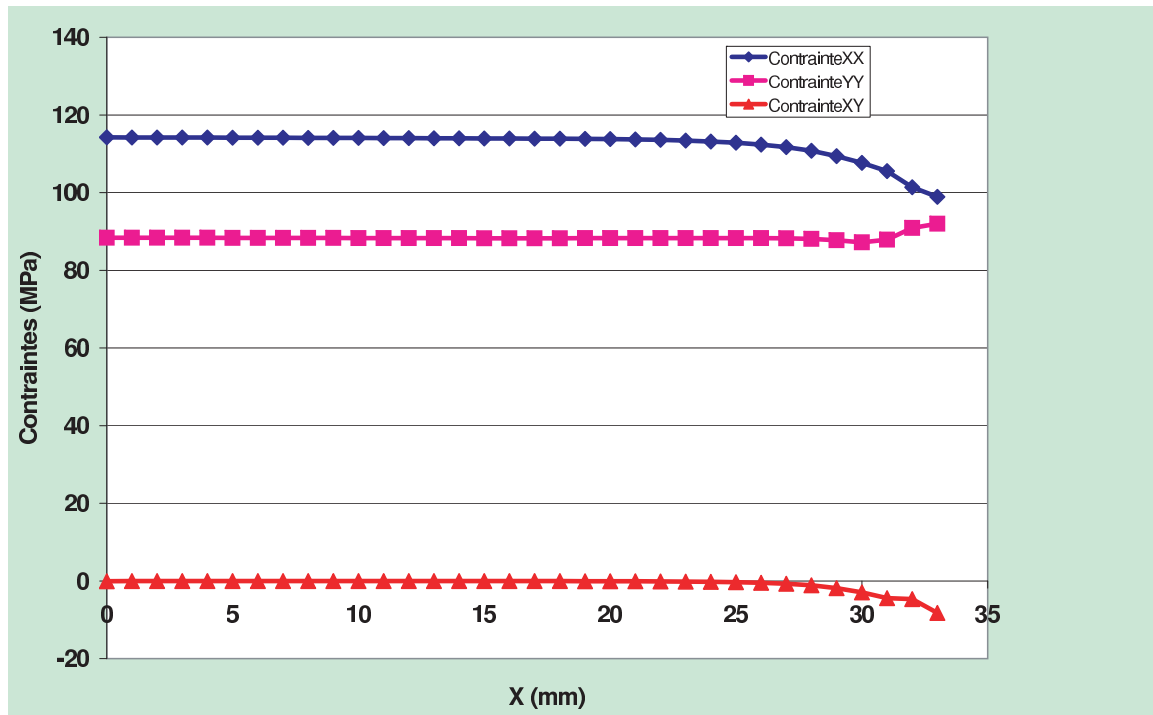
FIGURE 4.77 – Champs de contraintes à $t=10$ s et à l'ordonnée $Y = 375 \mu m$ FIGURE 4.78 – Champ de température ($^{\circ}C$) à $t=1$ s de la phase de refroidissement



FIGURE 4.79 – Champ de température (°C) à t=5 s de la phase de refroidissement



FIGURE 4.80 – Champ de température (°C) en fin de phase de refroidissement

b-1-1) Champs de contraintes microscopiques dans le domaine microscopique n°3

Dans le domaine microscopique n°3, le champ de contrainte obtenu est donné sur les figures 4.81, 4.82 et 4.83.

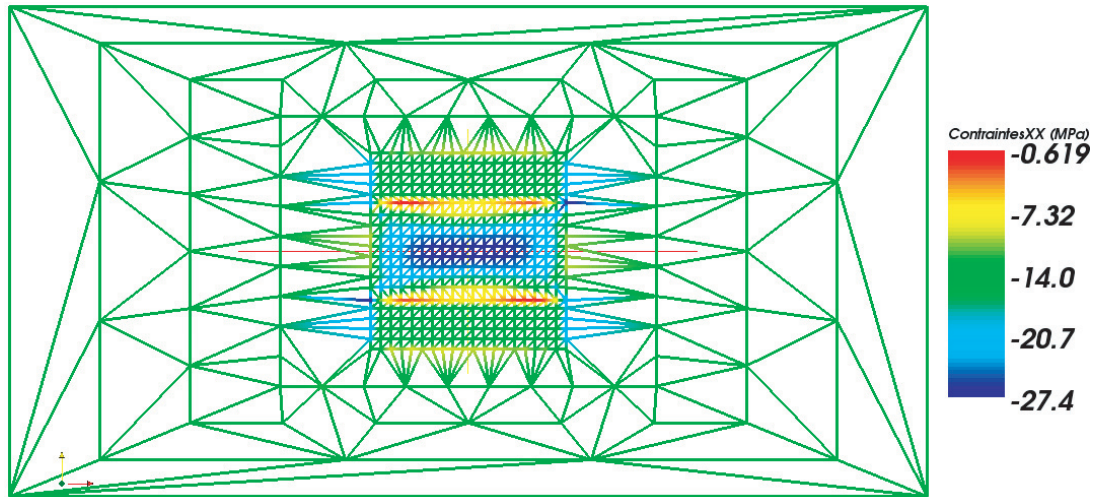


FIGURE 4.81 – Champ de contraintes σ_{XX} à $t=10$ s

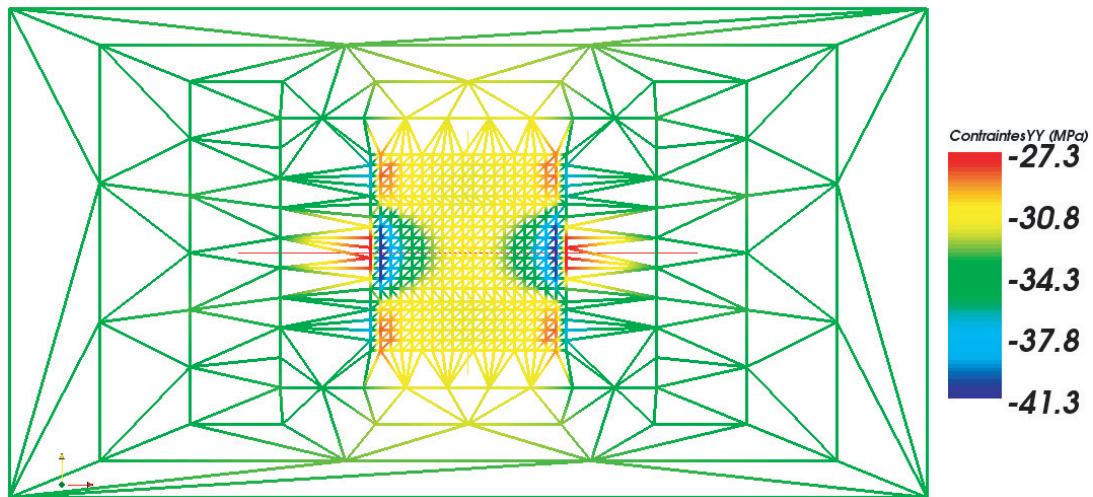


FIGURE 4.82 – Champ de contraintes σ_{YY} à $t=10$ s

Les courbes représentant l'allure des champs de contrainte le long de l'abscisse du plan médian de la cellule microscopique sont données sur la figure 4.84.

b-1-2) Champs de contraintes microscopiques dans le domaine microscopique n°4

Dans le domaine microscopique n°4, le champ de contrainte obtenu est donné sur les figures 4.85, 4.86 et 4.87.

Les courbes représentant l'allure des champs de contrainte le long de l'abscisse du plan médian de la cellule microscopique sont données sur la figure 4.88.

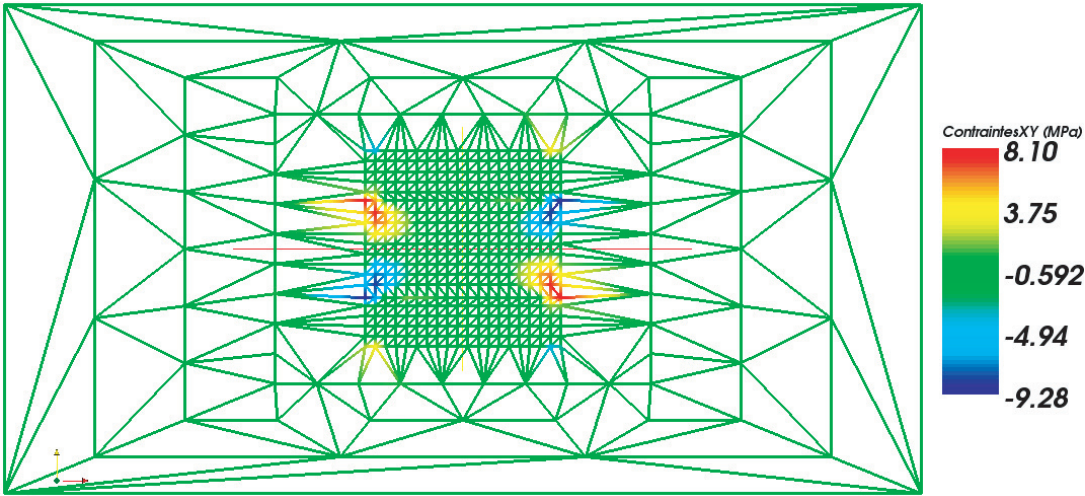


FIGURE 4.83 – Champ de contraintes σ_{XY} à $t=10$ s

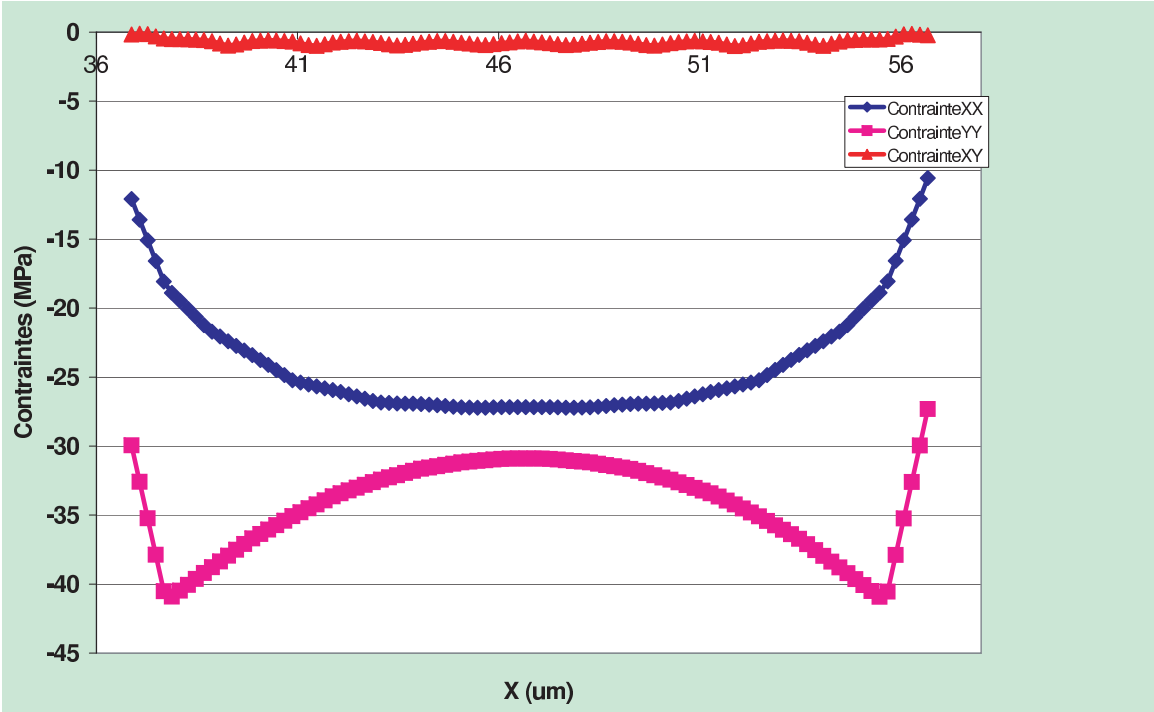


FIGURE 4.84 – Champ de contraintes σ_{XX} , σ_{YY} et σ_{XY} à $t=10$ s

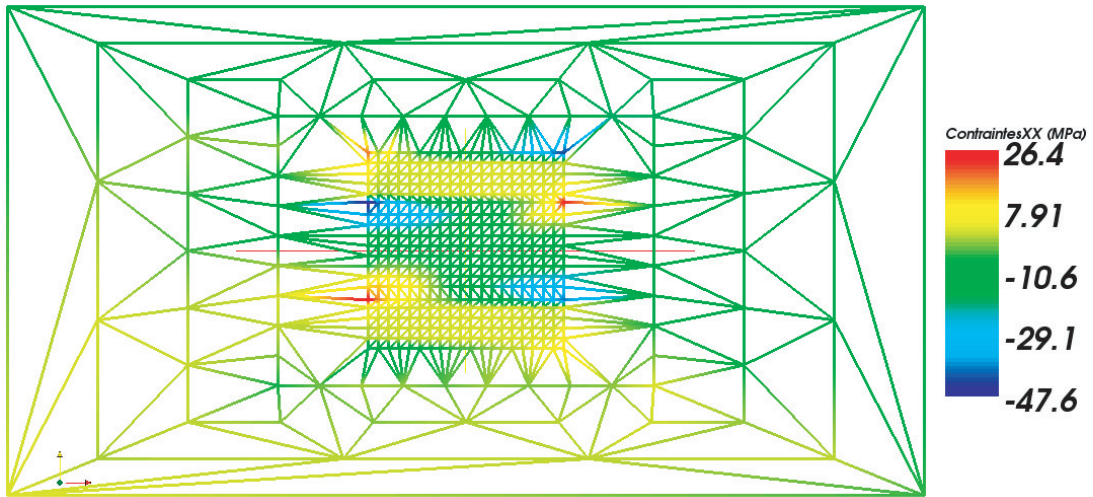


FIGURE 4.85 – Champ de contraintes σ_{XX} à $t=10$ s

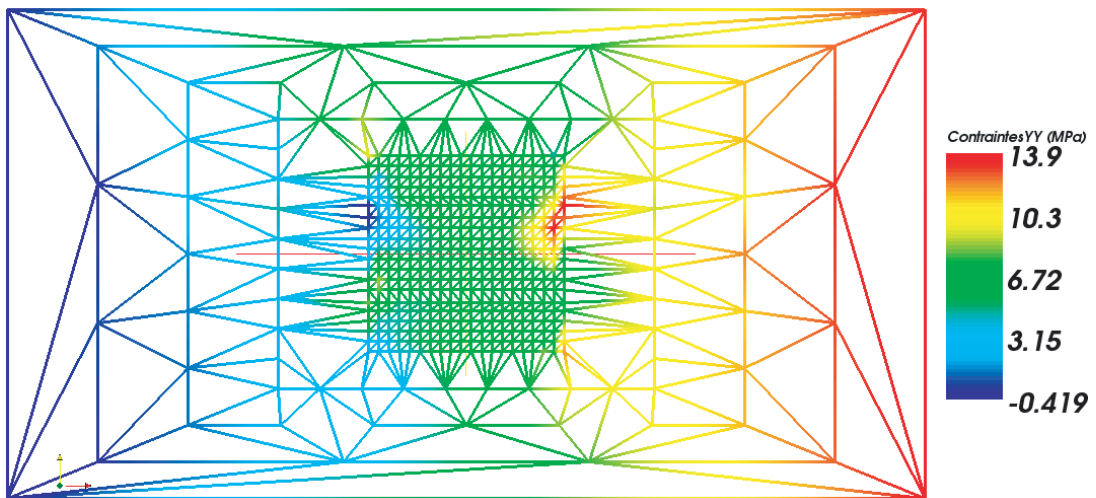


FIGURE 4.86 – Champ de contraintes σ_{YY} à $t=10$ s

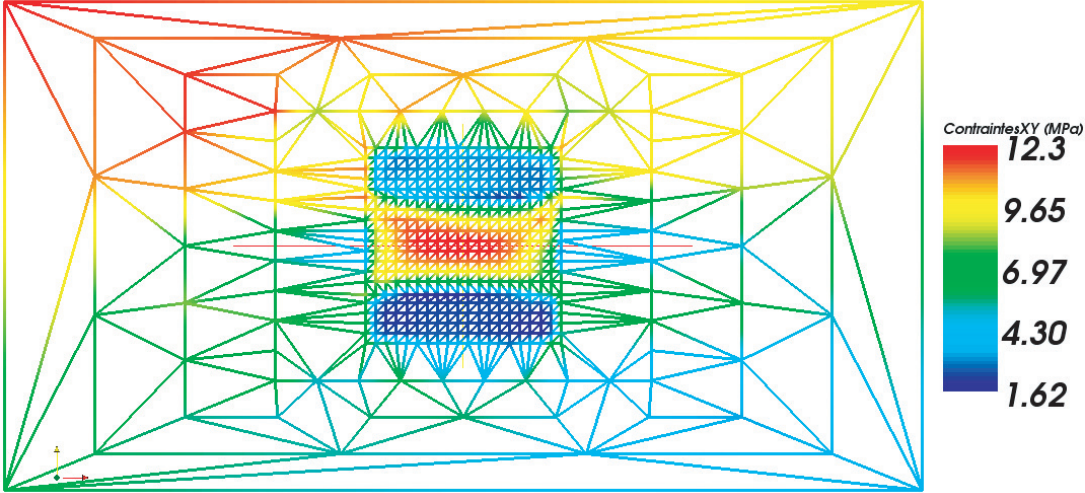


FIGURE 4.87 – Champ de contraintes σ_{XY} à $t=10$ s

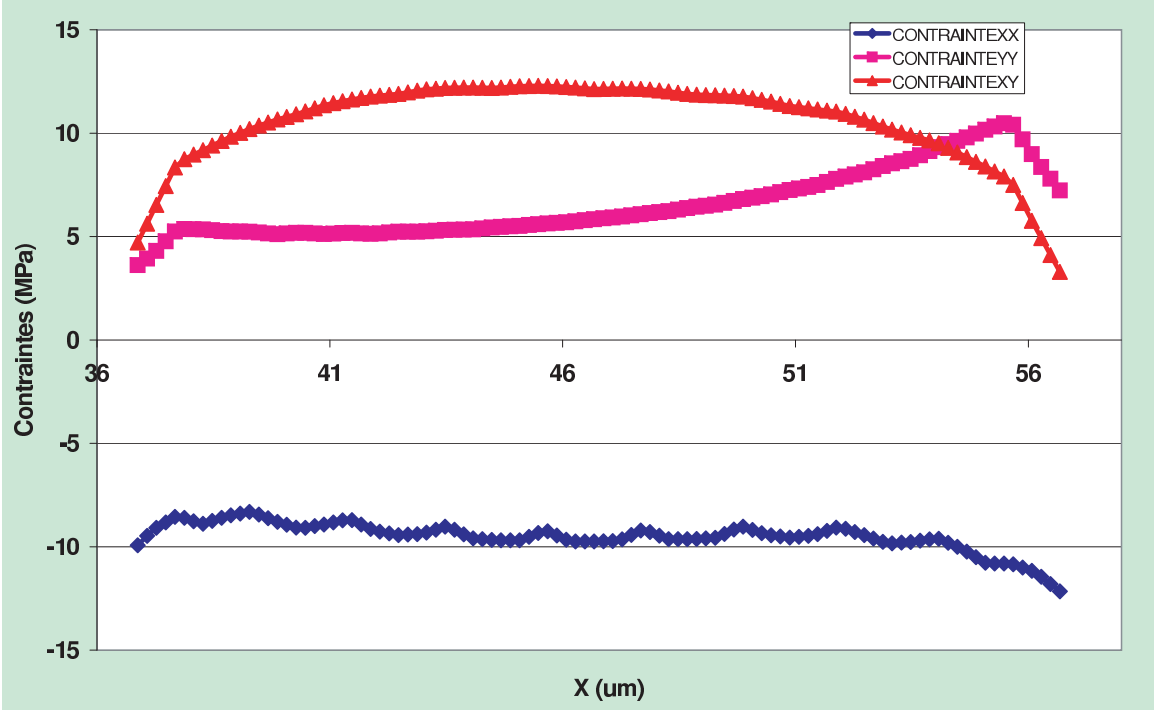
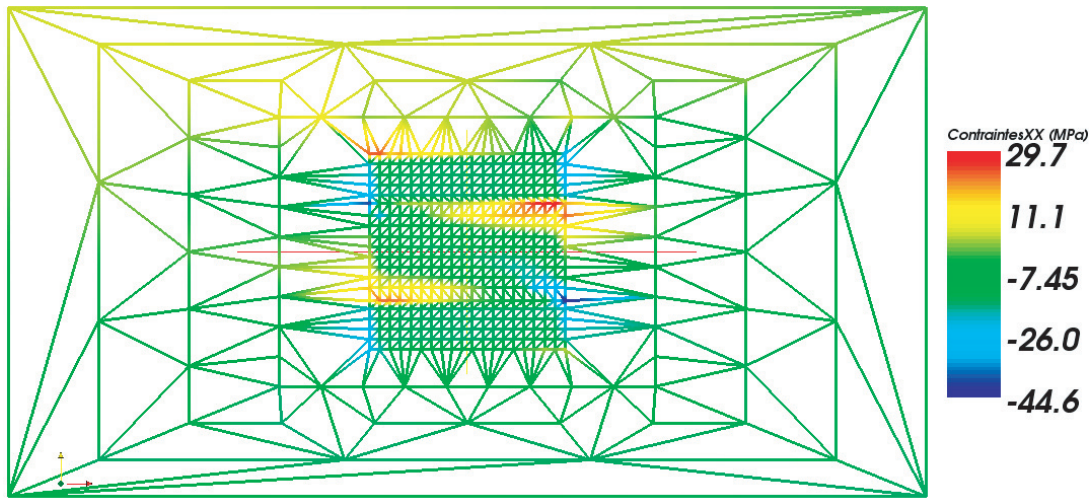
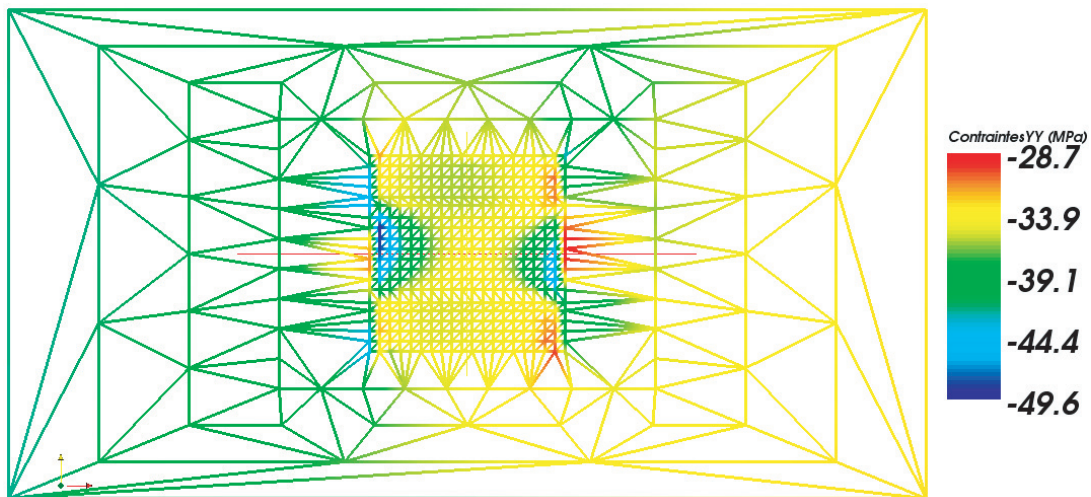


FIGURE 4.88 – Champ de contraintes σ_{XX} , σ_{YY} et σ_{XY} à $t=10$ s

b-1-3) Champs de contraintes microscopiques dans le domaine microscopique n°5

Dans le domaine microscopique n°5, le champ de contraintes obtenu est donné sur les figures 4.89, 4.91 et 4.91.

FIGURE 4.89 – Champ de contraintes σ_{XX} à $t=10$ sFIGURE 4.90 – Champ de contraintes σ_{YY} à $t=10$ s

Les courbes représentant l'allure des champs de contrainte le long de l'abscisse du plan médian de la cellule microscopique sont données sur la figure 4.92. Comme on peut le constater, le champ de contraintes est plus élevé dans les domaines microscopiques 4 et 5. En effet, Les conditions aux limites macroscopiques en déplacement sont d'amplitude plus élevées, car ces domaines microscopiques sont à la frontière d'un domaine où une condition de symétrie suivant l'axe X est imposée.

Nous allons maintenant étudier le champ de contraintes microscopiques dans les domaines microscopiques situés dans le ruban à fibres à 90° .

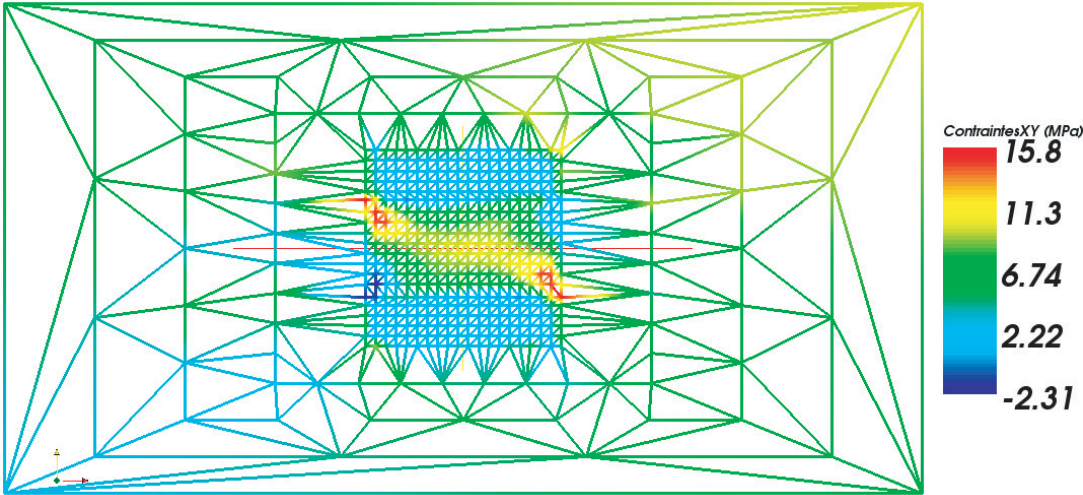


FIGURE 4.91 – Champ de contraintes σ_{XY} à $t=10$ s

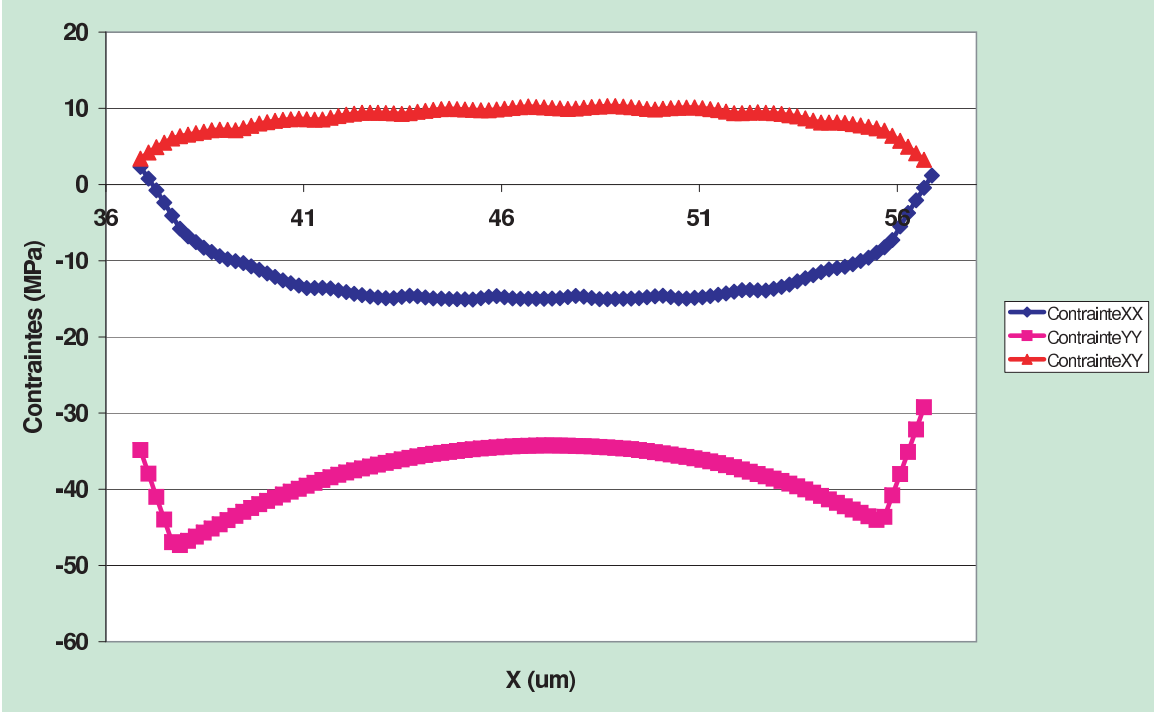


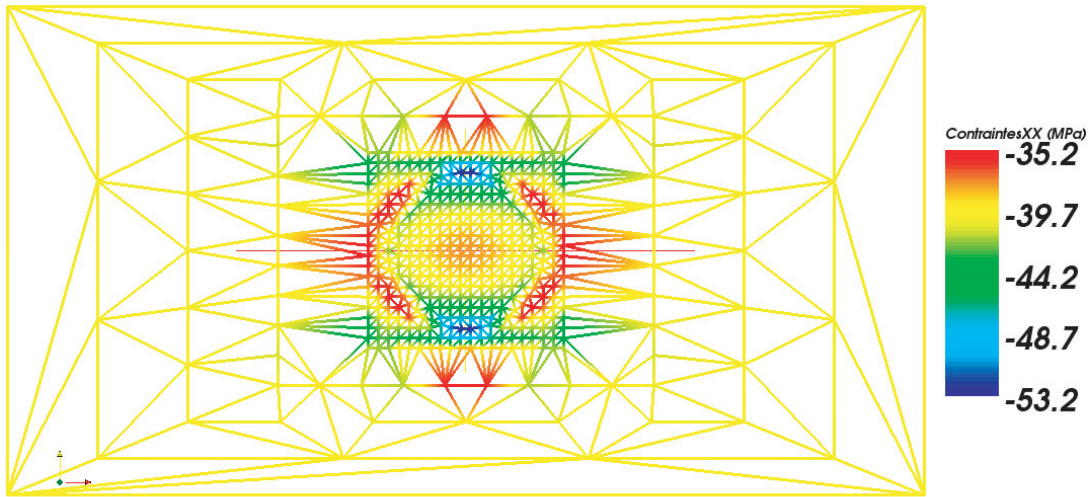
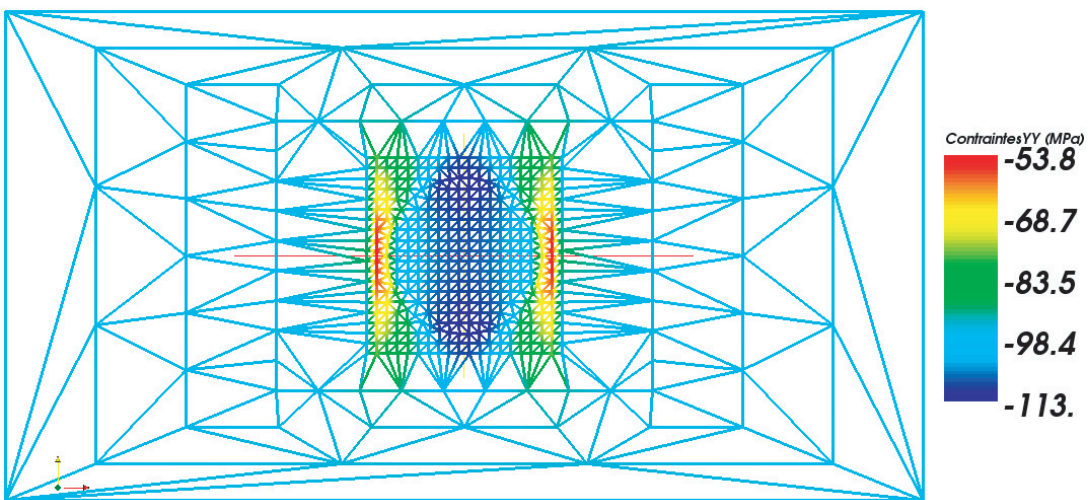
FIGURE 4.92 – Champ de contraintes σ_{XX} , σ_{YY} et σ_{XY} à $t=10$ s

b-2) Champs de contraintes microscopiques dans le ruban n°2 à fibres à 90°

Le champ de contraintes microscopiques obtenu en fin de phase de refroidissement ($t = 10$ s) dans les cellules microscopiques du ruban à fibres à 90° est donné dans les domaines microscopiques 3, 4 et 5.

b-2-1) Champs de contraintes microscopiques dans le domaine microscopique n°3

Dans le domaine microscopique n°3, le champ de contraintes obtenu est donné sur les figures 4.93, 4.94 et 4.95.

FIGURE 4.93 – Champ de contraintes σ_{XX} à $t=10$ sFIGURE 4.94 – Champ de contraintes σ_{YY} à $t=10$ s

Les courbes représentant l'allure des champs de contrainte le long de l'abscisse du plan médian de la cellule microscopique sont données sur la figure 4.96.

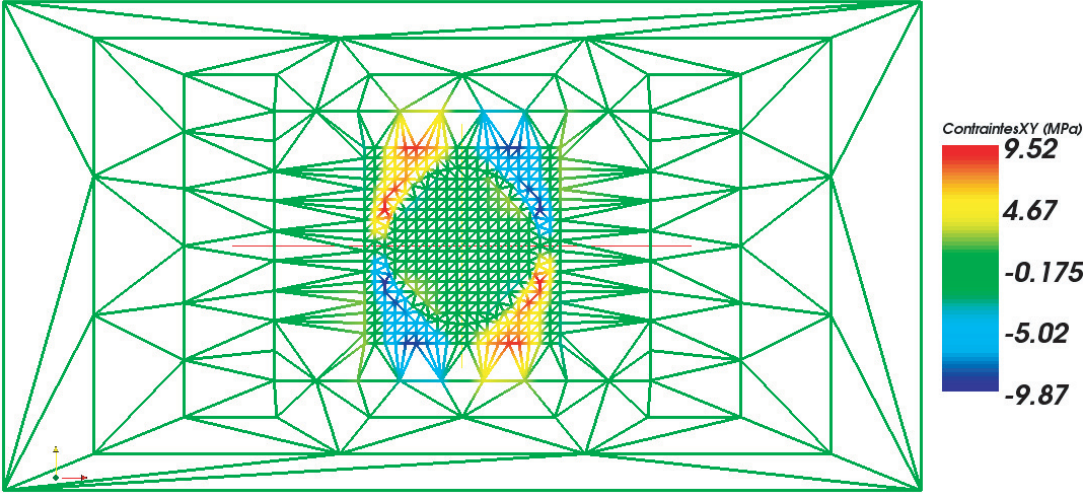


FIGURE 4.95 – Champ de contraintes σ_{XY} à $t=10$ s

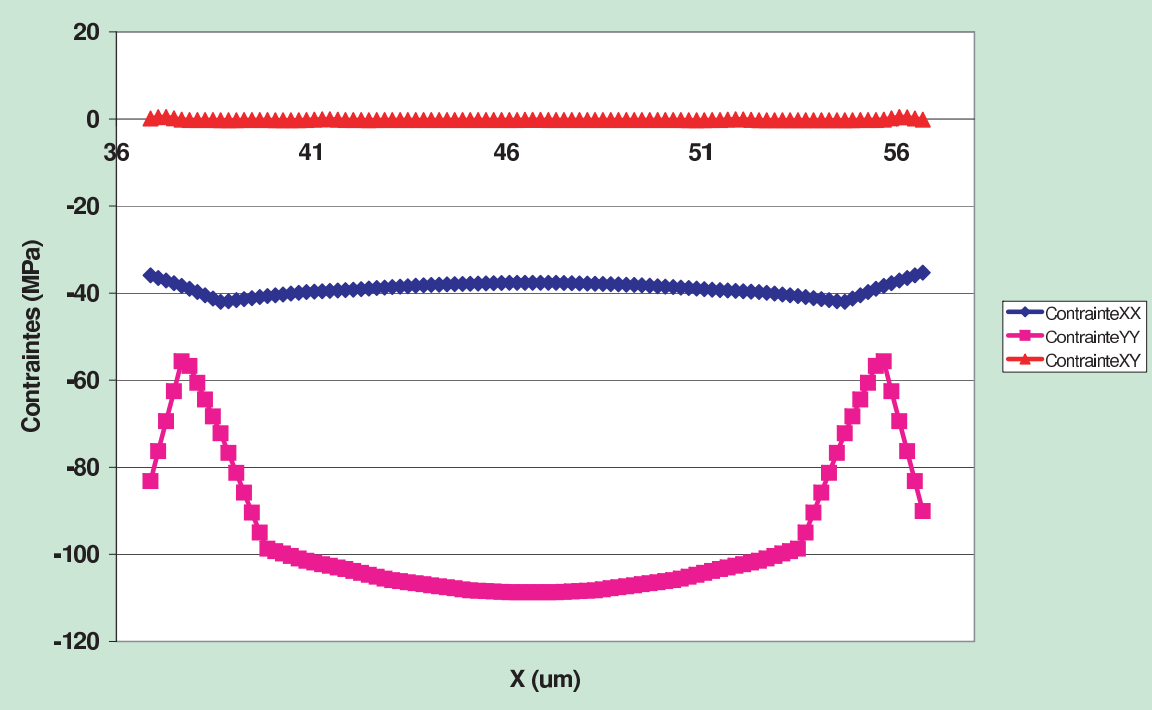


FIGURE 4.96 – Champ de contraintes σ_{XX} , σ_{YY} et σ_{XY} à $t=10$ s

b-2-2) Champs de contraintes microscopiques dans le domaine microscopique n°4

Dans le domaine microscopique n°4, le champ de contraintes obtenu est donné sur les figures 4.97, 4.98 et 4.99.

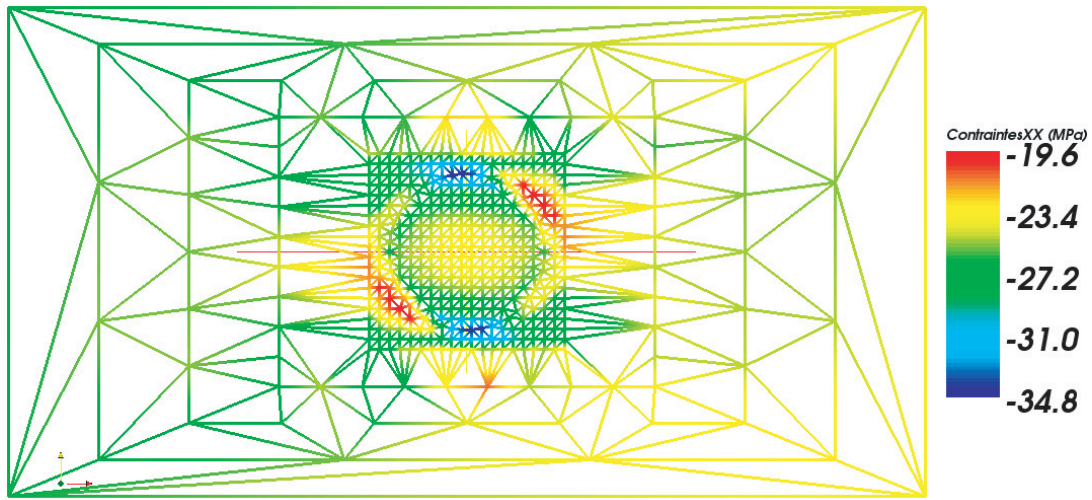


FIGURE 4.97 – Champ de contraintes σ_{XX} à $t=10$ s

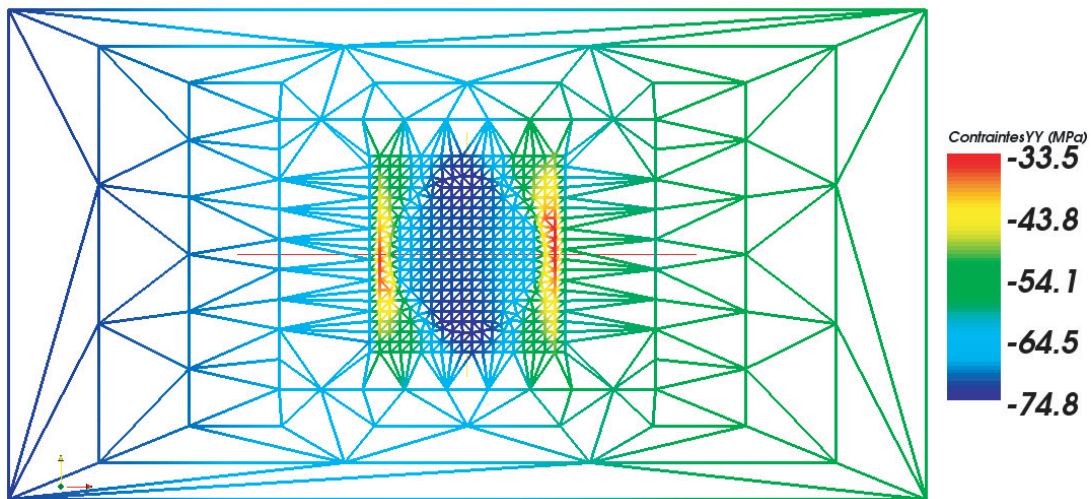


FIGURE 4.98 – Champ de contraintes σ_{YY} à $t=10$ s

Les courbes représentant l'allure des champs de contrainte le long de l'abscisse du plan médian de la cellule microscopique sont données sur la figure 4.100.

b-2-3) Champs de contraintes microscopiques dans le domaine microscopique n°5

Dans le domaine microscopique n°5, le champ de contraintes obtenu est donné sur les figures 4.101, 4.102 et 4.103.

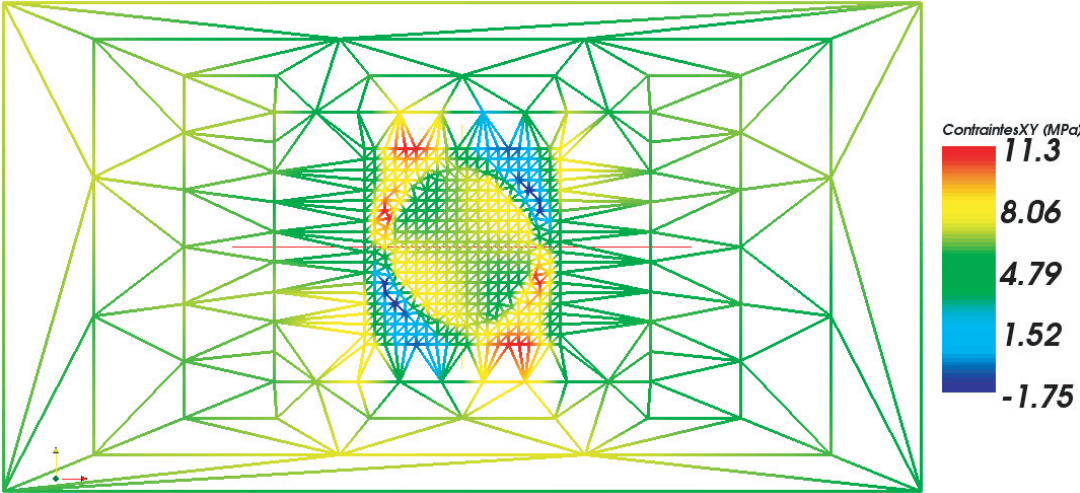


FIGURE 4.99 – Champ de contraintes σ_{XY} à $t=10$ s

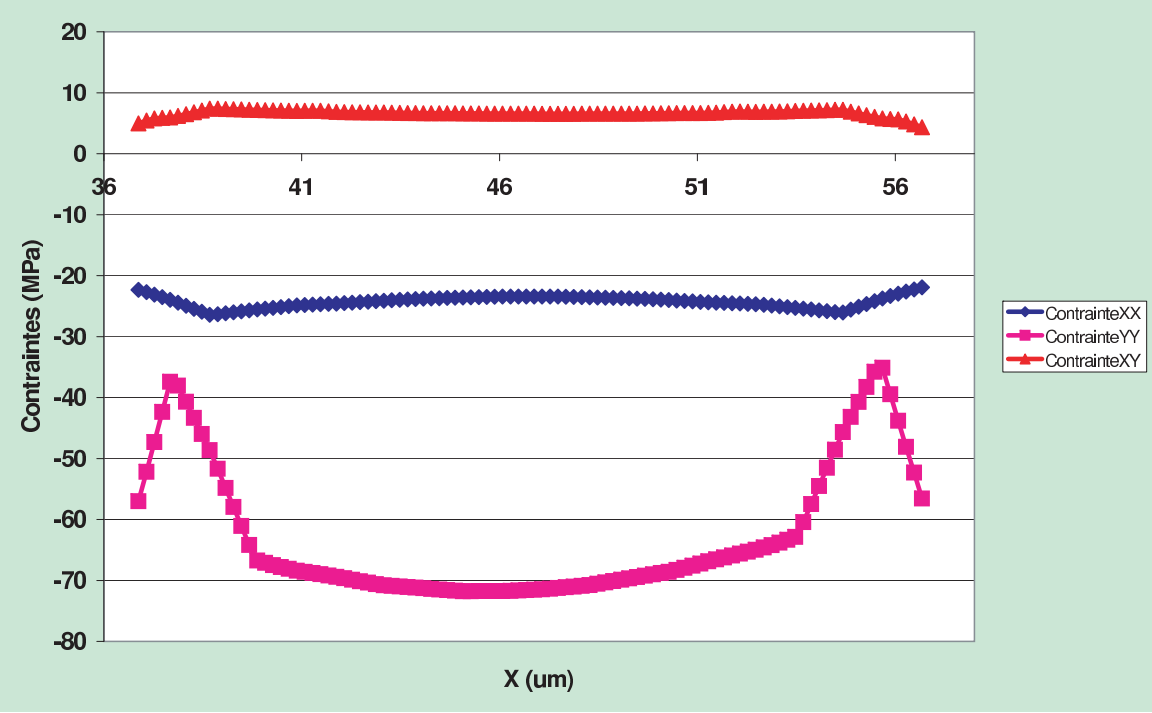


FIGURE 4.100 – Champ de contraintes σ_{XX} , σ_{YY} et σ_{XY} à $t=10$ s

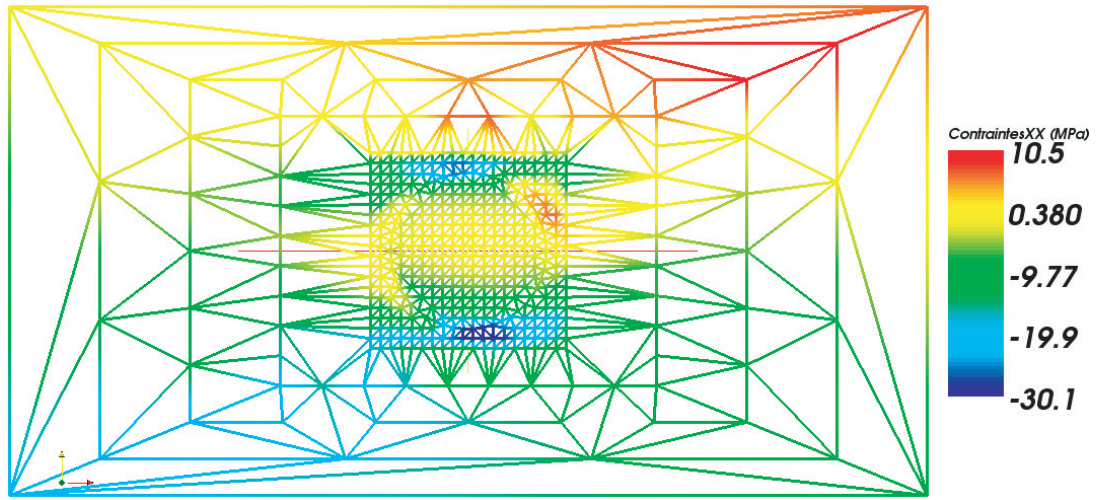


FIGURE 4.101 – Champ de contraintes σ_{XX} à $t=10$ s

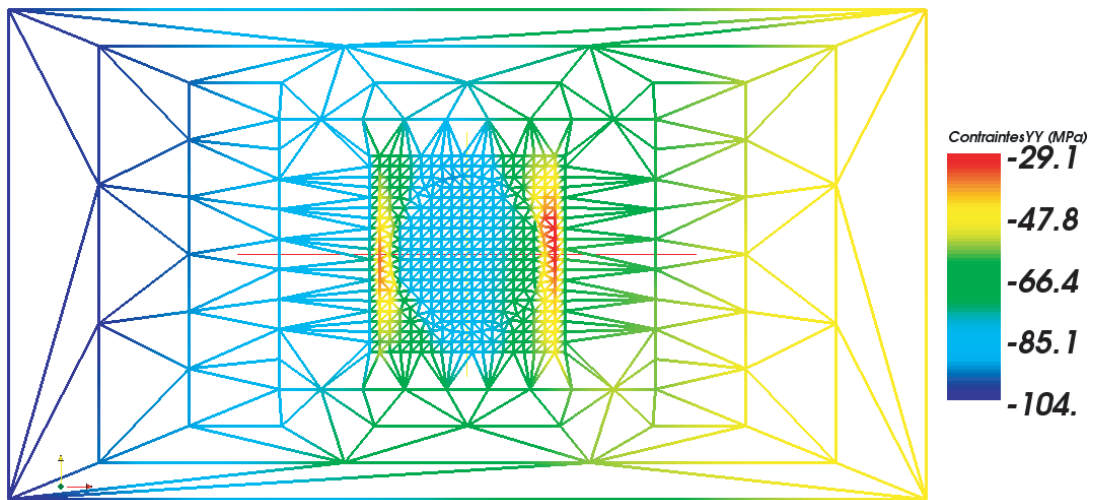


FIGURE 4.102 – Champ de contraintes σ_{YY} à $t=10$ s

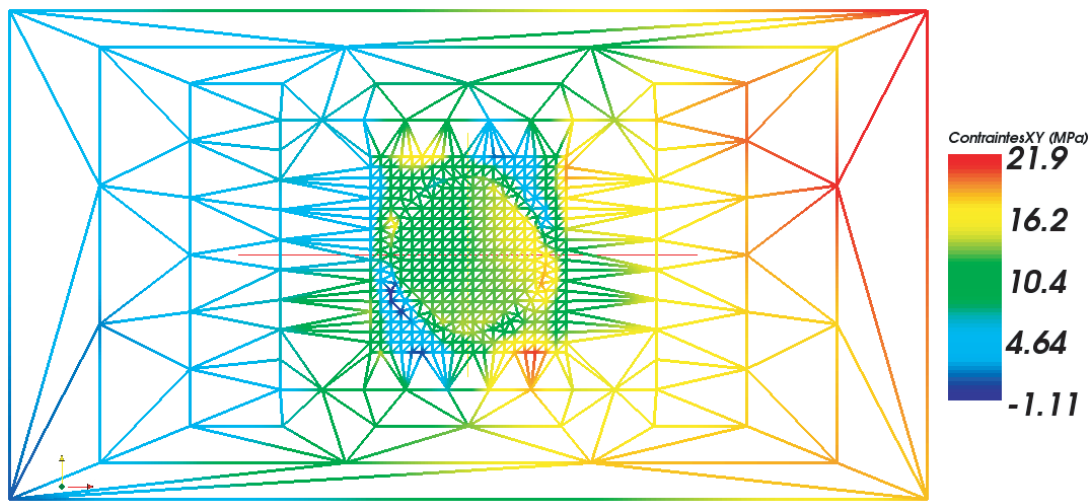


FIGURE 4.103 – Champ de contraintes σ_{XY} à $t=10$ s

Les courbes représentant l'allure des champs de contrainte le long de l'abscisse du plan médian de la cellule microscopique sont données sur la figure 4.104. Comme on peut le constater,

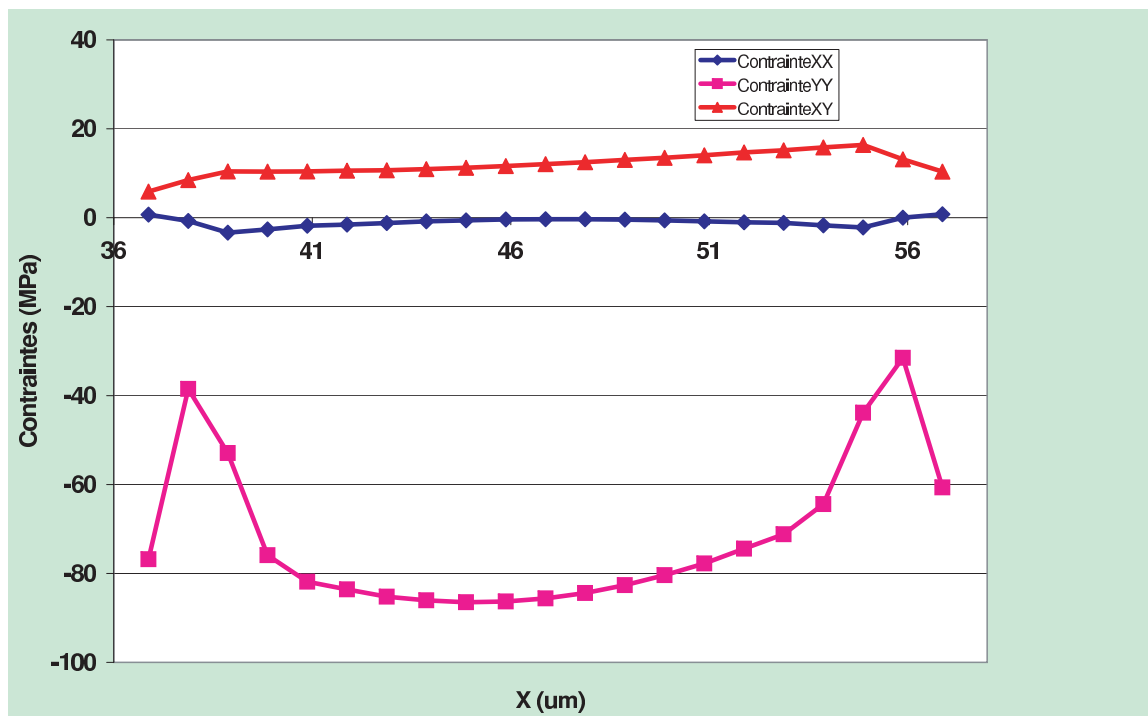


FIGURE 4.104 – Champ de contraintes σ_{XX} , σ_{YY} et σ_{XY} à $t=10$ s

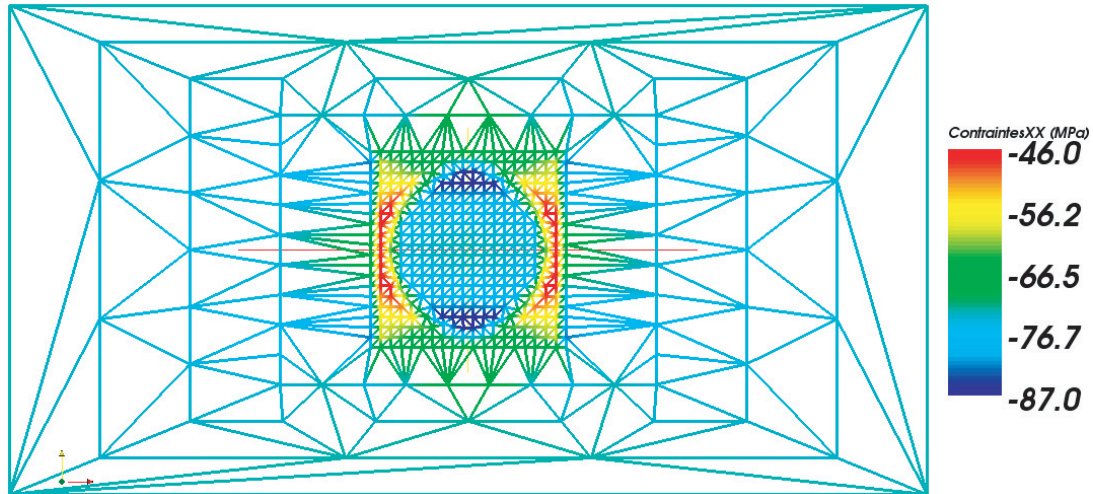
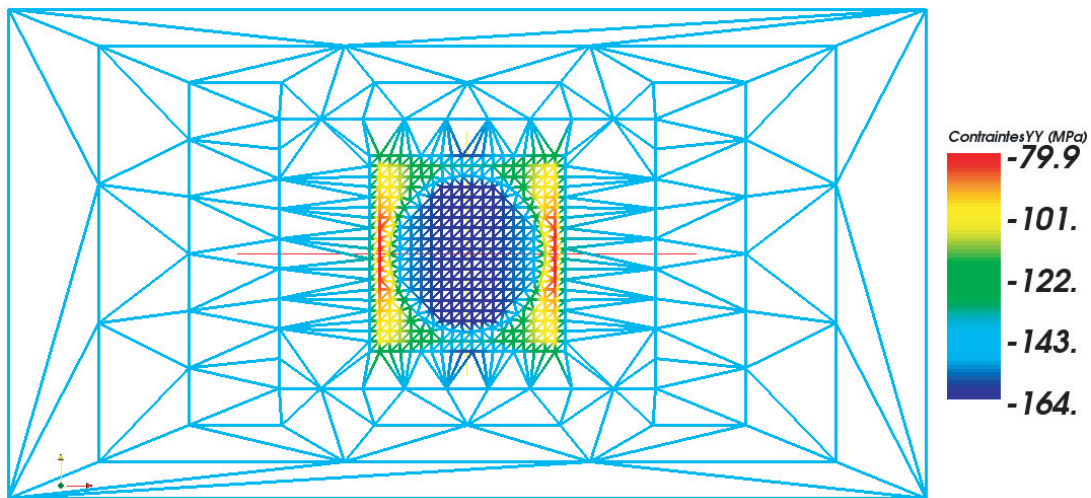
le champ de contraintes est plus élevé dans les domaines microscopiques 4 et 5. En effet, Les conditions aux limites macroscopiques en déplacement sont d'amplitude plus élevées, car ces domaines microscopiques sont situés sur une frontière comportant une condition de symétrie suivant l'axe X.

b-3) Champs de contraintes microscopiques dans le ruban n°3 à fibres à 90°

Le champs de contraintes microscopiques obtenu en fin de phase de refroidissement ($t = 10$ s) dans les cellules microscopiques du ruban à fibres à 90° qui vient d'être déposé est donné dans les domaines microscopiques 3, 4 et 5.

b-3-1) Champs de contraintes microscopiques dans le domaine microscopique n°3

Dans le domaine microscopique n°3, le champ de contraintes obtenu est donné sur les figures 4.105, 4.106 et 4.107.

FIGURE 4.105 – Champ de contraintes σ_{XX} à $t=10$ sFIGURE 4.106 – Champ de contraintes σ_{YY} à $t=10$ s**b-3-2) Champs de contraintes microscopiques dans le domaine microscopique n°4**

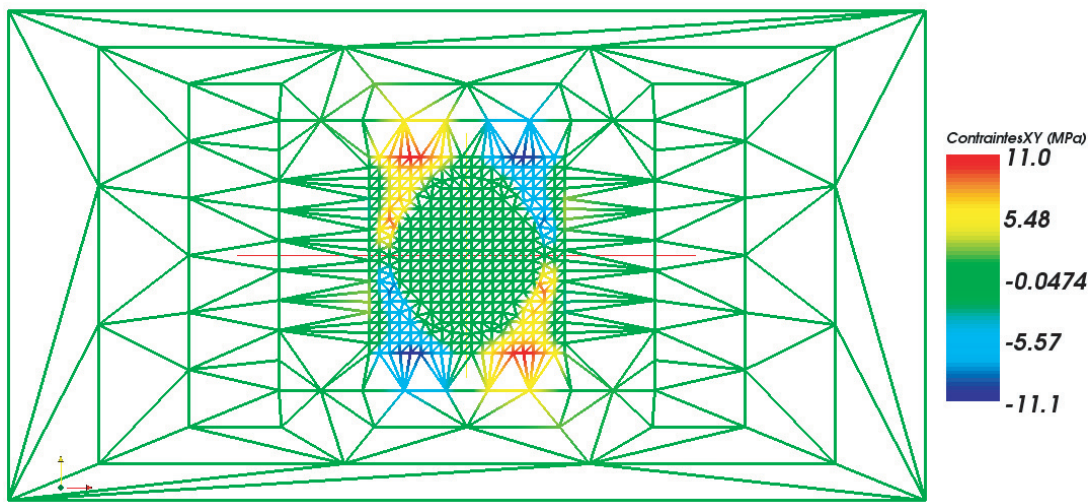


FIGURE 4.107 – Champ de contraintes σ_{XY} à $t=10$ s

Dans le domaine microscopique n°4, le champ de contraintes obtenu est donné sur les figures 4.108, 4.109 et 4.110.

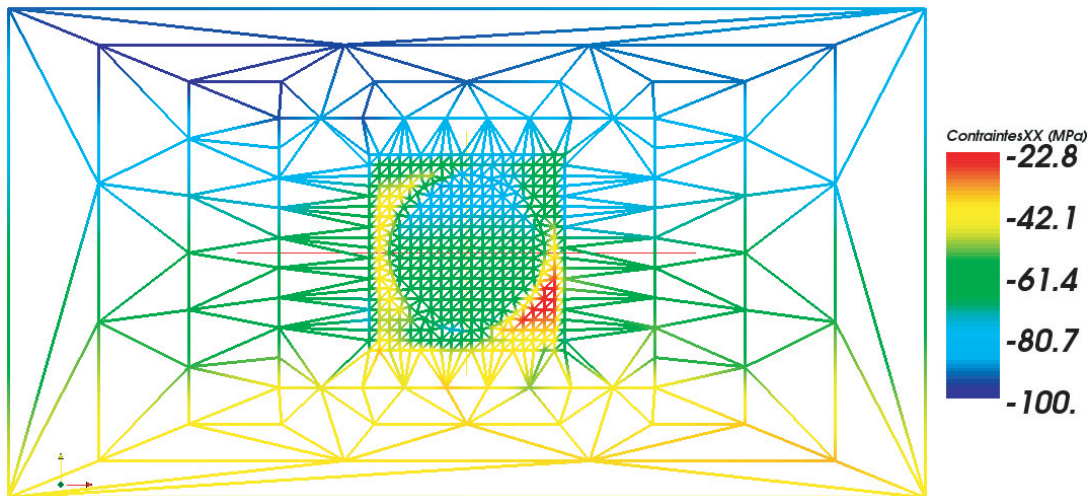


FIGURE 4.108 – Champ de contraintes σ_{XX} à $t=10$ s

b-3-3) Champs de contraintes microscopiques dans domaine microscopique n°5

Dans le domaine microscopique n°5, le champ de contraintes obtenu est donné sur les figures 4.111, 4.112 et 4.113. L'allure des champs de contrainte en fonction de l'abscisse du plan médian de la cellule microscopique est donnée sur la figure 4.114. Comme on peut le constater, le champ de contraintes dans les domaines microscopiques 4 et 5 est le plus élevé de l'ensemble des domaines microscopiques. En effet, Les conditions aux limites macroscopiques en déplacement sont d'amplitude plus élevées, car ces domaines microscopiques sont situés sur une frontière libre.

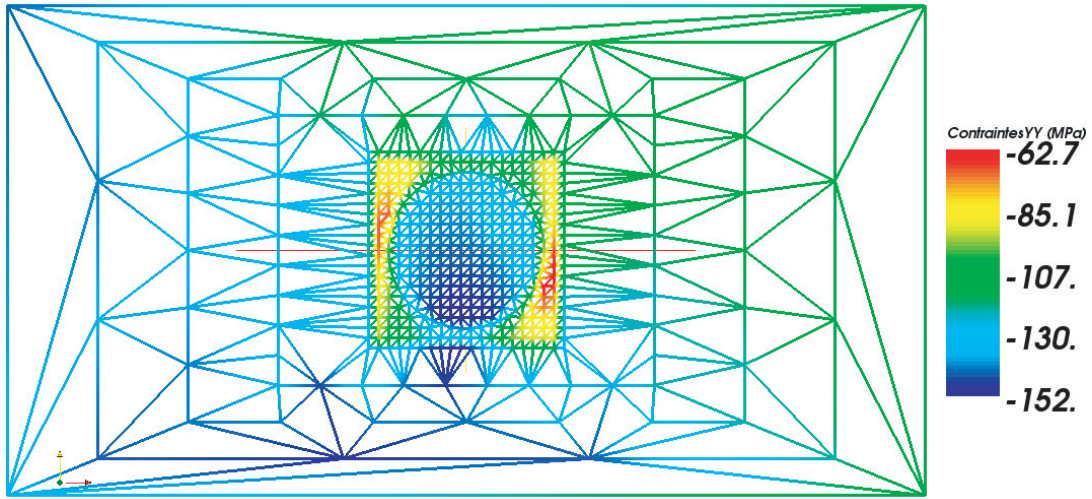


FIGURE 4.109 – Champ de contraintes σ_{YY} à $t=10$ s

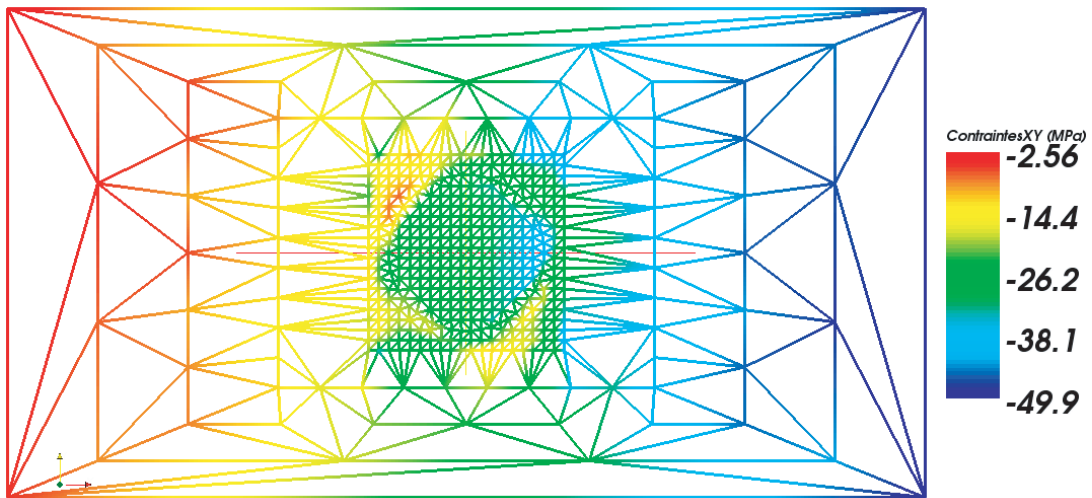


FIGURE 4.110 – Champ de contraintes σ_{XY} à $t=10$ s

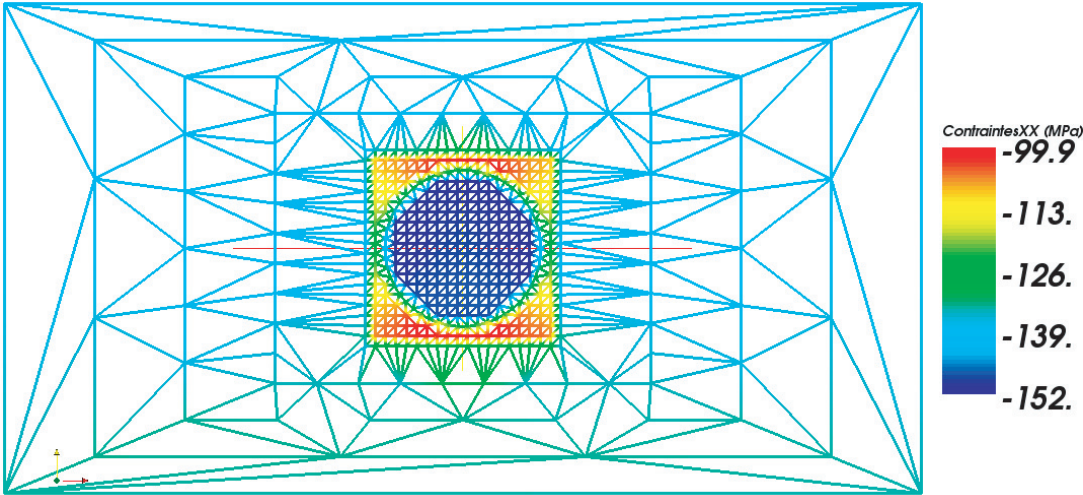


FIGURE 4.111 – Champ de contraintes σ_{XX} à $t=10$ s

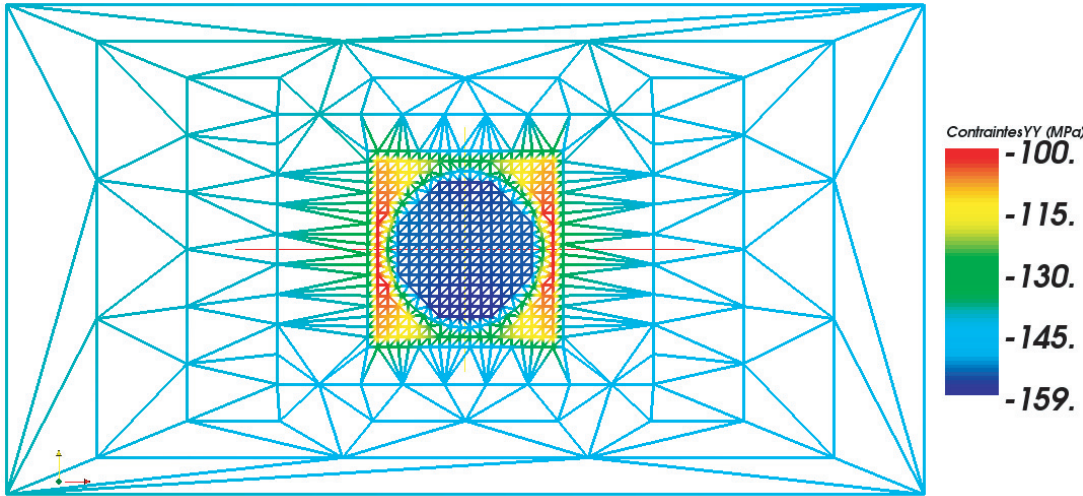


FIGURE 4.112 – Champ de contraintes σ_{YY} à $t=10$ s

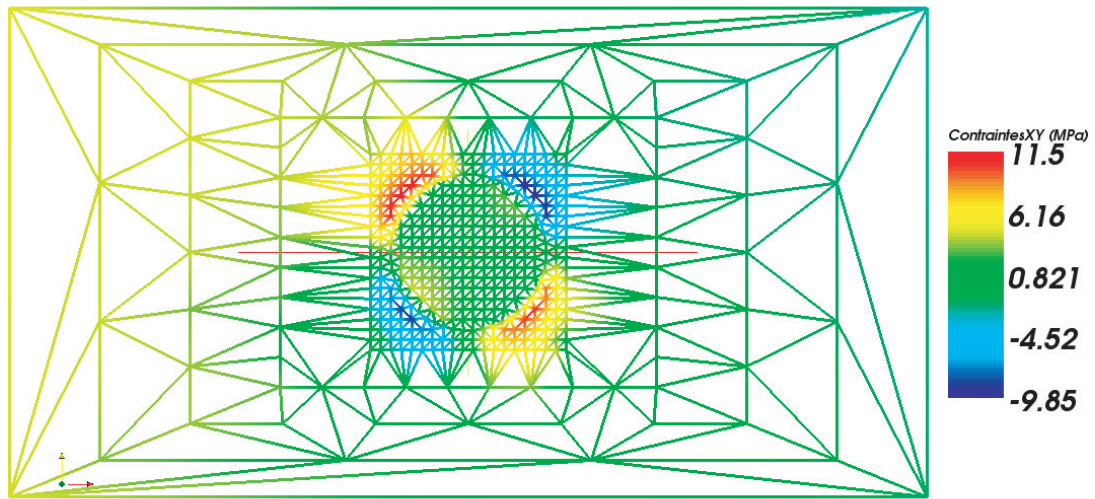


FIGURE 4.113 – Champ de contraintes σ_{XY} à $t=10$ s

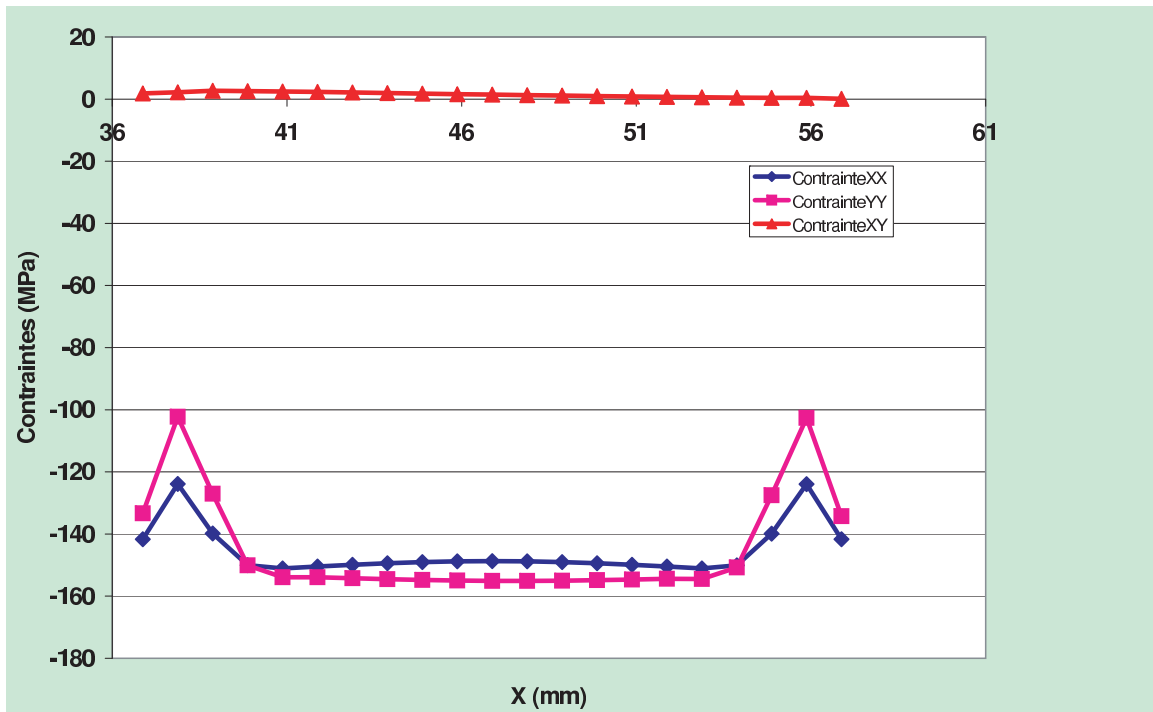


FIGURE 4.114 – Champ de contraintes σ_{XX} , σ_{YY} et σ_{XY} à $t=10$ s

Conclusions

Les valeurs de contraintes à l'échelle microscopique sont fortement dépendantes des conditions aux limites. Les valeurs maximales des contraintes sont obtenues pour les domaines microscopiques situés dans des zones où une condition aux limite mécanique est appliquée. Nous étudions maintenant les contraintes générées pour un empilement du type $[0^\circ/90^\circ/90^\circ]_1$.

4.2.3 Séquence d'empilement de type $90^\circ/0^\circ/90^\circ$

Nous étudions la formation des contraintes résiduelles dans un composite $[0^\circ/90^\circ/90^\circ]_1$.

a) Comparaison des champs de contraintes à l'échelle macroscopique entre les empilements $0^\circ/90^\circ/0^\circ$ et $0^\circ/90^\circ/90^\circ$

Dans ce type d'empilement, du fait de l'anisotropie entre les rubans n°2 (à fibres à 0°) et n°3 (à fibres à 90°), l'état de contraintes macroscopiques dans la pièce doit être plus élevé que dans le cas d'un empilement $[0^\circ/90^\circ/90^\circ]_1$ comme vu précédemment.

On a représenté la comparaison des états de contrainte obtenu en fin de refroidissement dans les trois rubans entre les séquences d'empilement $[0^\circ/90^\circ/90^\circ]_1$ et $[90^\circ/0^\circ/90^\circ]_1$ sur les figures 4.115, 4.116 et 4.117. On observe bien un état de contrainte d'amplitude supérieure pour ce

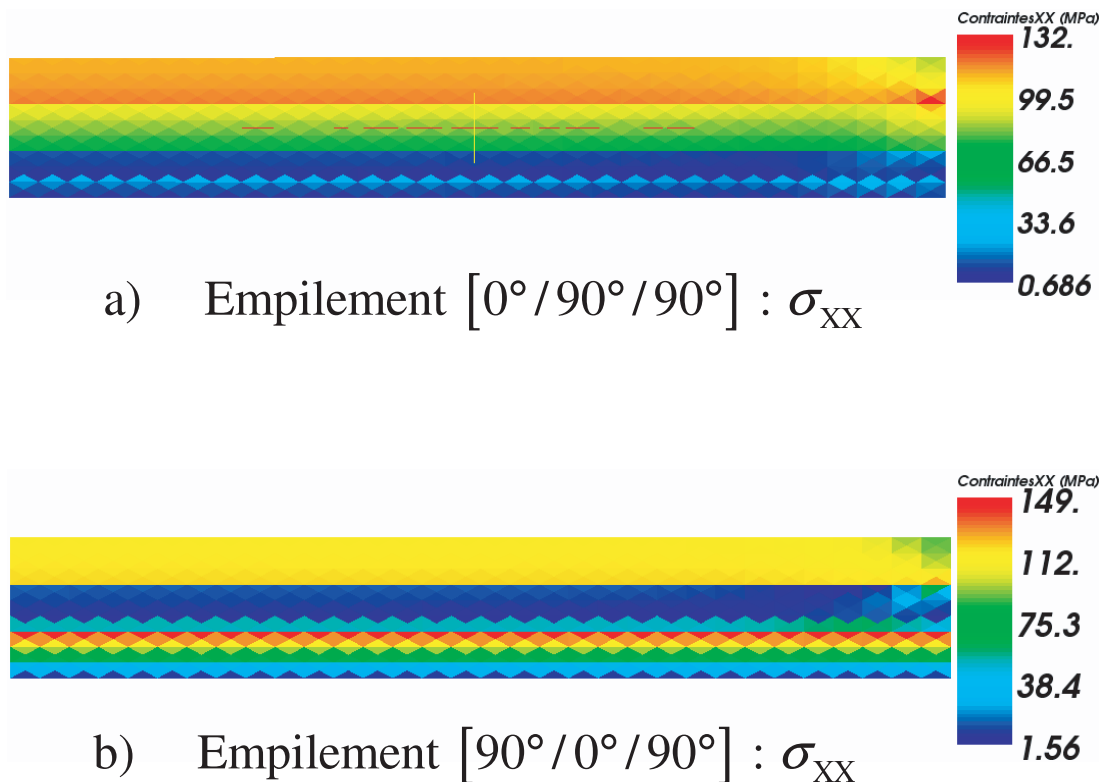


FIGURE 4.115 – Comparaison des champs de contraintes σ_{XX} à $t=10$ s

type d'empilement.

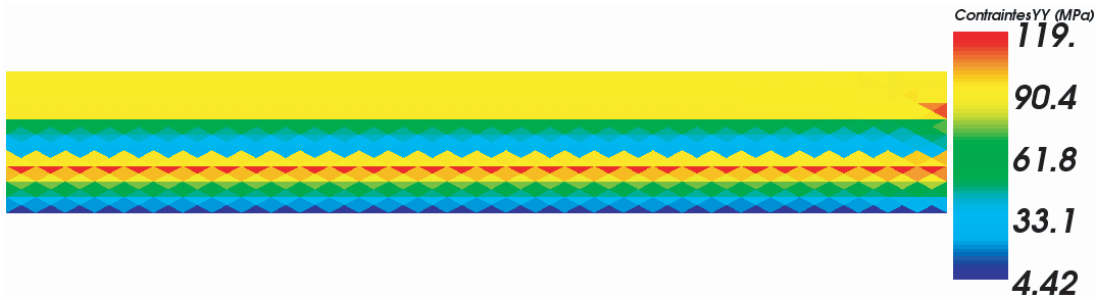
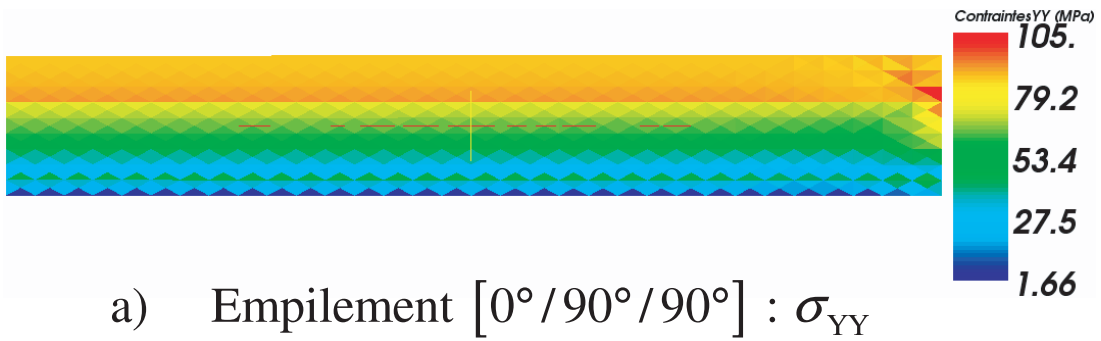


FIGURE 4.116 – Comparaison des champs de contraintes σ_{YY} à $t=10$ s

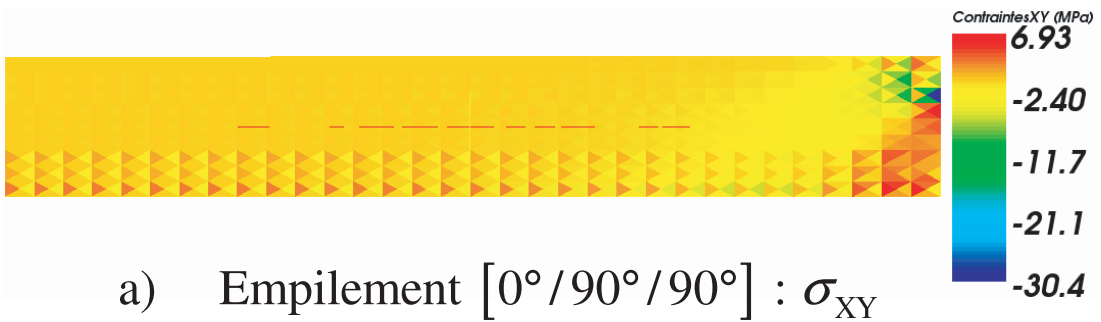


FIGURE 4.117 – Comparaison des champs de contraintes σ_{XY} à $t=10$ s

b) Comparaison des champs de contraintes à l'échelle microscopique entre les empilements $0^\circ/90^\circ/0^\circ$ et $0^\circ/90^\circ/90^\circ$

b-1) Champ de contraintes microscopiques dans le ruban n°1 (fibres à 90°)

Les comparaisons des champs de contraintes microscopiques entre les séquences d'empilement $[90^\circ/0^\circ/0^\circ]_1$ et $[0^\circ/90^\circ/0^\circ]_1$ sont données sur les figures 4.118, 4.119 et 4.120.

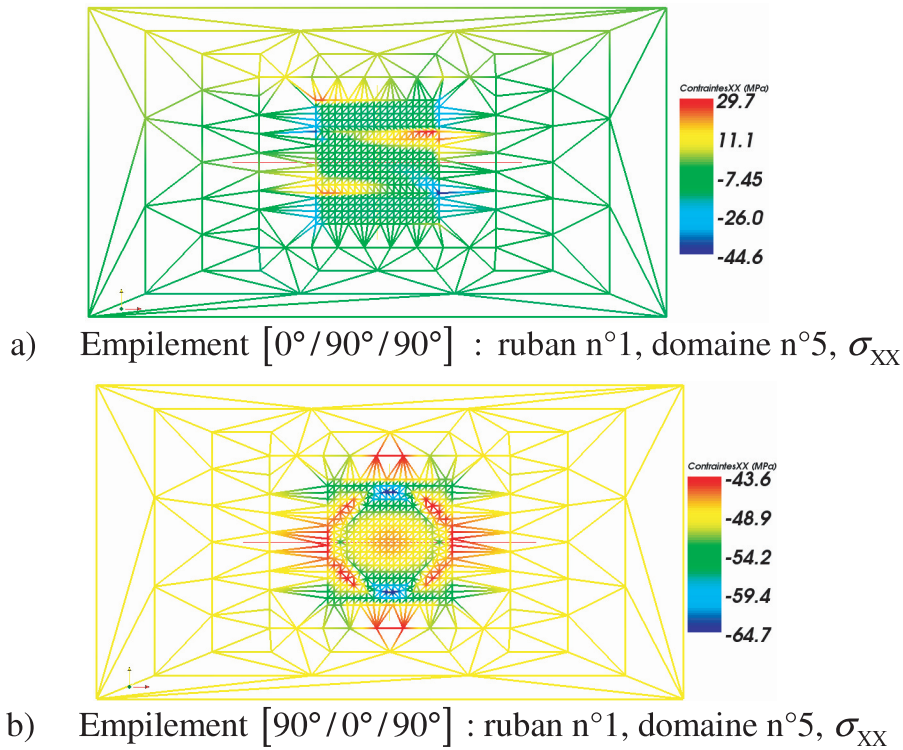


FIGURE 4.118 – Comparaison des champs de contraintes σ_{XX} à $t=10$ s

b-2) Champ de contraintes microscopiques dans le ruban n°2 (fibres à 0°)

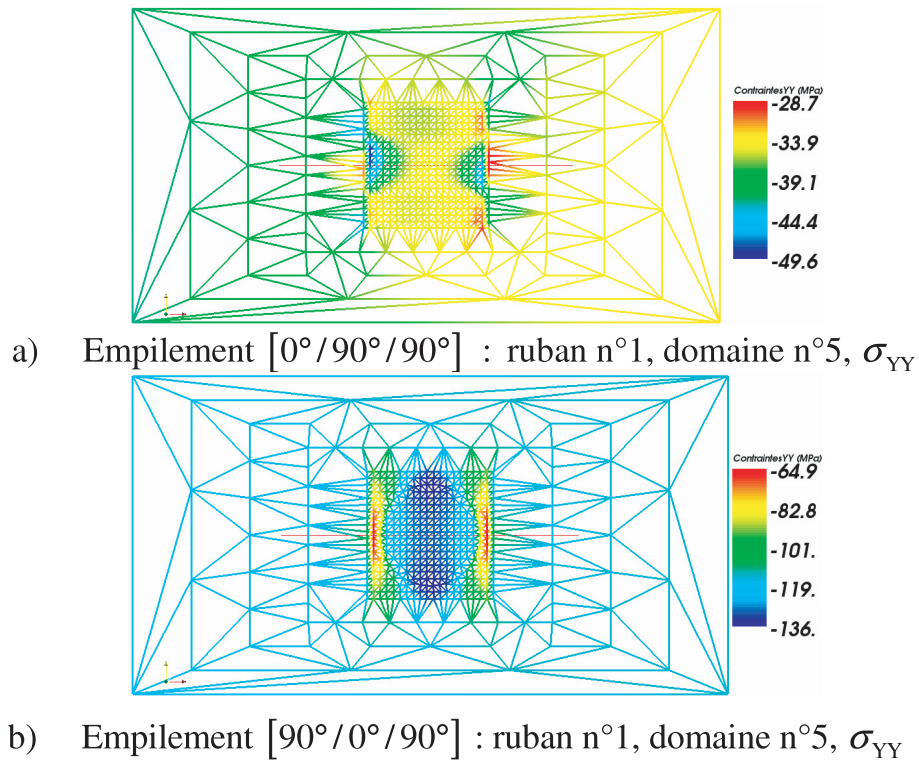
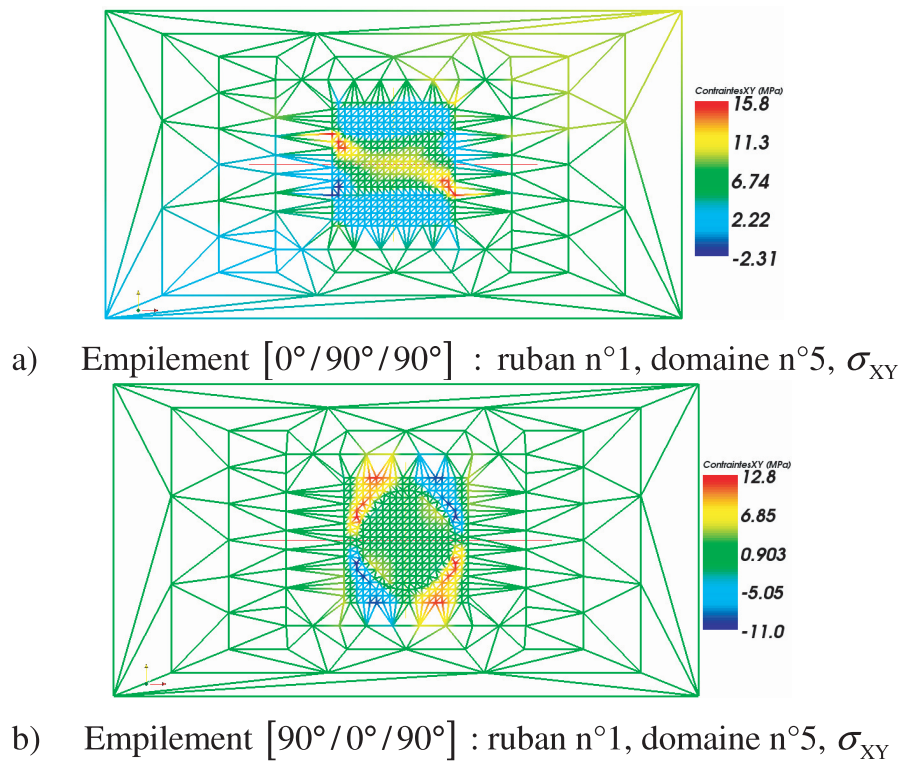
Les comparaisons des champs de contraintes microscopiques entre les séquences d'empilement $[90^\circ/0^\circ/0^\circ]_1$ et $[0^\circ/90^\circ/0^\circ]_1$ sont données sur les figures 4.121, 4.122 et 4.123.

b-3) Champ de contraintes microscopiques dans le ruban n°3 (fibres à 90°)

Les comparaisons des champs de contraintes microscopiques entre les séquences d'empilement $[90^\circ/0^\circ/0^\circ]_1$ et $[0^\circ/90^\circ/0^\circ]_1$ sont donnés sur les figures 4.124, 4.125 et 4.126.

Conclusions

Les états de contraintes macroscopiques et microscopiques présentent des valeurs plus élevées dans la séquence d'empilement $[90^\circ/0^\circ/90^\circ]_1$ que dans la séquence d'empilement $[0^\circ/90^\circ/90^\circ]_1$. Ceci est du à l'anisotropie plus forte induite par la séquence d'empilement.

FIGURE 4.119 – Comparaison des champs de contraintes σ_{YY} à $t=10$ sFIGURE 4.120 – Comparaison des champs de contraintes σ_{XY} à $t=10$ s

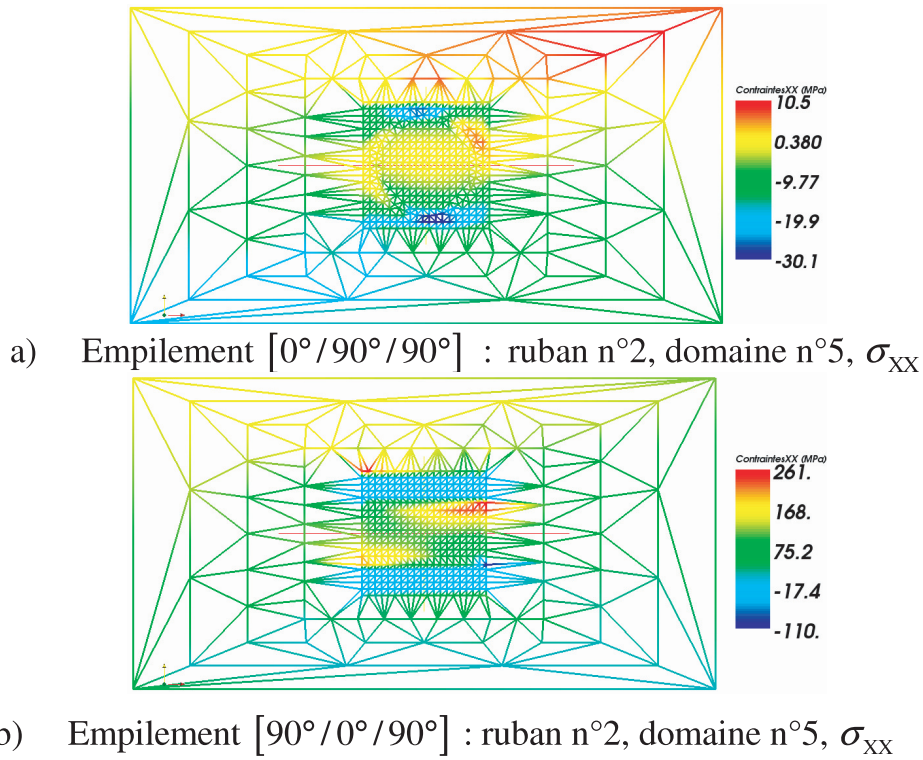


FIGURE 4.121 – Comparaison des champs de contraintes σ_{XX} à $t=10$ s

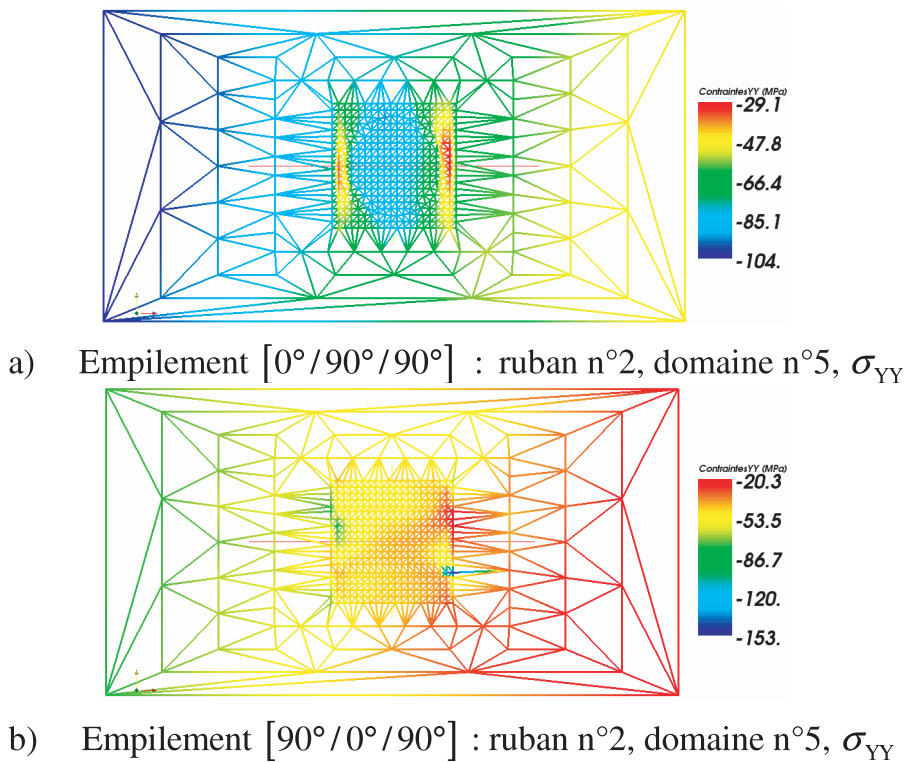


FIGURE 4.122 – Comparaison des champs de contraintes σ_{YY} à $t=10$ s

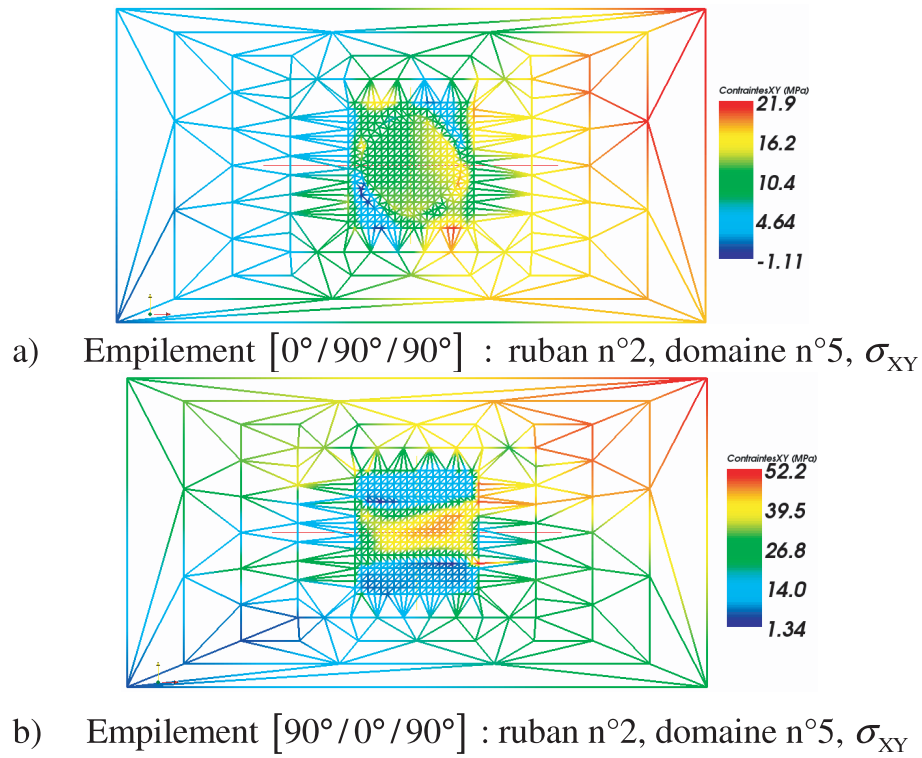


FIGURE 4.123 – Comparaison des champs de contraintes σ_{XY} à $t=10$ s

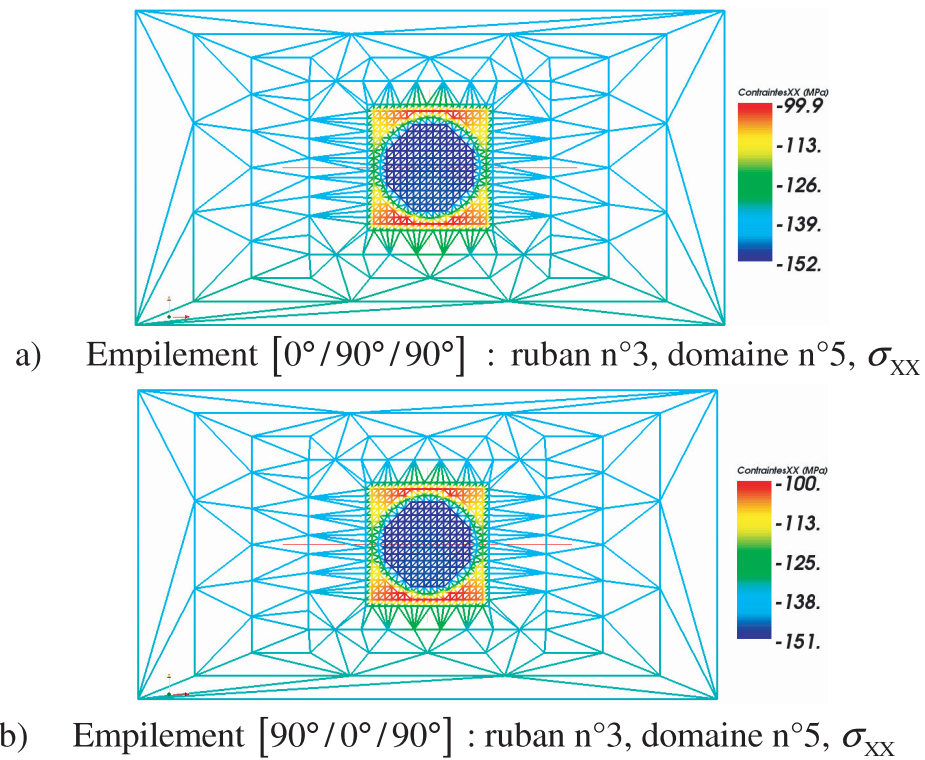


FIGURE 4.124 – Comparaison des champs de contraintes σ_{XX} à $t=10$ s

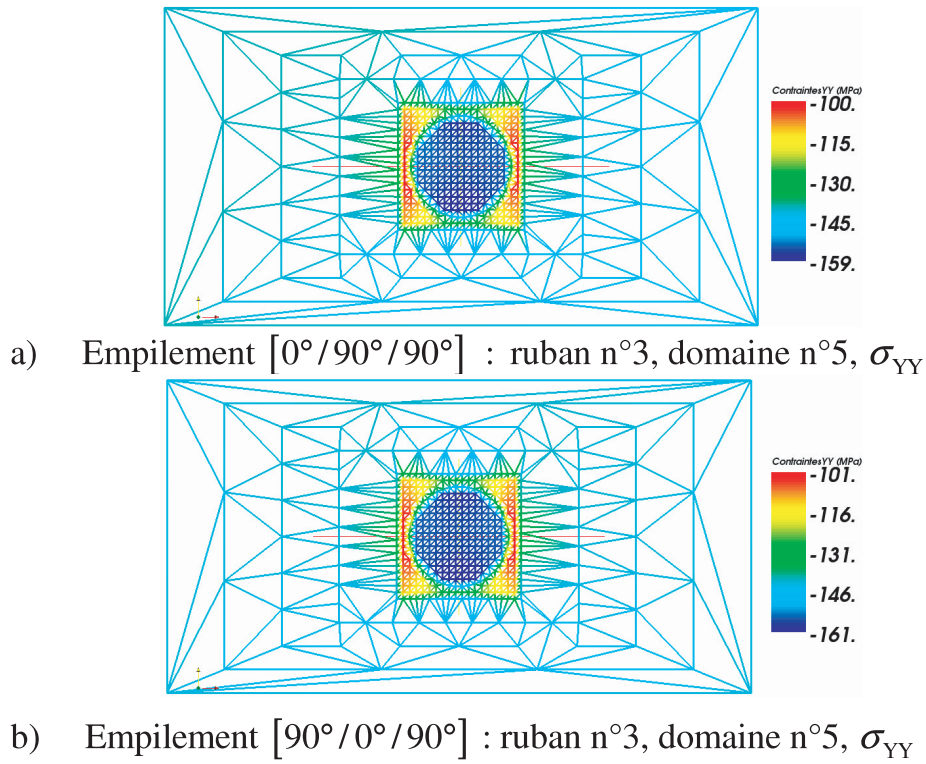


FIGURE 4.125 – Comparaison des champs de contraintes σ_{YY} à $t=10$ s

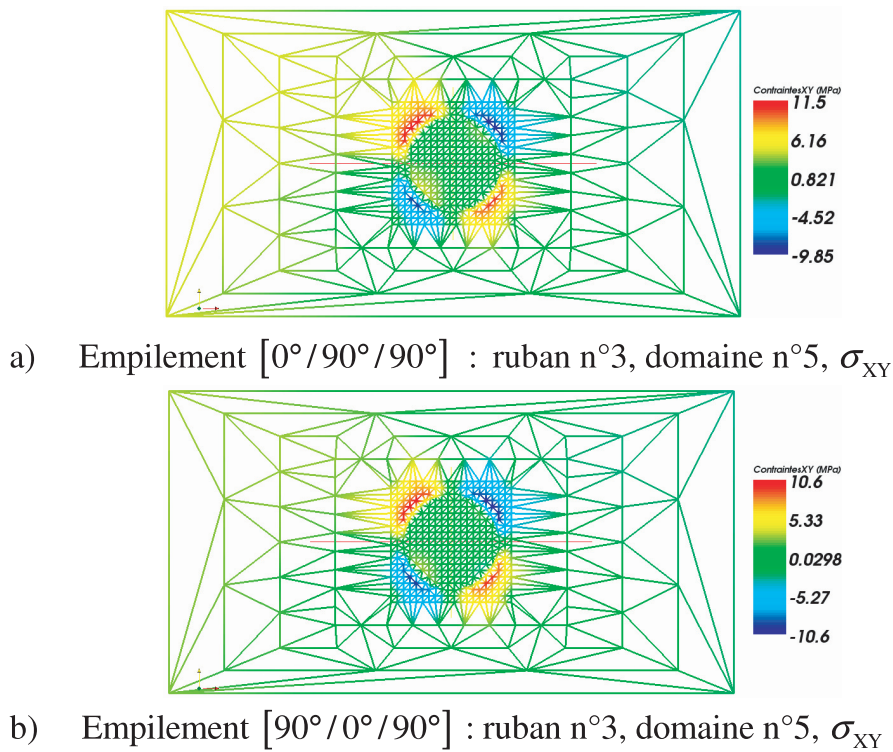


FIGURE 4.126 – Comparaison des champs de contraintes σ_{XY} à $t=10$ s

4.2.4 Conclusions

Dans ce chapitre, nous avons tout d'abord étudié la validation de notre méthode. L'étude de l'influence du raffinement des maillages sur les états de contraintes microscopiques a montré qu'un nombre raisonnable de noeuds des domaines intermédiaire et de la cellule microscopique pouvait être utilisé pour les simulations. La méthode d'homogénéisation des propriétés thermomécaniques du matériau a de plus été validée. Les effets de la vitesse de refroidissement, de l'anisotropie de l'empilement et des conditions aux limites appliquées au domaine sur les contraintes à l'échelle microscopique a de plus été étudié. De plus, l'étude de l'influence du nombre de domaines microscopiques sur l'état de contrainte à l'échelle macroscopique. a montré qu'avec le type de modélisation utilisé, c'est à dire sans prise en compte de modèle de suivi de front, le nombre de domaines microscopiques utilisé par ruban avait peu d'influence sur l'état de contrainte à l'échelle macroscopique. Enfin, la simulation du dépôt multiple de plis a montré tout le potentiel de la méthode pour prédire et analyser la formation des contraintes résiduelles aux échelles microscopique et macroscopique, lors du procédé ATP. La méthode développée peut de plus être aisément appliquée à d'autres types de procédé de mise en forme des composites thermoplastiques, comme par exemple le procédé d'enroulement filamentaire [Shi97].

CONCLUSION ET PERSPECTIVES

Nos travaux se sont intéressés à la modélisation de l'apparition des contraintes résiduelles dans le procédé d'empilement par soudage et consolidation en continu développé dans l'industrie aéronautique. Ce procédé a la particularité de présenter des temps caractéristiques de chauffe du matériau de l'ordre de la seconde, ce qui est très court par rapport aux procédés classiques tels que la consolidation en autoclave. Dans les conditions standard d'élaboration, les pièces réalisées par ce type de procédé sont le siège d'importantes contraintes résiduelles. L'ignorance de leur origine et développement est un frein important à la validation industriel de ce procédé prometteur.

Dans cette perspective, l'originalité de notre étude a été de développer une méthode de modélisation multi-échelle et multi-physique permettant une modélisation couplée aux échelles macroscopiques et microscopiques du phénomène de l'apparition des contraintes résiduelles au cours du procédé.

La méthode de modélisation développée permet de réaliser une description simultanée aux deux échelles microscopique et macroscopique des contraintes résiduelles, tout en réalisant un couplage entre les deux échelles :

- l'échelle microscopique apporte à l'échelle macroscopique les propriétés thermomécaniques homogénéisées du matériau à chaque pas de temps ;
- l'échelle macroscopique apporte à l'échelle microscopique les conditions aux limites (températures, déplacements), qui permettent de déterminer le champ de température, le champ de déformation et de contrainte au cours du temps à l'échelle microscopique.

Les résultats obtenus en terme de validation et d'application de la méthode au procédé d'empilement par chauffage et consolidation en continu sont satisfaisants et encourageants.

Ce modèle, qui simule le dépôt, la phase de chauffage et la phase de refroidissement successifs de rubans de préimprégné, prend en compte les échanges de chaleur par conduction et par convection ainsi que les phénomènes de cristallisation et de fusion du matériau via deux termes sources. La méthode peut cependant être aisément appliquée à d'autres types de procédé de mise en forme des composites thermoplastiques (par exemple le procédé d'enroulement filamentaire).

La modélisation du procédé a été faite en 2D et avec l'hypothèse des déformations planes. Nous n'avons pas eu à disposition les ressources et les résultats expérimentaux nécessaires pour comparer rigoureusement les résultats obtenus par notre modélisation du procédé et les résultats expérimentaux, en terme de contrainte résiduelle. De plus, notre modèle ne prend pas en compte le suivi du front de solidification dans le matériau au cours du procédé. Or l'essentiel des variations des propriétés thermomécaniques du matériau au cours du procédé se font dans le voisinage du front de solidification. La méthode que nous avons développée pourrait être ainsi enrichie par un modèle de suivi du front de solidification (par exemple du type « level-set »). Nous pouvons ainsi imaginer un modèle de suivi du front de solidification prenant en compte le déplacement des domaines microscopiques avec le déplacement du front de solidification à l'échelle macroscopique. De plus, pour prendre en compte le phénomène de recuit dû à la dépose des bandes adjacentes ou étendre la simulation à la fabrication de pièces de géométrie complexe, un modèle 3D serait nécessaire. Dans cette perspective, nous pouvons nous concentrer sur le développement en 3D de la méthode des éléments naturels contraints (CNEM) qui a été étudié récemment [Ill08]. Par ailleurs, nous n'avons pas exploité les méthodes de réduction en temps

développées récemment par Ryckelynck [Ryc05]. Le passage en 3D de la méthode de modélisation développée, particulièrement exigeant en terme de temps de calcul, en serait ainsi facilitée.

Annexe A

Travaux issus de l'étude

Reuves internationales à comité de lecture :

Chinesta F., Ammar A., Lemarchand F., Beauchêne P., Boust F., *Alleviating mesh constraints : model reduction, parallel time integration and high resolution homogenization*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol. 197, No. 5, pp. 400-413, 2008.

Lemarchand F., Beauchêne P., Laine B., Chinesta F., *A multi-scale method to predict residual stress appearance in the process of on-line consolidation of thermoplastic composites*, International Journal of Forming Processes, Vol. 10, No. 4, pp. 471-498, 2007.

Congrès avec acte :

Chinesta F., Lemarchand F., Beauchêne P., *Multi-scale thermomechanical simulation in composite forming processes*, Actes des VII^{èmes} World Conference in Computational Mechanics (WCCM VII), Los Angeles, Californie, USA, 16-22 Juillet 2006.

Lemarchand F., Beauchêne P., Chinesta F., *Modeling of residual stress appearance in the process of on-line consolidation of thermoplastic composites*, Actes des 10^{èmes} ESAFORM Conference on Material Forming Saragosse, Espagne, 18-20 Avril 2007.

Lemarchand F., Beauchêne P., Chinesta F., *Modélisation de l'apparition des contraintes résiduelles dans le procédé d'empilement par soudage et consolidation en continu de composites thermoplastiques*, Actes des XV^{èmes} Journées Nationales des Composites (JNC15), Marseille, France, 6-8 juin 2007.

Lemarchand F., Beauchêne P., Chinesta F., *Méthode de calcul multi-échelle pour prédire l'apparition des contraintes résiduelles dans le procédé d'empilement par soudage et consolidation*

en continu de composites thermoplastiques, Actes des XVIII^{èmes} Congrès Français de Mécanique, Grenoble, France, 27-31 août 2007.

Chinesta F., Ammar A., Lemarchand F., Beauchêne P., Boust F., *Advanced Multiscale Modeling of Composite Welding Processes*; MATERIALS PROCESSING AND DESIGN; Modeling, Simulation and Applications; NUMIFORM '07; Proceedings of the 9th International Conference on Numerical Methods in Industrial Forming Processes. AIP Conference Proceedings, Vol. 908, pp. 289-294, 2007.

Bibliographie

- [Aga91] V. Agarwal. Phd thesis, University of Delaware, 1991.
- [AGMS92] V. Agarwal, S. I. Güçeri, R. L. McCullough, and J. M. Schultz. *Journal of Thermoplastic Composite Materials*, 5 :115–135, 1992.
- [AMS87] M.L. Addonizio, E. Martuscelli, and C. Silvestre. *Polymer*, 28 :183, 1987.
- [ARCK06] A. Ammar, D. Ryckelynck, F. Chinesta, and R. Keunings. On the reduction of kinetic theory models related to finitely extensible dumbbells. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 134 :136–147, 2006.
- [Avr39] M. Avrami. *Journal of Chemical Physics*, 7 :1103, 1939.
- [Avr40] M. Avrami. *Journal of Chemical Physics*, 8 :212, 1940.
- [Avr41] M. Avrami. *Journal of Chemical Physics*, 9 :177, 1941.
- [AYH01] C. Ageorges, L. Ye, and M. Hou. Meshless. *M. Composites, Part A.*, 32 :839–857, 2001.
- [AZ96] M. Arias and G. Ziegmann. In *41st International SAMPE Symposium and Exhibition*, 1996.
- [BBA94] C. Bas, P. Battesti, and N. D. Albérola. *Journal of Applied Polymer Science*, 53 :1745–1757, 1994.
- [BBG01] M. Bornert, T. Bretheau, and P. Gilorimini. *Homogénéisation en mécanique des matériaux : 1. Matériaux aléatoires élastiques et milieux périodiques*. Hermès Science Publications, Paris, 2001.
- [BCMG85] D.J. Blundell, J.M. Chalmers, M.W. Mackenzie, and W.F. Gaskin. *Sampe Quarterly*, 16(4) :22, 1985.
- [BD98a] H. Ben Dhia. Problèmes mécaniques multi-échelles : la méthode arlequin. *Comptes Rendus à l'Académie des Sciences -Mécanique des Solides et des Structures*, 326 :899–904, 1998.
- [BD98b] H. Ben Dhia. Problèmes mécaniques multi échelles : la méthode arlequin. *C.R. ACAD. SCI. I-MATH.*, 326 :899–904, 1998.
- [BDR01] H. Ben Dhia and G. Rateau. Analyse mathématique de la méthode arlequin mixte. *Comptes Rendus à l'Académie des Sciences - Analyse numérique*, 332 :649–654, 2001.
- [Bea02] P. Beauchêne. Rapport interne RT 1/05050, DMSC, ONERA, 2002.
- [Bee91] A. Beevers. *Engineering*, 231 :ACE11–2, 1991.
- [Ben95] A. Benatar. In *Proceedings of the 2nd International Conference of Composites Engineering*, page 35, 1995.

- [BG86] A. Benatar and T.G. Gutowski. In *SAMPE Quarterly*, volume 18, page 35, 1986.
- [BG87] A. Benatar and T. G. Gutowski. *SAMPE Journal*, 23 :33–39, 1987.
- [BG88] E.P. Beyeler and S.I. Güceri. *Journal of Heat transfer*, 110 :424, 1988.
- [BG91] L. J. Bastien and J. W. Jr. Gillespie. *Polymer Engineering and Science*, 32(24) :1720–1730, 1991.
- [BG92] T.A. Bogetti and J.W. Jr. Gillespie. Process-induced stress and deformation in thick-section thermoset composite laminates. *Journal of Composites Materials*, 26(5) :626–660, 1992.
- [BGL06] J. Burkardt, M. Gunzburger, and H-Ch. Lee. Pod and cvt-based reduced-order modeling of navierstokes flows. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 196 :337–355, 2006.
- [BGTA95] C. Bas, A.C. Grillet, F. Thimon, and N.D. Albérola. *European Polymer Journal*, 31(10) :911, 1995.
- [BHB91] A. W. Birley, B. Haworth, and J. Batchelor. In *Physics of Plastics*. Hanser Publishers, 1991.
- [Bin77] F.L. Binsbergen. *Journal of Polymer Science*, 59 :11, 1977.
- [BKF05] R.A. Bialecki, A.J. Kassab, and A. Fic. Proper orthogonal decomposition and modal analysis for acceleration of transient fem thermal analysis. *Int. J. Numer. Meth. Engrng.*, 62 :774–797, 2005.
- [BLG94] T. Belytschko, Y.Y. Lu, and L. Gu. Element-free galerkin methods. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 37 :229–256, 1994.
- [Blu87] D. J. Blundell. *Polymer*, 28 :2248–2251, 1987.
- [BM97] I. Babuska and J.M. Melenk. The partition of unity method. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 40 :727–758, 1997.
- [BMCPG98] C. A. Butler, R. L. Mc Cullough, R. Pitchumani, and J. W. J. Gillespie. *Journal of Thermoplastic Composites Materials*, 11 :338–363, 1998.
- [BMUP01] T. Belytschko, N. Moes, S. Usui, and C. Parimi. Arbitrary discontinuities in finite elements. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 50 :993–1013, 2001.
- [BO83] D. J. Blundell and B. N. Osborn. *Polymer*, 24 :953–958, 1983.
- [BO85] D.J. Blundell and B.N. Osborn. *Sampe Quarterly*, 17(1) :1, 1985.
- [BOAR88] D.C. Bassett, R.H. Olley, and I.A.M. Al Raheil. *Polymer*, 29 :1745, 1988.
- [Bog89] T.A. Bogetti. *Process-Induced Stress and Deformation in Thick-Section Thermosetting Composites*. Dissertation thesis, University of Delaware, 1989.
- [BPWG94] C.A. Butler, R. Pitchumani, A.R. Wedgewood, and J.W. Gillespie. In *SAMPE Int. Technical Conference*, volume 10, page 595, 1994.
- [BS89] J. Border and R. Salas. In *Proceedings of the 34th International SAMPE Symposium*, page 2569, 1989.
- [BSL84] T. Belytschko, P. Smolinski, and W.K. Liu. Multi-stepping implicit-explicit procedures in transient analysis. In *Proceedings of the International Conference on Innovative Methods for Nonlinear Problems*, Swansea, U.K., 1984. Pineridge Press International Limited.

-
- [Bus02] F. Bustos. *Contribution à la modélisation des câbles monotorons par éléments finis*. Thèse de doctorat, Université Claude Bernard, Lyon I, 2002.
- [BYM79] T. Belytschko, H.J. Yen, and R. Mullen. Mixed methods for time integration. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 17(18) :259–275, 1979.
- [CAL⁺07] F. Chinesta, A. Ammar, F. Lemarchand, P. Beauchêne, and F. Boust. Multiscale modelling of composite welding processes. In *Proceedings of the 9th International Conference on Numerical Methods in Industrial Forming Processes. AIP Conference Proceedings*, volume 908, pages 289–294, 2007.
- [CAL⁺08] F. Chinesta, A. Ammar, F. Lemarchand, P. Beauchêne, and F. Boust. Alleviating mesh constraints : model reduction, parallel time integration and high resolution homogenization. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 197(5) :400–413, 2008.
- [CCC98] J.-Y. Chen, M. Chen, and S. C. Chao. *Macromolecules Chemical Physics*, 199 :1623–1629, 1998.
- [CCW86] S. Z. D. Cheng, M. Y. Cao, and B. Wunderlich. *Macromolecules*, 19 :1868–1876, 1986.
- [CD86] P. Cebe and H. S. D. *Polymer*, 27 :1183–1192, 1986.
- [CD93] W. J. Cantwell and P. Davies. In *Advanced Thermoplastic Composites*. Kausch, H. H., Ed. ; Hanser Publisher, 1993.
- [CDK90] W.J. Cantwell, P. Davies, and H.H. Kausch. *Composite Structures*, 14 :151, 1990.
- [CGP⁺90] T.J. Chapman, J.W. Gillespie, R.B. Pipes, J.-A.E. Manson, and J.C. Seferis. Prediction of process-induced stresses in thermoplastic composites. *Journal of Composite Materials*, 24 :616–643, 1990.
- [Cha88] S. S. Chang. *Polymer*, 29 :138–139, 1988.
- [CHM93] B. S. Coffenberry, D. E. Hauber, and Cirino M. In *38th International SAMPE Symposium*, pages 1640–1650, 1993.
- [Cho95] Kardos JL. Cho, B.R. *Journal of Applied Polymer Science*, 56 :1435, 1995.
- [CL89] C. R. Choe and K. H. Lee. *Polymer Engineering and Science*, 29(12) :801, 1989.
- [CM97] R. C. Costen and J. M. Marchello. In *In 42nd International SAMPE Symposium and Exhibition*, pages 33–47, Anaheim, CA, May 4-8 1997.
- [CM98] R. C. Costen and J. M. Marchello. In *In 43rd International SAMPE*, pages 2005–2019, Anaheim, May 31-June 4 1998.
- [CMS⁺89] F.N. Cogswell, P.J. Meakin, A.J. Smiley, M.T. Harvey, and C. Brooth. In *34th International SAMPE Symposium*, page 2315, 1989.
- [Cog92] F.N. Cogswell. *Thermoplastic aromatic polymer composites*. Ltd Edition, 1992.
- [Cot91] C. Cottenot. Phd thesis, Université de Poitiers, 1991.
- [CPMO94] J.J.C. Cruz-Pinto, A. Martins, and M.J. Oliveira. *Colloids and Polymer Science*, 272 :1, 1994.
- [CSC⁺03] E. Cueto, N. Sukumar, B. Calvo, J. Cegonino, and M. Doblaré. Overview and recent advances in natural neighbour galerkin methods. *Archives of computational methods in engineering*, 10 :307–384, 2003.
- [CWY01] J.S. Chen, C.T. Wu, and Y. Yoon. A stabilized conforming nodal integration for galerkin mesh-free methods. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 50 :435–466, 2001.

- [CYW02] J.S. Chen, S. Yoon, and C.T. Wu. Non-linear version of stabilized conforming nodal integration for galerkin mesh-free methods. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 53 :2587–2615, 2002.
- [DB80] P. C. Dawson and D. J. Blundell. *Polymer*, 21 :577–578, 1980.
- [DB99] J. Dolbow and T. Belytschko. Numerical integration of the galerkin weak forme in meshfree methods. *Computational Mechanics*, 23 :219–230, 1999.
- [DBBC97] D. Demange, P. Beauchêne, M. Bejet, and R. Casulleras. *Revue Générale de Thermique*, 36, 1997.
- [DCJ+91] P. Davies, W.J. Cantwell, P.Y. Jar, P.E. Bourban, V. Zysman, and H.H. Kaush. *Composites*, 22 :425, 1991.
- [DDD+85] J. Devaux, D. Delimoy, D. Daoust, R. Legras, and J. P. Mercier. *Polymer*, 26 :1996–2000, 1985.
- [DDG+93] D. Daoust, J. Devaux, P. Godard, A. Jonas, and R. Legras. In *Advanced Thermoplastic composites*, Kausch, H. H. ed. Kausch, H. H., Ed. ; Hanser Publishers, 2nd edition, 1993.
- [dG71] P. G. de Gennes. *Journal of Chemical Physics*, 55 :572–579, 1971.
- [DH98] M.M. Domb and J.S. Hansen. The effect of cooling rate on free-edge stress development in semi-crystalline thermoplastic laminates. *Journal of Composite Materials*, 32(4) :361–386, 1998.
- [DHSG93] R.C. Don, S.T. Holmes, K.V. Steiner, and J.W. Gillespie. In *SAMPE Int. Technical Conference*, volume 25, page 713, 1993.
- [DL85] P. H. Dara and A. C. Loos. Thermoplastic matrix composite processing model. Report CCMS 85-10, VPI-E-85-21, Center for Composite Materials and Structures, Virginia Polytechnic Institute and State University, Blacksburg, Virginia, 1985.
- [DPG94] R.C. Don, R. Pitchumani, and J.W. Gillespie. *International SAMPE Series*, 39(1) :1521, 1994.
- [DSCW8a] M. Day, T. Suprunchuk, J.D. Cooney, and D.M. Wiles. In *Proc. Int. SAMPE Tech. Conf.*, number 20, page 132, Orléans, 1988a.
- [DSCW8b] M. Day, T. Suprunchuk, J.D. Cooney, and D.M. Wiles. *Journal of Applied Polymer Science*, 36 :1097, 1988b.
- [Dum86] H. Dumontet. Study of a boundary layer problem in elastic composite. *Mathematical modelling and numerical analysis*, 20 :265–286, 1986.
- [DVK92] J. Denault and T. Vu-Khanh. *Polymer Composites*, 13(5) :361–371, 1992.
- [Edu91] R.F. Eduljee. *The effect of Microstructure on Residual Stress Development in Short Fiber Composites*. Dissertation thesis, University of Delaware, 1991.
- [EG88a] M. W. Egerton and M. B. Gruber. In *33rd International SAMPE Symposium*, pages 35–46, 1988.
- [EG88b] E.C. Eveno and J.W. Gillespie. *Journal of Thermoplastic Composite Materials*, 1 :322, 1988.
- [EGV89] E.C. Eveno, J.W. Gillespie, and J.R. Vinson. In *Proceedings of the 47th Annual technical Conference, ANTEC*, page 493, 1989.
- [Ers98] N.B. Ersoy. *Prediction and measurement of residual stresses in layered composites*. Phd thesis, Bogazici University, Istanbul, 1998.

-
- [EV00] N. Ersoy and O. Vardar. Measurement of residual stresses in layered composites by compliance method. *Journal of Composite Materials*, 34(7) :575–598, 2000.
- [Eva45] U.R. Evans. *Transfert Faraday Society*, 41 :365, 1945.
- [EW83] M. Eder and A. Wlochowicz. *Polymer*, 24 :1593, 1983.
- [Fac03] V. D. Fachinotti. On the solution of the non-linear transient thermal equation involving phase-change effects in the cast. Note interne, CEMEF, 2003.
- [FB95a] J. Fish and V. Belsky. Multigrid method for periodic heterogeneous media. part 1 : Convergence studies for one-dimensional case. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 126 :1–16, 1995.
- [FB95b] J. Fish and V. Belsky. Multigrid method for periodic heterogeneous media. part 1 : Part 2 : Multiscale modeling and quality control in multidimensional case. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 126 :17–38, 1995.
- [FCWA86] A.V. Fratini, E.M. Cross, R.B. Whitaker, and W.W. Adams. *Polymer*, 27 :861, 1986.
- [FDK99] C. Fournier, M. Dosière, and M. H. J. Koch. *Macromolecules*, 32 :8133–8138, 1999.
- [Fey99] F. Feyel. Multiscale fe2 elastoviscoplastic analysis of composite structures. *Computational Materials Science*, 16 :344–354, 1999.
- [Fis92] J. Fish. The s-version of the finite element method. *Computers and Structures*, 43 :539–547, 1992.
- [FM03] T.P. Fries and H.G. Matthies. Classification and overview of meshfree methods. Technical report Informatikbericht Nr. 2003-03, Institute of Scientific Computing - Technical University Braunschweig, 2003.
- [FR91] C. Farhat and F. Roux. A method of finite element tearing and interconnecting and its parallel solution algorithm. *Int. J. Numer. Methods Engrg.*, 32 :1205–1227, 1991.
- [FR0b] A. Franbourg and F. Rietsch. *Polymer Bulletin*, 24 :445, 1990b.
- [FRPF01] R. Fracasso, M. Rink, A. Pavan, and R. Frassinetti. *Composites Science and Technology*, 61 :57–63, 2001.
- [FS99] R. S. Feltman and M. H. Santare. *Journal of Thermal Stresses*, 22 :305–329, 1999.
- [Güç92] S. I. Güçeri. In *Transport Phenomena in Material Processing and Manufacturing ASME HTD*, volume 196, pages 11–21, 1992.
- [GC01] A. Gravouil and A. Combescure. Multi-time-step explicit implicit method for non-linear structural dynamics. *Int. J. for Numerical Methods in Engineering*, 50 :199–225, 2001.
- [GCKW86] T. G. Gutowski, Z. Cai, J. Kingery, and S. J. Wineman. *SAMPE Quarterly*, 17(4) :54–58, 1986.
- [GCMD04] D. Gonzalez, E. Cueto, M.A. Martinez, and M. Doblaré. Numerical integration in natural neighbor galerkin methods. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 60 :2077–2104, 2004.
- [GK00] S.-L. Gao and J.-K. Kim. *Composites Part A : Applied science and manufacturing*, 31 :517–530, 2000.
- [GK01] S.-L. Gao and J.-K. Kim. *Composites Part A : Applied science and manufacturing*, 32 :763–774, 2001.

- [GK02] S.-L. Gao and J.-K. Kim. *Journal of Applied Polymer Science*, 84 :1155, 2002.
- [GLM95] S. Ghosh, K. Lee, and S. Moorthy. Multiple scale analysis of heterogeneous elastic structures using homogenization theory and voronoi cell finite element method. *International Journal of Solids and Structures*, 32 :27–62, 1995.
- [GLP04] M. B. Gruber, M. A. Lamontia, and J. F. Pratte. In *In SAMPE Europe*, pages 527–532, Drechsler, K., March 30th-April 1st 2004. Ed. : Paris.
- [GM95] S. Ghosh and S. Moorthy. Elastic-plastic analysis of arbitrary heterogeneous materials with the voronoi cell finite element method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 121 :373–409, 1995.
- [GNL97] S. Ghosh, Z. Nowak, and K. Lee. Tessellation-based computational methods for the characterization and analysis of heterogeneous microstructures. *Composites Science and Technology*, 57 :1187–1210, 1997.
- [GP04] X. Guan and R. Pitchumani. *Composite Science and Technology*, 64 :1363, 2004.
- [GPS07] M.D. Gunzburger, J.S. Peterson, and J.N. Shadid. Reduced-order modeling of time- dependent pdes with multiple parameters in the boundary data. *Methods Appl. Mech. Engrg.*, 196 :1030–1047, 2007.
- [Gro88] S. M. Grove. *Composites*, 19 :367–375, 1988.
- [G’s95] C. G’sell. In *Introduction à la mécanique des polymères*. G’Sell, C. and Haudin, J. M.,Eds. ; Institut National Polytechnique de Lorraine, 1995.
- [Gut85] T. G. Gutowski. *SAMPE Quarterly*, 16(4) :58–64, 1985.
- [Gut88] T. G. Gutowski. *Composites*, 19(5) :367, 1988.
- [HC96] D. Hull and T. W. Clyne. *An introduction to composites materials*. Second edition edition, 1996.
- [HG93] S. T. Holmes and J. W. J. Gillespie. *Journal of Reinforced Plastics and composites*, 12 :722–736, 1993.
- [HGM95] J. A. Hinkley, R. W. Grenoble, and J. M. Marchello. In *40th International SAMPE Symposium*, pages 1560–1571, 1995.
- [Hie95] C.A. Hieber. *Polymer*, 36(7) :1455, 1995.
- [Hil65] I.H. Hillier. *Journal of Polymer Science*, A3 :3067, 1965.
- [HKH90] V. Hinrichs, G. Kalinka, and G. Hinrichsen. *Journal of Macromolecular Science, Physics*, B35(3 & 4) :295, 1990.
- [HKLR84] J. H. Hay, D. J. Kemmisch, J. I. Langdord, and A. I. M. Rae. *Polymer Communications*, 25 :175–178, 1984.
- [HL87] J.C0 Howes and A.C. Loos. Report CCMS CCMS-87-15, Centre for Composite Materials and Structures, Virginia Polytechnic Institute and State University, Blacksburg, Virginia, 1987.
- [HLL89] J.N. Hay, J.I. Langford, and J.R. Lloyd. *Polymer*, 30 :489, 1989.
- [HM97] J.D. Hoffman and R.C. Miller. *Polymer*, 38(13) :3151, 1997.
- [HMH⁺99] A. B. Hulcher, J. M. Marchello, J. A. Hinkley, N. J. Johnston, and M. A. Lamontia. In *In Proceedings of the 43rd international SAMPE Symposium and Exhibition*, Long Beach, CA, March 30th-April 1st 1999.
- [HW62] J.D. Hoffman and J.J. Weeks. *Journal of Research of the National Bureau of Standards, A : Physics and Chemistry*, 66A :13, 1962.

-
- [Ian93] P. Iannelli. *Macromolecules*, 26 :2309, 1993.
- [ILJ99] D. A. Ivanov, R. Legras, and A. Jonas. *Macromolecules*, 32 :1582–1592, 1999.
- [ILJ00] D. A. Ivanov, R. Legras, and A. Jonas. *Polymer*, 41 :3719–3727, 2000.
- [III08] Amran Lounès Illoul. *Mise en oeuvre de la méthode des éléments naturels contrainte en 3D - Application au cisailage adiabatique*. Thèse de doctorat, École Nationale Supérieure D’Arts et Métiers - Paris, 2008.
- [JB99] D.L. James and W.Z. Black. *Journal of Thermoplastic Composite Materials*, 9 :54, 1999.
- [JHT03] M.J. Jenkins, J.N. Hay, and N.J. Terrill. *Polymer*, 44 :6781, 2003.
- [JL91] A. Jonas and R. Legras. *Macromolecules*, 32(15) :2691, 1991.
- [JLSR93] A. Jonas, R. Legras, R. Scherrenberg, and H. Reynaers. *Macromolecules*, 26 :526, 1993.
- [Jon75] R.M. Jones. *In Mechanics of Composite Materials*. Scripta Book Company, 1975.
- [JP88] G. Jeronimidis and A.T. Parkyn. Residual stresses in carbon fibre-thermoplastic matrix laminates. *Journal of Composite Materials*, 22 :401–415, 1988.
- [KAA86] S. Kumar, P. Anderson, and W. W. Adams. *Polymer*, 27 :329–335, 1986.
- [KB96] P. Krysl and T. Belytschko. Element free galerkin method : convergence of the continuous and discontinuous shape functions. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 148 :257–277, 1996.
- [KFG⁺03] T. Kanit, S. Forest, I. Galliet, V. Mounoury, and D. Jeulin. Determination of the size of the representative volume element for random composites : statistical and numerical approach. *International Journal of Solids and Structures*, 40 :3647–3679, 2003.
- [KH96] Lee WI. Kim HJ, Kim SK. *Experimental Thermal and Fluid Science*, 13 :408, 1996.
- [KKL04] H. J. Kim, S. K. Kim, and W. I. Lee. *Journal of Thermoplastic Composites Materials*, 17 :5–12, 2004.
- [Lam04] J.F. Lamèthe. Thèse de doctorat, Université Pierre et Marie Curie, Paris VI, 2004.
- [LB82] W.K. Liu and T. Belytschko. Mixed-time implicit-explicit finite elements for transient analysis. *Computers and Structures*, 15 :445–450, 1982.
- [LBB⁺06] F. Lemarchand, P. Beauchêne, F. Boust, F. Chinesta, and J. Yvonnet. Multi-scale thermomechanical simulation in composite forming processes. In *7th World Congress on Computational Mechanics (WCCM-VII) Los Angeles, 2006*, 2006.
- [LBB⁺07] F. Lemarchand, P. Beauchêne, F. Boust, B. Laine, and F. Chinesta. Méthode de calcul multi-échelle pour prédire l’apparition des contraintes résiduelles dans le procédé d’empilement par soudage et consolidation en continu de composites thermoplastiques. In *18ème Congrès Français de Mécanique, 27-31 août 2007, Grenoble, France*, 2007.
- [LBC07a] F. Lemarchand, P. Beauchêne, and F. Chinesta. Modeling of residual stress appearance in the process of on-line consolidation of thermoplastic composites. In *10th ESAFORM Conference on Material Forming Zaragoza, Spain, 18-20 April 2007*, 2007.

- [LBC07b] F. Lemarchand, P. Beauchêne, and F. Chinesta. Modélisation de l'apparition des contraintes résiduelles dans le procédé d'empilement par soudage et consolidation en continu de composites thermoplastiques. In *15èmes Journées Nationales sur les Composites, Marseille, 6-8 juin 2007*, 2007.
- [LBLC07] F. Lemarchand, P. Beauchêne, B. Laine, and F. Chinesta. A multi-scale method to predict residual stress appearance in the process of on-line consolidation of thermoplastic composites. *International Journal of Forming Processes*, 10(4) :471–498, 2007.
- [LD85a] A. C. Loos and P. H. Dara. In *In Proceeding of 30th National SAMPE Symposium and Exhibition*, pages 1257–1265, 1985.
- [LD85b] A.J. Lovinger and D.D. Davis. *Journal of Applied Physics*, 58(8) :2843, 1985.
- [LD86] A.J. Lovinger and D.D. Davis. *Macromolecules*, 19(7) :1861–1867, 1986.
- [LD99] P. Ladevèze and D. Dureisseix. Une nouvelle stratégie de calcul micro/macro en mécanique des structures. *Comptes Rendus à l'Académie des Sciences - Mécanique des Solides et des Structures*, 327 :1237–1244, 1999.
- [LFG+03] M.A. Lamontia, S.B. Funck, M.B. Gruber, R.D. Cope, B.J. Waibel, and N.M. Gopez. In *SAMPE Journal*, volume 39, page 30, 2003.
- [LGF+03] M. A. Lamontia, M. B. Gruber, S. B. Funck, B. J. Waibel, R. D. Cope, and A. Bruce. In *In SAMPE Europe*, Paris, April 1-3 2003.
- [LGS+92] M.A. Lamontia, M.B. Gruber, M.A. Smoot, J. Sloan, and J.W. Gillespie. In *Proceedings of the Submarine Technology Symposium, The Johns Hopkins University Applied Physics Laboratory*, 1992.
- [LGS+95] M.A. Lamontia, M.B. Gruber, M.A. Smoot, J. Sloan, and J.W. Gillespie. *International Journal of Heat Mass Transfer*, 8(1) :15, 1995.
- [LHD92] A.J. Lovinger, S.D. Hudson, and D.D. Davies. *Macromolecules*, 25(6) :1752, 1992.
- [LHHB92] M. P. Lattimer, J. K. Hobbs, M. J. Hill, and P. J. Barham. *Polymer*, 33 :3971–3973, 1992.
- [LHL00] S. Li, W. Hao, and W.K. Liu. Mesh-free simulations of shear banding in large deformation. *International Journal of solids and structures*, 37 :7183–7206, 2000.
- [LJZ95] W.K. Liu, S. Jun, and Y.F Zhang. Reproducing kernel particle methods. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 20 :1081–1106, 1995.
- [LL90a] M.C. Li and A.C. Loos. Report CCMS CCMS-90-03, Center for Composite Materials and Structures, Virginia Polytechnic Institute and State University, Blacksburg, VA, 1990.
- [LL90b] A.C. Loos and M.C. Li. Advanced materials : The challenge for the next decade. *SAMPE*, page 557, 1990.
- [LLD01] P. Ladeveze, O. Loiseau, and D. Dureisseix. A micro-macro and parallel computational strategy for highly heterogeneous structures. *Int. J. Numer. Methods Engrg*, 52 :121–138, 2001.
- [LMS+90] W.E. Lawrence, J.-A.E. Manson, J.C. Seferis, J.W. Gillespie, and R.B. Pipes. Prediction of residual stress in continuous fiber semicrystalline in thermoplastic composites : a kinetic viscoelastic approach. In *Proceedings of American Society for Composites 5th Technical Conference*, pages 401–414, Holiday Inn, 300 MAC, E. Lansing, MI, 12-14 June 1990.

-
- [LN03] P. Ladeveze and A. Nouy. On a multiscale computational strategy with time and space homogenization for structural mechanics. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 192 :3061–3087, 2003.
- [Lov83] A.J. Lovinger. *Polymer Science*, 21 :97, 1983.
- [LP86] Y Lee and R. S. Porter. *Polymer Engineering and Science*, 26(8) :633–639, 1986.
- [LP88] Y. Lee and R.S. Porter. *Macromolecules*, 21 :2770, 1988.
- [LPL89] Y. Lee, R. S. Porter, and J. S. Lin. *Macromolecules*, 22 :1756, 1989.
- [LS87] W. I. Lee and G. S. Springer. *Journal of Composite Materials*, 21 :1017–1055, 1987.
- [LS90] S.Y. Lee and G.S. Springer. *Journal of Composite Materials*, 24 :1270, 1990.
- [LS4a] W.I. Lee and G.S. Springer. *Journal of Composite Materials*, 18 :387, 1984a.
- [LS4b] W.I. Lee and G.S. Springer. *Journal of Composite Materials*, 18 :357, 1984b.
- [LS7b] W.I. Lee and G.S. Springer. *Journal of Composite Materials*, 21 :1017, 1987b.
- [LTSB7a] W.I. Lee, M.F. Talbott, G.S. Springer, and L.A. Berglund. *Journal of Reinforced Plastics and Composites*, 6 :2, 1987a.
- [Luc77] L.B. Lucy. A numerical approach to the testing of fusion process. *The astronomic journal*, 88 :1013–10248, 1977.
- [LW94] K. Lee and Y. Weistman. Optimal cool down in nonlinear thermoviscoelasticity with application to graphite/peek (apc-2) laminates. *Journal of Applied Mechanics*, 61 :367–374, 1994.
- [LWLM97] M.C. Li, J.J. Wu, A.C. Loos, and J. Morton. A plane-strain finite element model for process-induced stresses in a graphite/peek composite. *Journal of Composite Materials*, 31(3) :212–243, 1997.
- [Mag89] D.M. Maguire. *SAMPE Journal*, 25(1) :11, 1989.
- [MB96] J.M. Melenk and I. BabuSka. The partition of unity finite element method : Basic theory and applications. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 139 :289–314, 1996.
- [MKN89] A.M. Maffezzoli, J.M. Kenny, and L. Nicolais. *SAMPE*, 25(1) :35, 1989.
- [MNV89] J. Muzzy, L. Norpoth, and B. Varughese. *SAMPE Journal*, 25 :23–29, 1989.
- [Mon90] B. Monasse. *Annales de la Chimie Française*, 15 :173, 1990.
- [Moo93] D. R. Moore. *In Advanced Thermoplastic Composites*. Kausch, H. H., Ed. ; Hanser Publishers, 1993.
- [Mor54] L.B. Morgan. *Journal of Applied Chemistry*, 4 :160, 1954.
- [MP92] H. Marand and A. Prasad. *Macromolecules*, 25 :1731, 1992.
- [MR04] Y. Maday and E.M. Ronquist. The reduced basis element method : application to a thermal fin problem. *SIAM J. Sci. Comput.*, 26(1) :240–258, 2004.
- [MS91] S.C. Mantell and G.S. Springer. In *36th International SAMPE Symposium*, volume 36, page 1763, 1991.
- [MS2a] S.C. Mantell and G.S. Springer. *Journal of Composite Materials*, 26(16) :2348, 1992a.
- [MWS2b] S.C. Mantell, Q. Wang, and G.S. Springer. *Journal of Composite Materials*, 26(16) :2378, 1992b.

- [NGC92] M.N.G. Nejhad, J.W. Gillespie, and Jr. R.D. Cope. Prediction of process-induced stresses for in-situ thermoplastic filament winding of cylinders. In *Proceedings of 3rd International Conference, Computer Aided Design in Composite Material Technology*, volume 3, pages 277–295, Delaware : Newark, 1992.
- [NGC07] M.N.G. Nejhad, J.W. Gillespie, and Jr. R.D. Cope. Prediction of process-induced stresses for in-situ thermoplastic filament winding of cylinders. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 196 :2325–2337, 2007.
- [NI85] H.X. Nguyen and H. Ishida. *American Chemical Society, Division Polymer Chemistry*, 26 :273, 1985.
- [Nic05] C. Nicodeau. Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Métiers, Paris, 2005.
- [NKA73] K. Nakamura, K. Katayama, and T. Amano. *Journal of Applied Polymer Science*, 17 :1031, 1973.
- [NS92] J.D. Nam and J.C. Seferis. *Journal of Polymer Science, Part B : Polymer Physics*, 30(5) :455, 1992.
- [NTV92] B. Nayroles, G. Touzot, and P. Villon. Generalizing the finite element method : diffuse approximation and diffuse elements. *Computational mechanics*, 10 :307–318, 1992.
- [NWKA72] K. Nakamura, K. Watanabe, K. Katayama, and T. Amano. *Journal of Applied Polymer Science*, 16 :1077, 1972.
- [OBB86] R.H. Olley, D.C. Bassett, and D.J. Blundell. *Macromolecules*, 27 :344, 1986.
- [OPR04] V. Oshmyan, S. Patlazhan, and V. Rémond. *Journal of Materials Science*, 39(11) :3577, 2004.
- [Oza71] T. Ozawa. *Polymer*, 12 :150, 1971.
- [PC96] H.M. Park and D.H. Cho. The use of the karhunen-love decomposition for the modelling of distributed parameter systems. *Chem. Engineer. Science*, 51 :81–98, 1996.
- [PD59] K.S. Pister and S.B. Dong. Elastic bending of layered plates. *J. Eng. Mech. Division, ASCE*, pages 1–10, 1959.
- [PDGR4a] R. Pitchumani, R.C. Don, J.W. Gillespie, and S. Ranganathan. In *Thermal Proceedings of Materials : Thermomechanics, Controls and Composites*, volume 289, page 223. V. Prasad et al. eds., ASME-HTD, 1994a.
- [PGL97] R. Pitchumani, J. W. J. Gillespie, and M. A. Lamontia. *Journal of Composite Materials*, 31 :244–275, 1997.
- [PGM97] R. Phillips, T. Glauser, and J.-A. E. Manson. *Polymer composites*, 18 :500–508, 1997.
- [PRD⁺96] R. Pitchumani, S. Ranganathan, R.C. Don, J.W. Gillespie, and M.A. Lamontia. *International Journal of Heat Mass Transfer*, 39(9) :1883, 1996.
- [PRDG4b] R. Pitchumani, S. Ranganathan, R.C. Don, and J.W. Gillespie. In *Mechanics in Materials Proceeding and Manufacturing*, volume 194, page 71. T.J. Moon and MNG Nejhad eds., ASME-AMD, 1994b.
- [PYG99] C. M. Pistor, M. A. Yardimci, and S.I. Güçeri. *Composites :Part A*, 30 :1149–1157, 1999.

-
- [RAL95] S. Ranganathan, S.G. Advani, and M.A. Lamontia. *Journal of Composite Materials*, 29(8) :1040, 1995.
- [RAR⁺83] D. R. Rueda, F. Ania, A. Richardson, I. M. Ward, and B. Calleja. *Polymer Community*, 24 :258–260, 1983.
- [Rat03] G. Rateau. *Méthode Arlequin pour les problèmes mécaniques multi-échelles : Applications à des problèmes de jonction et de fissuration de structures élancées*. Thèse de doctorat, École Centrale - Paris, 2003.
- [Rau90] J. Rault. *Annales de la Chimie Française*, 15 :237, 1990.
- [RCCA06] D. Ryckelynck, F. Chinesta, E. Cueto, and A. Ammar. On the 'a priori' model reduction : overview and recent developments. *Archives of Computational Methods in Engineering, State of the Art Reviews*, 13(1) :91–128, 2006.
- [RG04] P. Raghavan and S. Ghosh. Concurrent multi-scale analysis of elastic composites by a multi-level computational model. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 193 :497–538, 2004.
- [RHCA05] D. Ryckelynck, L. Hermanns, F. Chinesta, and E. Alarcn. An efficient « a priori » model reduction for boundary element models. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 29 :796–801, 2005.
- [RS61] E. Reissner and Y. Stavsky. Bending and stretching of certain types of heterogeneous aeolotropic elastic plates. *J. Appl. Mech.*, pages 402–408, 1961.
- [Ryc05] D. Ryckelynck. A priori hyper-reduction method : an adaptive approach. *Journal of Computational Physics*, 202 :346–366, 2005.
- [SA07] F.O. Sonmez and M. Akbulut. *Composites : Part A*, 38 :2013–2023, 2007.
- [SBC00] T. Strouboulis, I. Babuska, and K. Copps. The design and analysis of the generalized finite element method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 181 :43–69, 2000.
- [SBM95] M. Sambridge, J. Braun, and M. McQueen. Geophysical parameterization and interpolation of irregular data using natural neighbors. *Geophys. J. Int.*, 122 :837–857, 1995.
- [SBM98] R.J.M. Smit, W.A.M. Brekelmans, and H.E.H. Meijer. Prediction of the mechanical behavior of nonlinear heterogeneous systems by multi-level finite element modeling. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 155 :181–192, 1998.
- [SCB01] T. Strouboulis, K. Copps, and I. Babuska. The generalized finite element method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 190 :4081–4193, 2001.
- [Sch81] W. Schnabel. *Polymer Degradation : Principles and Practical Applications*. Macmillan, New York, 1981.
- [Sch84] J.M. Schultz. *Polymer Engineering and Science*, 24(10) :770, 1984.
- [Sch94] M.M. Schwartz. In *ASM International*, volume 35, page 88, 1994.
- [SCMB00] N. Sukumar, D.L. Chopp, N. Moes, and T. Belytschko. Modeling holes and inclusions by level sets in the extended finite element method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 190 :6183–6200, 2000.
- [SG89] E.M. Silverman and R.A. Griese. *SAMPE Journal*, 25(5) :34, 1989.
- [SH97] F. O. Sonmez and H. T. Hahn. *Journal of Thermoplastic Composites Materials*, 10 :543–572, 1997.

- [SH7a] F.O. Sonmez and H.T. Hahn. *Journal of Thermoplastic Composite Materials*, 10 :198, 1997a.
- [SH7b] F.O. Sonmez and H.T. Hahn. *Journal of Thermoplastic Composite Materials*, 10 :381, 1997b.
- [SHA02a] F.O. Sonmez, H.T. Hahn, and M. Akbulut. Analysis of process-induced residual stresses in tape placement. *Journal of Thermoplastic Composites Materials*, 15(6) :525–544, 2002.
- [SHA02b] FO. Sonmez, HT. Hahn, and M. Akbulut. Analysis of process-induced residual stresses in tape placement. *J Thermoplast Compos Mater*, 15(6) :525–44, 2002.
- [Shi97] P.-J. Shih. Phd thesis, Virginia Polytechnic Institute and State, 1997.
- [SKNBT00] B. B. Sauer, W. G. Kampert, E. Neal Blanchard, and S. A. Threefoot. *Polymer*, 41 :1099–1108, 2000.
- [SMB98] N. Sukumar, B. Moran, and T. Belytschko. The natural elements method in solid mechanics. *Int. J. Numer. Methods Engrg.*, 43 :839–887, 1998.
- [SMBM00] N. Sukumar, N. Moes, T. Belytschko, and B. Moran. Extended finite element method for three-dimensional crack modelling. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 48 :1549–1570, 2000.
- [Soy90] N. Soyris. *Modélisation tridimensionnelle du couplage thermique en forgeage ‘a chaud*. Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, 1990.
- [SPBG95] K.V. Steiner, R. Pitchumani, B.M. Bauer, and J.W. Gillespie. In *Proceedings, 40th International SAMPE Symposium*, page 1550, 1995.
- [Spi] P. Spiteri. *Algorithmes numériques pour la résolution des grands systèmes*. Techniques de l’ingénieur, af 502 edition.
- [Suq82] P. Suquet. *Plasticité et homogénéisation*. Université Paris 6, 1982.
- [TAN00] A. Trende, B.T. Aström, and G. Nilsson. Modelling of residual stresses in compression moulded glass-mat reinforced thermoplastics. *Composites : Part A*, 31 :1241–1254, 2000.
- [TEP04] Y.M. Toso, P. Ermanni, and D. Poulidakos. *Journal of Composite Materials*, 38(2) :107–135, 2004.
- [TGML87] C. M. Tung, D. S. Gnanamuthu, R. J. Moores, and C. L. Leung. In *32nd International SAMPE Symposium*, volume 196, pages 476–483, 1987.
- [Tie03] J. Tierney. Phd thesis, University of Delaware, 2003.
- [TO04] N. Takano and Y. Okuno. Three-scale finite element analysis of heterogeneous media by asymptotic homogenization and mesh superposition methods. *International Journal of Solids and Structures*, 41 :4121–4135, 2004.
- [Tob74] M.C. Tobin. *Journal of Polymer Science, Polymer Physics Edition*, 12 :399, 1974.
- [Tob76] M.C. Tobin. *Journal of Polymer Science, Polymer Physics Edition*, 14 :2253, 1976.
- [Tob77] M.C. Tobin. *Journal of Polymer Science, Polymer Physics Edition*, 15 :2269, 1977.
- [Tod90] S.M. Todd. In *Proceedings of the 22nd International SAMPE Technical Conference*, volume 22, page 383, 1990.
- [Tos03] Y.M. Toso. Phd thesis, Swiss Federal Institute of Technology of Zurich (ETHZ), 2003.

-
- [Tsa87] S.W. Tsai. *In Composites Design, Think Composites*. 1987.
- [TSB87] M. F. Talbott, G. S. Springer, and L. A. Berglund. *Journal of Composite Materials*, 21(11) :1056–1081, 1987.
- [TTCM01] S. Tumkor, N. Turkmen, C. Chassapis, and S. Manoochchri. *International Communication in Heat and Mass Transfer*, 28(1) :49, 2001.
- [Tur50] D. Turnbull. *Journal of Chemical Physics*, 18 :198, 1950.
- [UH93] W.J. Unger and J.S. Hansen. The effect of cooling rate and annealing on residual stress development in graphite fibre reinforced peek laminates. *Journal of Composite Materials*, 27(2) :108–137, 1993.
- [Vau90] P. Vautey. *SAMPE Quarterly*, 21 :23, 1990.
- [Vau93] P. Vautey. Phd thesis, Université de technologie de Compiègne, 1993.
- [Vin99] A.-S. Vintimiglia. Phd thesis, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, 1999.
- [VS65] C.N. Velisaris and J.C. Seferis. *Polymer Engineering and Science*, A(3) :3067, 1965.
- [VS86] C. N. Velisaris and J. C. Seferis. *Polymer Engineering and Science*, 26(22) :1574–1581, 1986.
- [VS88] C. N. Velisaris and J. C. Seferis. *Polymer Engineering and Science*, 28(9) :583–591, 1988.
- [Wak84] N.T. Wakelyn. *Polymer Community*, 25 :306, 1984.
- [Wak87] N.T. Wakelyn. *Journal of Polymer Science*, 25 :25, 1987.
- [WAZ⁺92] J. Wang, M. Alvarez, W. Zhang, Z. Wu, Y. Li, and B. Chu. *Macromolecules*, 25 :6943, 1992.
- [WCY03] C.-L. Wei, M. Chen, and F.-E. Yu. *Polymer*, 44 :8185–8193, 2003.
- [WDG92] T.M. Wang, I.M. Daniel, and J.T. Gotto. Thermoviscoelastic analysis of residual stresses and warpage in composite laminates. *Journal of Composite Materials*, 26(6) :883–899, 1992.
- [WGMC90] G. Williams, S. Green, J. McAfee, and Heward C.M. In *FRC90-Proceedings, ImechE*, page 133, 1990.
- [WHKB87] A.J. Waddon, M.J. Hill, A. Keller, and D.J. Blundell. *Journal of Materials Science*, 22(5) :1773, 1987.
- [WKB92] A.J. Waddon, A. Keller, and D.J. Blundell. *Polymer*, 33(1) :27, 1992.
- [WLF55] M.L. Williams, R.F. Landel, and J.D. Ferry. *Journal of the American Chemical Society*, 77 :3701–3707, 1955.
- [Wn04] E. Wei-nan. Analysis of multiscale methods. *Journal of Computational Mathematics*, 22 :210–219, 2004.
- [WS97] C. Wang and C.T. Sun. Thermoelastic behavior of peek thermoplastic composite during cooling from forming temperatures. *Journal of Composite Materials*, 31(22) :2230–2248, 1997.
- [Wun76] B. Wunderlich. *Macromolecular Physics*, Vol.2, 1976.
- [Wun90] B. Wunderlich. *Macromolecular Physics*, Vol.3, 1990.
- [YCLR05] J. Yvonnet, F. Chinesta, P. Lorong, and D. Rynckelynck. The constrained natural element method (c-nem) for treating thermal models involving moving interfaces. *Int. J. Thermal Sci.*, 44 :559– 569, 2005.

- [YGN01] A. Yousefpour and M.N. Ghasemi Nejhada. *Journal of Thermoplastic Composite Materials*, 14 :129, 2001.
- [YH07] J. Yvonnet and Q.-C. He. The reduced model multiscale method (r3m) for the nonlinear homogenization of hyperelastic media at finite strains. *Journal of Computational Physics*, 223 :341–368, 2007.
- [YRLC04] J. Yvonnet, D. Ryckelynck, P. Lorong, and F. Chinesta. A new extension of the natural element method for non-convex and discontinuous domains : the constrained natural element method (c-nem). *Int. J. Numer. Methods Engrg.*, 60 :1451–1474, 2004.
- [Yvo04] Julien Yvonnet. *Nouvelles approches sans maillage basées sur la méthode des éléments naturels pour la simulation numérique des procédés de mise en forme*. Thèse de doctorat, École Nationale Supérieure D’Arts et Métiers - Paris, 2004.
- [ZZ92] Z. Zhang and H. Zeng. *Macromolecular Chemistry*, 193 :1745, 1992.
- [ZZ93] Z. Zhang and H. Zeng. *Polymer*, 34(7) :1551, 1993.

ETUDE DE L'APPARITION DES CONTRAINTES RESIDUELLES DANS LE PROCÉDE D'EMPILEMENT PAR SOUDAGE ET CONSOLIDATION EN CONTINU DE COMPOSITES THERMOPLASTIQUES

RESUME: Nos travaux se sont intéressés à la modélisation de l'apparition des contraintes résiduelles dans le procédé d'empilement par soudage et consolidation en continu développé dans l'industrie aéronautique. Dans les conditions standard d'élaboration, les pièces réalisées par ce type de procédé sont le siège d'importantes contraintes résiduelles. L'ignorance de leur origine et développement est un frein important à la validation industriel de ce procédé prometteur. Dans cette perspective, l'originalité de l'étude a été de développer une méthode de modélisation numérique multi-échelle et multi-physique permettant de réaliser une modélisation couplée aux échelles macroscopique et microscopique du phénomène de l'apparition des contraintes résiduelles, au cours du procédé. L'échelle microscopique, décrite à l'aide de la méthode des éléments naturels contraints (CNEM), apporte à l'échelle macroscopique les propriétés thermomécaniques homogénéisées du matériau à chaque pas de temps. L'échelle macroscopique apporte à l'échelle microscopique les conditions aux limites (températures, déplacements), qui permettent de déterminer les champs de température, de déformation et de contrainte microscopiques dans le matériau au cours du temps. Les résultats obtenus en terme de validation et d'application de la méthode au procédé d'empilement par chauffage et consolidation en continu sont satisfaisants et prometteurs. La méthode développée peut de plus être aisément appliquée à d'autres types de procédé de mise en forme des composites thermoplastiques.

Mots-clés: *modélisation numérique, méthode des éléments naturels contraints (CNEM), composite carbone/PEEK, soudage en continu, modélisation multi-échelle, méthode multi-pas en temps, homogénéisation, décomposition orthogonale propre*

STUDY OF RESIDUAL STRESS APPEARANCE IN THE PROCESS OF ON-LINE CONSOLIDATION OF THERMOPLASTIC COMPOSITES

ABSTRACT: The automated two placement process developed in the aircraft industry is an emerging technique for manufacturing continuous fiber-reinforced thermoplastic parts. Our objective is to model the appearance of residual stress in the process. The originality of the study was to develop a multi-scale and multi-physics numerical modeling allowing a coupling between the two scales in order to model the residual stress appearance during the process. The microscopic level, which is described by the constrained natural elements method (CNEM), provides the macroscopic scale the thermomechanical properties of the homogenized material at each time step. The macroscopic scale provides the microscopic scale the boundary conditions (temperatures, displacements), which allow to determine the temperature, strain and stress microscopic fields during the process. The results in terms of validation and implementation of the method to the automated two placement process are satisfactory and promising. The developed numerical method can moreover be easily applied to other types of forming processes of thermoplastic composites.

Keywords: *numerical modeling, constrained natural elements method (CNEM), carbone/PEEK composite, continuous welding, multi-scale modeling, multi-step method in time, homogenization, proper orthogonal decomposition*