



Simulation numérique de l'orientation de fibres en injection de thermoplastique renforcé

Abla Redjeb

► To cite this version:

Abla Redjeb. Simulation numérique de l'orientation de fibres en injection de thermoplastique renforcé. Mécanique [physics.med-ph]. École Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2007. Français. NNT : 2007ENMP1545 . tel-00332719

HAL Id: tel-00332719

<https://pastel.hal.science/tel-00332719>

Submitted on 21 Oct 2008

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

N° attribué par la bibliothèque

--	--	--	--	--	--	--	--	--	--

THÈSE

à présenter et soutenir publiquement par

Abla REDJEB

le 04 décembre 2007

en vue de l'obtention du titre de

DOCTEUR

en

MÉCANIQUE NUMÉRIQUE

SIMULATION NUMÉRIQUE DE L'ORIENTATION DE FIBRES EN INJECTION DE THERMOPLASTIQUE RENFORCÉ

Directeurs de Thèse : Thierry COUPEZ, Patrice LAURE, Michel VINCENT

Jury

Docteur	Gilles AUSIAS	Rapporteur
Professeur	Arnaud POITOU	Rapporteur
Professeur	Gilles REGNIER	Examineur
Docteur	Luisa SILVA	Examineur
Docteur	Philippe LE BOT	Examineur

Remerciements

Ces travaux ont été effectués au Centre de Mise en Forme des Matériaux de l'Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris à Sophia Antipolis (CEMEF, UMR 7635).

Je tiens à exprimer ma profonde gratitude à Messieurs Thierry Coupez, Patrice Laure et Michel Vincent, mes directeurs de thèse, pour leurs intérêts pour mon travail, leur soutien et leur contribution aux travaux de recherche exposés dans ce manuscrit.

Je tiens à remercier également Jean François Agassant pour ses conseils et l'enthousiasme sans faille dont il a toujours fait preuve à l'égard de mes travaux. Un grand merci aussi à Luisa Silva pour son apport scientifique et humain pendant ces années au Cemef.

Mes remerciements vont bien naturellement aux autres membres du jury, Messieurs Gilles Ausias, Arnaud Poitou ainsi que Gilles Regnier pour leur examen du manuscrit et leur remarques avisées.

Cette thèse a été effectuée dans le cadre du Consortium Rem3D qui regroupe les sociétés Atofina, Plastic Omnium Automotive Exterior et Schneider Electric. Je les remercie pour leur soutien scientifique, technique et financier. Merci en particulier à Philippe Le Bot, Plastic Omnium, pour son suivi et son soutien sans faille pendant toutes ces années. Merci également à Cécile Venet, Schneider Electric et Jocelyn Mauffrey, Atofina, pour leurs conseils et leur enthousiasme à l'égard de mes travaux.

Je ne saurai oublier la disponibilité et la bonne humeur de l'ensemble des permanents du Cemef pendant toutes ces années. Qu'ils en soient remerciés. Merci en particulier à Michel Yves pour ces moments partagés lors de nos footing au parc de la Valmasque. Un grand merci aussi à Marie Françoise pour sa disponibilité et sa grande gentillesse.

Une pensée spéciale à mes amis et à ma promotion pour toutes ces années passées ensemble dans les Alpes Maritimes. Un merci particulier à Marianne et Carole qui ont largement contribué à rendre très agréable la vie au laboratoire.

Ce qui revient à mon mari Gérard ainsi qu'à toute notre famille va bien au delà des remerciements ou de la gratitude.

A mes parents,

A Gérard.

Table des matières

1	Introduction générale	1
1.1	Motivation industrielle	1
1.1.1	Qu'est ce qu'un matériau composite ?	1
1.1.2	Fabrication du polymère chargé	2
1.1.3	Procédé de mise en forme	3
	a) Principes du procédé d'injection des thermoplastiques	4
	b) Application industrielle	5
1.1.4	Problématique industrielle	6
1.2	Objectif de l'étude et démarche	7
1.2.1	Cadre des travaux	7
1.2.2	Contexte scientifique	7
1.2.3	Démarche adoptée	7
2	L'orientation des fibres	9
2.1	Les mécanismes d'orientation en injection	11
2.1.1	Les mécanismes d'orientation	11
	a) Orientation d'une fibre en écoulement de cisaillement simple	11
	b) Orientation d'une fibre en écoulement élongationnel	12
	c) Mécanismes d'orientation en injection	12
	d) Conclusion	14
2.1.2	Analyse des paramètres influençant l'orientation des fibres	15
	a) Influence des principaux paramètres d'injection	15
	b) Influence du renfort et de la matrice	16
	c) Influence de la géométrie du moule	16
2.2	Description des outils mathématiques	17
2.2.1	Les régimes de concentration	17
2.2.2	Représentation vectorielle de l'orientation d'une fibre	19
2.2.3	Fonction de distribution de l'orientation	20
2.2.4	Introduction aux tenseurs d'orientation	21

a)	Interprétation physique des composantes du tenseur d'ordre 2 .	22
b)	Représentation ellipsoïdale de l'état d'orientation	23
c)	Perte d'information engendrée par l'utilisation d'un tenseur d'orientation	23
2.3	Équation d'évolution macroscopique d'une particule	24
2.3.1	Équation d'évolution de Jeffery	24
2.3.2	Prise en compte du mouvement brownien	25
2.3.3	Équation de Jeffery et tenseurs d'orientation	25
2.3.4	Solution analytique du modèle de Jeffery	26
a)	Cas d'un écoulement de cisaillement simple	26
b)	Cas d'un écoulement élongationnel	30
2.4	Évolution macroscopique d'une population de fibres	31
2.4.1	Le modèle de Folgar et Tucker	31
2.4.2	Les équations de fermeture	31
a)	Approximations simples	32
b)	Approximations construites par interpolation	33
c)	Approximations contenant des coefficients ajustables	33
d)	Performances des équations de fermeture	37
e)	Synthèse et conclusion	38
2.4.3	Complexité de la détermination d'un coefficient d'interaction	39
a)	Signification du coefficient d'interaction	40
b)	Influence du coefficient d'interaction	41
c)	Détermination d'un coefficient d'interaction	42
2.4.4	Remarque relative au rapport de forme des particules	46
2.5	Autres modèles macroscopiques	47
2.5.1	Approche micromécanique : modèle de Koch et Shaqfeh	47
2.5.2	Évolution de l'orientation dans un milieu isotrope transverse	47
a)	Modèle proposé par Meslin	47
b)	Rôle du paramètre λ	48
c)	Comparaison des modèles	49
2.5.3	Analogie avec le modèle viscoélastique PomPom	50
2.6	Conclusion et choix d'un modèle	51
3	Couplage rhéologie orientation	55
3.1	Quelques généralités sur les lois de comportement pour les matériaux chargés	57
3.1.1	L'homogénéisation spatiale	57
3.1.2	Hypothèses utilisées pour la mise en place de lois de comportement .	59

3.1.3	Une loi de comportement générique	59
3.1.4	Caractère rhéofluidifiant et milieux concentrés ?	60
3.2	Les modèles basés sur la théorie des corps élancés	61
3.2.1	Le régime de concentration dilué	61
3.2.2	Le régime de concentration semi-dilué	61
	a) Une première approche : l'étude de Batchelor	61
	b) Le modèle de Dinh et Armstrong	62
	c) Une amélioration du modèle : l'analyse de Fredrickson et Shaqfeh	64
	d) Les travaux de Mackaplow et Shaqfeh	65
3.2.3	Utilisation d'un facteur correctif	65
3.3	Prise en compte du caractère rhéofluidifiant du polymère	67
3.3.1	Le modèle rhéologique de Souloumiac	67
	a) Expression générale du tenseur des contraintes	67
	b) Limitations du modèle	68
3.3.2	Vers le régime concentré : le modèle de Thomasset	68
	a) Description du modèle	68
	b) La loi de comportement	69
	c) Identification des paramètres rhéologiques	69
3.4	D'autres théories	71
3.4.1	Le cas des particules sphéroïdales	71
	a) Le régime de concentration dilué	71
	b) Un paradoxe de la théorie	71
	c) Un modèle pour les fluides anisotropes transverses : vers un régime semi-dilué	72
3.4.2	La théorie moléculaire de Doi et Edwards	73
	a) Une extension de la théorie moléculaire : les travaux de Petrie	74
	b) Le modèle de Fan et al.	74
3.4.3	Les suspensions viscoélastiques	75
	a) Travaux d'Ait-Kadi et <i>al.</i>	75
	b) Travaux de Ramazani et <i>al.</i>	76
3.5	Synthèse et discussion	76
3.5.1	Comparaison de certains modèles rhéologiques	76
3.5.2	En synthèse	78
3.6	Équation de fermeture et thermodynamique	80
3.6.1	Stabilité thermodynamique	80
3.6.2	Stabilité énergétique	80
3.6.3	Conclusion de l'étude	81

a)	Équations de fermeture compatibles avec le second principe . . .	81
b)	Équations de fermeture non compatibles	81
3.7	Conclusion	82
4	Méthodes Numériques	85
4.1	État de l'art	87
4.1.1	Les méthodes numériques	87
a)	Méthodes éléments finis mixtes pour le problème mécanique . .	87
b)	Méthodes stabilisées et méthodes mixtes pour le problème en orientation	88
c)	Conclusion	90
4.1.2	La simulation numérique du couplage rhéologie-orientation	91
a)	Écoulement en extrusion	91
b)	Écoulement avec des zones de recirculation	92
c)	Écoulement en injection	93
d)	Conclusion	95
4.2	Le problème mathématique	95
4.2.1	Les équations mises en jeu	95
4.2.2	Les conditions aux limites	96
4.2.3	Approche numérique	97
4.3	Méthode éléments finis mixte appliquée au problème mécanique	98
4.3.1	La formulation faible continue	98
4.3.2	La formulation faible discrète	101
4.3.3	La formulation algébrique	102
4.4	Méthode TGD espace-temps appliquée à l'orientation	103
4.4.1	Méthode temporelle pour la résolution du problème instationnaire .	104
a)	L'élément fini espace-temps	104
b)	Le maillage du domaine spatio-temporel	104
4.4.2	La formulation faible discrète	105
a)	L'interpolation sur l'élément fini spatio-temporel	105
b)	La formulation variationnelle du problème	106
4.4.3	Discrétisation des termes constituant l'équation d'orientation	106
a)	Discrétisation du terme de dérivée permanent	106
b)	Discrétisation du terme de convection	108
c)	Discrétisation des termes linéaires	108
d)	Linéarisation des termes non linéaires et discrétisation des termes restants	110

e)	Discrétisation du second membre	111
4.4.4	Écriture matricielle du problème d'orientation	111
4.5	Algorithme de résolution	112
4.5.1	Couplage orientation / cinématique en extrusion	112
a)	Calcul mécanique	112
b)	Détermination de l'orientation	113
c)	Normalisation du tenseur d'orientation	114
4.5.2	Couplage orientation / cinématique en injection	115
a)	Évolution de la surface libre	115
b)	Résolution du problème dans le cadre de l'injection	116
4.6	Conclusion	118
5	Orientation dans des géométries simples	119
5.1	Introduction	121
5.1.1	Le logiciel REM3D	121
5.1.2	Les conditions aux limites	122
5.1.3	Les calculs effectués	122
5.2	Validation du module calcul d'orientation sur des solutions analytiques . . .	124
5.2.1	Écoulement de cisaillement simple : écoulement dit de «Couette» . .	124
a)	Cas des rapports de forme des fibres finis	124
b)	Cas d'un rapport de forme des fibres infini	126
5.2.2	Écoulement élongationnel	127
5.3	L'écoulement de Poiseuille	128
5.3.1	Le Poiseuille 2D en extrusion	128
a)	La géométrie et les paramètres du calcul	128
b)	Effet de la rhéologie de la matrice	128
c)	Influence du coefficient d'interaction	132
d)	Le rapport de forme des fibres	134
5.3.2	Écoulement de Poiseuille 3D en injection	135
a)	La géométrie et les paramètres du calcul	135
b)	Influence du maillage	137
c)	Influence de la relation de fermeture	139
5.4	La contraction plane 2D : le rôle du couplage	139
5.5	Injection d'un moule 3D : formation des lignes de soudure	142
5.5.1	Géométrie et paramètres de calculs	142
5.5.2	Résultats numériques	143
5.6	La géométrie de type contraction-expansion	146

5.6.1	Géométrie et conditions initiales	146
5.6.2	Résultats pour un écoulement en extrusion	147
a)	Effet de la rhéologie de la matrice	148
b)	Influence du coefficient d'interaction	150
c)	Le rôle du couplage rhéologie-orientation	152
5.6.3	Écoulement d'injection	155
a)	Le rôle de l'effet fontaine	155
b)	Le rôle du couplage	157
c)	L'orientation initiale des fibres	161
5.7	Conclusion	164
6	Vers une application industrielle	165
6.1	Un premier cas de comparaison : la plaque seuil	167
6.1.1	Géométrie du seuil et maillage	167
6.1.2	Matériau utilisé et condition d'injection	167
6.1.3	Zones d'analyses	169
6.1.4	Résultats numériques	170
6.1.5	Corrélation du code de calcul avec l'expérience	174
6.2	Application à une pièce automobile : la traverse nervurée	178
6.2.1	Présentation du support de l'étude	178
a)	Le maillage	178
b)	Le matériau	179
c)	Les conditions initiales et aux limites	180
d)	La plateforme de calcul et temps cpu	180
6.2.2	Résultats de la simulation numérique	181
a)	Dynamique de remplissage de la traverse	181
b)	L'orientation des fibres	182
c)	Position d'une ligne de soudure	186
6.2.3	Corrélation du code de calcul à l'expérience	190
a)	Mesure d'orientation de fibres	190
b)	Comparaison au code de calcul	193
6.3	Autres études	196
6.4	Conclusion et perspectives	197
	Conclusion et perspectives	199
	Annexe, compléments	207

Table des figures

1.1	Granulés de fibres longues	2
1.2	Procédé de pultrusion	3
1.3	Cycle d'injection : les différentes phases (source : Arkéma)	4
1.4	Application industrielle des thermoplastiques chargés de fibres	5
1.5	Bloc avant d'une BMW fabriqué en thermoplastique chargé de fibres	6
2.1	Mouvement d'une fibre isolée en suspension dans un fluide Newtonien.	12
2.2	Mouvement d'une fibre dans un écoulement élongationnel.	12
2.3	Orientation des particules dans un disque injecté par le centre.	13
2.4	Modèle d'écoulement au front d'avancée de matière (effet fontaine)	14
2.5	Régimes de concentration en fonction du facteur de forme	18
2.6	Définition des angles et du vecteur $\underline{p}$	19
2.7	Exemple de tenseurs d'orientation $\underline{a}_2$ pour différentes orientations	22
2.8	Représentation ellipsoïdale du tenseur $\underline{a}_2$ [12]	23
2.9	Écoulement de cisaillement.	27
2.10	Variation de l'angle ϕ dans un écoulement de type cisaillement simple.	28
2.11	Comparaison des différentes équations de fermeture	37
2.12	Comparaison des différentes équations de fermeture	38
2.13	Influence du paramètre C_I sur la fonction de distribution des orientations pour un écoulement de cisaillement [63]	40
2.14	Variations des composantes a_{11} vs C_I pour un écoulement de cisaillement $\underline{u} = (\dot{\gamma}z, 0, 0)$	42
2.15	Variations des composantes a_{13} vs C_I pour un écoulement de cisaillement $\underline{u} = (\dot{\gamma}z, 0, 0)$	43
2.16	Variations des composantes a_{33} vs C_I pour un écoulement de cisaillement $\underline{u} = (\dot{\gamma}z, 0, 0)$	44
2.17	Coefficient d'interaction en fonction du produit $\Phi\beta$ (fraction volumique de fibres $\times$ rapport de forme). Valeurs obtenues par Phan-Thien et <i>al</i> pour différents β par simulation directe [107] et par Folgar et Tucker : essais sur huile silicone	46

2.18	Variation du paramètre λ en fonction du facteur de forme β , pour différentes concentrations [100].	49
2.19	Influence du paramètre λ à t et $\dot{\gamma}$ fixés sur la fonction de distribution de probabilité des orientations, dans un écoulement de cisaillement simple. . .	50
2.20	Modèle Pom-Pom	50
3.1	Fibre « test » de Dinh et Armstrong.	62
3.2	Paramètre rhéologique N_p en fonction du facteur de forme des particules et de la fraction volumique de fibres [54].	65
3.3	Facteur correctif utilisé dans la théorie des corps élancés	66
3.4	Schématisation d'une fibre.	67
3.5	Évolution du rapport N_p/N_s en fonction de facteur de forme.	72
3.6	comparaison des modèles pour $\beta = 5$	76
3.7	comparaison des modèles pour $\beta = 20$	77
3.8	comparaison des modèles pour $\beta = 350$	77
4.1	Représentation des différentes frontières et des différents domaines	97
4.2	L'élément fini mixte P_1^+/P_1	100
4.3	Le maillage Ω^{st} et l'élément spatio-temporel K^i (cas 2D) [Batkam [24]]. . . .	105
4.4	Organigramme du programme de calcul dans le cadre de l'extrusion	113
4.5	Organigramme du programme de calcul sous Rem3d ®	117
5.1	Organigramme simplifié du code de calcul REM3D®	121
5.2	Comparaison d'une solution analytique et numérique pour un écoulement de cisaillement simple : $\dot{\gamma} = 10 \text{ s}^{-1}$; $\beta = 10$ et $\lambda = .980$	125
5.3	Comparaison d'une solution analytique et numérique pour un écoulement de cisaillement simple ($\dot{\gamma} = 10 \text{ s}^{-1}$) et un rapport de forme des fibres infini ($\lambda = 1$); $\delta t = 5 \cdot 10^{-2} \text{ s}$	126
5.4	Comparaison d'une solution analytique et numérique pour un écoulement d'élongation pure ($\dot{\alpha} = 10$)	127
5.5	Maillage et géométrie utilisé	128
5.6	Composantes du tenseur d'orientation pour un écoulement de poiseuille, une orientation initiale isotrope et $m = .75$	129
5.7	Influence de l'indice de pseudoplasticité m sur la composante a_{xx} du tenseur d'orientation pour $x = 5 \text{ cm}$	130
5.8	Influence de l'indice de pseudoplasticité m sur la première composante du champ de vitesse à $x = 5 \text{ cm}$	131
5.9	Influence de l'indice de pseudoplasticité m sur la composante a_{yy} du tenseur d'orientation à $x = 5 \text{ cm}$	131
5.10	Influence de l'indice de pseudoplasticité m sur la composante a_{zz} du tenseur d'orientation à $x = 5 \text{ cm}$	132

5.11	Influence du coefficient d'interaction sur l'orientation des fibres pour un écoulement de Poiseuille.	133
5.12	Influence du coefficient d'interaction C_I sur la composante a_{xx} du tenseur d'orientation à $x = 5 \text{ cm}$	133
5.13	Influence du rapport de forme des fibres β sur la composante a_{xx} du tenseur d'orientation	134
5.14	Géométrie de la plaque et position des échantillons pour les mesures expérimentales	135
5.15	Visualisation du maillage utilisé	136
5.16	Influence du maillage sur la composante a_{xx} du tenseur d'orientation aux points P_1 et P_2	137
5.17	Influence du maillage sur la composante a_{xx} du tenseur d'orientation aux points P_3 et P_4	138
5.18	Lignes de courant dans une contraction : A sans fibres et B avec fibres. . . .	140
5.19	Maillage et géométrie de la pièce	140
5.20	Lignes de courant à travers une contraction avec et sans couplage.	141
5.21	Orientation des fibres au voisinage de la recirculation	141
5.22	Maillage et géométrie de la pièce	142
5.23	Orientation des fibres en début de remplissage	143
5.24	Composante a_{xx} du tenseur d'orientation à différents instants de remplissage	144
5.25	Composante a_{xx} du tenseur d'orientation en fin de remplissage	145
5.26	Composante a_{xx} du tenseur d'orientation en fin de remplissage dans toute la pièce	145
5.27	Géométrie de la contraction-expansion	146
5.28	Isovaleur du champ de vitesse pour un calcul en extrusion : a) vitesse horizontale v_x ; b) vitesse verticale v_y	147
5.29	Isovaleur du tenseur orientation (rouge = 1, bleu = 0) : a) composante a_{xx} ; b) composante a_{yy}	147
5.30	Influence de l'indice de pseudoplasticité m sur la composante a_{xx} du tenseur d'orientation et sur la composante v_x du champ de vitesse pour $x = 21, 22.5, 31 \text{ mm}$ et $z = 4 \text{ mm}$	149
5.31	Influence du coefficient d'interaction C_I sur la composante a_{xx} du tenseur d'orientation pour $x = 21, 22.5, 31 \text{ mm}$ et $z = 4 \text{ mm}$	151
5.32	Évolution de l'orientation des fibres pour différentes valeurs de N_p	152
5.33	Influence de la valeur de N_p sur la composante a_{xx} du tenseur d'orientation et sur la composante v_x du champ de vitesse pour $x = 21, 22.5, 31 \text{ mm}$ et $z = 4 \text{ mm}$	154
5.34	Remplissage 3d d'une géométrie de type contraction-expansion et évolution de l'orientation de fibres	156
5.35	Orientation 3d au bout de 29 % de remplissage : effet fontaine	156

5.36	Influence du couplage sur l'évolution de la surface libre	157
5.37	Orientation des fibres pour différents instants de remplissage	159
5.38	Composante a_{xx} du tenseur d'orientation le long du chemin A à la fin du remplissage : comparaison entre le modèle couplé et découplé	160
5.39	Composante a_{xx} du tenseur d'orientation le long du chemin B	161
5.40	Influence de l'orientation initiale sur les composantes principales du tenseur d'orientation - Calcul couplé $N_p=50$, $N_s=0.08$	162
6.1	Photo de l'empreinte plaque et de son alimentation	167
6.2	Maille de la plaque et du seuil d'injection	168
6.3	Géométrie du seuil et position des zones d'analyse	169
6.4	Observations expérimentales dans le plan (x, y) (a) dans zone d'entrée divergente et (b) dans la zone de jonction avec la plaque de 5 mm.	170
6.5	Ellipsoïdes représentant l'orientation des fibres dans le plan (x, y) de la zone d'entrée du moule. Calculs effectués sans couplage	171
6.6	Isovaleur de la composante a_{xx} dans le plan (x, y)	171
6.7	Isovaleur de la composante a_{xx} dans l'épaisseur de la plaque	172
6.8	Isovaleurs de a_{xx} - coupe dans le plan (x, z) en $y = 0$	173
6.9	Comparaison des champs de pression obtenus par un calcul découplé et un calcul couplé	173
6.10	Comparaison des champs de vitesse obtenus par un calcul découplé et un calcul couplé : composante V_x	174
6.11	Comparaison des champs de vitesse obtenus par un calcul découplé et un calcul couplé : composante V_y	174
6.12	Comparaison des profils d'orientation dans la zone d'analyse A	175
6.13	Comparaison des profils d'orientation dans la zone d'analyse B	176
6.14	Comparaison des profils d'orientation dans la zone d'analyse C	176
6.15	Comparaison des profils d'orientation dans la zone d'analyse D	177
6.16	Photographie de la pièce réelle	178
6.17	Maillage d'une partie de la géométrie	179
6.18	Dynamique de remplissage de la traverse à différents instants	182
6.19	Orientation des fibres dans la carotte d'injection	183
6.20	Composante a_{xx} dans le plan (x, y) et (x, z) , plan médian	183
6.21	Composante a_{yy} dans le plan (x, y) et (x, z)	184
6.22	Composante a_{xx} suivant différentes coupes	184
6.23	Composante a_{xx} suivant une coupe passant par le mi-épaisseur des nervures	185
6.24	Composante a_{xx} suivant différentes coupes	186
6.25	Schéma de la traverse nervurée et positionnement des lignes de soudure)	187
6.26	Photographie du flanc de la traverse (injection par la droite)	187

6.27	Aggrandissement au voisinage de la ligne de soudure	188
6.28	Composantes a_{xx} et a_{yy} du tenseur d'orientation	189
6.29	Zone de prélèvement des échantillons	190
6.30	Évolution de l'orientation des fibres en zone A	191
6.31	Évolution de l'orientation des fibres en zone B	192
6.32	Évolution de l'orientation des fibres en zone C	192
6.33	Évolution de la composante a_{xx} du tenseur d'orientation dans l'épaisseur de la pièce pour les différentes zones	193
6.34	Résultats numériques : évolution de la composante a_{xx} dans les zones A, B, C	194
6.35	Corrélation : évolution de la composante a_{xx} en zone A	194
6.36	Corrélation : évolution de la composante a_{xx} en zone B	195
6.37	Corrélation : évolution de la composante a_{xx} en zone C	195
6.38	Domaine de tous les état d'orientation physiquement possible représenté par le triangle UTB (Advani et Tucker [2]).	207
6.39	Composantes du tenseur d'orientation en écoulement de cisaillement simple pour $C_I = 0.001$ - Performances des différentes approximations de ferme- ture : DFC : fonction de distribution de l'orientation (solution exacte), NAT : approximation naturelle, ORT, ORF, ORL : approximations orthotropes . .	209

Notations et symboles

De manière générale, les tenseurs sont soulignés de deux traits ($\underline{\underline{\sigma}}$), les vecteurs sont soulignés d'un trait ($\underline{u}$) et les autres variables sont des scalaires.

Grandeurs et propriétés physiques

D	: diamètre d'une fibre,
L	: longueur d'une fibre,
θ	: angle d'orientation dans le plan (y, z) ,
φ	: angle d'orientation dans le plan (x, y) ,
β	: rapport de forme d'une particule,
Ψ	: fonction de distribution de l'orientation,
V	: Volume élémentaire représentatif,
T	: période de rotation d'une particule,
n	: nombre de particules par unité de volume,
ϕ	: concentration de particules,
η	: viscosité,
η_0	: viscosité au plateau newtonien (ou consistance selon la loi),
m	: indice de pseudoplasticité,
$a_T(T)$	: facteur de glissement (loi d'Arrhénius),
λ	: temps caractéristique (loi de Carreau),
a	: transition fluide newtonien–fluide pseudoplastique (loi de Carreau–Yasuda),
η_I	: facteur rhéologique,
N_s	: facteur rhéologique,
N_p	: facteur rhéologique.

Les scalaires

t	: temps absolu,
x, y, z	: coordonnées cartésiennes d'un point de l'espace,
$\dot{\gamma}$	: taux de cisaillement,
$\dot{\alpha}$	: taux d'élongation,
p	: pression,
ρ	: masse volumique,
h	: taille de maille,
C_I	: coefficient d'interaction,
$F(\underline{x}, t)$	: fonction de présence (aussi appelée de pseudo-concentration).

Les vecteurs

$\underline{u} = (u, v, w)$	: vecteur vitesse,
$\underline{b}$	: vecteur vitesse sur la bulle,
$\underline{p}$	: vecteur unitaire porté par l'axe principal de la fibre,
$\underline{x} = (x, y, z)$	: coordonnées cartésiennes,
$\underline{f}$	: densité massique des forces extérieures,
$\underline{q}$	: flux de chaleur,
$\underline{n}$	: vecteur normal.

Les tenseurs

$\underline{\underline{\epsilon}}$	: tenseur des vitesses de déformation,
$\underline{\underline{\Omega}}$	: tenseur de rotation,
$\underline{\underline{E}}$	: gradient généralisé,
$\underline{\underline{\sigma}}$	: tenseur des contraintes macroscopique,
$\underline{\underline{\tau}}$	: tenseur des contraintes macroscopique,
$\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}$	: tenseur des taux de déformation,
$\underline{\underline{a}}_2$	: tenseur d'orientation d'ordre 2,
$\underline{\underline{a}}_4$	: tenseur d'orientation d'ordre 4,
$\underline{\underline{I}}_d$	: tenseur identité.

Modélisation Numérique et éléments finis

Ensembles et domaines

Ω	: Espace de résolution,
Ω_i	: partie de Ω occupée par le domaine i ,
$\partial\Omega$	: frontière de l'espace de résolution
K	: élément de discrétisation (tétraèdre en 3D),
F	: face d'un élément,
∂K	: frontière de l'élément K .

Espaces mathématiques

$L^2(\Omega)$	: espace de Lebesgue des fonctions carrées intégrables,
$\mathcal{H}^1(\Omega)$	: espace de Sobolev,
$\mathcal{V}$	: espace des vitesses,
$\mathcal{P}$	: espace des pressions,
$\mathcal{B}$	: espace de la vitesse <i>bulle</i> ,
$\mathcal{V}_h$	: espace de discrétisation des vitesses,
$\mathcal{P}_h$	: espace de discrétisation des pressions,
$\mathcal{B}_h$	: espace de discrétisation de la vitesse <i>bulle</i> .

Les opérateurs

- ∇ : gradient,
- $\nabla \cdot$: divergence,
- Δ : laplacien,
- d : dérivée partielle ou convective,
- ∂ : dérivée partielle.

Chapitre 1

Introduction générale

LA plasturgie est une industrie en progression constante malgré les effets de cycle dus au manque de stabilité des matières premières et la pression très forte qu'exerce en aval les marchés clients qui sont les grands donneurs d'ordre. Cette industrie assez jeune s'est surtout développée après la seconde guerre mondiale. Toutefois, suivant les différentes branches professionnelles, il existe quelques différences d'évolution. Ainsi l'emballage plastique, les éléments pour le bâtiment ou encore les pièces techniques telles que les matériaux renforcés (ou non) ont connu en 2000 une progression soutenue malgré la hausse des matières premières. Seuls quelques produits de consommation divers subissent depuis quelques années la concurrence des pays à faible coût de main d'oeuvre.

Pour les matériaux composites (matériaux renforcés), le positionnement du marché en France est plutôt sur le haut de gamme en raison du poids important de l'aéronautique (22% en valeur) juste derrière l'automobile (31%) mais devant la construction (14%) et l'électricité (10%). Ces quatre marchés représentent 75% de l'utilisation des composites en France.

1.1 Motivation industrielle

Le développement et les changements rapides des produits, des pratiques technologiques et industrielles sont souvent accompagnés par de nouvelles générations de matériaux. Parmi ces matériaux, les composites ne cessent d'évoluer vers des produits qui sont, soit le moins coûteux possible, soit le plus performant, ou mieux les deux à la fois...

Les matériaux composites s'offrent à nous comme des matériaux légers, aux performances mécaniques remarquables et se substituent de plus en plus aux matériaux métalliques par exemple. Les rapports résistance/poids élevés et le fluage faible contribuent à donner des pièces pouvant supporter des charges lourdes sur de longues périodes. Mais avant toute chose qu'est ce qu'un matériau composite ?

1.1.1 Qu'est ce qu'un matériau composite ?

Classiquement, les matériaux composites sont définis comme la constitution de l'assemblage de deux matériaux de nature différente, se complétant et permettant d'aboutir à un matériau dont l'ensemble des performances est supérieur à celui des composants pris

séparément. D'une manière générale on distingue deux phases :

- une phase continue appelée la matrice,
- une phase discontinue appelée le renfort ou matériau renforçant.

Les matériaux qui nous concernent sont les composites à matrice organique (thermoplastique) et plus précisément les matériaux composites à fibres de verre. Celles-ci se présentent sous forme discontinue, ce sont des fibres courtes (quelques centaines de μm pour 15 μm de diamètre) ou longues (quelques millimètres). Les verres utilisés présentent une résistance à la traction élevée, ainsi qu'un point de ramolissement supérieur à 800°C. La matrice est considérée comme le constituant qui enrobe les fibres. Ces dernières agissent comme un renfort dont l'orientation détermine l'anisotropie du matériau. Cet aspect constitue une des caractéristiques fondamentales des matériaux composites.

Nous pouvons en outre considérer deux grandes classes de matrice polymère : les matrices thermoplastiques et les thermodurcissables. Actuellement, l'utilisation de matrices thermoplastiques semble subir un essor plus conséquent, grâce à une réduction notable du cycle de mise en forme, mais aussi grâce à une meilleure recyclabilité du produit fini. Cependant bien que connaissant une progression plus lente, les thermodurcissables continuent d'occuper une part significative du marché.

1.1.2 Fabrication du polymère chargé

Il existe deux grandes classes de granulés de fibres :

- les granulés à fibres courtes : fabrication par compoundage (mélange extrudeuse) puis granulation,
- les granulés à fibres longues comme le montre la figure (1.1) : fabrication par pultrusion (imprégnation en continu d'une fibre), refroidissement et découpe à environ 10 mm.



FIG. 1.1 – Granulés de fibres longues

Le principe de base de fabrication du composite thermoplastique chargé de fibres longues est, comme pour la production des granules thermoplastiques, l'extrusion. Ce procédé de fabrication appelé pultrusion est un procédé de fabrication automatisé comme le montre la figure (1.2).

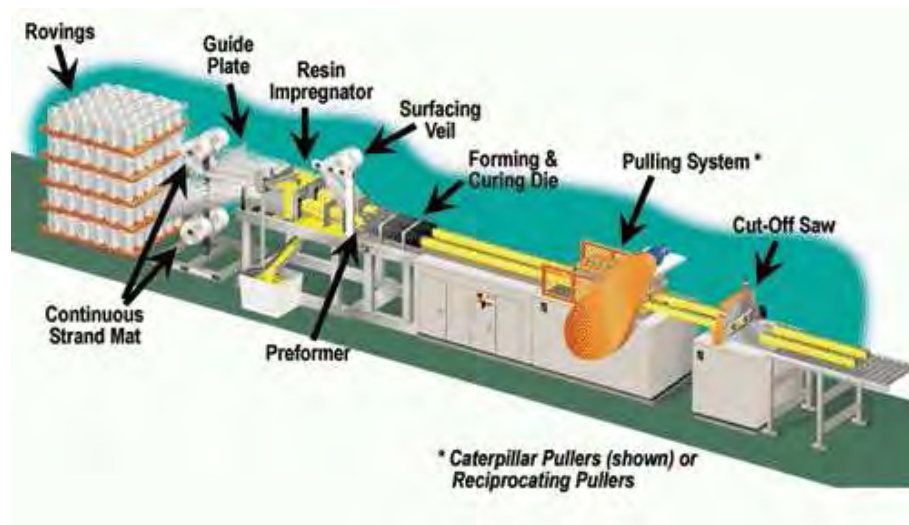


FIG. 1.2 – Procédé de pultrusion

Il permet de produire des profilés, renforcés par des fils de verre continus. Les renforts sont imprégnés de résine thermodurcissable, puis tractés dans une filière chaude où ils sont mis en forme. Le profilé obtenu est ensuite coupé à la longueur désirée. Le procédé de pultrusion possède deux caractéristiques techniques importantes :

- une section de granulés constante,
- de grandes propriétés mécaniques.

On obtient ainsi un excellent produit, de composition homogène qui pourra aisément être refondu lors de la plastification précédant l'injection. L'avantage de ce procédé est la bonne imprégnation des fibres par le polymère thermoplastique.

Les thermoplastiques renforcés par des fibres longues présentent certains avantages vis à vis de ceux renforcés par des fibres courtes. Les propriétés mécaniques et la résistance aux chocs s'en trouvent améliorées. Le gain sur produit fini dépend de plus de la maîtrise de leur mise en oeuvre par injection. On voit ainsi des actions de recherche engagées ayant pour objectif la connaissance de leur qualité intrinsèque (caractérisation, prévision de l'orientation des fibres, etc.) aboutissant à de nouveaux outils de simulation et apportant un véritable saut technologique à ces matériaux.

1.1.3 Procédé de mise en forme

L'objectif étant d'augmenter à la fois la productivité mais également la qualité mécanique des pièces, les matériaux composites qui nous intéressent sont obtenus par un procédé d'injection de la matrice polymère et de son renfort. Ce procédé permet d'obtenir des pièces de tailles et de complexités géométriques variées et reste un procédé économique, bien adapté aux grandes séries, donnant des tolérances dimensionnelles généralement suffisantes pour s'affranchir des opérations d'usinage. Ces matériaux composites présentent ainsi l'avantage de pouvoir être mis en forme par les mêmes procédés que les thermoplastiques non chargées et ceci sans grande modification des outillages.

Toutefois, dans le cadre des thermoplastiques fibres longues le procédé d'injection attend de gros progrès d'une meilleure maîtrise des caractéristiques dimensionnelles des produits qui ne s'obtiendront qu'au travers d'une meilleure caractérisation des matériaux et d'un développement des outils de simulation.

a) Principes du procédé d'injection des thermoplastiques

Le moulage par injection de polymères chargés de fibres ne diffère du procédé classique d'injection que par le produit injecté. Le moulage par injection consiste à injecter à l'aide d'une vis, un polymère fondu dans une cavité dont les parois sont maintenues à une température inférieure à la température de solidification ou de transition vitreuse du polymère utilisé.

Ce procédé permet la production de pièces de tailles et de complexités géométriques très différentes, et satisfaisant à des exigences dimensionnelles de plus en plus sévères.

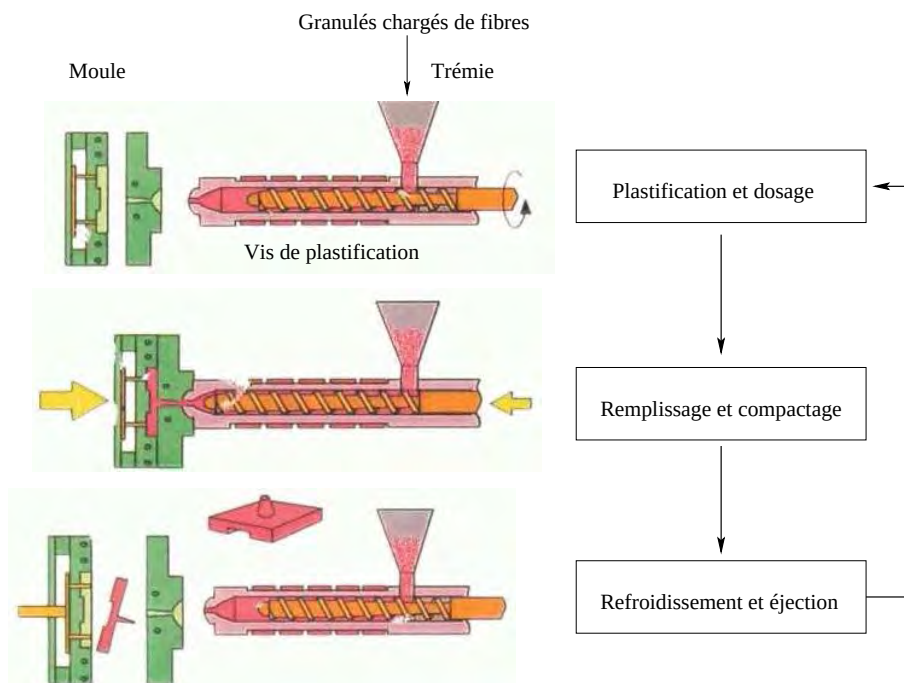


FIG. 1.3 – Cycle d'injection : les différentes phases (source : Arkéma)

Le fonctionnement classique d'une machine d'injection consiste en un premier temps à mélanger et plastifier les granules de polymère lorsque la vis de plastification est en rotation, et ensuite à injecter le polymère fondu dans la cavité par translation de la vis. Nous rappelons que dans le cas des matériaux chargés, les granules sont constitués d'un enrobage de polymère (polypropylène) et de fibres de verre. Le procédé d'injection de polymère ayant fait l'objet de nombreuses études, il existe dans la littérature de nombreuses descriptions détaillées [4]. Néanmoins, nous rappelons de façon sommaire les différentes phases du procédé.

Un cycle typique de moulage par injection comprend les étapes suivantes (figure 1.3) :

- **La plastification** : Les granules sont progressivement chauffés, fondus et homogénéisés par le cisaillement dû à la rotation de la vis. L'apport énergétique nécessaire

à la fusion provient de l'action conjuguée de la dissipation mécanique et du transfert thermique depuis le fourreau chauffé. Cette étape est l'une des origines de la diminution de la longueur moyenne des fibres due à la casse des fibres, et va ainsi induire une distribution de longueur non homogène dans l'écoulement [99].

- **Le remplissage** : A l'instant choisi, la vis est poussée axialement et joue le rôle d'un piston en injectant à vitesse contrôlée le polymère fondu dans la cavité du moule. Pendant le remplissage, les fibres vont s'orienter dans des directions privilégiées selon les sollicitations mises en jeu.
- **Le compactage** : Une fois la cavité remplie, une pression élevée est maintenue, autant que possible, jusqu'au figeage de la matière. Une quantité supplémentaire de polymère est alors introduite dans la cavité, dans le but de limiter le retrait thermique et d'uniformiser progressivement la pression dans la cavité.
- **Le refroidissement et l'éjection** : La pièce reste quelques instants dans le moule afin que le refroidissement puisse se poursuivre. Une fois que la pièce est refroidie, le moule s'ouvre et la pièce est éjectée par des éjecteurs (lors de petites pièces) ou prise par des robots (pièces plus grandes). Pendant ce temps, la phase de plastification recommence, de façon à préparer le prochain cycle.

La durée du cycle varie selon les applications de quelques secondes à une ou deux minutes, la phase de remplissage occupant environ un dixième du temps de cycle.

b) Application industrielle

L'application du procédé d'injection s'étend des grandes pièces utilisées dans l'industrie automobile, comme le suggère la figure 1.5, jusqu'à des pièces beaucoup plus petites, telles que celles utilisées dans l'industrie électromécanique (boîtiers de commande, interrupteurs électriques, etc. ...).



FIG. 1.4 – Application industrielle des thermoplastiques chargés de fibres

La figure 1.4 regroupe les différents secteurs utilisateurs de matériaux composites. On voit notamment que le secteur automobile arrive en tête avec plus de 30% en valeur suivi de l'aéronautique et de la construction civile.

Ans, voit-on apparaître chez les constructeurs automobiles des collecteurs d'admission air/essence, des pédales de débrayage ou encore des hayons, pare-choc, tableaux de bords, etc... La figure 1.5 montre un exemple d'application à travers notamment la fabrication d'un bloc avant d'une BMW en thermoplastique chargé de fibres longues.



FIG. 1.5 – Bloc avant d'une BMW fabriqué en thermoplastique chargé de fibres

1.1.4 Problématique industrielle

Cependant, au cours de la phase d'écoulement de la charge dans le moule, chaque fibre est transportée par l'écoulement et son orientation évolue en fonction des contraintes imposées par la matrice, les autres particules ainsi que les parois du moule. Il en résulte ainsi une distribution d'orientation complexe, variant considérablement dans la pièce, en particulier suivant l'épaisseur, affectant ainsi les propriétés thermomécaniques : le module élastique, la contrainte à la rupture, la résistance au choc ainsi que le coefficient de dilatation thermique vont dépendre de cette distribution d'orientation mais également de la concentration locale des fibres ainsi que de l'hétérogénéité de la distribution de longueur des fibres.

L'anisotropie, induite par la présence des fibres, est donc une propriété importante qu'il faut prendre en compte lors de la conception des pièces et du moule. En effet, l'orientation des fibres a un rôle majeur sur la résistance et la rigidité d'une pièce.

Dans le même temps, l'hétérogénéité induite par une distribution de longueur des fibres et de concentration non homogène dans l'écoulement est souvent une source de défauts pouvant conduire à un gauchissement des pièces difficilement prévisible ou encore pouvant induire une fatigue précoce du matériau composite.

Il apparaît donc indispensable de contrôler ou pour le moins de prévoir l'orientation des fibres durant la phase de mise en forme. La simulation numérique trouve sa place dans cette recherche, étant donné son aptitude à prédire l'écoulement de la matière et donc l'orientation des fibres dans le moule.

1.2 Objectif de l'étude et démarche

1.2.1 Cadre des travaux

Les travaux présentés ici s'inscrivent dans le cadre du consortium "Fibre" de Rem3D faisant intervenir les partenaires industriels suivants :

- Arkéma, grand acteur de la chimie mondiale et fournisseur de matière première,
- Plastic Omnium Auto Exterior, acteur majeur sur le marché de la conception et de la réalisation de pièces automobiles telles que les pare chocs, les ailes, les blocs avant et arrière, ...,
- Schneider Electric, fabricant de pièces électriques.

1.2.2 Contexte scientifique

L'objectif de notre travail est double : il est d'une part de créer, via Rem3D[®], un module de prévision de l'orientation des fibres susceptible de rendre compte du comportement des matériaux chargés de fibres, il est d'autre part de comprendre les phénomènes qui régissent l'orientation des fibres pendant le procédé de mise en forme.

1.2.3 Démarche adoptée

Dans une optique de maîtrise et de compréhension du comportement des matériaux chargés de fibres, nous proposons, dans ce travail, de mettre en place un outil numérique ayant pour vocation de simuler le comportement de matériaux chargés.

Notre objectif est double :

- d'une part de permettre, via Rem3D, le calcul 3D de l'orientation des fibres,
- d'autre part de prendre en compte un couplage entre la rhéologie et l'orientation des fibres afin d'enrichir la prédictivité des résultats liés à l'orientation des fibres.

Cet outil numérique 3D nous permettra de prendre en compte le comportement global d'un matériau chargé de fibres et constituera un outil d'aide à la compréhension et à l'analyse des phénomènes qui régissent l'orientation des fibres.

Cette thèse s'articule autour de cinq parties, chacune d'elle contribuant à la compréhension des mécanismes d'orientation via la simulation numérique.

Le premier chapitre de la thèse est dédié à la description des modèles macroscopiques rencontrés dans la littérature pour la modélisation des mécanismes d'orientation de fibres en écoulement.

Le deuxième chapitre détaille les lois de comportement généralement utilisées pour modéliser le comportement d'une suspension chargée de fibres. Les deux premiers chapitres de la thèse font donc référence aux travaux de modélisation généralement rencontrés dans la bibliographie. La discussion autour de ces travaux bibliographiques nous permettra d'effectuer un choix de modèle macroscopique pour l'équation de l'évolution de l'orientation ainsi que pour la loi de comportement rhéologique que nous utiliserons ensuite dans le cadre de nos travaux de développement.

Le troisième chapitre de cette thèse sera consacré à la description des modèles numériques utilisés dans le cadre de la résolution de l'équation d'évolution de l'orientation et de la loi de comportement rhéologique. Ce chapitre est donc principalement consacré au couplage entre la rhéologie et l'orientation des fibres.

Une fois l'outil numérique mis en place, nous procéderons dans le chapitre 4 à une validation numérique du code de calcul. Cet outil numérique sera testé dans le cadre de géométries simples de types académiques afin de d'évaluer l'apport du couplage rhéologie/orientation sur les résultats de la simulation numérique.

Enfin, le dernier chapitre traitera de deux applications à vocation industrielle : un seuil d'une plaque de type éprouvette ainsi qu'une pièce de type automobile (traverse nervurée), suggérée par Plastic Omnium. Une corrélation entre les résultats numériques et expérimentaux sera établie dans le cadre de la validation de l'outil numérique.

Chapitre 2

L'orientation des fibres

Ce chapitre a pour objectif de fournir un état de l'art concernant l'orientation des fibres lors du moulage par injection de composites, en résumant les principaux résultats des recherches récentes. Après une description générale du procédé de mise en forme par injection de thermoplastiques chargés, la première partie de ce chapitre est consacrée à l'analyse qualitative des mécanismes d'orientation rencontrés pendant le procédé de mise en forme. Plus précisément, nous nous attachons à décrire le mouvement d'une fibre pour différents types de sollicitations rencontrées lors de la phase de remplissage.

La seconde partie de ce chapitre est dédiée à la modélisation macroscopique de l'orientation des fibres avec notamment la description des outils mathématiques utilisés lors de la modélisation de l'orientation des fibres. La description des outils mathématiques sera suivie de la mise en place des différentes équations macroscopiques gouvernant l'évolution de l'orientation d'une population de fibres.

Enfin nous achevons ce chapitre par l'établissement d'un choix de modèle macroscopique qui sera implémenté pour rendre compte de l'évolution de l'orientation.

Sommaire

2.1	Les mécanismes d'orientation en injection	11
2.1.1	Les mécanismes d'orientation	11
a)	Orientation d'une fibre en écoulement de cisaillement simple	11
b)	Orientation d'une fibre en écoulement élongationnel	12
c)	Mécanismes d'orientation en injection	12
d)	Conclusion	14
2.1.2	Analyse des paramètres influençant l'orientation des fibres	15
a)	Influence des principaux paramètres d'injection	15
b)	Influence du renfort et de la matrice	16
c)	Influence de la géométrie du moule	16
2.2	Description des outils mathématiques	17
2.2.1	Les régimes de concentration	17
2.2.2	Représentation vectorielle de l'orientation d'une fibre	19
2.2.3	Fonction de distribution de l'orientation	20
2.2.4	Introduction aux tenseurs d'orientation	21
a)	Interprétation physique des composantes du tenseur d'ordre 2	22
b)	Représentation ellipsoïdale de l'état d'orientation	23
c)	Perte d'information engendrée par l'utilisation d'un tenseur d'orientation	23
2.3	Équation d'évolution macroscopique d'une particule	24
2.3.1	Équation d'évolution de Jeffery	24
2.3.2	Prise en compte du mouvement brownien	25
2.3.3	Équation de Jeffery et tenseurs d'orientation	25
2.3.4	Solution analytique du modèle de Jeffery	26
a)	Cas d'un écoulement de cisaillement simple	26
b)	Cas d'un écoulement élongationnel	30
2.4	Évolution macroscopique d'une population de fibres	31
2.4.1	Le modèle de Folgar et Tucker	31
2.4.2	Les équations de fermeture	31
a)	Approximations simples	32
b)	Approximations construites par interpolation	33
c)	Approximations contenant des coefficients ajustables	33
d)	Performances des équations de fermeture	37
e)	Synthèse et conclusion	38
2.4.3	Complexité de la détermination d'un coefficient d'interaction	39
a)	Signification du coefficient d'interaction	40
b)	Influence du coefficient d'interaction	41
c)	Détermination d'un coefficient d'interaction	42
2.4.4	Remarque relative au rapport de forme des particules	46
2.5	Autres modèles macroscopiques	47
2.5.1	Approche micromécanique : modèle de Koch et Shaqfeh	47
2.5.2	Évolution de l'orientation dans un milieu isotrope transverse	47
a)	Modèle proposé par Meslin	47
b)	Rôle du paramètre λ	48
c)	Comparaison des modèles	49
2.5.3	Analogie avec le modèle viscoélastique PomPom	50
2.6	Conclusion et choix d'un modèle	51

2.1 Les mécanismes d'orientation en injection

Cette section est dédiée à la description de l'orientation des particules dans une suspension pendant le procédé de mise en forme. Plus précisément, nous nous attachons à décrire les mécanismes qui régissent l'orientation des fibres pendant la phase de remplissage.

La première partie de ce chapitre est consacrée à l'analyse qualitative des différents mécanismes d'orientation rencontrés pendant la phase de remplissage. Enfin, dans une optique de compréhension du problème régi par l'orientation des fibres, nous analyserons dans une dernière partie l'ensemble des paramètres susceptibles d'influencer l'orientation des fibres.

2.1.1 Les mécanismes d'orientation

Deux types de sollicitations vont orienter préférentiellement les fibres pendant l'étape de remplissage :

- Le cisaillement, d'une part, présent majoritairement dans les canaux d'alimentation des moules ou dans les cavités minces,
- l'élongation, d'autre part, localement prépondérante dans certaines régions telles que les seuils d'injection, au front de matière lors de l'injection ou encore dans certaines régions 3D.

Les écoulements mis en jeu dans les procédés industriels combinent les deux mécanismes précédents. Au cours du procédé de remplissage, les fibres vont s'orienter dans des directions privilégiées en fonction de la sollicitation appliquée.

Afin de comprendre les phénomènes qui gouvernent l'orientation des fibres, nous allons nous attacher par la suite à décrire le mouvement d'une fibre soumise respectivement à un écoulement de cisaillement et d'élongation et nous concluons par une brève description de l'orientation des fibres dans un disque injecté par le centre.

a) Orientation d'une fibre en écoulement de cisaillement simple

De très nombreux auteurs [130], [16], [138], [31] ont observé qu'une fibre isolée, en écoulement de cisaillement avec un fluide newtonien, est animée d'un mouvement périodique. Cette période T est inversement proportionnelle au taux de cisaillement $\dot{\gamma}$ et à peu près proportionnelle au rapport de forme β de la fibre, défini comme étant le rapport entre la longueur et le diamètre de la fibre :

$$T = \frac{2\pi}{\dot{\gamma}} \beta(1 + \beta)$$

La vitesse de rotation de la fibre n'est pas constante, elle devient maximale lorsque la fibre est perpendiculaire à la direction de l'écoulement comme le montre la figure 2.1. Avec un fluide non newtonien, la fibre subit également un mouvement de rotation. Toutefois la période de rotation augmente fortement avec la pseudoplasticité du fluide [31].

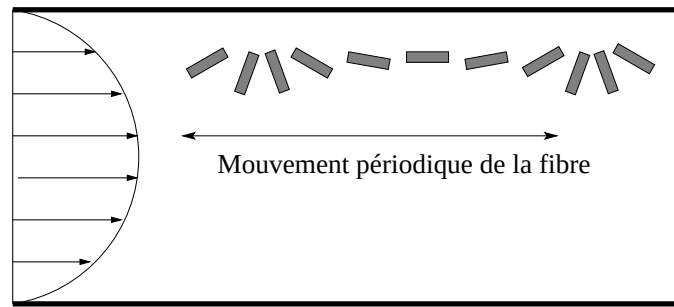


FIG. 2.1 – Mouvement d'une fibre isolée en suspension dans un fluide Newtonien.
(Vincent [138])

b) Orientation d'une fibre en écoulement élongationnel

En écoulement élongationnel, la fibre s'oriente perpendiculairement ou parallèlement à la direction de l'écoulement suivant que le taux d'élongation est négatif ou positif. Contrairement à l'écoulement de cisaillement, il existe en élongation une position d'équilibre stable de la fibre. Celle-ci s'oriente suivant la direction de l'élongation comme le montre la figure 2.2.

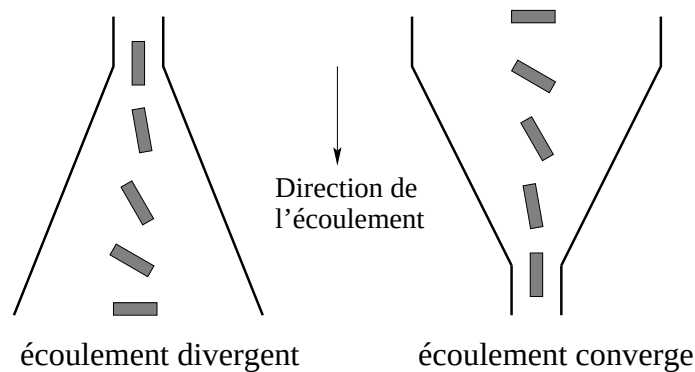


FIG. 2.2 – Mouvement d'une fibre dans un écoulement élongationnel.
(Vincent [138])

Un écoulement élongationnel aligne ainsi les fibres dans la direction d'étirement du fluide.

c) Mécanismes d'orientation en injection

Les écoulements mis en jeu dans les procédés d'injection conjuguent et parfois opposent le cisaillement et l'élongation. L'orientation des fibres, pour un thermoplastique chargé de fibres de verre, présente alors une structure assez particulière dans l'épaisseur de la pièce que l'on dénomme communément «*structure coeur-peau*».

La figure (2.3) illustre ce mécanisme et montre l'orientation des fibres dans un disque injecté par le centre, d'après des observations expérimentales avec des fibres courtes. Ces observations mettent en évidence plusieurs couches distinctes, avec une symétrie par rapport au

plan médian du disque :

- une fine couche de peau (A), près des parois, dans laquelle les fibres semblent orientées de manière isotrope.
- deux couches de peau (B) où les contraintes de cisaillement sont importantes et donc, les fibres sont orientées selon la direction de l'écoulement,
- une couche de coeur (D) caractérisée par des contraintes d'élongation prépondérantes : les fibres sont orientées perpendiculairement au sens de l'écoulement,
- enfin, les deux dernières couches (C), dans lesquelles l'orientation des fibres est aléatoire, sont des couches de transition entre les états d'orientation (B) et (D).

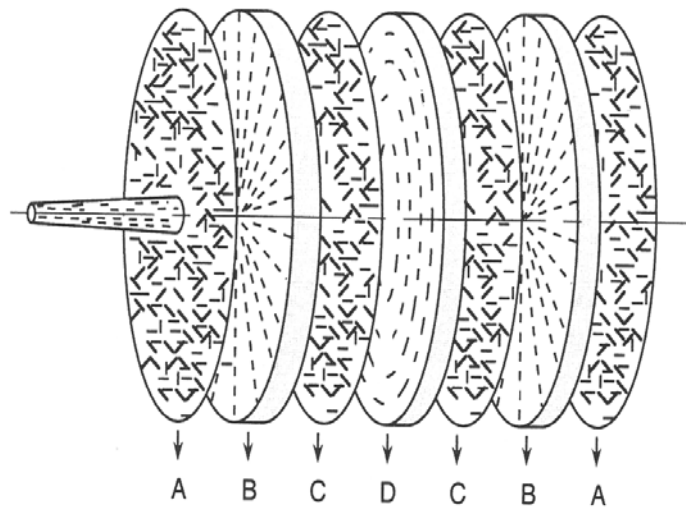


FIG. 2.3 – Orientation des particules dans un disque injecté par le centre.
(Woebcken, 1971)

Karpov et *al* [90] ont été les premiers à observer une structure en couches sur des disques injectés en polyamide renforcés de fibres de verre. Ils ont noté une structure symétrique à cinq couches comprenant une fine couche de peau (A), suivie d'une couche plus épaisse (couche (B)) et enfin une couche de coeur (couche (D)) d'épaisseur plus faible.

Tous les auteurs reconnaissent l'existence d'une orientation multi-couches. Néanmoins les différences entre les auteurs viennent du décompte du nombre de couches dans l'épaisseur. Ce nombre varie de 3 pour Kamal et *al* [89] à 11 pour Kaliske et *al* [88] selon la finesse de l'observation, la géométrie de la pièce, les paramètres procédés, la nature du matériau, ...

La conclusion commune à tous ces travaux se situe dans le fait que l'orientation des fibres est gouvernée par les caractéristiques de l'écoulement lors du procédé de mise en forme. Kenig [91] identifie l'origine de cette structure en couche à l'aide des mécanismes d'écoulement :

- Au voisinage du seuil d'injection, le front de matière adopte un écoulement d'**extension radiale** qui s'apparente à un écoulement élongationnel de type divergent, et

provoque une orientation transverse des fibres par rapport à la direction d'écoulement. A coeur, le cisaillement étant pratiquement nul, les fibres conservent leur orientation initiale, transverse à la direction de l'écoulement (couche (D)).

- Loin du seuil d'injection et en amont du front de matière, un écoulement de **cisaillement** se met en place et favorise une orientation des fibres dans la direction de l'écoulement. Le taux de cisaillement étant maximal au niveau des points d'inflexion des profils de vitesse (Figure 2.4), l'orientation des fibres est unidirectionnelle dans le sens de l'écoulement à une certaine distance de la paroi (couche (B)).
- Au niveau de la paroi, une couche de polymère solidifiée se forme dans laquelle les fibres ne sont pas orientées de façon préférentielle. L'**effet fontaine** a un rôle déterminant puisqu'il ramène la matière du centre vers les parois froides du moule où les fibres vont être figées avec une orientation désordonnée. L'épaisseur de cette couche va dépendre de la vitesse de refroidissement (couche (A)).

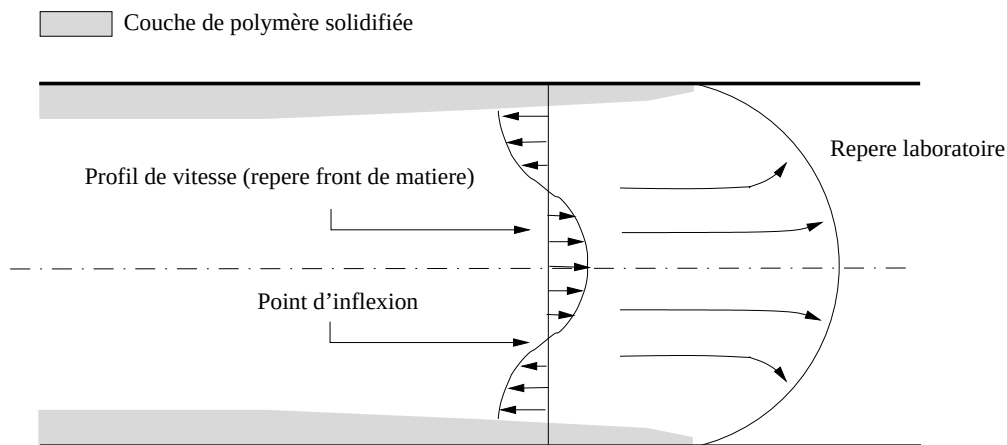


FIG. 2.4 – Modèle d'écoulement au front d'avancée de matière (effet fontaine)

d) Conclusion

L'exemple du disque injecté par le centre montre l'influence du procédé de mise en forme sur l'orientation finale des fibres. Il apparaît clairement que l'orientation des fibres est gouvernée par différents mécanismes qui peuvent parfois se combiner pour donner lieu à des orientations de fibres dans des directions privilégiées :

- l'effet fontaine, acteur principal de la formation de la couche de peau,
- la vitesse de refroidissement du polymère qui va plus ou moins accentuer l'effet fontaine,
- le seuil d'injection qui va gouverner l'orientation initiale des fibres que l'on retrouve dans la zone de coeur
- le cisaillement et l'élongation qui vont contraindre les fibres à s'orienter dans des directions privilégiées.

Nous listons dans le paragraphe qui suit l'ensemble des paramètres susceptibles d'influencer l'orientation des fibres pendant la phase de mise en forme. Nous n'avons pas traité la problématique du compactage dans cette étude.

2.1.2 Analyse des paramètres influençant l'orientation des fibres

Nous proposons dans cette section de faire une synthèse des connaissances acquises dans le domaine de la compréhension des mécanismes gouvernant l'orientation des fibres avec notamment la description des paramètres susceptibles d'influencer cette orientation.

a) Influence des principaux paramètres d'injection

Pour une géométrie donnée, l'orientation des fibres est gouvernée par les différentes variables liées au procédé d'injection. Dans la littérature, diverses études ont été menées afin de déterminer les paramètres susceptibles d'avoir une influence sur l'orientation finale des fibres [33].

On peut noter en particulier :

- **La température du moule**

Une réduction de la température du moule (ou de la température de la matière) augmente la couche de polymère solidifiée ce qui induit des valeurs maximales de cisaillement décalées vers le centre de la pièce. Cette réduction de température entraîne ainsi une augmentation de l'épaisseur de la couche de peau [137], [32], où les fibres sont généralement considérées alignées dans la direction de l'écoulement. Les phénomènes observés sont principalement liés à l'effet fontaine qui est accentué par la vitesse de refroidissement du polymère.

- **La vitesse d'injection**

[64], [75] ont montré que, plus la vitesse d'injection est élevée, plus la couche de coeur, siège d'une orientation de fibres transverse à la direction d'écoulement, devient large. En contrepartie, la couche de peau devient plus fine puisque les fibres n'ont pas le temps de s'orienter. En outre, pour des vitesses d'injection importantes, la zone de peau, affectée par l'effet fontaine, est réduite, décalant ainsi la région à fort taux de cisaillement vers les parois du moule.

- **La vitesse de plastification**

La vitesse de plastification joue un rôle non négligeable sur le rapport de forme des fibres (contre-pression, vitesse de rotation engendrant une casse des fibres et donc une diminution du rapport de forme des fibres).

- **La pression de maintien**

L'absence d'un temps de maintien suffisant provoque des agglomérations de fibres [53] et augmente l'épaisseur de la zone de coeur [28].

- **La température d'injection**

Cette température d'injection influe sur la rhéologie de la matrice qui sera traitée dans la partie suivante.

b) Influence du renfort et de la matrice

Trois paramètres essentiels peuvent influencer l'orientation des fibres dans une pièce moulée par injection : la rhéologie de la matrice, la concentration en fibres ainsi que le rapport de forme des fibres. Nous allons passer en revue ces paramètres et notamment leur incidence sur l'orientation des fibres :

• Rhéologie de la matrice

La nature du profil de vitesse dans le moule résulte du caractère rhéofluidifiant des polymères utilisés. Le caractère pseudoplastique des polymères engendre un écoulement caractérisé par un profil de vitesse beaucoup plus aplati que dans le cas des fluides newtoniens. Il apparaît que l'épaisseur de la zone de coeur est une fonction croissante de l'indice de pseudoplasticité du polymère. Parallèlement, l'ajout de fibres va contribuer à augmenter la pseudoplasticité de la matrice [117], [127]. Il faut toutefois garder à l'esprit que plusieurs de ces effets agissent de façon identique. Notons également que, dans la grande majorité des cas, ces études restent qualitatives.

Le caractère viscoélastique de la matrice a également une incidence sur la périodicité du mouvement d'une fibre en écoulement de cisaillement. Il a été montré [31] que pour un fluide non newtonien la période d'une particule augmente fortement. En outre, il a été observé que cet accroissement de la périodicité du mouvement est exacerbé par le taux de cisaillement.

• Concentration et rapport de forme des fibres

Une étude extensive [99] réalisée sur un polypropylène renforcé de fibres de verre avec des longueurs de fibres différentes (fibres initialement de 4 et 12 *mm*) a montré une augmentation de la largeur de la zone de coeur avec le rapport de forme des fibres. L'épaisseur de la zone de coeur est plus importante pour une longueur initiale de fibres plus grande. Néanmoins les fibres sont moins orientées dans la direction transverse à l'écoulement. Il ressort aussi qu'une augmentation de la concentration de fibres augmente également la taille de la zone de coeur. En outre, il a été constaté [99] que, pour des faibles concentrations de fibres, et dans le cas de plaques en polypropylène renforcé de 10 % de fibres de verre, la structure coeur-peau disparaissait.

c) Influence de la géométrie du moule

La géométrie de l'écoulement (*i.e* du seuil d'injection et de l'outillage) est un paramètre important et a un rôle majeur sur l'orientation des fibres [67].

• Les seuils d'injection

L'influence des seuils d'injection sur l'orientation des fibres a fait l'objet de nombreuses études [52], [27]. Il apparaît que la présence des seuils gouverne l'orientation initiale des fibres qui sont transportées au cours de l'écoulement dans la couche de coeur car le taux de cisaillement y est pratiquement nul. Lorsque les seuils d'injection sont le siège d'écoulements élongationnels, la couche de coeur est caractérisée par des fibres orientées dans la direction transverse à l'écoulement.

- **La géométrie de l'outillage**

Certains auteurs [70] ont montré, via des observations microscopiques qualitatives, que l'orientation des fibres, dans la zone de coeur, peut être affectée par une réduction de l'épaisseur de la cavité. Leur étude a montré qu'une réduction par un facteur deux de l'épaisseur d'une cavité entraîne une zone de coeur caractérisée par des fibres qui sont légèrement orientées dans le sens de l'écoulement.

D'autre part, une réduction de l'épaisseur de la cavité a pour effet également de diminuer l'épaisseur de la couche de coeur. En effet, les écoulements dans des pièces minces créent des taux de cisaillement importants qui sont le siège d'une orientation quasi unidirectionnelle dans le sens de l'écoulement.

2.2 Description des outils mathématiques

L'étude bibliographique a mis en exergue la complexité des phénomènes qui gouvernent l'orientation des fibres. Dans une optique de compréhension de ces mécanismes, nous proposons dans la section qui suit d'étudier la modélisation de l'orientation des fibres avec notamment la description des outils mathématiques, nécessaires à la mise en place de modèles de comportements macroscopiques gouvernant l'orientation d'une population de fibres évoluant dans un fluide visqueux.

Dans un premier temps, il nous paraît indispensable de différencier les régimes de concentration. En effet, cette notion est importante dans la mesure où elle permet de fixer le domaine de validité d'un modèle de comportement macroscopique, en l'occurrence ici les équations d'évolution de l'orientation des fibres ainsi que les lois de comportement de telles suspensions.

2.2.1 Les régimes de concentration

Une suspension est caractérisée, entre autre, par sa concentration en particules, en l'occurrence ici les fibres. La concentration en fibres peut être représentée par :

- la fraction volumique ϕ , qui est le rapport entre le volume occupé par les particules et le volume de la suspension,
- le nombre n de particules par unité de volume.

Dans le cas d'une particule cylindrique de longueur L et de diamètre D nous avons la relation :

$$\phi = n\pi \frac{D^2}{4} L$$

Classiquement, on distingue trois régimes de concentration, illustrés sur la figure 2.5 :

- le régime dilué,
- le régime semi-dilué,
- le régime concentré.

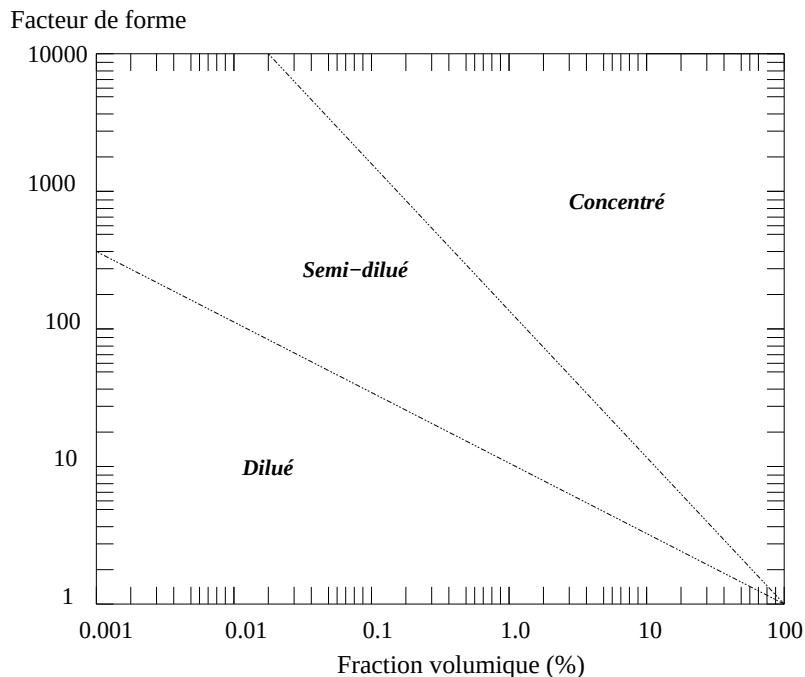


FIG. 2.5 – Régimes de concentration en fonction du facteur de forme des particules et de la fraction volumique

- Une **solution diluée** est définie comme une solution dans laquelle la distance entre une fibre et sa plus proche voisine est d'au moins la longueur de la fibre. Ainsi, chaque fibre est libre de tourner dans toutes les directions sans interaction avec d'autres fibres. Alors la fraction volumique maximale admissible ϕ est :

$$\phi \leq \left(\frac{D}{L}\right)^2$$

- Pour une **solution semi-concentrée**, la distance entre une fibre et sa plus proche voisine varie de la longueur de la fibre au diamètre de celle-ci. La fraction volumique doit être comprise entre :

$$\left(\frac{D}{L}\right)^2 \leq \phi \leq \left(\frac{D}{L}\right)$$

Une fibre peut se déplacer dans la direction de son axe de révolution mais l'enchevêtrement est tel que les déplacements dans une direction perpendiculaire tels que les rotations ou les translations sont rapidement bloqués par les autres fibres [56]. Les contacts entre fibres sont rares [57] et Doï [55] établit un nombre critique de fibres par unité de volume n_c , au-dessus duquel la population de fibres ne peut plus s'orienter. n_c est la limite inférieure du régime concentré :

$$n_c = \frac{1}{DL^2}$$

- Dans le cas d'une **solution concentrée**, la distance moyenne entre fibres est plus petite que le diamètre des fibres. En régime concentré, les fibres s'organisent plus ou moins parallèlement les unes aux autres. L'orientation de la population de fibres tend vers une distribution unidirectionnelle quand la fraction volumique de fibres

tend vers 1. Par analogie avec les polymères à cristaux liquides, Doi emploie la notion de *structure nématique*. Le déplacement d'une fibre engendre irrémédiablement des interactions entre les différentes particules.

A noter que Pipes et *al* [110] définissent un régime hyperconcentré pour lequel la distance moyenne entre les axes des fibres est inférieure à deux fois leur diamètre. La désorientation d'une fibre par rapport à la direction moyenne est très limitée. Le mouvement périodique des fibres rencontré en écoulement de cisaillement n'est plus envisageable.

Les différents régimes de concentration sont donc fonction de la fraction volumique et du rapport de forme. Il faut garder à l'esprit que les frontières entre ces différentes régions sont hypothétiques. Cette notion de régime de concentration permet de fixer un domaine de validité pour les modèles macroscopiques ou les lois de comportement. Pour obtenir un modèle pour les milieux concentrés, il est indispensable de prendre en compte les interactions de type hydrodynamiques et mécaniques de type contact, prépondérantes pour ce régime de concentration.

2.2.2 Représentation vectorielle de l'orientation d'une fibre

Nous considérons un repère global de directions principales $(\underline{1}, \underline{2}, \underline{3})$. L'orientation d'une fibre seule peut être décrite classiquement à l'aide de deux angles (θ, φ) , comme illustré sur la figure 2.6 ou par l'intermédiaire d'un vecteur $\underline{p}$ dirigé selon l'axe principal de la fibre.

On peut ainsi définir l'orientation d'une fibre par la projection du vecteur $\underline{p}$ dans le repère global :

$$\underline{p} = (p_1, p_2, p_3)^T = (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta)^T$$

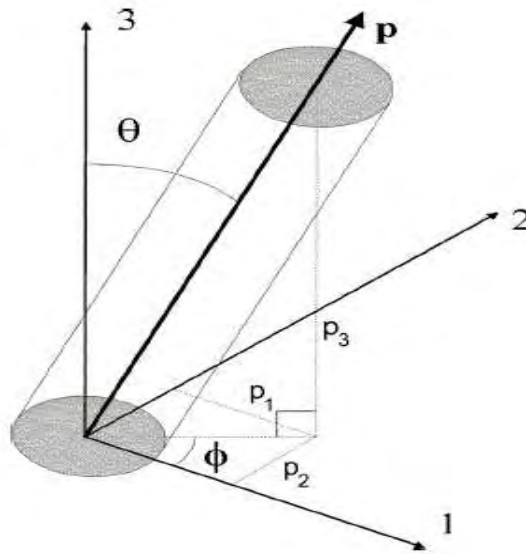


FIG. 2.6 – Définition des angles et du vecteur $\underline{p}$

Notons que le sens de $\underline{p}$ est purement arbitraire, car on ne différencie pas les deux extrémités de la particule. De ce fait, la description de l'orientation doit être inchangée si l'on effectue la transformation :

$$\theta \rightarrow \pi - \theta \quad \text{et} \quad \varphi \rightarrow \varphi + \pi$$

Chaque vecteur orientation est contenu dans une sphère de rayon unitaire. Ainsi chaque état d'orientation possible correspond à un point se trouvant sur la surface de la sphère unité.

2.2.3 Fonction de distribution de l'orientation

Dans un thermoplastique chargé de fibres, les particules peuvent s'orienter dans différentes directions. Prager [112] fut le premier à s'intéresser à la statistique des orientations de particules en définissant une fonction de distribution d'orientation. En effet, une description complète de l'état d'orientation du composite nécessite l'appel d'une fonction de distribution d'orientation $\psi(\underline{p}, t)$ ou de manière équivalente $\psi(\theta, \varphi)$ qui exprime la probabilité d'obtenir une fibre ayant une certaine orientation $\underline{p}$ au temps t [112].

Ainsi, la probabilité P de trouver une fibre entre les angles $(\theta \text{ et } \theta + d\theta)$, $(\varphi \text{ et } \varphi + d\varphi)$ est donnée par :

$$P = \int_{\theta}^{\theta+d\theta} \int_{\varphi}^{\varphi+d\varphi} \psi(\theta, \varphi) \sin\theta d\theta d\varphi$$

Cette fonction de distribution doit satisfaire deux conditions élémentaires [76] :

- Elle doit être inchangée par la transformation $\underline{p} \rightarrow -\underline{p}$, ce qui se traduit par :

$$\psi(\theta, \varphi) = \psi(\pi - \theta, \varphi + \pi)$$

ou encore :

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

- Par ailleurs, l'intégrale sur toutes les orientations possibles de la fonction de distribution doit être égale à l'unité (condition de normalisation induite par la définition d'une probabilité) :

$$\int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \psi(\theta, \varphi) \sin\theta d\theta d\varphi = 1$$

ou de manière équivalente :

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

où $d\underline{p}$ désigne un élément d'aire de la sphère unitaire.

D'autre part, si $d\underline{p}/dt$ désigne la dérivée exacte de $\underline{p}$ par rapport au temps, alors l'équation de conservation de ψ s'écrit en négligeant le mouvement brownien des fibres (équation de type Fokker Planck) :

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \underline{p}} (\psi d\underline{p}/dt) = 0 \quad (2.1)$$

Cette équation est licite dans le cas particulier de solutions diluées de fibres.

Dans le cas des suspensions semi-diluées ou concentrées de fibres, il est possible de prendre en compte les interactions de types hydrodynamiques via l'introduction d'un terme analogue à une *pseudo-diffusivité brownienne*, dans l'équation (2.1).

L'expression de (2.1) devient alors :

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

Les expressions (2.1) et (2.2) sont valables d'une façon très générale. Il faut donc expliciter le terme $\underline{dp}/dt$ en fonction des valeurs moyennes des vitesses.

Cette fonction de distribution est une représentation complète et précise de l'état d'orientation des fibres. Néanmoins, la résolution d'une telle équation requiert des ressources informatiques importantes. Dans le cadre d'une application industrielle, il est nécessaire d'avoir une description plus compacte pour calculer l'évolution de l'orientation des fibres dans un milieu. La notion de tenseur d'orientation a été introduite par Hand [76] afin de condenser l'information contenue dans ψ et ainsi obtenir une représentation de l'état d'orientation des fibres qui ne dépende plus que de la position et du temps.

2.2.4 Introduction aux tenseurs d'orientation

L'orientation de $\underline{p}$ est donnée par sa fonction de distribution d'orientation $\psi(\underline{p})$ et on peut calculer une moyenne macroscopique d'une quantité F par la relation :

$$\langle F \rangle = \int F(\underline{p}) \psi(\underline{p}) d\underline{p} \quad (2.3)$$

Cependant la plupart du temps, la fonction $\psi(\underline{p})$ n'est pas explicitement connue. Afin de décrire la structure microscopique d'un fluide chargé, Hand [76] introduit un tenseur d'ordre 2, fréquemment noté $\underline{a}_2$, et défini comme la moyenne spatiale du double produit tensoriel de $\underline{p}$.

$$\underline{a}_2 = \int \underline{p} \otimes \underline{p} \psi(\underline{p}) d\underline{p} \quad (2.4)$$

De la définition même de ces tenseurs, découlent les propriétés de symétrie et la condition de normalisation suivantes :

$$a_{ij} = a_{ji}$$

$$a_{ii} = 1$$

Ces propriétés indiquent que seulement 5 des 9 composantes de a_{ij} sont indépendantes et qu'il suffit de 5 scalaires pour décrire ce tenseur dans le cas d'un écoulement 3D.

Ce tenseur d'orientation est utilisé dans la théorie moléculaire de Doi et Edwards [56], et dans le cadre des nombreux travaux sur les polymères chargés de fibres [2].

a) Interprétation physique des composantes du tenseur d'ordre 2

Dans une base orthonormée (e_1, e_2, e_3) , a_{11} , a_{22} et a_{33} (ou a_{xx} , a_{yy} et a_{zz}) quantifient respectivement l'alignement des fibres suivant e_1 , e_2 et e_3 . En d'autres termes, dire que $a_{11} = 1$ signifie que toutes les fibres sont orientées suivant la direction e_1 . Par ailleurs, $a_{11} = 0$ indique que toutes les fibres sont perpendiculaires à e_1 , c'est à dire qu'elles appartiennent au plan (e_2, e_3) .

Les composantes a_{ij} avec $i \neq j$ quantifient la dissymétrie de la distribution d'orientation par rapport aux directions e_i ou e_j . La figure 2.7 illustre les valeurs prises par les composantes du tenseur $\underline{\underline{a}}_2$ pour différentes orientations dans le cas tridimensionnel.

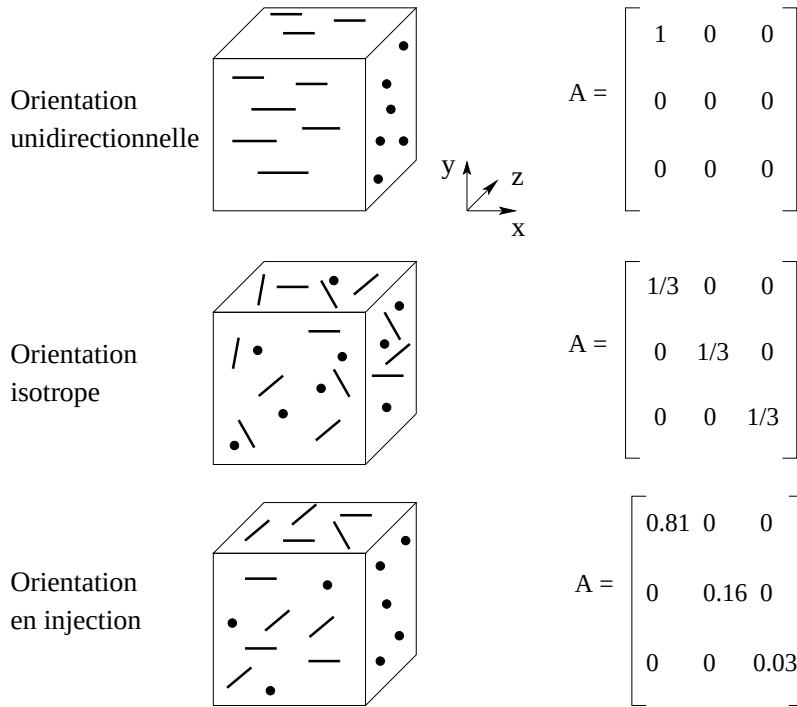


FIG. 2.7 – Exemple de tenseurs d'orientation $\underline{\underline{a}}_2$ pour différentes orientations dans le cas 3d.

Pour une orientation isotrope 3d les composantes $a_{ii} = \frac{1}{3}$ alors que $a_{ij} = 0$ avec $i \neq j$. Dans le cas bi-dimensionnel, l'isotropie se traduit par des composantes diagonales égales à $\frac{1}{2}$, les composantes extra-diagonales étant nulles.

Démonstration

Considérons une fibre ayant une orientation :

$$\underline{p} = (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta)^T$$

D'après la définition du tenseur d'ordre 2, nous avons :

$$\underline{\underline{a}}_2 = \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \begin{pmatrix} \sin^2 \theta \cos^2 \varphi & \sin^2 \theta \sin \varphi \cos \varphi & \sin \theta \cos \theta \cos \varphi \\ \sin^2 \theta \sin \varphi \cos \varphi & \sin^2 \theta \sin^2 \varphi & \sin \theta \cos \theta \sin \varphi \\ \sin \theta \cos \theta \cos \varphi & \sin \theta \cos \theta \sin \varphi & \cos^2 \theta \end{pmatrix} \sin \theta \psi(\theta, \varphi) d\theta d\varphi$$

Dans le cas particulier d'une distribution d'orientation isotrope, nous avons :

$$\psi(\theta, \varphi) = \frac{1}{4\pi}$$

Or :

$$\int_0^{2\pi} \sin \varphi d\varphi = \int_0^{2\pi} \cos \varphi d\varphi = \int_0^{2\pi} \sin \varphi \cos \varphi d\varphi = 0$$

$$\int_0^{2\pi} \sin^2 \varphi d\varphi = \int_0^{2\pi} \cos^2 \varphi d\varphi = \pi$$

$$\int_0^\pi \sin^3 \varphi d\varphi = \frac{4}{3} \quad \text{et enfin} \quad \int_0^\pi \sin \varphi \cos^2 \varphi d\varphi = \frac{2}{3}$$

Nous obtenons alors :

$$\underline{a}_2 = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{3} \end{pmatrix}$$

b) Représentation ellipsoïdale de l'état d'orientation

Connaissant les vecteurs propres E_i ($1 \leq i \leq 3$) du tenseur d'ordre 2, il est possible de décrire l'état d'orientation des fibres à l'aide d'un ellipsoïde. En effet, Advani [2] propose de représenter les tenseurs d'ordre 2 sous la forme d'une ellipse. Les vecteurs propres et les valeurs propres du tenseur d'orientation donnent respectivement la direction et la longueur des axes de l'ellipse comme le montre la figure 2.8.

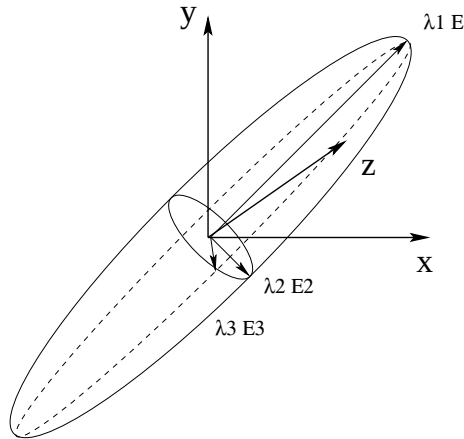


FIG. 2.8 – Représentation ellipsoïdale du tenseur $\underline{a}_2$ [12]

c) Perte d'information engendrée par l'utilisation d'un tenseur d'orientation

Le passage de la fonction de distribution de l'orientation $\psi(\underline{p})$ au tenseur $\underline{a}_2$ engendre une perte d'information. Aussi pour enrichir sa description, Altan et al [12] utilisent le tenseur d'orientation d'ordre 4 $\underline{a}_4$ défini par :

$$\mathbf{a}_4 = \int \underline{p} \otimes \underline{p} \otimes \underline{p} \otimes \underline{p} \psi(\underline{p}) d\underline{p} \quad (2.5)$$

L'utilisation de ce tenseur augmente fortement le nombre de paramètres décrivant l'état d'orientation. Cependant, tout comme le tenseur du second ordre, $\mathbf{a}_4$ est symétrique et unitaire. Seul 14 composantes sont alors indépendantes sur les 81 coefficients de $\mathbf{a}_4$.

Afin d'évaluer la perte d'information liée au passage de la fonction de distribution de l'orientation à la description par les tenseurs d'orientation, Advani et Tucker [2] définissent des fonctions de base $f(\underline{p})$ ainsi que des tenseurs $\underline{b}$ susceptibles de recomposer $\psi(\underline{p})$. Il est alors possible de reconstruire la fonction de distribution d'orientation $\psi(\underline{p})$ à partir de ces fonctions de base ainsi que de ces tenseurs. Les tenseurs d'orientation correspondent ainsi à des coefficients d'un développement en série de la fonction de distribution $\psi(\underline{p})$. La reconstruction est d'autant plus exacte que l'ordre des tenseurs est élevé.

Advani et *al* ont reconstruit des fonctions $\psi(\underline{p})$ à partir des tenseurs d'ordre 2 et des tenseurs d'ordre 2 et 4. Ils ont remarqué que pour une population de fibres fortement orientées, la description de l'orientation est moins performante dans le cas de l'utilisation du tenseur d'ordre 2 uniquement. L'estimation de la fonction de distribution $\psi(\underline{p})$ à l'aide des tenseurs d'ordre 2 uniquement est donc réductrice.

2.3 Équation d'évolution macroscopique d'une particule

2.3.1 Équation d'évolution de Jeffery

Jeffery [84] propose une équation d'évolution de l'orientation dans le cas des solutions diluées de particules sphéroïdales rigides. Comme dans tous les modèles basés sur l'hypothèse de milieu dilué, il considère une seule particule dans un fluide newtonien. Les dimensions de la particule sont petites pour que le champ de vitesse de déformation soit homogène à grande distance. La vitesse du fluide non perturbé est alors une fonction linéaire de la position. Les efforts d'inertie sont négligés.

Pour ce problème, Jeffery suppose le non-glissement à la surface de la particule et calcule la vitesse en tout point de l'écoulement. Il fait de plus l'hypothèse que le centre de gravité de la particule se déplace à la vitesse non perturbée du fluide en ce point. La solution pour le mouvement de la particule s'écrit en fonction du vecteur orientation $\underline{p}$ et prend la forme suivante :

$$\frac{D\underline{p}}{Dt} = \underline{\underline{\Omega}}(\underline{v}) \underline{p} + \lambda(\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{v}) \underline{p} - (\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{v}) : \underline{p} \otimes \underline{p}) \underline{p}) \quad (2.6)$$

$\frac{D\underline{p}}{Dt}$ désigne la dérivée matérielle de $\underline{p}$ définie par la relation :

$$\frac{D\underline{p}}{Dt} = \frac{\partial \underline{p}}{\partial t} + \underline{v} \cdot \nabla \underline{p}$$

Cette dérivée tient compte du déplacement du centre de gravité de la particule et de son évolution comme une particule fluide.

$\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{v})$ et $\underline{\underline{\Omega}}(\underline{v})$ sont respectivement le tenseur des vitesses de déformation et le tenseur de rotation :

$$\varepsilon(\underline{v})_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.7)$$

$$\Omega(\underline{v})_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.8)$$

Ces tenseurs contribuent dans l'équation de Jeffery (2.6) au changement d'orientation de la particule dû à la déformation et à la rotation du fluide. Le dernier terme de l'équation de Jeffery garantit quant à lui, la norme unitaire du vecteur $\underline{p}$.

Le paramètre λ est une fonction qui dépend du facteur de forme β de l'ellipsoïde. Si L et D définissent respectivement les longueur et diamètre de la fibre, alors λ et β sont définis comme suit :

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

Par ailleurs $\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{v}) : \underline{p} \otimes \underline{p}$ désigne un produit doublement contracté défini par :

$$\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{v}) : \underline{p} \otimes \underline{p} = \sum_{i,j} \varepsilon_{ij} p_i p_j$$

2.3.2 Prise en compte du mouvement brownien

Hand [77] calcule l'évolution du vecteur $\underline{p}$ au cours du temps dans le cas d'une particule de rapport de forme infini (*i.e.* $\lambda = 1$). Il introduit, de plus, dans l'équation de Jeffery un mouvement brownien via l'introduction d'un coefficient de diffusion D_r . Il obtient :

$$\frac{D\underline{p}}{Dt} = (\underline{\underline{\Omega}}(\underline{v}) + \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{v})) \underline{p} - ((\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{v}) : \underline{p} \otimes \underline{p}) \underline{p}) - \frac{D_r}{\psi} \frac{\partial \psi}{\partial \underline{p}} \quad (2.9)$$

Étant donné la dimension des fibres, on peut supposer que l'effet du mouvement brownien devient négligeable. Cependant l'idée d'introduire un mouvement brownien a été reprise par d'autres auteurs [63] pour modéliser l'interaction inter-particulaire.

2.3.3 Équation de Jeffery et tenseurs d'orientation

Hand [77] donne l'équation générale que doit satisfaire le tenseur d'orientation du second ordre en faisant l'hypothèse que la dérivée particulaire de $\underline{\underline{a}}_2$ est uniquement fonction de $\underline{\underline{a}}_2$ et de $\nabla \underline{v}$.

Cependant l'équation mise en place requiert l'utilisation d'un certain nombre de coefficients α_i ($0 \leq i \leq 8$) à déterminer. Hand obtient alors une équation de la forme :

$$\frac{Da_2}{Dt} = \sum_{i=0}^8 \alpha_i \nabla v^k \underline{a}_2^l \quad (2.10)$$

Les paramètres k et l sont les exposants des tenseurs et sont compris entre 0 et 2. Lipscomb et al [95] aboutissent à une écriture sous forme tensorielle en procédant par homogénéisation volumique. Ils introduisent dans l'équation de type Fokker Planck (2.1) l'équation de Jeffery (2.6). En multipliant l'équation obtenue par la quantité $\underline{p} \otimes \underline{p}$ et en intégrant le tout sur la sphère unité, ils ont obtenu l'équation suivante :

$$\frac{Da_2}{Dt} = \underline{\underline{\Omega}}(v) \underline{a}_2 - \underline{a}_2 \underline{\underline{\Omega}}(v) + \lambda(\underline{\underline{\varepsilon}}(v) \underline{a}_2 + \underline{a}_2 \underline{\underline{\varepsilon}}(v) - 2 \underline{\underline{\varepsilon}}(v) : \underline{a}_4) \quad (2.11)$$

2.3.4 Solution analytique du modèle de Jeffery

Pour une meilleure compréhension des équations macroscopiques introduites précédemment, nous proposons ici de traiter deux cas simples, mais non moins fondamentaux, d'écoulements :

- l'écoulement de cisaillement simple,
- l'écoulement élongationnel.

La réécriture de l'équation de Jeffery sous forme lagrangienne conduit facilement à l'obtention d'une solution analytique, dans le cas d'un écoulement homogène. En effet, si nous considérons que $\underline{\underline{E}}$ est le *gradient généralisé* défini comme suit :

$$\begin{cases} \frac{d\underline{\underline{E}}}{dt} = (\underline{\underline{\Omega}}(v) + \lambda \underline{\underline{\varepsilon}}(v)) \underline{\underline{E}} \\ \underline{\underline{E}}(t=0) = \underline{\underline{I}}_d \end{cases}$$

Alors, l'équation d'évolution de l'orientation proposée par Jeffery peut s'écrire sous la forme qui suit [12] :

$$\underline{\underline{E}} \frac{d}{dt} (\underline{\underline{E}}^{-1} \underline{p}) = -\lambda (\underline{p}^T \underline{\underline{\varepsilon}}(v) \underline{p}) \underline{p} \quad (2.12)$$

Cette équation admet une solution qui exprime $\underline{p}$ en fonction de $\underline{p}_0$, orientation de la particule à l'instant de référence :

$$\underline{p} = \frac{\underline{\underline{E}} \underline{p}_0}{\|\underline{\underline{E}} \underline{p}_0\|} \quad (2.13)$$

Pour permettre une meilleure compréhension de cette solution, nous allons développer l'expression de (2.13) dans le cas d'écoulements simples tels que le cisaillement ou encore l'élongation.

a) Cas d'un écoulement de cisaillement simple

On étudie ici l'évolution de l'orientation d'une fibre dans un écoulement de type cisaillement simple, caractérisé par un champ de vitesse, dans le repère fixe $(0, x, y, z)$ dont la forme est :

$$\underline{v} = (\dot{\gamma}y, 0, 0)^T \quad (2.14)$$

La fibre est repérée par un angle φ , comme l'indique la figure (2.9).

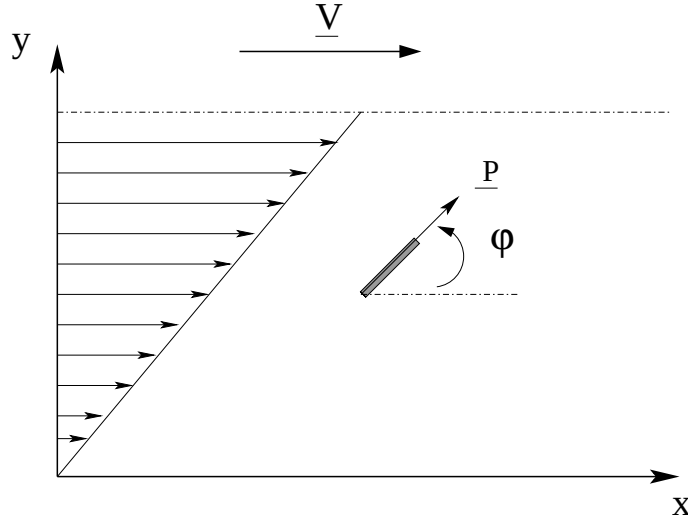


FIG. 2.9 – Écoulement de cisaillement.

La solution analytique de l'équation de Jeffery peut s'obtenir, après avoir déterminé le tenseur gradient généralisé $\underline{E}$ [12]. A l'instant de référence, la particule est supposée être alignée avec les lignes de courant ($\underline{p}_0$ est colinéaire à $\underline{x}$). La solution finale, à l'instant t s'obtient en substituant $\underline{E}$ et $\underline{p}_0$ dans l'équation (2.13) :

$$\underline{p} = \frac{1}{\sqrt{\cos^2(\frac{2\pi t}{T}) + \frac{1-\lambda}{1+\lambda} \sin^2(\frac{2\pi t}{T})}} \left(\cos(\frac{2\pi t}{T}), -\frac{\sqrt{1-\lambda^2}}{1+\lambda} \sin(\frac{2\pi t}{T}), 0 \right)^T \quad (2.15)$$

où T désigne la période de rotation de la particule définie comme suit :

$$T = \frac{4\pi}{\dot{\gamma} \sqrt{1-\lambda^2}} \quad (2.16)$$

La solution analytique ainsi obtenue nous montre que l'orientation d'une particule, dans un fluide newtonien, soumise à un écoulement de cisaillement simple est périodique. La période de ce mouvement dépend du taux de cisaillement $\dot{\gamma}$ ainsi que du facteur de forme β .

La figure (2.10) montre l'évolution de l'angle ϕ pour différentes valeurs de β en fonction du rapport t/T , mettant ainsi en exergue la trajectoire de la particule communément appelée *orbite de Jeffery*. Nous constatons alors que, plus la particule est élancée, plus le temps de séjour de la particule dans le sens de l'écoulement est long. Par ailleurs, le temps mis par la particule lors de la rotation est petit comparativement au temps écoulé lorsque la particule reste alignée avec les lignes de courant. La solution indique, par ailleurs, que si $\beta \rightarrow \infty$, alors la trajectoire de la particule devient stable ; elle s'aligne avec les lignes de courant.

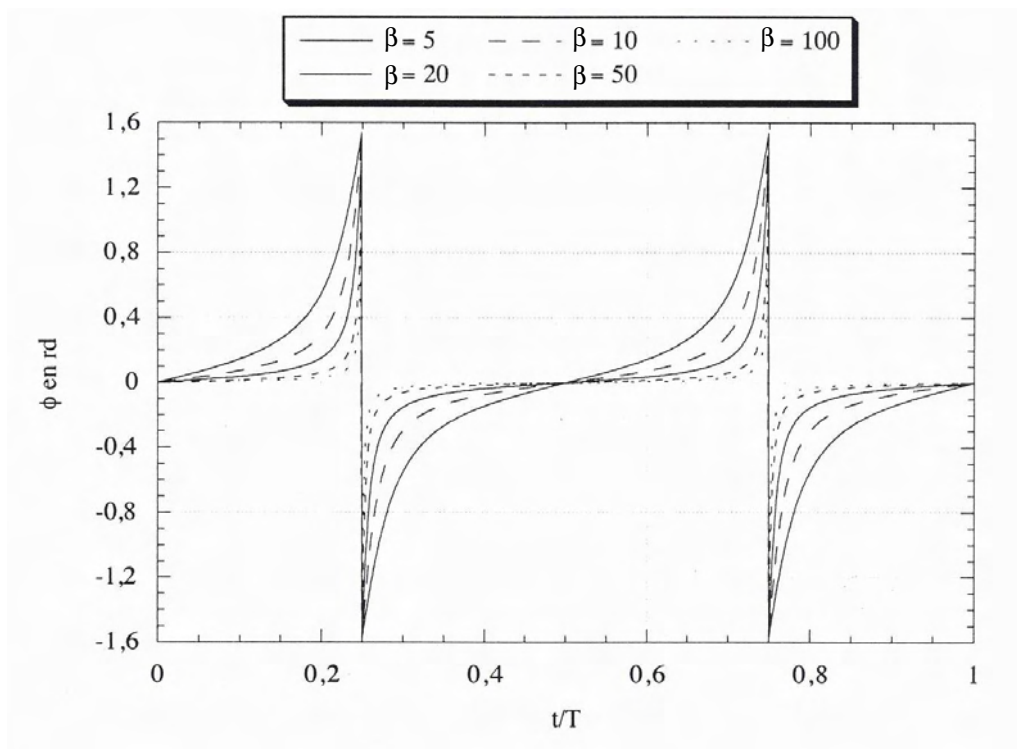


FIG. 2.10 – Variation de l'angle ϕ dans un écoulement de type cisaillement simple.

Plusieurs études expérimentales respectant les hypothèses de Jeffery ont été menées par divers auteurs [98], [130], [138]. Ces études ont permis de valider l'équation d'évolution décrite par Jeffery. Les hypothèses utilisées pour ce modèle sont cependant assez restrictives.

En effet, dans le cas de suspensions chargées de fibres :

- la matrice est généralement non newtonienne,
- la suspension est une solution concentrée de fibres,
- les interactions mécaniques sont importantes,
- les fibres ne sont pas rigides (GFL),
- la longueur des fibres n'est pas constante.

Certains de ces facteurs contribuent à une déviation de l'orbite de Jeffery qui se traduit par une trajectoire de la fibre qui perd, au fur et à mesure de l'écoulement, son caractère périodique [98], [69]. Néanmoins, cette déviation n'est constatée qu'à partir de certaines périodes du mouvement de la fibre. D'autre part, certaines observations expérimentales ont révélé que la déviation de l'orbite de Jeffery était négligeable.

Solution analytique 2d pour les tenseurs d'orientation :

En considérant la solution donnée par l'équation (2.13) et en calculant une solution analytique de $\psi(\underline{p}, t)$, il est alors possible d'aboutir à une solution analytique sur les composantes du tenseur d'orientation [10].

Si nous considérons un écoulement de type cisaillement simple et dans l'hypothèse d'une distribution initiale d'orientation isotrope, alors une solution pour les composantes a_{ij} du tenseur d'orientation $\underline{a}_2$ peut être donnée par :

$$a_{11} = \frac{a_1 + a_1 a_3 - a_3 + a_3^2 - 2}{(a_1 + a_3)^2 - 4} \quad (2.17)$$

$$a_{12} = \frac{a_2(2 - a_1 - a_3)}{2[(a_1 + a_3)^2 - 4]} \quad (2.18)$$

$$a_{22} = \frac{a_1^2 - a_1 + a_1 a_3 + a_3 - 2}{(a_1 + a_3)^2 - 4} \quad (2.19)$$

avec

$$a_1 = 1 - \frac{2\lambda}{1 + \lambda} \sin^2(\omega t)$$

$$a_2 = -\frac{2\lambda}{\sqrt{1 + \lambda^2}} \sin(2\omega t)$$

$$a_3 = 1 + \frac{2\lambda}{1 - \lambda} \sin^2(\omega t)$$

$$\omega = \frac{\dot{\gamma} \sqrt{\lambda^2 - 1}}{2}$$

En substituant les valeurs de a_1 , a_2 et a_3 dans les expressions (2.17), (2.18) et (2.19) et après développement, nous avons alors obtenu les expressions suivantes pour le tenseur d'orientation qui sont fonction uniquement du rapport de forme β de la particule et du taux de cisaillement :

$$a_{11} = \frac{1}{2} \frac{1 + \frac{\lambda}{1-\lambda} \sin^2(\omega t)}{1 + \frac{\lambda^2}{1-\lambda^2} \sin^2(\omega t)} \quad (2.20)$$

$$a_{12} = \frac{\lambda}{4\sqrt{1 + \lambda^2}} \frac{\sin(2\omega t)}{1 + \frac{\lambda^2}{1-\lambda^2} \sin^2(\omega t)} \quad (2.21)$$

$$a_{22} = \frac{1}{2} \frac{1 - \frac{\lambda}{1-\lambda} \sin^2(\omega t)}{1 + \frac{\lambda^2}{1-\lambda^2} \sin^2(\omega t)} \quad (2.22)$$

Cette solution analytique servira de validation au code de calcul Rem3D.

b) Cas d'un écoulement élongationnel

Considérons une élongation uniaxiale dans la direction z . Le champ des vitesses s'écrit alors :

$$\underline{v} = \left(-\frac{\dot{\alpha}}{2}x, -\frac{\dot{\alpha}}{2}y, \dot{\alpha}z \right)^T \quad (2.23)$$

Afin d'aboutir à une solution analytique de l'équation de Jeffery, la solution la plus simple consiste à utiliser les équations d'évolution de l'orientation sous forme lagrangienne. En exprimant le tenseur des gradients généralisé pour le champ de vitesse (2.23) et en le substituant dans l'équation (2.13), on obtient alors l'évolution de l'orientation $\underline{p}$ pour tout instant t :

$$\underline{p} = \frac{1}{\sqrt{e^{2\lambda\dot{\alpha}t}}} \left(e^{-\frac{\lambda\dot{\alpha}t}{2}} \sin \theta_0 \cos \phi_0, e^{-\frac{\lambda\dot{\alpha}t}{2}} \sin \theta_0 \sin \phi_0, e^{\lambda\dot{\alpha}t} \cos \theta_0 \right)^T \quad (2.24)$$

A l'instant initial, l'orientation $\underline{p}_0$ de la particule est quelconque :

$$\underline{p}_0 = (\sin \theta_0 \cos \phi_0, \sin \theta_0 \sin \phi_0, \cos \theta_0)^T \quad (2.25)$$

Les angles θ et ϕ peuvent alors s'exprimer de la manière suivante :

$$\begin{cases} \tan \phi = \tan \phi_0 \\ \tan \theta = \tan \theta_0 e^{-\frac{3}{2}\lambda\dot{\alpha}t} \end{cases} \quad (2.26)$$

L'équation (2.26) indique que l'angle ϕ de la particule reste constant tandis que l'angle θ tend vers 0 ou $\frac{\pi}{2}$ suivant que le taux d'élongation est positif (écoulement convergent) ou négatif (écoulement divergent). En écoulement élongationnel, les particules évoluent ainsi vers un état stationnaire en s'orientant dans la direction d'étirement du fluide. Cette solution analytique servira de validation au code de calcul Rem3D.

Solution analytique 2d pour les tenseurs d'orientation :

De la même manière que dans le cas d'un écoulement de cisaillement simple, il est possible d'établir une relation qui relie les composantes du tenseur d'orientation en fonction du taux d'élongation $\dot{\alpha}$ et du rapport de forme β [10].

Nous considérons un écoulement élongationnel caractérisé par un tenseur gradient des vitesses de la forme :

$$\nabla \underline{v} = \begin{pmatrix} \dot{\alpha} & 0 \\ 0 & -\dot{\alpha} \end{pmatrix}$$

Les composantes du tenseur d'orientation prennent alors pour expression ($t > 0$) :

$$a_{11} = \frac{1 - e^{2\lambda\dot{\alpha}t}}{e^{-2\lambda\dot{\alpha}t} - e^{2\lambda\dot{\alpha}t}} \quad (2.27)$$

$$a_{12} = 0 \quad (2.28)$$

$$a_{22} = \frac{e^{-2\lambda\dot{\alpha}t} - 1}{e^{-2\lambda\dot{\alpha}t} - e^{2\lambda\dot{\alpha}t}} \quad (2.29)$$

2.4 Évolution macroscopique d'une population de fibres

L'équation d'évolution de Jeffery n'est valable que pour des suspensions diluées, c'est à dire ayant une concentration volumique en fibres inférieure à $\frac{1}{\beta^2}$. La détermination de l'orientation des fibres dans des solutions semi-concentrées ou concentrées est un problème plus complexe. La difficulté majeure réside dans la quantification et la prise en compte des interactions d'origine hydrodynamique et des interactions de contact (friction, chocs entre les particules) .

La modélisation de l'orientation des fibres dans un milieu semi-concentré a fait l'objet de quelques études [128]. En revanche, il existe très peu de modèles macroscopiques susceptibles de rendre compte de l'évolution de l'orientation des fibres au cours de l'écoulement. Nous présentons dans cette section un modèle macroscopique issu d'un formalisme phénoménologique : le modèle de Folgar et Tucker [63] largement utilisé dans la littérature.

2.4.1 Le modèle de Folgar et Tucker

Pour modéliser le mouvement des particules dans des solutions semi-concentrées, Folgar et Tucker [63] proposent d'utiliser une approche phénoménologique. L'équation (2.6) a été modifiée par Folgar et Tucker [63] en introduisant un terme de diffusion brownien censé représenter l'effet de l'interaction fibre-fibre sur la rotation des particules, cela donne :

$$\frac{D\underline{a}_2}{Dt} = (\underline{\Omega}(v) \underline{a}_2 - \underline{a}_2 \underline{\Omega}(v)) + \lambda(\underline{\varepsilon}(v) \underline{a}_2 + \underline{a}_2 \underline{\varepsilon}(v) - 2 \underline{\varepsilon}(v) : \underline{a}_4) + 2C_I \dot{\underline{\varepsilon}}(I - 3\underline{a}_2) \quad (2.30)$$

où $\dot{\underline{\varepsilon}} = \sqrt{2 \sum_{ij} \dot{\varepsilon}_{ij}^2}$ est la vitesse de déformation généralisé et C_I est une constante, intrinsèque au matériau, appelée *coefficient d'interaction*.

Cette description tensorielle est plus facile à utiliser que la fonction de distribution d'orientation mais dans l'équation (2.30) apparaît le tenseur $\underline{a}_4$, qui ne peut être résolu qu'à partir de son équation d'évolution dans laquelle intervient le tenseur d'ordre 6 et ainsi de suite. Ce schéma se répète ainsi pour les tenseurs des ordres supérieurs. Pour contourner cette difficulté et permettre une description complète du comportement, on fait appel à une relation de fermeture qui permet de donner une approximation du tenseur $\underline{a}_4$ en fonction du tenseur $\underline{a}_2$ et de substituer le résultat dans l'équation (2.30).

2.4.2 Les équations de fermeture

La recherche d'une approximation de fermeture fait partie des problèmes les plus motivants concernant la modélisation de l'orientation des fibres. De nombreuses méthodes ont été utilisées pour obtenir ces diverses approximations de clôture mais aucune ne s'est avérée suffisante pour prédire avec soin l'orientation dans des écoulements réels.

Nous allons dans les paragraphes qui suivent passer en revue les différentes équations de fermeture susceptibles d'être intégrées dans un code de calcul pour prédire l'état d'orientation des fibres.

Nous avons classé ces équations de fermeture en différentes catégories et les présentons ci-après :

- les approximations « simples »,
- les approximations obtenues par interpolation des approximations simples,
- les approximations utilisant des coefficients ajustables.

a) Approximations simples

Les approximations de fermeture dites «simples» pour a_{ijkl} peuvent être formées par combinaisons linéaires des produits de a_{ij} et du tenseur unité δ_{ij} .

Approximation de fermeture linéaire :

Hand [76] fut l'un des pionniers en proposant une équation de fermeture dite *linéaire*, la plus ancienne. Cette approximation de fermeture est exacte pour une population de fibres orientées aléatoirement. Cependant, pour d'autres types d'écoulements, elle peut parfois fournir des résultats non physiques. En effet la solution est parfois un tenseur non défini positif, qui a, dans ce cas, au moins une valeur propre négative, et dont l'interprétation en termes de probabilité n'a évidemment aucun sens. L'équation de fermeture linéaire se traduit par l'équation suivante :

$$a_{ijkl}^{lin} = c_1 (\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{ij}\delta_{kl} + \delta_{il}\delta_{jk}) + c_2 (a_{ij}\delta_{kl} + a_{ik}\delta_{jl} + a_{il}\delta_{jk} + a_{kl}\delta_{ij} + a_{jl}\delta_{ik} + a_{jk}\delta_{il}) \quad (2.31)$$

Dans le cas $3d$:

$$c_1 = -\frac{1}{35} \text{ et } c_2 = \frac{1}{7}$$

Dans le cas $2d$:

$$c_1 = -\frac{1}{24} \text{ et } c_2 = \frac{1}{6}$$

Dans le cas particulier où le matériau est supposé incompressible, certains termes de l'équation (2.31) disparaissent et la relation de fermeture linéaire peut s'écrire sous la forme tensorielle suivante :

$$\underline{\underline{\dot{\epsilon}}} : \underline{\underline{a_4}} = 2c_1 \underline{\underline{\dot{\epsilon}}} + c_2 \left(2 \underline{\underline{a_2}} \underline{\underline{\dot{\epsilon}}} + 2 \underline{\underline{\dot{\epsilon}}} \underline{\underline{a_2}} + (\underline{\underline{a}} : \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}) \underline{\underline{I_d}} \right) \quad (2.32)$$

Approximation de fermeture quadratique :

Hinch et Leal [80] ont mis en place une approximation de fermeture *quadratique* exacte pour les écoulements qui orientent les fibres dans une seule direction. Cette approximation de fermeture, assez simple, prend la forme suivante :

$$a_{ijkl}^{quad} = a_{ij}a_{kl} \quad (2.33)$$

L'équation de fermeture quadratique est largement utilisée pour son expression compacte, néanmoins elle ne respecte pas toutes les conditions de symétrie du tenseur d'ordre 4. En effet écrire $a_{1122} = a_{11}a_{22}$ ou écrire $a_{1212} = a_{12}a_{12}$ donne des résultats très différents [9]. Par ailleurs, elle est reconnue pour surestimer l'alignement des fibres dans la direction de l'écoulement.

b) Approximations construites par interpolation

Dans l'optique de mettre en place une équation de fermeture ayant un domaine de validité plus large, Hinch et Leal [81] ont cherché une approximation du produit doublement contracté $\underline{\underline{g}}(v) : \underline{\underline{a}}_4$, dans le cas d'une distribution isotrope et d'une orientation parfaitement unidirectionnelle des fibres. Ils proposèrent alors deux équations de fermeture formées par combinaison linéaire des deux approximations de fermeture précédentes. Advani et Tucker [3] ont repris les approximations données par Hinch et Leal en les nommant respectivement approximations *HL1* et *HL2*. Ils ont également développé une nouvelle équation de fermeture dite *Hybride*, basée sur l'idée d'une simple loi de mélange. L'approximation de fermeture hybride prends alors la forme suivante :

$$a_{ijkl}^{hybride} = (1 - f)a_{ijkl}^{lin} + fa_{ijkl}^{quad} \quad (2.34)$$

$$f = 1 - n^n \det(\underline{\underline{a}}_2)$$

f est un scalaire indépendant du repère, défini à partir des invariants de $\underline{\underline{a}}_2$, n désigne ici la dimension spatiale. f prend pour valeur 1 lorsque les fibres sont alignées dans la direction de l'écoulement. Nous retrouvons alors l'approximation quadratique. Enfin, $f = 0$ pour une orientation isotrope des fibres et nous retrouvons l'équation de fermeture linéaire.

Advani et Tucker [2], [3] montrèrent que, pour un certain nombre d'écoulements, les approximations *Quadratiques* et *Hybride* ne produisent jamais des comportements physiques inadmissibles, et ils établirent que leur approximation *Hybride* donne des résultats plus précis que la *Quadratique* dans l'ensemble des écoulements analysés. Cependant, ces dernières approximations de fermeture peuvent entraîner des erreurs importantes lors du calcul des coefficients de $\underline{\underline{a}}_2$ ou de $\underline{\underline{a}}_4$.

c) Approximations contenant des coefficients ajustables

Les réalisations récentes en matière d'approximation de fermeture utilisent des approximations contenant des paramètres ajustables. Le point de départ est toujours l'expression d'une solution particulière, obtenue par des considérations théoriques, pour différents types d'écoulements. Ces solutions particulières relient le tenseur d'ordre 4 au tenseur d'ordre 2 via un certain nombre de paramètres qui sont par la suite ajustés afin de minimiser l'écart entre les prédictions de l'approximation et des résultats significatifs donnés par le calcul de la fonction de distribution d'orientation.

Cisaillement simple : approximation de Bay :

Bay et Tucker [25] furent des pionniers en utilisant l'expression de $\frac{D\underline{\underline{a}}_2}{Dt}$ donnée par Hand (équation 2.10). En simplifiant l'expression de Hand, ils aboutissent à une expression qui relie $\underline{\underline{a}}_4$ et $\underline{\underline{a}}_2$ via certains coefficients qu'ils ajustent afin de minimiser l'écart avec la solution exacte calculée numériquement en écoulement de cisaillement simple via une méthode utilisant les volumes de contrôle. L'interpolation des paramètres dépend de la valeur du coefficient d'interaction C_I .

L'approximation de fermeture obtenue donne de très bons résultats en écoulement de cisaillement simple. Des écarts de 10 % par rapport à la solution exacte apparaissent pour un écoulement combinant elongation et cisaillement.

L'approche de Bay a été reprise par différents auteurs qui utilisent également des paramètres ajustables afin d'évaluer les performances des approximations de fermeture utilisées.

Approximation «Naturelle» 2D :

Verleye [133] part d'une approche basée sur la mécanique des milieux continus pour mettre en place une approximation *Naturelle* dans un cas bidimensionnel. L'approximation de fermeture *Naturelle* est valable pour des fibres ayant un rapport d'allongement élevé ($\lambda = 1$) et pour une suspension ne présentant pas d'interaction entre les particules, ce qui se traduit par un coefficient d'interaction nul ($C_I = 0$). Pour ce faire, Verleye utilise une relation générale qui traduit la dépendance d'un tenseur symétrique du quatrième ordre à l'égard d'un tenseur du second ordre symétrique et de trace imposée.

Cette relation générale s'écrit :

$$\begin{aligned} a_{ijkl} = & \beta_1 S(\delta_{ij}\delta_{kl}) + \beta_2 S(\delta_{ij}a_{kl}) + \beta_3 S(a_{ij}a_{kl}) + \beta_4 S(\delta_{ij}a_{km}a_{ml}) \\ & + \beta_5 S(a_{ij}a_{km}a_{ml}) + \beta_6 S(a_{im}a_{mj}a_{kn}a_{nl}) \end{aligned} \quad (2.35)$$

Notons que S est un opérateur qui transforme un tenseur d'ordre quatre en un tenseur symétrique satisfaisant les conditions de symétrie complètes.

$$S(T_{ijkl}) = \frac{1}{24} \sum_{\sigma} T_{\sigma(ijkl)} \quad (2.36)$$

σ désignant l'opérateur permutation (sans répétition), $S(T_{ijkl})$ est ainsi la somme sur l'ensemble des permutations possibles de $ijkl$ et contient alors $4!$ termes. Les coefficients β_i sont des fonctions du second invariant II_a et du troisième invariant III_a du tenseur $\underline{a}_2$. Pour une orientation bidimensionnelle, les coefficients β_4, β_5 et β_6 sont nuls, les autres coefficients sont alors calculés analytiquement et dépendent uniquement du second invariant de $\underline{a}_2$. L'approximation de fermeture *Naturelle* 2D prend alors la forme suivante :

$$a_{ijkl} = \frac{1}{6} II_a (\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk} + \delta_{ij}\delta_{kl}) + \frac{1}{3} (a_{ij}a_{kl} + a_{ik}a_{jl} + a_{il}a_{jk}) \quad (2.37)$$

$$II_a = \det(\underline{a}_2)$$

Pour une orientation 3D, Verleye considère que les coefficients β_i sont des fonctions polynomiales du deuxième et du troisième invariant de $\underline{a}_2$, ce qui permet d'assurer que l'approximation de fermeture est indépendante du repère choisi. Les coefficients ne peuvent plus être exprimés analytiquement, ils sont alors ajustés numériquement afin de minimiser l'écart entre le modèle prédictif et la solution obtenue avec la résolution de la fonction de distribution de l'orientation dans le cas particulier où $\lambda = 1$ et $C_I = 0$.

Approximations « orthotropes » :

Les équations de fermeture de type *orthotropes* sont similaires à l'approximation de fermeture naturelle, tant au niveau de leur philosophie que de leurs performances. Ce type d'approximations est basé sur les propriétés d'orthotropie du tenseur $\underline{\underline{a}}_4$. Le principe de base est le suivant. Le tenseur $\underline{\underline{a}}_2$ étant symétrique, il existe $(\alpha_1, \alpha_2 \text{ et } \alpha_3)$ valeurs propres de $\underline{\underline{a}}_2$ et $(E_1, E_2 \text{ et } E_3)$ vecteurs propres correspondants tels que dans la base de ses vecteurs propres $\underline{\underline{a}}_2$ se réduit à :

$$\underline{\underline{a}}_2 = \begin{pmatrix} \alpha_1 & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_2 & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_3 \end{pmatrix} \quad (2.38)$$

Nous considérons que : $\alpha_1 \geq \alpha_2 \geq \alpha_3$. La condition de normalisation du tenseur $\underline{\underline{a}}_2$ se traduit par : $\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 = 1$

Il n'y a donc que deux valeurs propres indépendantes. Chaque axe principal, défini par un vecteur propre, est un axe de symétrie pour la population de fibres puisque le tenseur est diagonal. Dès lors, le tenseur $\underline{\underline{a}}_2$ est toujours orthotrope. L'approximation de $\underline{\underline{a}}_4$ recherchée doit respecter les conditions de symétrie contenues dans $\underline{\underline{a}}_2$.

Un tenseur d'ordre 4 présentant les symétries majeures et mineures (comme le tenseur $\underline{\underline{a}}_4$) présente 21 composantes indépendantes. Nous pouvons réduire ce nombre en adoptant une écriture utilisant la contraction des indices comme indiquée ci-dessous :

valeurs de m ou n	notation tensorielle ij ou kl
1	11
2	22
3	33
4	23 ou 32
5	31 ou 13
6	12 ou 21

TAB. 2.1 – Contraction des indices

Le tenseur $\underline{\underline{a}}_4$ peut s'écrire dans la base des vecteurs propres de $\underline{\underline{a}}_2$ sous la forme d'une matrice 6×6 comme suit :

$$\bar{A} = \begin{pmatrix} \bar{A}_{11} & \bar{A}_{12} & \bar{A}_{13} & 0 & 0 & 0 \\ \bar{A}_{21} & \bar{A}_{22} & \bar{A}_{23} & 0 & 0 & 0 \\ \bar{A}_{31} & \bar{A}_{32} & \bar{A}_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \bar{A}_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \bar{A}_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \bar{A}_{66} \end{pmatrix}$$

Les symétries du tenseur $\underline{\underline{a}}_4$ se traduisent par : $\bar{A}_{12} = \bar{A}_{66}$ $\bar{A}_{23} = \bar{A}_{44}$ $\bar{A}_{13} = \bar{A}_{55}$

Par ailleurs, l'égalité : $a_{ijkl} = a_{ij}$ valable dans tout système de coordonnées se traduit par :

$$\begin{aligned}\bar{A}_{11} + \bar{A}_{66} + \bar{A}_{55} &= \alpha_1 \\ \bar{A}_{66} + \bar{A}_{22} + \bar{A}_{44} &= \alpha_2 \\ \bar{A}_{55} + \bar{A}_{44} + \bar{A}_{33} &= \alpha_3\end{aligned}\tag{2.39}$$

Ainsi, en utilisant toutes les propriétés de symétrie de $\underline{a}_4$ ainsi que la condition de normalisation, seuls 3 coefficients de $\underline{\bar{A}}$ sont à déterminer dans la base des vecteurs propres de $\underline{a}_2$: $\bar{A}_{11}, \bar{A}_{22}$ et $\bar{A}_{33}$

Notons enfin que le tenseur $\underline{a}_4$ se déduit de $\underline{\bar{A}}$ en utilisant la matrice de passage ou de rotation comme suit :

$$a_{ijkl} = R_{iq}R_{jr}R_{ks}R_{lt}\bar{A}_{qrst}$$

où a_{ijkl} et $\bar{A}_{qrst}$ représentent respectivement les composantes du tenseur d'orientation d'ordre 4 dans le repère classique et dans le repère constitué des vecteurs propres de $\underline{a}_2$.

La matrice de rotation R_{ij} est définie de la manière suivante :

$$R_{ij} = E_i^j$$

où E_i^j désigne la i^{eme} composante du j^{eme} vecteur propre de $\underline{a}_2$.

Il existe dans la littérature différentes formes d'approximations orthotropes :

- ORS ou « Orthotropic Smooth » qui correspond à une approximation lissée,
- ORF ou « Orthotropic Fitted » valable pour un coefficient d'interaction $C_I \approx 0.01$,
- ORL valable pour un coefficient d'interaction assez faible : $C_I \approx 0.001$,
- ORT valable pour un coefficient d'interaction nul.

Le but des ces approximations est d'exhiber des valeurs de $\bar{A}_{ii}$ pour un écoulement donné et pour un coefficient d'interaction donné. Le lecteur pourra se référer pour plus de détails à l'annexe située à la fin du manuscrit.

Il est possible de développer d'autres relations de fermeture orthotropes à paramètres ajustables en utilisant des écoulements variés pour le calcul de la solution de la fonction de distribution de l'orientation ou en proposant une expression différente de $\bar{A}_{mn}$.

d) Performances des équations de fermeture

La comparaison des différentes relations de fermeture a fait l'objet de nombreuses publications [9], [25], [133], [47]. Les performances des diverses approximations de fermeture ont ainsi été comparées à une solution exacte résultant de l'intégration de la fonction de distribution de l'orientation. Ces approximations ont souvent été testées pour des écoulements simples tels que le cisaillement ou encore l'élongation comme le montrent les figures (2.11) et (2.12) .

Performances des équations de fermeture en cisaillement :

Ces études ont montré que l'approximation de fermeture linéaire peut engendrer des oscillations non physiques. En effet, nous rappelons que dans certains cas tel qu'en écoulement de cisaillement (ou d'élongation), cette relation de fermeture peut donner une solution n'ayant pas de sens physique. Les approximations hybrides et quadratiques n'ont pas ces défauts. Les états transitoires et stationnaires sont respectivement fortement et légèrement surestimés. Elles ont donc une tendance à prédire un alignement des fibres trop unidirectionnel. Les approximations à coefficient ajustable n'ont pas ces défauts.

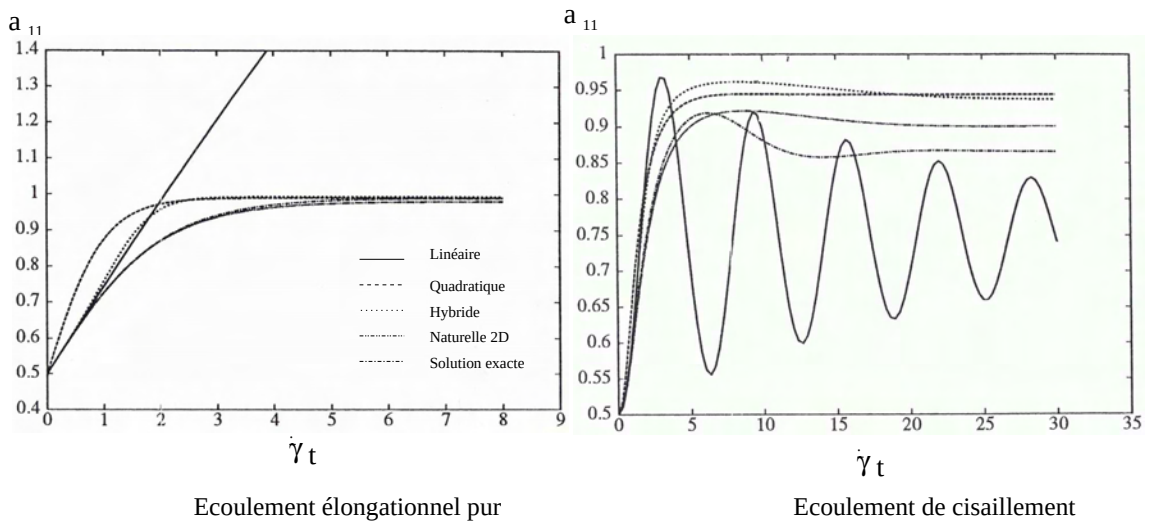


FIG. 2.11 – Comparaison des différentes équations de fermeture dans le cas d'écoulements simples avec $C_I = 0.01$ [133].

Performance des équations de fermeture en élongation :

Tout comme en écoulement de cisaillement, l'équation de fermeture linéaire peut donner des valeurs complètement erronées. Les approximations quadratiques et Hybride sont quant à elles correctes. Elles prédisent correctement les états stationnaires, bien que les états transitoires soient là aussi surestimés. Les approximations de fermeture à coefficient ajustable donnent toujours de meilleurs résultats.

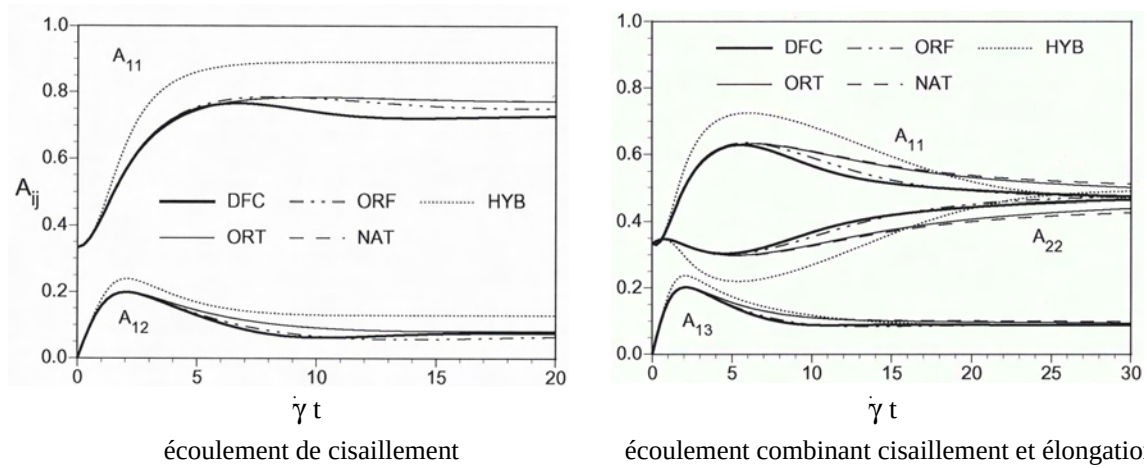


FIG. 2.12 – Comparaison des différentes équations de fermeture dans le cas d'écoulements simples avec $C_I = 0.01$ [134]. DFC désigne la solution exacte

e) Synthèse et conclusion

Le tableau ci-après synthétise les connaissances actuelles en matière d'équations de fermeture. Ce tableau met en exergue les domaines d'application de chaque équation de fermeture ainsi que les tendances généralement observées en terme de prédiction.

En guise de conclusion, nous pouvons dire que l'approximation Naturelle, de par sa nature exacte, fournit les meilleurs résultats. Néanmoins, elle n'est valable qu'en dimension deux.

Les équations de fermeture de type orthotropes sont réputées donner de très bons résultats comme le suggère la figure (2.12) pour des écoulements de type cisaillement simple, élongationnel uni-axial et bi-axial et pour plusieurs écoulements qui combinent le cisaillement et l'élongation.

Cependant, il faut garder à l'esprit que :

- d'une part ces équations de fermeture sont valables pour un rapport de forme des fibres infini ce qui peut en partie expliquer les résultats obtenus par Megally et al [99] (approximations orthotropes présentant un comportement non physique pour a_{1212}),
- d'autre part les coefficients de ces approximations ont été ajustés de manière à minimiser l'écart avec les solutions exactes. Ces ajustements sont effectués pour des valeurs particulières de λ et de C_I . Or, il est difficile, pour une suspension donnée, d'exprimer la valeur d'un coefficient d'interaction et en conséquence de choisir une approximation de fermeture adéquate. La question essentielle est alors : « quelle est la valeur de mon coefficient d'interaction ? »

Afin de mettre en exergue l'importance du coefficient d'interaction et de manière à appréhender son rôle dans la modélisation de l'orientation des fibres, nous lui consacrons le paragraphe suivant.

Approximations de fermeture	Domaine d'orientation	rapport de forme	C_I	d	Tendances
Linéaire	isotrope	$\forall$	$\forall$	$\forall$	donne parfois des résultats non physiques
Quadratique	alignées	$\forall$	$\forall$	$\forall$	mauvaise prédiction pour un état d'orientation isotrope
Hybride	alignées et isotrope	$\forall$	$\forall$	$\forall$	meilleure que quadratique
Naturelle	$\forall$	∞	0	2	exacte
Orthotropes ORS	$\forall$	∞	–	3	sensible à l'état d'orientation
Orthotropes ORF	$\forall$	∞	0.01	3	meilleure que ORS, oscillations non physique pour $C_I < 0.01$
Orthotropes ORL	$\forall$	∞	0.001	3	meilleure que ORS, peu précise pour $C_I > 0.001$
Orthotropes ORT	$\forall$	∞	0	3	très bonnes prédictions

TAB. 2.2 – Domaines d'application des équations de fermeture et tendances générales

2.4.3 Complexité de la détermination d'un coefficient d'interaction

Afin de modéliser l'interaction entre les différentes particules, Folgar et Tucker utilisent l'idée d'un mouvement brownien via l'utilisation d'un coefficient de diffusion D_r , censé modéliser le contact entre les différentes particules. Ainsi les interactions entre les fibres sont vues comme des collisions aléatoires qui vont induire une diffusion de l'orientation des fibres. Folgar et Tucker notent également que ce terme de diffusion n'intervient que lorsqu'il y a écoulement et suppose alors que le coefficient D_r est proportionnel au taux de cisaillement $\dot{\epsilon}$:

$$D_r = C_I \dot{\epsilon} \quad (2.40)$$

La difficulté majeure réside dans la détermination et la quantification du coefficient d'interaction. Ce problème de modélisation touche certains industriels habitués à travailler avec des produits chargés de fibres et utilisant les codes de calcul de rhéologie pour la détermination de l'orientation finale des fibres.

Nous allons essayer de comprendre l'influence ainsi que la signification du coefficient d'interaction sur l'orientation des fibres puis nous présenterons les approches que nous avons jugées les plus pertinentes, utilisées pour la détermination d'un coefficient d'interaction.

a) Signification du coefficient d'interaction

Dans le cas particulier d'un écoulement de cisaillement, l'équation de continuité de la fonction de distribution des orientations s'écrit :

$$\frac{D\psi}{Dt} = C_I \dot{\varepsilon} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} + \dot{\varepsilon} \frac{\partial}{\partial \phi} (\psi \sin^2 \phi) \quad (2.41)$$

La figure (2.13) montre l'influence du paramètre C_I sur la fonction de distribution des orientations calculée à partir de l'équation (2.41), dans le cas stationnaire. On constate que :

- tant que le coefficient d'interaction est non nul, les particules ne sont pas parfaitement alignées dans le sens de l'écoulement,
- une exacerbation de la valeur du coefficient d'interaction a pour effet d'évaser la distribution de probabilité des orientations ψ . En d'autres termes, une augmentation du coefficient C_I a pour effet d'accroître le désalignement moyen des particules.

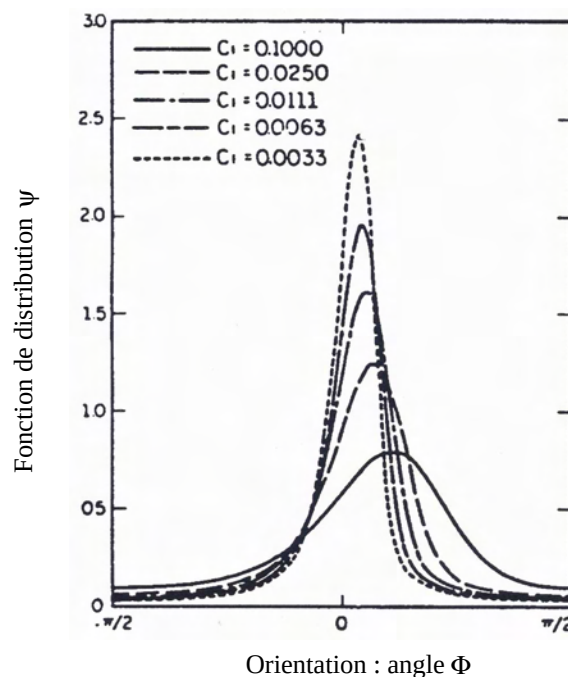


FIG. 2.13 – Influence du paramètre C_I sur la fonction de distribution des orientations pour un écoulement de cisaillement [63]

Pour conclure, nous pouvons dire que l'écoulement a tendance à orienter les fibres dans une certaine direction alors que la diffusion via C_I tend à ramener les fibres vers une distribution isotrope. La distribution d'orientation atteint un état stationnaire résultant de ces deux influences antinomiques. De plus, l'ajout d'un coefficient de diffusion permet de rendre compte du caractère irréversible de l'orientation en écoulement de cisaillement par exemple, en accord avec des observations expérimentales.

b) Influence du coefficient d'interaction

Influence de C_I en écoulements simples :

- En écoulement de cisaillement simple, C_I a une influence majeure sur l'état stationnaire de l'orientation des fibres. En effet, plus C_I est élevé, plus l'orientation des fibres tend vers l'isotropie. En revanche, une valeur de C_I relativement faible se traduit par un alignement des fibres dans la direction d'écoulement.
- En écoulement élongationnel, C_I a une influence majeure sur l'état transitoire de l'orientation. Plus C_I est élevé, plus les fibres tendent très rapidement vers l'état stationnaire. En contrepartie, lorsque C_I est faible, l'état transitoire est long et les fibres mettent un peu plus de temps à converger vers leur état stationnaire.

Relation entre C_I et orientation :

Afin de mettre en exergue l'influence du coefficient d'interaction, nous présentons ci-après l'évolution des composantes de $\underline{a}_2$ en fonction de C_I . En effet, dans le cas d'un écoulement de cisaillement simple, nous pouvons écrire $u_1 = \dot{\gamma}z$ et ainsi établir une solution stationnaire de l'équation de Folgar et Tucker dépendant naturellement de C_I . Les composantes a_{11} et a_{33} du tenseur d'orientation peuvent alors être exprimées en fonction de la composante a_{13} et de C_I comme suit :

$$a_{11} = \frac{a_{13} (\lambda + 1) + 2 C_I}{2 (\lambda a_{13} + 3 C_I)} \quad (2.42)$$

$$(2.43)$$

$$a_{33} = \frac{a_{13} (\lambda - 1) + 2 C_I}{2 (\lambda a_{13} + 3 C_I)} \quad (2.44)$$

avec :

$$a_{13} = \frac{X^{2/3} + 36 C_I^2 + 3 (-1 + \lambda^2) - 12 C_I X^{1/3}}{6 \lambda X^{1/3}} \quad (2.45)$$

et

$$X = \frac{54 C_I + 216 C_I^3 + 3 \sqrt{-3 \lambda^6 + 9 \lambda^4 - 108 \lambda^4 C_I^2 - 9 \lambda^2}}{+216 C_I^2 \lambda^2 - 1296 \lambda^2 C_I^4 + 3 + 216 C_I^2 + 3888 C_I^4}$$

D'autre part, pour des fibres ayant un rapport de forme infini et pour $C_I \rightarrow 0$, nous obtenons les valeurs asymptotiques suivantes :

$$a_{11} = 1 - (4 C_I)^{\frac{2}{3}} ; a_{33} = \frac{1}{2} (4 C_I)^{\frac{2}{3}} ; a_{13} = \frac{1}{2} (4 C_I)^{\frac{1}{3}} \quad (2.46)$$

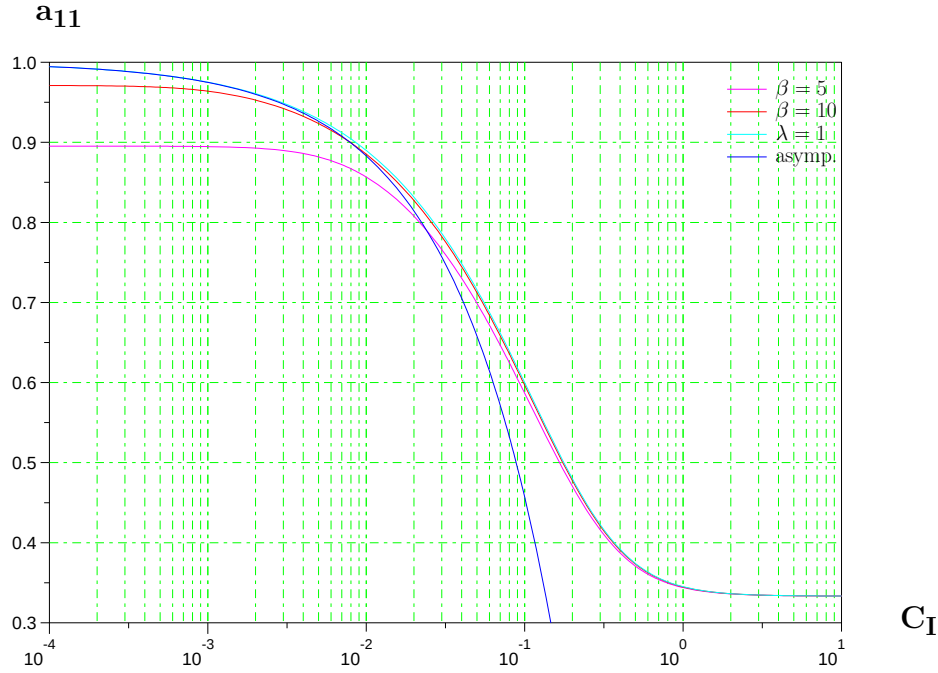


FIG. 2.14 – Variations des composantes a_{11} vs C_I pour un écoulement de cisaillement $\underline{u} = (\dot{\gamma}z, 0, 0)$.

Les figures (2.14), (2.15) et (2.16) présentent l'évolution de a_{11} , a_{13} et a_{33} , comme étant des fonctions de C_I pour différentes valeurs de β . Nous pouvons ainsi remarquer que l'évolution de a_{11} correspond à la valeur asymptotique pour des valeurs de C_I inférieures à 10^{-2} . Pour des valeurs supérieures, on observe une influence sensible sur l'orientation.

c) Détermination d'un coefficient d'interaction

La difficulté majeure réside dans la détermination et la quantification du coefficient C_I qui peut être réalisé par des essais ou plus récemment par simulation numérique directe. Toutes les méthodes présentées considèrent des solutions stationnaires en écoulement de cisaillement.

Détermination de C_I par ajustement :

Folgar et Tucker utilisent des essais de cisaillement simple (géométrie de type couette) sur des suspensions à 8% de fibres de polyamide ou de polyester dans des huiles silicones. Ils supposent entre autres, que ce coefficient est une fonction de la fraction volumique de fibres et de leur facteur de forme, mais qu'il est indépendant de l'état d'orientation des fibres. L'identification du coefficient d'interaction reste néanmoins assez délicate car elle nécessite de connaître la distribution de l'orientation dans l'espace, ce qui n'est pas facile à mesurer. Les valeurs obtenues par Folgar et Tucker, via un ajustement de C_I pour que les prédictions du modèle théorique (résolution de l'équation d'évolution obtenue pour la

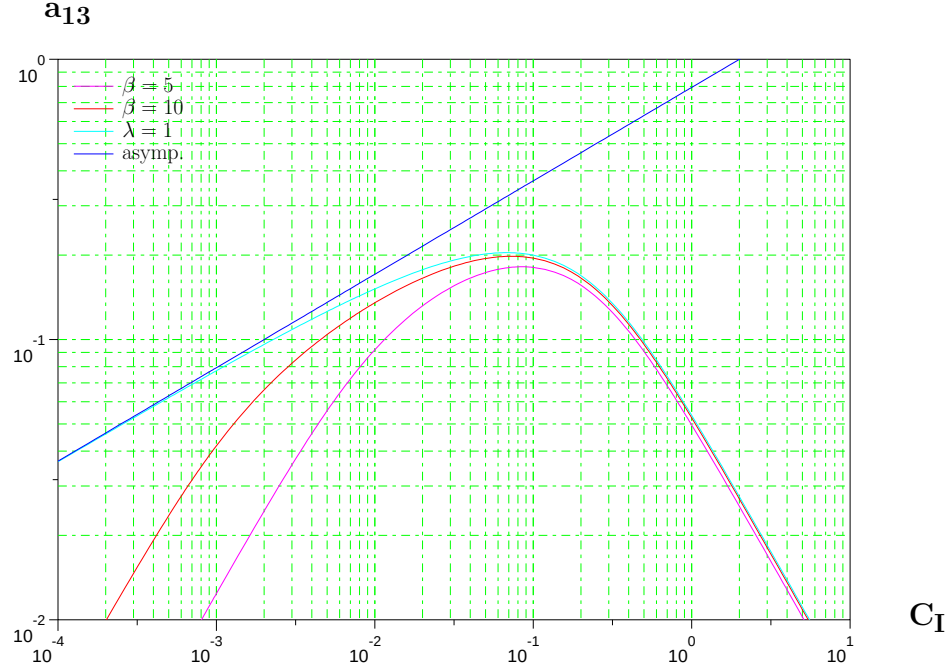


FIG. 2.15 – Variations des composantes a_{13} vs C_I pour un écoulement de cisaillement $\underline{u} = (\dot{\gamma}z, 0, 0)$.

fonction de distribution) correspondent aux mesures de distribution d'orientation, sont de l'ordre de 10^{-2} ou 10^{-3} . La valeur de C_I augmente avec le facteur de forme ou avec la fraction volumique de fibres.

Ranganathan et Advani [116] ont démontré que ces prémisses n'étaient valables que dans l'hypothèse d'une solution semi-diluée de fibres. Au delà d'une certaine concentration de fibres, le coefficient d'interaction décroît exponentiellement avec le produit $\phi\beta$. Ils attribuent ce phénomène à l'encombrement qui, dans des solutions concentrées, minimise la diffusion. L'alignement des fibres dans la direction de l'écoulement est alors favorisé. Pour cela et afin de diminuer le nombre de mesures expérimentales, Ranganathan et Advani [116] proposent de relier le terme C_I à la distance moyenne entre les fibres. En effet, lorsque l'espace inter-fibres diminue, les interactions hydrodynamiques sont plus fortes et l'espace physique pour qu'une particule puisse tourner est réduit. Le coefficient C_I prend alors la forme suivante :

$$C_I = K\left(\frac{h}{l}\right)^{-1} \quad (2.47)$$

Où :

- l représente la longueur de la particule,
- h est la distance moyenne entre deux particules,
- K est une constante déterminée expérimentalement.

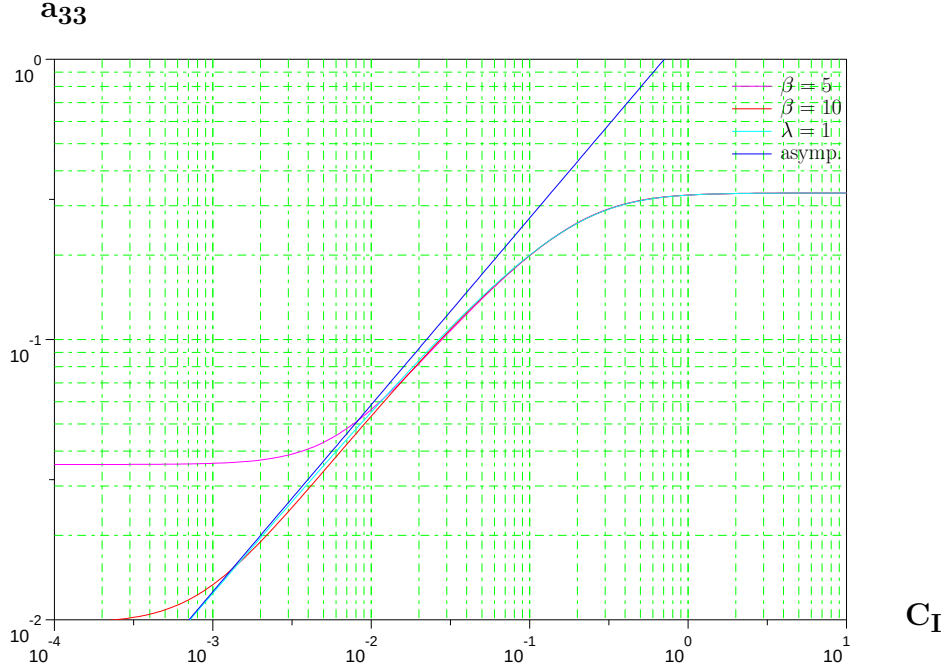


FIG. 2.16 – Variations des composantes a_{33} vs C_I pour un écoulement de cisaillement $\underline{u} = (\dot{\gamma}z, 0, 0)$.

Le facteur K se doit d'être déterminé par des essais de cisaillement. Toutefois, cette expression de C_I permet de s'affranchir de nombreuses manipulations expérimentales fastidieuses (K est constant) et de rendre compte de l'orientation dynamique des fibres.

Une autre méthode pour déterminer C_I peut être obtenue, non pas en résolvant l'équation induite par l'évolution de la fonction de distribution de l'orientation mais en utilisant l'équation d'évolution du tenseur d'ordre 2. Les valeurs de C_I sont alors obtenues par ajustement sur la base des résultats expérimentaux.

Bay [27] utilisa cette méthode pour mettre en place une relation empirique pour le coefficient d'interaction. En confrontant ses calculs à des mesures d'orientations effectuées sur des plaques et des disques injectés à différentes concentrations de fibres et pour différents polymères, Bay propose la relation suivante :

$$C_I = 0.0814e^{-0.7148\phi\beta} \quad (2.48)$$

Notons que pour ce modèle, le coefficient d'interaction décroît lorsque le produit $\phi\beta$ augmente.

Recours à la simulation directe :

La simulation directe permet de quantifier l'état d'orientation des fibres tout en s'affranchissant de l'interaction entre fibres ou entre fibres et parois et constitue ainsi une approche très efficace pour ce qui concerne la détermination de paramètres macroscopiques tel que C_I .

Yamane et *al* [142] utilisent ainsi des méthodes purement numériques par simulation directe pour déterminer des valeurs du coefficient d'interaction. Ils modélisent les interactions entre fibres à courte distance dans un fluide newtonien pour des écoulements de type cisaillement simple. Les interactions inter-particulaires sont modélisées par des forces de lubrification qui, lorsque les fibres sont suffisamment proches ($rayon_{action} \leq \frac{D}{10}$), créent une résistance au mouvement relatif des fibres. Ils obtiennent des valeurs théoriques de C_I comprises entre : $(10^{-7} \leq C_I \leq 10^{-4})$, valeurs relativement faibles par comparaison à celles obtenues par Folgar et Tucker ou Bay.

Koch et Shaqfeh [92] ont calculé par simulation directe le taux de rotation moyen d'une fibre en écoulement de cisaillement simple afin de rendre compte du type d'interaction à considérer. Ils concluent que les interactions hydrodynamiques à longue distance ne doivent pas être négligées pour des suspensions semi-concentrées. Fan et *al* développèrent une approche numérique qui rend compte des interactions modélisées par l'équipe de Yamane (courte distance) mais également des interactions suggérées par Koch et Shaqfeh. Ils considèrent alors un coefficient de diffusion D_r anisotrope proportionnel au taux de cisaillement et un coefficient d'interaction tensoriel $\underline{\underline{C}}$. Ils récupèrent un coefficient d'interaction scalaire on ne considérant que la trace du tenseur : $C_I = \frac{1}{3}Tr(\underline{\underline{C}})$.

Phan-Thien et *al* [107] améliorent le modèle de simulation proposé par Fan en modifiant légèrement les équations utilisées. Les interactions à longue distance sont estimées à partir de la théorie des corps élancés. En ne considérant que la trace du tenseur $\underline{\underline{C}}$, Phan-Thien et *al* proposent la forme suivante pour C_I :

$$C_I = 0.03(1 - e^{-0.224\phi\beta}) \quad (2.49)$$

Les valeurs de C_I sont comprises entre 10^{-3} et 10^{-2} . C_I croît avec $\phi\beta$, en accord avec Folgar et Tucker comme le montre la figure (2.17). Elles contredisent, par contre, les évolutions de Bay et de Ranganathan et *al*. Notons que :

- C_{13} , C_{23} et C_{33} sont faibles comparativement aux autres composantes,
- la composante dans le plan de cisaillement C_{12} n'est en revanche pas négligeable.

Le modèle proposé par Phan-Thien est intéressant dans la mesure où on introduit un coefficient anisotrope.

La figure (2.17) présente certaines valeurs du coefficient d'interaction ajustées par Folgar et Tucker, et celles obtenues par Phan-Thien pour différents rapports de forme. Les valeurs de C_I sont représentées en fonction du produit $\phi\beta$ pour une meilleure comparaison. Nous rappelons que les valeurs de C_I obtenues par Bay proviennent de la résolution de l'équation d'évolution de la fonction de distribution de l'orientation par une méthode utilisant des

volumes de contrôle. La figure (2.17) montre que le coefficient d'interaction est une fonction croissante de la fraction volumique et du rapport de forme des fibres.

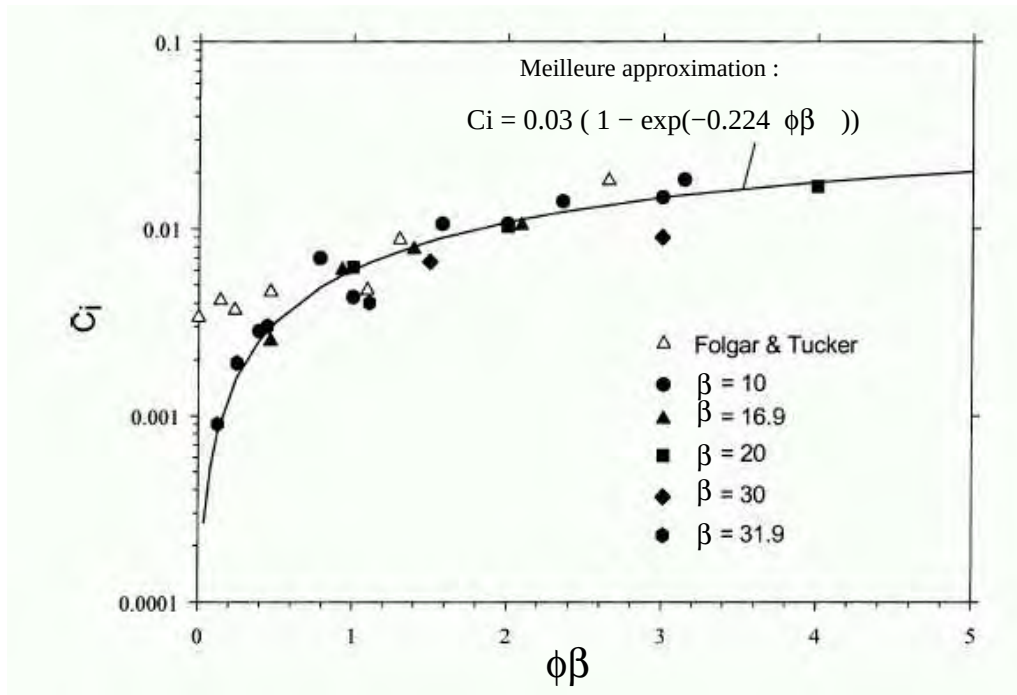


FIG. 2.17 – Coefficient d'interaction en fonction du produit $\Phi\beta$ (fraction volumique de fibres $\times$ rapport de forme). Valeurs obtenues par Phan-Thien et *al* pour différents β par simulation directe [107] et par Folgar et Tucker : essais sur huile silicone

2.4.4 Remarque relative au rapport de forme des particules

C'est en observant le mouvement de fibres cylindriques en suspension dans des fluides newtoniens soumis à des écoulements de cisaillement (Couette, Poiseuille) que Goldsmith et Mason [73] constatent que le théorie de Jeffery s'applique pour des fibres cylindriques. Le rapport de forme des particules n'est alors plus défini de la même manière et ils introduisent un rapport de forme équivalent β_e .

Harris et Pittman [78] proposent alors la relation empirique suivante :

$$\beta_e = 1.14\beta^{0.844} \quad (2.50)$$

2.5 Autres modèles macroscopiques

2.5.1 Approche micromécanique : modèle de Koch et Shaqfeh

Koch et Shaqfeh [92] ont proposé un modèle issu d'une approche micromécanique pour décrire l'orientation d'une particule dans un milieu semi-dilué. Ils considèrent un milieu où les fibres ont une orientation unidirectionnelle dans le sens de l'écoulement (milieu isotrope transverse), les fibres ayant un rapport de forme infini. Ils s'inspirent des travaux de Shaqfeh et Fredrikson [123] afin de prendre en compte, de manière explicite, les interactions hydrodynamiques dans une solution semi-concentrée. L'équation d'évolution de l'orientation prend alors la forme suivante :

$$\frac{D\underline{p}}{Dt} = \nabla \underline{v} - Tr(\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{v}) \underline{p} \otimes \underline{p}) \underline{p} + H Tr(\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{v}) \underline{p} \otimes \underline{p}) (\underline{n} - (\underline{p} \cdot \underline{n}) \underline{p}) \quad (2.51)$$

où $\underline{n}$ est un vecteur unitaire qui caractérise la matrice isotrope transverse et H est une fonction qui dépend de :

- ξ , défini comme étant l'angle entre la particule étudiée et l'axe d'anisotropie de la matrice,
- R et L qui sont respectivement le rayon et la longueur de la particule,
- et enfin X qui représente la longueur d'écran du volume élémentaire représentatif.

Les deux premiers termes de l'équation d'évolution de Koch et Shaqfeh sont équivalents à l'équation de Jeffery dans le cas particulier où les particules ont un facteur de forme infini. Le troisième terme représente la contribution de la matrice, supposée ici anisotrope, sur la rotation de la particule.

2.5.2 Évolution de l'orientation dans un milieu isotrope transverse

En s'appuyant sur les résultats d'Eshelby appliqués aux cas d'une inclusion sphéroïdale rigide dans une matrice isotrope transverse, Meslin [100] étend le modèle de Jeffery sur les suspensions diluées de fibres au cas des suspensions semi-diluées.

a) Modèle proposé par Meslin

Nous présentons brièvement dans ce paragraphe l'équation d'évolution de l'orientation obtenue par Meslin. Nous ne rappelons pas le contexte théorique utilisé pour mettre en place le modèle d'orientation macroscopique. L'équation d'évolution de l'orientation obtenue par Meslin s'écrit de façon intrinsèque :

$$\frac{D\underline{p}}{Dt} = \underline{\underline{\Omega}}(\underline{v}) \underline{p} + \lambda(\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{v}) \underline{p} - (\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{v}) : \underline{p} \otimes \underline{p}) \underline{p}) \quad (2.52)$$

avec :

$$\lambda = \frac{\alpha_1 I_3 - 2\alpha_3 I_0 - (3\alpha_2 + 2\alpha_1 - 2\alpha_3) I_1}{2\alpha_3 I_0 + (2\alpha_1 + 3\alpha_2 - 4\alpha_3) I_1 + \alpha_1 I_3 + 2(\alpha_1 - \alpha_3) I_2}$$

Où I_0 , I_1 , I_2 et I_3 représentent les intégrales suivantes, fonction du rapport de forme β des particules et des facteurs rhéologiques α_i de la matrice :

$$\begin{aligned} I_0 &= \int_0^1 \frac{x^6}{\Delta} dx \\ I_1 &= \int_0^1 \frac{\beta^2 x^4 (1-x^2)}{\Delta} dx \\ I_2 &= \int_0^1 \frac{\beta^4 x^2 (1-x^2)^2}{\Delta} dx \\ I_3 &= \int_0^1 \frac{\beta^6 (1-x^2)^3}{\Delta} dx \end{aligned}$$

avec :

$$\Delta = \frac{a}{\alpha_1} \{ \alpha_1 \beta^2 (1-x^2) + \alpha_3 x^2 \} \{ \alpha_3 \beta^4 (1-x^2)^2 + \beta^2 (3\alpha_2 + \alpha_1 - 2\alpha_3) + \alpha_3 x^4 \}$$

Les paramètres rhéologiques de la matrice anisotrope (fluide + fibre) sont issus d'un *modèle différentiel* [100]. Ces paramètres sont des fonctions qui dépendent :

- du rapport de forme β des particules,
- de la fraction volumique ϕ des fibres,
- de la viscosité η de la matrice.

Dans le cas d'une matrice newtonienne, les facteurs rhéologiques de la matrice ont une expression simple :

$$\alpha_i = 2\eta \quad \text{pour} \quad 1 \leq i \leq 3$$

Dans le cas général, les paramètres rhéologiques α_i sont issus de la résolution numérique d'un système de trois équations différentielles assez complexes que nous n'avons pas explicité, de type :

$$d\alpha_i = f(\alpha_i, \beta, \phi, \eta)$$

La résolution numérique se fait via une méthode de type Runge Kutta d'ordre 4.

b) Rôle du paramètre λ

L'équation d'évolution proposée pour les milieux isotropes transverses a une forme tout à fait similaire à celle proposée par Jeffery [84]. Cependant une différence majeure réside dans la valeur du paramètre λ . En effet, dans le cas des solutions diluées, ce paramètre dépend uniquement du facteur de forme de la particule. En revanche, dans le cas des milieux isotropes transverses, le paramètre λ est non seulement une fonction du rapport de forme β des particules, mais aussi de la fraction volumique de fibres et des caractéristiques rhéologiques de la matrice comme le montre la figure (2.18).

La courbe 2.18 présente l'évolution du facteur λ en fonction du facteur de forme β des particules et pour différentes concentrations.

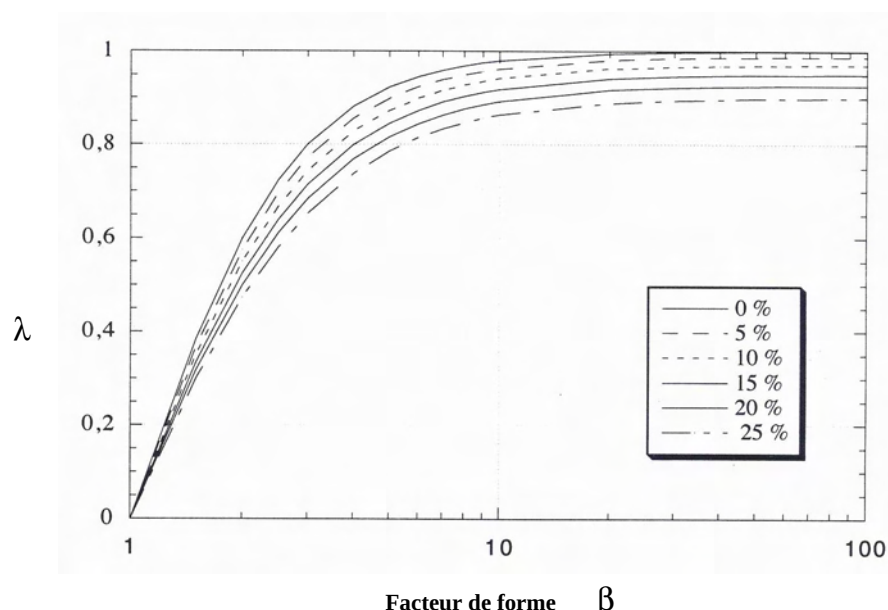


FIG. 2.18 – Variation du paramètre λ en fonction du facteur de forme β , pour différentes concentrations [100].

Cette figure met en évidence l'influence de la concentration des fibres sur le paramètre λ et montre notamment deux points importants :

- λ diminue lorsque la fraction volumique de fibres augmente, phénomène qui n'est pris en compte ni par la théorie de Jeffery, ni par le modèle de Folgar et Tucker,
- λ tend vers 1 lorsque les particules sont élancées ($\beta \rightarrow \infty$) et ceci quelle que soit la concentration, ce qui rejoint les prémisses de Jeffery et Folgar et Tucker.

c) Comparaison des modèles

Après comparaison dans le cas d'un écoulement de type cisaillement simple avec le modèle proposé par Folgar et Tucker, Meslin constate que le paramètre λ a une même influence que le coefficient d'interaction C_I . Plus λ est petit, plus les particules sont désalignées par rapport aux lignes de courant. Il constate également que la fonction de distribution de l'orientation est très sensible à ce paramètre comme le montre la figure (2.19). En d'autres termes, même pour des grands facteurs de forme de particules, λ a une influence non négligeable sur la distribution des orientations. D'un point de vue qualitatif, le modèle de Meslin corrobore les tendances prédites par le modèle macroscopique de Kock et Shaqfeh : les interactions de type hydrodynamique ont tendance à ralentir la rotation des particules.

Pour conclure, nous pouvons dire que le modèle proposé par Meslin permet de rendre compte des interactions de type hydrodynamiques en s'affranchissant des problèmes causés par la détermination d'un coefficient d'interaction. Toutefois Meslin note, après comparaison avec les résultats expérimentaux de Stover et *al* [126] que le paramètre λ surestime les effets dus à la concentration. Par ailleurs, d'un point de vue numérique, la détermination des nombreux paramètres rhéologiques est fastidieuse et certainement très coûteuse en temps de calcul.

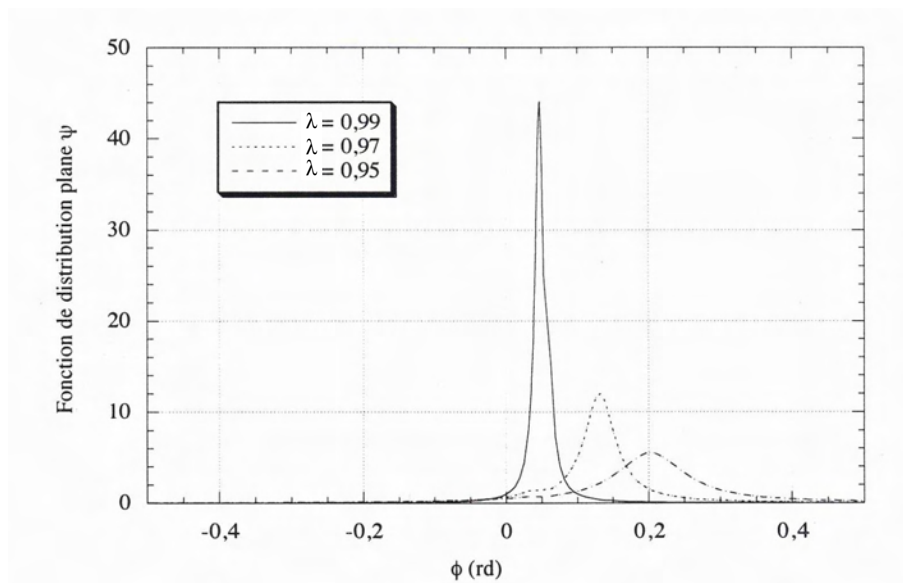


FIG. 2.19 – Influence du paramètre λ à t et $\dot{\gamma}$ fixés sur la fonction de distribution de probabilité des orientations, dans un écoulement de cisaillement simple.

2.5.3 Analogie avec le modèle viscoélastique PomPom

Il existe de grandes similitudes entre le problème régi par l'orientation des particules dans une suspension et le problème viscoélastique. La structure topologique des polymères est telle que l'histoire subie par le matériau influe sur son comportement. Cet effet mémoire est attribué à la viscoélasticité du matériau.

Le comportement viscoélastique d'un polymère peut être décomposé en un ensemble de modes qui traduisent le comportement d'une structure topologique particulière, une molécule Pom-Pom. Dans le cas particulier des polymères branchés, chaque molécule est composée de deux séries de ramifications et d'une branche centrale comme le montre la figure (2.20).

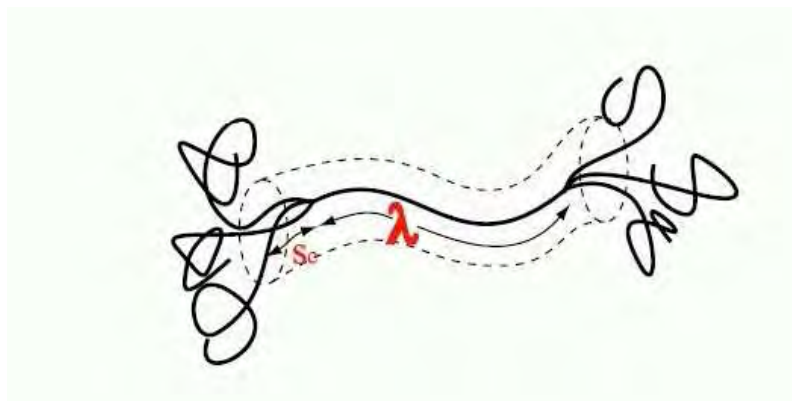


FIG. 2.20 – Modèle Pom-Pom

Si nous considérons un seul mode, le modèle est déterminé géométriquement par la longueur de la branche centrale s_b , la longueur des bras s_a et le nombre de branches q . La configuration de la molécule dans l'écoulement est décrite par deux variables dynamiques : $\underline{\underline{S}}$ et λ' qui représentent respectivement la distribution de l'orientation de la branche centrale et son étirement.

L'évolution du tenseur d'orientation macromoléculaire est décrite via une équation différentielle similaire à celle rencontrée pour des suspensions chargées de fibres :

$$\frac{D\underline{\underline{S}}}{Dt} = \nabla \cdot \underline{\underline{v}} \underline{\underline{S}} + \underline{\underline{S}} \nabla \cdot \underline{\underline{v}}^T - 2(\underline{\underline{S}} : \nabla \cdot \underline{\underline{v}}) \underline{\underline{S}} - \frac{1}{\theta_b} (\underline{\underline{S}} - \underline{\underline{I}}_d/3) \quad (2.53)$$

θ_b désigne un terme de relaxation de la branche centrale, qui est fonction du temps de relaxation θ_a des bras qui, à son tour, est fonction de la pénétration s_c des bras dans le tube. Le facteur $\frac{1}{\theta_b}$ joue donc un rôle analogue à celui joué par le coefficient d'interaction C_I . Dans l'équation (2.53), l'existence du terme $2(\underline{\underline{S}} : \nabla \cdot \underline{\underline{v}}) \underline{\underline{S}}$ permet au tenseur d'orientation macromoléculaire de conserver sa trace unitaire, comme dans le cas des chargés fibres.

Afin de résoudre un problème viscoélastique, il est également nécessaire de calculer l'étirement λ' de la chaîne, qui se fait via la résolution d'une équation de type advection. L'étirement de la chaîne ne sera possible que s'il est strictement inférieur au nombre de bras q de cette même chaîne. Si $\lambda' = q$, il devient nécessaire de calculer la pénétration s_c des bras qui s'exprime, là aussi, au moyen d'une équation de type advection. En général, l'échelle temporelle du mécanisme de pénétration est suffisamment rapide pour être négligée devant les autres (temps d'orientation macromoléculaire et temps d'étirement). Enfin, la résolution complète d'un problème viscoélastique conduit au calcul de l'extra-contrainte qui est fonction de l'orientation macromoléculaire et de l'étirement de la chaîne.

Entre les expressions (2.53) et (2.30), les similarités sont claires, surtout dans le cas où les fibres ont un rapport de forme quasi infini. Les mêmes méthodes de résolution pourront donc être utilisées pour solutionner des problèmes à connotation physique totalement différente.

2.6 Conclusion et choix d'un modèle

Dans ce premier chapitre, nous avons mis en évidence deux difficultés majeures dans la détermination d'un état représentatif de la distribution de l'orientation des fibres. Le problème régi par l'orientation des fibres dans une suspension s'avère être d'une complexité ardue, aussi bien d'un point de vue expérimental, pour la détermination quantitative d'un état représentatif de l'orientation, que d'un point de vue théorique pour la détermination d'une loi susceptible de décrire l'évolution de l'orientation des particules.

L'ensemble des articles bibliographiques portant sur l'orientation des fibres au cours du procédé d'injection s'accordent sur le fait que :

- Pendant le procédé de mise en forme, les fibres s'orientent dans des directions privilégiées qui sont imposées par le fluide. Cette orientation se fait suivant des plans parallèles à la direction de l'écoulement ; une structure en couches suivant l'épaisseur, caractérisée par une distribution d'orientation propre à chaque couche,

est alors observée. Les fibres sont souvent orientées perpendiculairement à la direction de l'écoulement au coeur de la pièce et parallèlement à cette direction en peau.

- Différentes observations ont permis de mettre en évidence l'influence de la déformation du fluide sur l'orientation des fibres :
 - en écoulement de cisaillement simple, une fibre seule subit un mouvement de rotation périodique avec un temps de séjour prépondérant dans la direction de l'écoulement,
 - en écoulement élongationnel, les fibres tendent vers un écoulement d'équilibre stable et s'orientent dans la direction d'étirement du fluide.
- Les paramètres d'injection, le rapport de forme des particules ainsi que la rhéologie de la matrice ont une influence significative sur l'orientation des particules. La géométrie de l'écoulement avec notamment la géométrie du seuil d'injection est un paramètre majeur.

La deuxième partie de ce chapitre a été dédiée à la description des modèles macroscopiques issus d'approches différentes.

L'équation de Jeffery donne une description de l'orientation des particules dans le cas d'une solution diluée de fibres et qui corrobore plusieurs études expérimentales. Les hypothèses du modèle de Jeffery sont en revanche assez restrictives (fluide newtonien, solution diluée de fibres, interactions de type hydrodynamiques négligées).

Dans le cas des particules infiniment minces, Koch et Shaqfeh proposent un modèle pour les suspensions en régime semi-dilué. Là encore, puisque l'épaisseur des particules est négligée, ce modèle ne permet pas d'obtenir une description complète de l'état d'orientation des particules, notamment dans le cas d'un écoulement de cisaillement.

Plus récemment, Meslin a mis en place un modèle pour les fluides isotropes transverses, valable pour les suspensions semi-diluées de fibres. Les interactions hydrodynamiques sont bien prises en compte via un facteur λ , analogue au coefficient d'interaction, et qui s'affranchit des problèmes de détermination expérimentale rencontrés avec C_I . Cependant ce facteur surestime les effets dus à la concentration des fibres, et les valeurs obtenues pour l'orientation ne confirment pas certaines études expérimentales validées par le modèle de Jeffery. Cependant, le modèle reste prometteur pour l'amélioration des prédictions.

Enfin, il est possible, pour modéliser l'évolution de l'orientation des particules, d'utiliser une approche phénoménologique des interactions. Dans ce cas, les paramètres introduits doivent être identifiés par des mesures expérimentales, qui aboutissent à des valeurs souvent antinomiques. Les faiblesses du modèle de Folgar et Tucker se retrouvent dans le fait d'utiliser un coefficient d'interaction qui est souvent déterminé après ajustement de la solution numérique avec des valeurs expérimentales. Ce coefficient d'interaction dépend de la nature de la matrice, du type d'écoulement, de la concentration en particules, du rapport de forme des fibres ainsi que de l'état d'orientation des fibres. A ce jour, il n'existe pas de modèles empiriques ou théoriques fiables permettant de déterminer ce coefficient d'interaction. Le deuxième inconvénient est relatif à l'utilisation d'une équation de fermeture qui,

pour les plus précises, dépend du coefficient d'interaction, lui même difficile à évaluer.

Nonobstant ces faiblesses, le modèle est largement utilisé dans la littérature. De plus, les résultats obtenus avec le modèle proposé par Folgar et Tucker corroborent certains résultats expérimentaux de différents auteurs (sous la condition, bien entendu, d'utiliser un bon coefficient d'interaction).

Notre code de calcul ayant une vocation industrielle et dans une optique de minimiser les temps de calcul, nous avons opté pour le modèle de Folgar et Tucker.

Chapitre 3

Couplage rhéologie orientation

La modélisation du procédé d'injection nécessite la construction d'une équation constitutive générale qui représente le comportement du matériau pour les différents cas d'écoulements rencontrés. Dans le cas d'un composite thermoplastique renforcé de fibres, il est nécessaire d'exprimer le champ de contrainte du matériau en fonction de la distribution d'orientation, du taux de déformation et des paramètres du polymère renforcé tels que la fraction volumique de fibres, le rapport de forme des fibres ainsi que la viscosité de la matrice.

Dans ce chapitre, nous nous attacherons, en premier lieu, à présenter les différents modèles de comportement rhéologique appliqués aux suspensions chargées de fibres. Le comportement macroscopique d'un matériau est obtenu après une étape d'homogénéisation qui consiste à moyenner des grandeurs obtenues via un formalisme micromécanique. Cette étape d'homogénéisation fait ainsi apparaître dans la loi de comportement un terme qui représente la contribution des fibres au tenseur des contraintes macroscopiques.

Après une brève présentation des moyens d'obtention classiquement utilisés pour mettre en place un modèle de comportement macroscopique, la première partie de ce chapitre est consacrée à la description des différentes approches utilisées pour estimer cette contribution des fibres au tenseur des contraintes macroscopiques.

Des hypothèses subsidiaires, notamment sur la forme des particules et la concentration des solutions, sont alors nécessaires pour quantifier la contribution des fibres au tenseur des contraintes et vont donner lieu à des théories différentes. Nous présenterons ainsi les principales lois de comportement rencontrées dans la littérature, lois issues de théories différentes et susceptibles de modéliser le comportement rhéologique des suspensions chargées de fibres.

Nous clôturerons ce chapitre par le choix d'un modèle concernant la loi de comportement rhéologique.

Sommaire

3.1 Quelques généralités sur les lois de comportement pour les matériaux chargés	57
3.1.1 L'homogénéisation spatiale	57
3.1.2 Hypothèses utilisées pour la mise en place de lois de comportement	59
3.1.3 Une loi de comportement générique	59
3.1.4 Caractère rhéofluidifiant et milieux concentrés ?	60
3.2 Les modèles basés sur la théorie des corps élancés	61
3.2.1 Le régime de concentration dilué	61
3.2.2 Le régime de concentration semi-dilué	61
a) Une première approche : l'étude de Batchelor	61
b) Le modèle de Dinh et Armstrong	62
c) Une amélioration du modèle : l'analyse de Fredrickson et Shaqfeh	64
d) Les travaux de Mackaplow et Shaqfeh	65
3.2.3 Utilisation d'un facteur correctif	65
3.3 Prise en compte du caractère rhéofluidifiant du polymère	67
3.3.1 Le modèle rhéologique de Soulloumiac	67
a) Expression générale du tenseur des contraintes	67
b) Limitations du modèle	68
3.3.2 Vers le régime concentré : le modèle de Thomasset	68
a) Description du modèle	68
b) La loi de comportement	69
c) Identification des paramètres rhéologiques	69
3.4 D'autres théories	71
3.4.1 Le cas des particules sphéroïdales	71
a) Le régime de concentration dilué	71
b) Un paradoxe de la théorie	71
c) Un modèle pour les fluides anisotropes transverses : vers un régime semi-dilué	72
3.4.2 La théorie moléculaire de Doi et Edwards	73
a) Une extension de la théorie moléculaire : les travaux de Petrie	74
b) Le modèle de Fan et al.	74
3.4.3 Les suspensions viscoélastiques	75
a) Travaux d'Ait-Kadi et <i>al.</i>	75
b) Travaux de Ramazani et <i>al.</i>	76
3.5 Synthèse et discussion	76
3.5.1 Comparaison de certains modèles rhéologiques	76
3.5.2 En synthèse	78
3.6 Équation de fermeture et thermodynamique	80
3.6.1 Stabilité thermodynamique	80
3.6.2 Stabilité énergétique	80
3.6.3 Conclusion de l'étude	81
a) Équations de fermeture compatibles avec le second principe	81
b) Équations de fermeture non compatibles	81
3.7 Conclusion	82

3.1 Quelques généralités sur les lois de comportement pour les matériaux chargés

L'obtention d'une loi de comportement se fait en deux étapes. La première étape permet d'obtenir les grandeurs macroscopiques associées au comportement microscopique du matériau. C'est une étape classique d'« *homogénéisation spatiale* » qui permet d'obtenir des quantités moyennes à partir d'un formalisme micromécanique.

La deuxième est une étape d'« *homogénéisation statistique* » qui permet d'obtenir les grandeurs macroscopiques moyennes à partir de l'état d'orientation des particules obtenu via un formalisme statistique.

La section introductive suivante présente d'une façon générale l'approche fréquemment utilisée pour obtenir un modèle de comportement macroscopique en utilisant une approche micromécanique. Nous introduisons également les différents modèles qui seront par la suite développés.

3.1.1 L'homogénéisation spatiale

Dans toutes les théories, les lois de comportement pour les matériaux chargés ont été obtenues via les techniques d'homogénéisation classiques. Batchelor [22] a apporté une nouvelle approche pour passer d'un niveau de description microscopique de l'écoulement à l'expression de la contrainte macroscopique moyenne dans la suspension. Selon Batchelor, les champs de contraintes et de vitesses macroscopiques doivent être définis à partir d'un volume moyen V communément appelé « volume élémentaire représentatif » qui permet de développer l'équation constitutive pour le champ de contrainte. Les grandeurs macroscopiques sont définies comme étant les moyennes spatiales sur ce volume V des grandeurs microscopiques associées. Ainsi le champ de vitesse macroscopique $\underline{v}$ et son taux de déformation $\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{v})$ s'écrivent :

$$\underline{v} = \langle \underline{u} \rangle = \frac{1}{V} \int_V \underline{u} dv \quad (3.1)$$

$$\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{v}) = \frac{1}{2V} \int_V (\nabla \underline{u} + (\nabla \underline{u})^T) dv \quad (3.2)$$

Le symbole ∇ représente l'opérateur gradient. Le vecteur $\underline{u}$ correspond à la vitesse microscopique qui peut être définie comme suit :

$$\underline{u} = \underline{v} + \underline{u}'$$

où le vecteur $\underline{u}'$ symbolise la fluctuation de vitesse tel que $\langle \underline{u}' \rangle = 0$. En séparant les contributions dues au fluide et celles dues à la présence des particules, cette relation s'écrit :

$$\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{v}) = \frac{1}{V} \int_{V-\sum V_i} \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{u}) dv + \frac{1}{V} \sum_i \int_{V_i} \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{u}) dv$$

où V_i est le volume occupé par la fibre i . Les particules étant supposées rigides, la relation précédente est simplifiée et s'écrit :

$$\underline{\underline{\varepsilon}}(v) = \frac{1}{V} \int_{V-\sum V_i} \underline{\underline{\varepsilon}}(u) dv \quad (3.3)$$

Batchelor définit alors le tenseur des contraintes macroscopiques de la manière suivante :

$$\underline{\underline{\sigma}} = \frac{1}{V} \int_V (\underline{\underline{\tau}} - \rho \underline{u}' \otimes \underline{u}') dv \quad (3.4)$$

où $\underline{\underline{\tau}}$ désigne le tenseur des contraintes microscopiques, $\otimes$ correspond à l'opérateur produit tensoriel et ρ exprime la densité moyenne de la suspension considérée. Dans l'expression précédente, la matrice étant supposée newtonienne, le tenseur des contraintes microscopiques s'écrit :

$$\underline{\underline{\tau}} = -p \underline{\underline{I}}_d + 2\eta \underline{\underline{\varepsilon}}(u) \quad (3.5)$$

Notons que le terme $-\rho \underline{u}' \otimes \underline{u}'$ correspond à un flux dû aux fluctuations de la vitesse microscopique et donc l'expression $-\rho \langle \underline{u}' \otimes \underline{u}' \rangle$ exprime la contribution des fluctuations microscopiques au tenseur des contraintes. En utilisant les équations (3.3), (3.4), et (3.5) Batchelor obtient la relation suivante :

$$\underline{\underline{\sigma}} = -P \underline{\underline{I}}_d + 2\eta \underline{\underline{\varepsilon}}(v) + \underline{\underline{\Sigma}}_p \quad (3.6)$$

Dans cette équation, P représente une pression macroscopique η désigne la viscosité de la matrice sans charge et $\underline{\underline{\Sigma}}_p$ la contribution des particules au tenseur des contraintes macroscopiques définie comme suit :

$$\underline{\underline{\Sigma}}_p = \frac{1}{V} \sum_i \int_{S_i} \rho \underline{n} \otimes \underline{x} ds \quad (3.7)$$

où $\underline{n}$ est la normale extérieure à la surface S_i de la particule i et $\underline{x}$ correspond à la position du point courant.

L'homogénéisation spatiale suppose entre autre que l'orientation des particules est connue. Afin d'obtenir un tenseur des contraintes macroscopiques, il faut procéder à une homogénéisation dite « statistique » sur l'ensemble des orientations possibles.

Il existe dans la bibliographie de nombreuses lois de comportement qui ne diffèrent que dans l'expression de $\underline{\underline{\Sigma}}_p$.

3.1.2 Hypothèses utilisées pour la mise en place de lois de comportement

Plusieurs lois de comportement ont été proposées pour des suspensions de fibres rigides placées dans un fluide.

Nous listons ci-après les hypothèses fréquemment utilisées lors de la mise en place des lois de comportement :

- la longueur d’une fibre est petite devant les dimensions de l’écoulement,
- le rapport de forme β des fibres est uniforme,
- la diffusion brownienne due à la rotation des fibres pendant l’écoulement est négligée,
- la matrice polymère est newtonienne,
- le matériau est incompressible,
- les forces d’inertie sont négligées.

Notons que la majeure partie des travaux rencontrés font référence à des lois de comportement prenant en compte une matrice newtonienne pour des régimes de concentration diluée à semi-diluée. Il existe peu de modèles rhéologiques faisant référence au caractère rhéofluidifiant de la matrice ou valables pour des régimes de concentrations élevées.

Pour obtenir une estimation du terme $\underline{\Sigma}_p$, il est nécessaire de faire des hypothèses supplémentaires sur la forme des particules et sur la concentration de la suspension. Il existe dans la littérature diverses lois de comportement basées sur des hypothèses qui leur sont propres. Cependant ces lois de comportement ne diffèrent que dans les expressions des paramètres rhéologiques présents dans la loi de comportement.

3.1.3 Une loi de comportement générique

Les modèles classiques permettant une expression de la contribution des fibres au tenseur des contraintes macroscopiques peuvent s’écrire sous une forme générique qui a pour expression générale :

$$\begin{cases} \sigma_{ij} = -pI_{d_{ij}} + 2\eta\varepsilon(\underline{v})_{ij} + \tau_{ij} \\ \tau_{ij} = 2\eta\phi \{ A\varepsilon(\underline{v})_{kl}a_{ijkl} + B(\varepsilon(\underline{v})_{ik}a_{kj} + a_{ik}\varepsilon(\underline{v})_{kj}) + 2C\varepsilon(\underline{v})_{ij} + 2FD_r a_{ij} \} \end{cases} \quad (3.8)$$

A , B , C et F sont des paramètres rhéologiques intrinsèques au matériau chargé et D_r est le coefficient de diffusion qui rend compte des interactions entre les fibres. Il existe dans la littérature différentes théories qui vont donner lieu à des expressions variées pour A , B , C et F .

Le coefficient de diffusion brownien D_r peut être important pour des particules avoisinant la taille des molécules, mais il est négligeable dans le cadre des matériaux chargés de fibres, si bien que la majeure partie de la communauté scientifique considère que F est nul. Il est alors habituel de rencontrer dans la littérature une autre forme générique [131] :

$$\underline{\underline{\sigma}} = -p\underline{\underline{I}}_d + 2\underline{\eta}_I \{ \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{v}) + N_s(\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{v}) \underline{\underline{a}}_2 + \underline{\underline{a}}_2 \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{v})) + N_p \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{v}) : \underline{\underline{a}}_4 \} \quad (3.9)$$

Le terme η_I regroupe toutes les contributions associées à la viscosité (dus à la fois à la matrice et aux fibres), tandis que les contributions associées à l'anisotropie due aux fibres, sont représentées par les deux paramètres sans dimension, N_s et N_p .

Les paramètres η_I , N_s et N_p ont une expression en fonction de la concentration de la solution, du rapport de forme des fibres et de la viscosité de la matrice. Toutefois, ces expressions empiriques sont obtenues au prix de nombreuses hypothèses parfois assez restrictives et qui limitent souvent le domaine d'application de la relation de comportement.

3.1.4 Caractère rhéofluidifiant et milieux concentrés ?

Il existe dans la littérature quelques lois de comportement valables pour des fluides non newtoniens. Pour tenir compte de la rhéofluidité de la matrice et des fortes concentrations, la viscosité introduite dans la loi de comportement doit être une fonction dépendant du taux de cisaillement et de la fraction volumique de fibres. Des techniques nouvelles telles que la rhéologie numérique très prometteuse [99] pourrait aider à la mise en place de lois de comportement plus riches que celles généralement rencontrées dans la bibliographie. En outre, les régimes de concentrations élevées peuvent être pris en compte en ajoutant à cette loi de comportement un seuil de contrainte qui pourrait être identifié via des essais expérimentaux [120, 129]. Ces lois de comportement, peu nombreuses et fort intéressantes, feront bien évidemment l'objet d'un paragraphe.

Nous allons donc présenter dans les sections qui suivent les principaux modèles de comportement permettant d'obtenir les différentes expressions empiriques des paramètres rhéologiques η_I , N_s et N_p . Plusieurs approches basées notamment sur la forme des particules et la concentration de la suspension sont classiquement utilisées :

- une approche utilisant « La théorie des corps élancés » : la particule est alors considérée comme une fibre infiniment mince d'épaisseur négligeable, ce qui se traduit par des valeurs nulles pour B , C et F dans l'équation (3.8),
- une approche utilisant les résultats connus sur les sphéroïdes en suspension. Cette approche est valable pour des faibles rapports de forme des particules. Seul le paramètre F est considéré nul dans la loi de comportement,
- les approches basées notamment sur les travaux de Doi et Edwards permettent d'aborder les milieux concentrés. Cependant, le mouvement brownien de la suspension n'est pas négligé laissant ainsi apparaître dans la loi de comportement un coefficient de diffusion.

Nous aborderons également la question relative aux lois de comportement valables dans le cadre des matériaux chargés non newtoniens.

3.2 Les modèles basés sur la théorie des corps élançés

3.2.1 Le régime de concentration dilué

Nonobstant la faible concentration de fibres, les théories pour les suspensions diluées de particules ont permis d'identifier la plupart des mécanismes fondamentaux qui agissent dans les suspensions chargées et ont servi de base à d'autres études.

Le modèle de Batchelor

Batchelor [22] propose une loi de comportement rhéologique pour des particules rigides de forme ellipsoïdale dans une suspension diluée. Partant de l'équation (3.7), Batchelor [23] calcule la contribution des particules au champ de contrainte macroscopique dans le cas particulier d'une solution diluée de fibres ayant la même orientation. La loi de comportement rhéologique s'écrit :

$$\underline{\underline{\sigma}} = -P\underline{\underline{I}}_d + 2\eta (\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{v}}) + N_p \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{v}}) : \underline{\underline{a}}_4) \quad (3.10)$$

$$N_p = \frac{\beta^2 \phi}{3 \ln(\beta)} \quad (3.11)$$

Cette relation n'est valable que dans le cas de suspensions diluées de particules rigides. Pour étendre cette loi de comportement à des suspensions plus concentrées, il est indispensable de prendre en considération les interactions de type hydrodynamique prépondérantes pour ce type de régime de concentration.

Notons que d'autres études ont été menées dans le cadre de suspensions diluées de particules. Elles utilisent, pour la plupart, « La théorie des particules sphéroïdales » qui sera abordée dans la deuxième partie de cette section.

3.2.2 Le régime de concentration semi-dilué

L'extension des analyses développées pour des suspensions diluées à des concentrations plus importantes est complexe. La première difficulté consiste à déterminer les interactions inter-particulaires surtout celles d'origine hydrodynamique. Les forces de lubrification jouent également un rôle important au niveau de la structure et du comportement à haute concentration.

a) Une première approche : l'étude de Batchelor

Batchelor [23] étend ses travaux menés dans le cadre des régimes de concentration diluée (équation 3.11) au cas de suspensions semi-diluées de fibres. Il modélise les contraintes lors d'un écoulement élongationnel, et dans le cas où les fibres sont alignées dans la direction d'élongation du fluide. Il trouve alors une relation empirique pour N_p de la forme :

$$N_p = \frac{\phi \beta^2}{9 \left[\ln(2\beta) - \ln(1 + 2\beta \sqrt{\phi/\pi}) - 1.5 \right]} \quad (3.12)$$

Les interactions hydrodynamiques entre les particules sont représentées par un milieu effectif. Il considère alors que chaque fibre est à l'intérieur d'une « cellule » créée par le milieu ambiant. Afin de déterminer l'évolution d'une perturbation hydrodynamique, Batchelor introduit le concept d'*effet d'écran* des interactions hydrodynamiques. Il montre notamment qu'il existe une longueur d'écran au delà de laquelle une perturbation hydrodynamique n'a aucun effet sur le fluide environnant.

b) Le modèle de Dinh et Armstrong

Dinh et Armstrong [54] ont prolongé les travaux de Batchelor [22] pour étendre le modèle aux suspensions semi-diluées de particules. Tout comme Batchelor, ils ont considéré une fibre test dans un milieu effectif qui intègre l'influence des autres fibres.

Calcul des interactions hydrodynamiques :

Les interactions hydrodynamiques ont été prises en compte en calculant le champ de contrainte à la surface d'une fibre de diamètre négligeable par rapport à sa longueur.

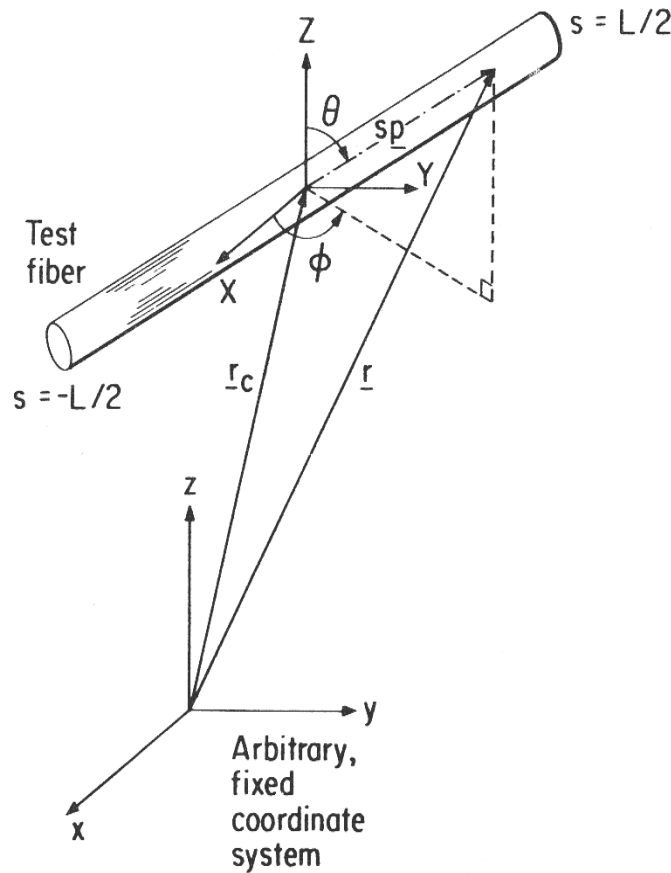


FIG. 3.1 – Fibre « test » de Dinh et Armstrong.

Avec les notations de la figure (3.1), Dinh et Armstrong proposent la loi de comportement initiale suivante :

$$\underline{\underline{\sigma}} = -p\underline{\underline{I}}_d + 2\eta_s \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{v}) + \frac{1}{V} \sum_{i=1}^{nV} \int_{A_i} [\underline{\underline{\pi}}_s \underline{n}] \underline{r} dA_i \quad (3.13)$$

η_s représente la viscosité du solvant ($\eta_s = \eta$), A_i la surface d'une fibre, $\underline{n}$ la normale sortante à la fibre, $\underline{\underline{\pi}}_s$ la contribution de la fibre au tenseur des contraintes et $\underline{r}$ le vecteur porté par la particule.

La démarche présentée par Dinh et Armstrong a été la suivante :

- calcul de la vitesse relative du fluide par rapport à la fibre,
- calcul de la cission à la surface de la fibre,
- introduction d'un coefficient de trainée,
- calcul du tenseur des contraintes moyen dans la fibre.

Les trois premières étapes aboutissent à un tenseur des contraintes locales dans le repère fixe. La contribution de la fibre i au tenseur des contraintes locales a pour expression :

$$\underline{\underline{\Sigma}}_{p_i} = \frac{\zeta_p L}{12\pi R^2} (\nabla \underline{u} : \underline{p}_i \otimes \underline{p}_i) \underline{p}_i \otimes \underline{p}_i \quad (3.14)$$

$\nabla \underline{u}$ désigne le tenseur gradient de vitesse, R est le rayon de la fibre, ζ_p le coefficient de trainée d'une fibre parallèle à l'écoulement, $\underline{p}_i$ désigne la position de la fibre i .

Homogénéisation statistique :

Pour le calcul du champ de contrainte homogénéisé, Dinh et Armstrong effectuent une homogénéisation statistique sur l'ensemble des orientations possibles. Dès lors, il est nécessaire d'introduire la fonction de distribution de l'orientation $\psi(\underline{p}, t)$. La contribution des fibres au tenseur des contraintes macroscopique devient :

$$\underline{\underline{\Sigma}}_p = \frac{\zeta_p n L^2}{12} \nabla \underline{u} : \int_p \psi(\underline{p}, t) \underline{p} \otimes \underline{p} \otimes \underline{p} \otimes \underline{p} d\underline{p} \quad (3.15)$$

n désigne le nombre de fibres par unité de volume.

Afin d'éliminer le coefficient de trainée, Dinh et Armstrong font intervenir la relation suivante :

$$\frac{\zeta_p n L^2}{12} = \eta \frac{\pi n L^3}{6 \ln(2h/D)} \quad (3.16)$$

En substituant (3.16) dans l'équation (3.15), la contribution des fibres au tenseur des contraintes macroscopique devient :

$$\underline{\underline{\Sigma}}_p = \eta \frac{\pi n L^3}{6 \ln(2h/D)} \nabla \underline{u} : \int_p \psi(\underline{p}, t) \underline{p} \otimes \underline{p} \otimes \underline{p} \otimes \underline{p} d\underline{p} \quad (3.17)$$

Le numérateur peut être transformé en faisant apparaître la fraction volumique de fibres ϕ et le rapport de forme β des particules.

Introduction des tenseurs d'orientation :

En outre, en introduisant le tenseur d'orientation $\underline{a}_4$, la loi de comportement finale prend la forme suivante :

$$\underline{\underline{\sigma}} = -p\underline{I}_d + 2\eta\underline{\underline{\varepsilon}}(v) + \frac{2\eta\phi\beta^2}{3\ln(\frac{h}{R})} \quad \underline{\underline{\varepsilon}}(v) : \underline{a}_4 \quad (3.18)$$

où h représente la distance caractéristique entre deux fibres voisines. Cette distance dépend alors de l'orientation des particules et prend pour valeur :

$$\begin{cases} h = R\sqrt{\pi/\phi} & \text{pour des fibres alignées} \\ h = \pi R/(2\phi\beta) & \text{pour une orientation isotrope des fibres} \end{cases}$$

Avec les notations introduites en début de chapitre, nous obtenons les relations empiriques suivantes :

$$\begin{cases} \eta_I = \eta \\ N_s = 0 \\ N_p = \frac{\phi\beta^2}{3\ln(h/R)} \end{cases} \quad (3.19)$$

Évolution du paramètre rhéologique N_p :

La figure (3.2) montre l'évolution du paramètre rhéologique N_p en fonction de la fraction volumique de fibres. Le modèle utilisé vient de la relation (3.19). La distance inter-particulaire h prend en compte une orientation isotrope des fibres.

c) Une amélioration du modèle : l'analyse de Fredrickson et Shaqfeh

Plus récemment, Fredrickson et Shaqfeh [123] ont développé une théorie afin de décrire « les propriétés de transport effectives » d'une suspension chargée de fibres.

L'approche est basée sur le calcul d'un tenseur de propagation qui décrit le champ de vitesse moyen créé par une force ponctuelle dans la suspension. A partir de cette théorie, ils démontrent qu'il existe un effet d'écran correspondant à un amortissement rapide de la perturbation hydrodynamique créée par une fibre test du fait de la présence des fibres voisines. Pour les suspensions diluées, Fredrickson et Shaqfeh [123] retrouvent les résultats de Batchelor [23]. Dans le cas semi-dilué, leur calcul des interactions hydrodynamiques basé sur une technique de sommation diagrammatique affine les résultats de Dinh et Armstrong [54] (calcul explicite des interactions hydrodynamiques). La loi de comportement conserve une forme analogue aux lois précédentes et le paramètre rhéologique N_p s'exprime :

$$N_p = \frac{2\phi\beta^2}{3[\ln(\frac{1}{\phi}) + \ln(\ln(\frac{1}{\phi})) + \zeta]} \quad (3.20)$$

$$\text{avec} \quad \begin{cases} \zeta = -0.664 & \text{pour une orientation isotrope des fibres} \\ \zeta = +0.158 & \text{pour des fibres alignées} \end{cases}$$

Dans leur étude, Fredrickson et Shaqfeh montrent notamment que l'état d'orientation des fibres n'a pas une grande influence sur le paramètre rhéologique N_p .

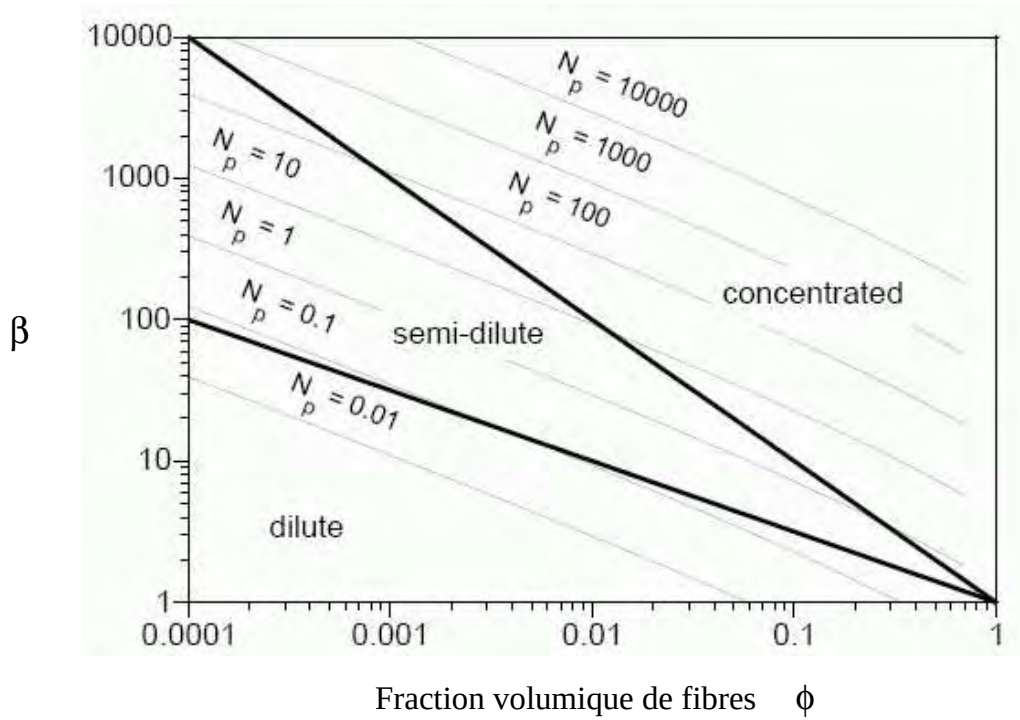


FIG. 3.2 – Paramètre rhéologique N_p en fonction du facteur de forme des particules et de la fraction volumique de fibres [54].

d) Les travaux de Mackaplow et Shaqfeh

Mackaplow et Shaqfeh [96] ont étendu les travaux de Batchelor [23] en considérant une cellule constituée de deux fibres pour une meilleure représentation des interactions hydrodynamiques. L'expression de l'équation constitutive du champ de contrainte macroscopique prend la forme suivante :

$$\begin{cases} \eta_I = \eta \\ N_s = 0 \\ N_p = \frac{1}{6}\pi n L^3 (\varepsilon f(\varepsilon) + 0.15 n L^3 \varepsilon^2) \end{cases} \quad (3.21)$$

$f(\varepsilon)$ est une fonction de correction qui sera introduite postérieurement dans la section 3.2.3 et ε est un paramètre dépendant uniquement du rapport de forme des fibres.

3.2.3 Utilisation d'un facteur correctif

La théorie des corps élançés a été largement utilisée pour modéliser le comportement des suspensions de particules notamment des thermoplastiques chargés de fibres. Cette théorie permet d'incorporer les interactions hydrodynamiques entre les fibres, et de ce fait d'étendre les modèles au cas de suspensions en régime semi-dilué. Toutefois, cette approche est valable

pour les particules ayant un grand rapport de forme et les modèles issus de cette théorie s'avèrent peu précis dans le cas de particules peu élancées telles que les fibres courtes ($\beta \leq 10$). En outre, les modèles issus de la théorie des corps élancés négligent l'épaisseur de la fibre, ce qui a pour conséquence de sous-estimer le facteur N_p . Afin de remédier à cela, Ranganathan et Advani [117] proposent d'utiliser les résultats de Batchelor [22] qui consistent à multiplier le terme N_p par une fonction de correction $f(\varepsilon)$ définie de la manière suivante :

$$f(\varepsilon) = \frac{1 + 0.64\varepsilon}{1 - 0.50\varepsilon} + 1.659\varepsilon^2 \quad \text{avec} \quad \varepsilon = \frac{1}{\ln(2\beta)} \quad (3.22)$$

La fonction $f(\varepsilon)$ apporte une correction significative. Pour un rapport de forme de 100 $f(\varepsilon) = 1.62$, comme le montre la figure (3.3). Toutefois, différentes études bibliographiques ont montré que cette correction est trop forte pour des facteurs de forme inférieurs à 10.

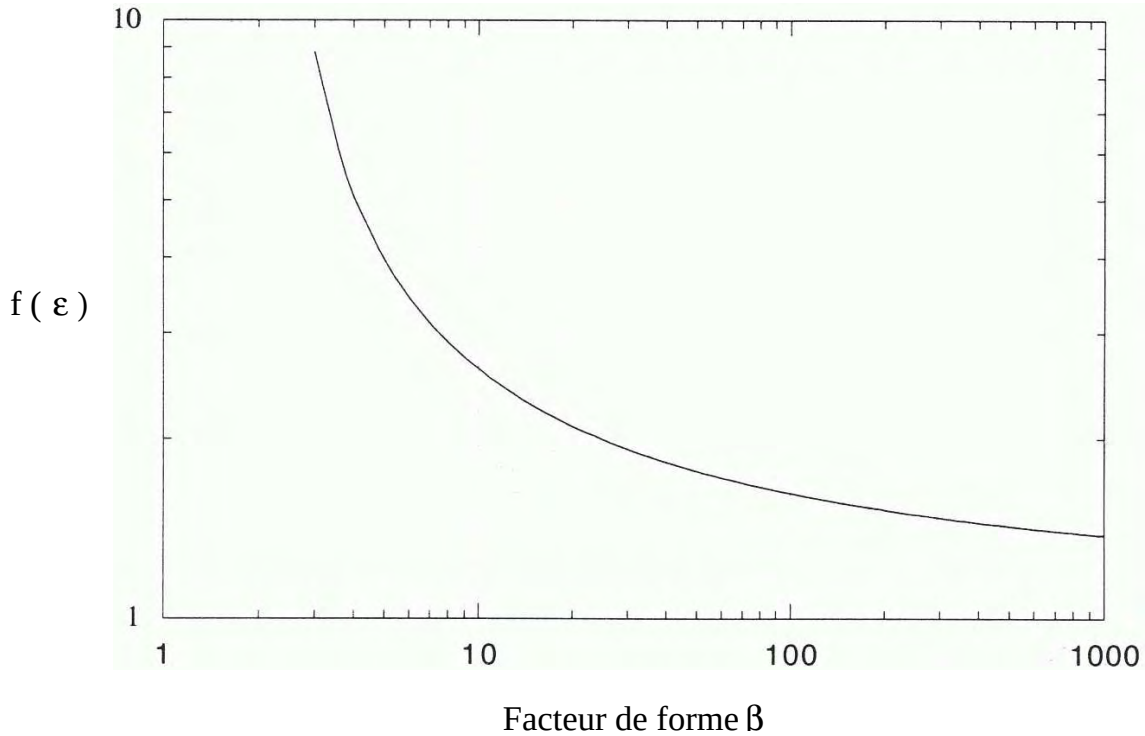


FIG. 3.3 – Facteur correctif utilisé dans la théorie des corps élancés pour tenir compte de l'épaisseur des fibres

Le point de départ des théories précédentes considère une suspension de fibres dans un fluide newtonien alors que le comportement rhéologique des polymères est généralement considéré rhéofluidifiant à partir d'une certaine vitesse de cisaillement et viscoélastique. Ces lois de comportement sont difficilement applicables aux thermoplastiques chargés de fibres puisque le caractère rhéofluidifiant ou viscoélastique prédomine dans l'écoulement. La section qui suit introduit deux lois de comportement valables pour une suspension non-newtonienne de fibres.

3.3 Prise en compte du caractère rhéofluidifiant du polymère

Il existe peu d'études prenant en compte le caractère rhéofluidifiant de la matrice polymère. Goddard [72] fut l'un des pionniers dans la matière en reprenant la démarche de Batchelor pour prédire de façon théorique les propriétés élongationnelles d'une suspension de particules longues dans un fluide visqueux rhéofluidifiant. Nous présentons dans les sections qui suivent deux lois de comportement établies pour des suspensions non newtoniennes.

3.3.1 Le modèle rhéologique de Souloumiac

Citons également les travaux de Souloumiac [125] qui a développé un modèle rhéologique pour un thermoplastique obéissant à une loi puissance. Il a repris la démarche de Batchelor et de Dinh et Armstrong en utilisant également un modèle cellulaire.

a) Expression générale du tenseur des contraintes

Selon le même principe de division du volume total en volume occupé par la matrice plus un volume occupé par les fibres, le champ de contrainte dans un fluide pseudoplastique est du type :

$$\underline{\underline{\sigma}} = -P' \underline{\underline{I}}_d + 2K |2I_2|^{(m-1)/2} \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{v}) + \underline{\underline{\Sigma}}_p \quad (3.23)$$

P' est la contribution de la matrice à la pression homogénéisée, K désigne la consistance du matériau non chargé, m est l'indice de pseudoplasticité, et I_2 le second invariant de $\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{v})$.

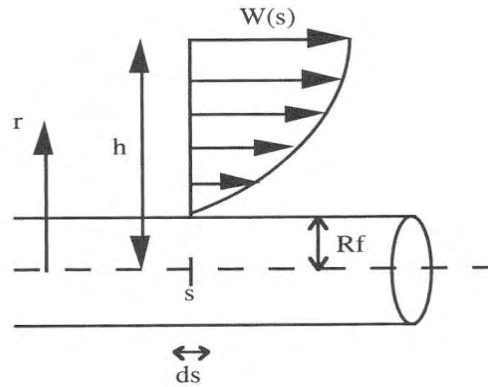


FIG. 3.4 – Schématisation d'une fibre.

En utilisant les mêmes étapes que celles utilisées par Dinh et Armstrong, Souloumiac aboutit à une loi de comportement qui prend la forme suivante :

$$\underline{\underline{\Sigma}}_p = \kappa \int_p \psi(\underline{p}, t) | \nabla \underline{u} : \underline{p} \otimes \underline{p} |^{m-1} (\nabla \underline{u} : \underline{p} \otimes \underline{p}) \underline{p} \otimes \underline{p} d\underline{p} \quad (3.24)$$

$$\kappa = \frac{\phi K \beta^{m+1}}{m+2} \left(\frac{(1-m)}{m(1 - (R_{fi}/h)^{\frac{1-m}{m}})} \right)^m \quad (3.25)$$

R_{fi} désigne le rayon de la fibre et h la dimension de la cellule, distance au delà de laquelle la vitesse n'est plus perturbée par la fibre comme le montre la figure (3.4).

b) Limitations du modèle

Lorsque $m \rightarrow 1$ nous retrouvons le résultat de Dinh et Armstrong pour un fluide newtonien. Dans le cas pseudoplastique $\nabla \underline{u}$ ne peut sortir de l'intégrale et l'équation (3.24) ne peut pas s'écrire en fonction du tenseur $\underline{a}_4$. Nous ne pouvons donc pas aboutir à une écriture simplifiée de cette équation, ce qui limite fortement son utilisation dans le cas notamment de la simulation numérique.

3.3.2 Vers le régime concentré : le modèle de Thomasset

Les suspensions concentrées de fibres longues à matrices non newtoniennes ont été étudiées par Thomasset [128] qui s'est intéressé au comportement rhéologique d'un polypropylène chargé à 30 % en masse de fibres de verre. Il a mis en évidence un seuil d'écoulement attribué aux interactions inter-particulaires et à la formation d'une structure responsable d'un seuil de contrainte. Une contrainte minimale doit être appliquée au matériau pour qu'il y ait écoulement. Quand le niveau de contrainte augmente, la structure responsable du seuil de contrainte est alors détruite et le matériau peut s'écouler comme un fluide visqueux.

a) Description du modèle

Le comportement de la suspension s'exprime à partir de la loi de comportement du polymère qui est un polypropylène. La viscosité du polypropylène est décrite par une *loi de Carreau* :

$$\eta = \eta_0(1 + (\lambda_c \dot{\gamma})^2)^{(n-1)/2} \quad (3.26)$$

où $\dot{\gamma}$, η_0 , λ_c , et n représentent respectivement le taux de cisaillement, la valeur de la viscosité plateau à faible vitesse de cisaillement, le temps caractéristique du polymère et l'indice de la loi puissance.

Le modèle rhéologique de Thomasset présente en outre un seuil de contrainte dont la valeur dépend de l'orientation :

- la valeur du seuil de contrainte est nulle dans le cas où les fibres sont alignées dans le sens de l'écoulement,
- cette valeur est maximale pour un état d'orientation isotrope.

En dessous du seuil, le comportement du matériau est décrit par une loi élastique de Hooke. Le module d'élasticité dépend également de l'orientation : lorsque les fibres sont alignées, la valeur tend vers zéro ce qui suggère que l'élasticité du matériau en dessous du seuil est liée à la présence des fibres. Ce comportement intervient pour des contraintes très faibles.

Au dessus du seuil, le modèle proposé est une combinaison du modèle de Bingham pour les faibles vitesses de cisaillement, et du modèle de Carreau modifié pour les vitesses de cisaillement élevées afin de faire dépendre la viscosité de l'orientation et de la concentration

en fibres.

b) La loi de comportement

Le modèle de Thomasset est décrit par les équations suivantes :

$$\begin{cases} \underline{\underline{\sigma}} = GC_1 \underline{\underline{\gamma}}(\underline{\underline{v}}) & \text{Si } tr(\underline{\underline{\gamma}}^2) \leq 2\gamma_s^2 \\ \underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{\sigma}}_s + \eta_0 (1 + \lambda_c^2 \frac{1}{2} I_2)^{(n-1)/2} \times \left[(1 + 2\phi) \underline{\underline{\dot{\gamma}}}(\underline{\underline{v}}) + 15\mu_{fibre} \underline{\underline{a}}_4 : \underline{\underline{\dot{\gamma}}}(\underline{\underline{v}}) \right] \\ \text{Si } tr(\underline{\underline{\gamma}}^2) \geq 2\gamma_s^2 \end{cases} \quad (3.27)$$

En adoptant les notations utilisées par Thomasset, tr désigne l'opérateur trace, G le module élastique aux faibles déformations, C_1 est un paramètre d'orientation, ϕ désigne la concentration de la charge, $\underline{\underline{\sigma}}_s$ est le tenseur seuil de contrainte, $\underline{\underline{\dot{\gamma}}}(\underline{\underline{v}})$ est le tenseur des vitesses de déformation et enfin $\underline{\underline{\gamma}}(\underline{\underline{v}})$ le tenseur des déformations.

Le tenseur seuil de contrainte se déduit de la relation suivante :

$$\underline{\underline{\sigma}}_s = GC_1 \underline{\underline{\gamma}}_s \quad \text{et} \quad tr(\underline{\underline{\gamma}}_s^2) = 2\gamma_s^2 \quad (3.28)$$

La valeur de C_1 varie entre zéro pour des fibres alignées et 1 pour une orientation aléatoire des fibres. Le choix de C_1 détermine les relations entre le seuil de contrainte et l'orientation, et entre le module élastique et l'orientation. Au niveau expérimental, ces relations n'ont pas pu être déterminées.

Avec les notations introduites par Tucker les paramètres rhéologiques de la loi de comportement sont de la forme :

$$\begin{cases} \eta_I = \eta_0 (1 + 2\phi) (1 + \lambda_c^2 \frac{1}{2} I_2)^{(n-1)/2} \\ N_s = 0 \\ N_p = 15\mu_{fibre} \eta_0 (1 + \lambda^2 I_2 / 2)^{(n-1)/2} \end{cases} \quad (3.29)$$

Notons qu'il existe de grandes similitudes entre le modèle proposé par Thomasset et le modèle de Servais [122] valable dans le cadre d'écoulements en compression 2D [122], [121].

c) Identification des paramètres rhéologiques

Le comportement rhéologique de la suspension dépend de trois paramètres qui peuvent être mesurés expérimentalement :

- le seuil dont la valeur dépend de la longueur et de la concentration en fibres,
- μ_{fibre} qui détermine l'amplitude de la variation de la viscosité avec l'orientation des fibres,
- le module élastique qui est déterminé via des expériences en fluage.

Récemment, Thomasset a su identifier, via des essais de rhéométrie capillaire et de rhéométrie oscillatoire, les paramètres rhéologiques dans le cadre d'un polypropylène chargé de fibres longues à 30% [129].

Le tableau 3.1 résume les données rhéologiques ainsi obtenues.

Paramètres rhéologiques	Valeur
η_0 ($P_a s$)	270
λ (s) en cisaillement	1.8610^{-2}
n	0.35
λ_e (s) en élongation	1.9810^{-3}
G (P_a)	238
μ_{fibre}	3
σ_s (P_a)	100
C_1	5.4610^{-2}

TAB. 3.1 – Paramètres rhéologiques obtenus pour un polypropylène chargé de fibres longues à 30%

Les paramètres η_0 , λ , n , et λ_e ont été obtenus en considérant la rhéologie de la matrice sans charge, en l'occurrence ici du polypropylène. G est déterminé après obtention expérimentale de la contrainte d'écoulement et en supposant connu l'état d'orientation des fibres ; par exemple :

$$\underline{a}_2 = \begin{pmatrix} 0.45 & 0 & 0 \\ 0 & 0.45 & 0 \\ 0 & 0 & 0.1 \end{pmatrix} \quad (3.30)$$

C_1 est calculé en prenant également en compte (3.30) et en considérant la relation empirique suivante décrite par Advani [1] :

$$C_1 = \frac{27}{6}(1 - 3a_{ij}a_{ji} + 2a_{ij}a_{jk}a_{kl})$$

Les autres paramètres ont été obtenus après ajustement avec les courbes expérimentales.

Le modèle rhéologique de Thomasset est très intéressant dans la mesure où il prédit un seuil de contrainte mis en évidence par d'autres auteurs tels que Meslin [100] pour les thermoplastiques chargés de fibres longues. Il reste à savoir si, dans la gamme de taux de cisaillement rencontrée lors du procédé d'injection, ce seuil est justifié.

En outre, son modèle rhéologique fait intervenir plusieurs paramètres phénoménologiques dont le seuil de contrainte qui semble actuellement difficile à déterminer dans le cadre général des suspensions chargées.

3.4 D'autres théories

3.4.1 Le cas des particules sphéroïdales

a) Le régime de concentration dilué

Pour calculer le terme $\underline{\underline{\Sigma}}_p$, une deuxième approche considère les fibres non pas comme des particules très élancées mais comme des sphéroïdes. Les premiers travaux datent de 1906 avec les travaux d'Einstein qui a prédit la viscosité d'une suspension diluée de sphères rigides.

$$\eta = \eta_0(1 + 2.5\phi) \quad (3.31)$$

η_0 représente la viscosité newtonienne du fluide non chargé et ϕ la concentration volumique de sphères rigides. La loi de comportement s'écrit alors :

$$\underline{\underline{\sigma}} = -p\underline{\underline{I}}_d + 2\eta_0(1 + 2.5\phi)\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{v}}) \quad (3.32)$$

Giesekus (1962) utilise les travaux menés par Jeffery qui exprime le champ des vitesses autour d'un ellipsoïde pour calculer la viscosité en cisaillement d'une suspension diluée de particules. Ses résultats seront étendus par Hand [77] qui, en postulant que les composantes du tenseur des contraintes s'expriment sous la forme d'un polynôme en $\underline{\underline{a}}_{ij}$ et $\underline{\underline{\varepsilon}}_{ij}(\underline{\underline{v}})$, obtient le champ de contrainte suivant, défini à une pression près :

$$\begin{aligned} \underline{\underline{\sigma}} = & (\sigma_0 + \sigma_1 tr(\underline{\underline{a}}_2 \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{v}})) + \sigma_2 tr(\underline{\underline{a}}_2^2 \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{v}}))) \underline{\underline{I}}_d \\ & + (\sigma_3 + \sigma_4 tr(\underline{\underline{a}}_2 \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{v}})) + \sigma_5 tr(\underline{\underline{a}}_2^2 \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{v}}))) \underline{\underline{a}}_2 \\ & + \sigma_6 \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{v}}) + \sigma_7 (\underline{\underline{a}}_2 \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{v}}) + \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{v}}) \underline{\underline{a}}_2) + \sigma_8 (\underline{\underline{a}}_2^2 \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{v}}) + \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{v}}) \underline{\underline{a}}_2^2) \end{aligned}$$

Il reste alors à déterminer les coefficients σ_i qui sont fonction des invariants de $\underline{\underline{a}}_2$. Hinch et Leal [80], [81] et Lipscomb et al. [94] ont développé une équation constitutive du champ de contrainte basée sur les travaux de Hand [77]. La loi de comportement a la forme suivante :

$$\begin{aligned} \underline{\underline{\sigma}} = & -p\underline{\underline{I}}_d + 2\eta_I \{ \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{v}}) + N_s (\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{v}}) \underline{\underline{a}}_2 + \underline{\underline{a}}_2 \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{v}})) + N_p \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{v}}) : \underline{\underline{a}}_4 \} \\ \left\{ \begin{array}{l} \eta_I = \eta(1 + 2\phi) \\ N_p = \frac{\phi}{1+2\phi} \frac{\beta^2}{2(\ln(2\beta)-1.5)} \\ N_s = \frac{\phi}{1+2\phi} \frac{6 \ln(2\beta)-11}{\beta^2} \end{array} \right. \quad (3.33) \end{aligned}$$

Dans ce modèle, le terme N_s est d'autant plus petit devant le terme N_p que le facteur de forme est grand, comme le montre la figure (3.5). Le modèle présenté est issu des travaux de Jeffery et, par conséquent, ne peut être appliqué qu'aux suspensions en régime dilué.

b) Un paradoxe de la théorie

Le modèle de comportement adopté pour les suspensions de sphéroïdes prévoit une augmentation de la viscosité en cisaillement avec la concentration volumique de fibres. Cependant

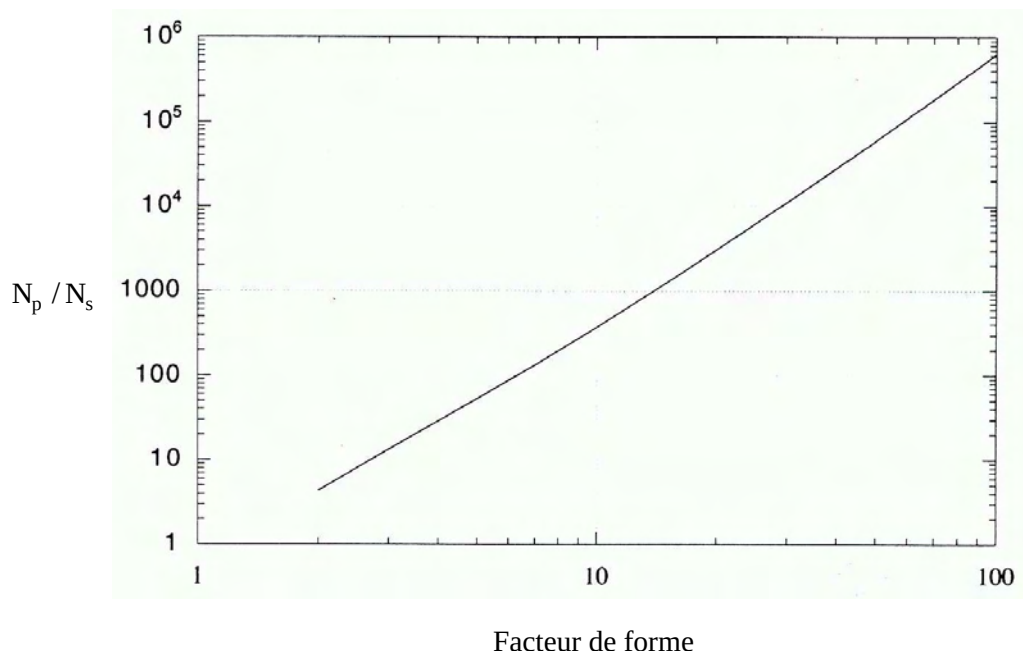


FIG. 3.5 – Évolution du rapport N_p/N_s en fonction de facteur de forme.

et paradoxalement, cette augmentation de viscosité, dans le cas des fibres, reste toujours plus faible que l'augmentation de viscosité d'une suspension de billes de même concentration, et ceci quel que soit le facteur de forme. Ce résultat est en contradiction avec les mesures expérimentales menées par divers auteurs.

En effet, les résultats expérimentaux montrent que la viscosité est une fonction croissante du rapport de forme des particules. Ce résultat expérimental ne corrobore pas les tendances prévues par les lois de comportement issues de la théorie des particules sphéroïdales.

c) Un modèle pour les fluides anisotropes transverses : vers un régime semi-dilué

Meslin [100] a étendu les résultats connus sur les suspensions de sphéroïdes rigides aux suspensions en régime semi-dilué en utilisant des schémas autocohérents et différentiels. La technique proposée pour calculer la contribution des fibres au tenseur des contraintes fait appel aux travaux d'Eshelby [60] sur les inclusions équivalentes. Pour des commodités de calcul, le modèle proposé s'écrit dans une base d'opérateurs à symétrie isotrope transverse $(\underline{\underline{A}}_1, \underline{\underline{A}}_2, \underline{\underline{A}}_3)$ définie comme suit :

$$\begin{cases} \underline{\underline{A}}_1 = \underline{\underline{I}}_d - \underline{\underline{A}}_2 - \underline{\underline{A}}_3 \\ \underline{\underline{A}}_2 = \frac{1}{2}(3\underline{\underline{p}} \otimes \underline{\underline{p}} - \underline{\underline{I}}_d) \otimes \underline{\underline{p}} \otimes \underline{\underline{p}} \\ \underline{\underline{A}}_3 \underline{\underline{Q}} = \underline{\underline{Q}} \underline{\underline{p}} \otimes \underline{\underline{p}} + \underline{\underline{p}} \otimes \underline{\underline{p}} \underline{\underline{Q}} - 2Tr(\underline{\underline{Q}} \underline{\underline{p}} \otimes \underline{\underline{p}}) \underline{\underline{p}} \otimes \underline{\underline{p}} \quad \forall \underline{\underline{Q}} \end{cases} \quad (3.34)$$

Le modèle auto-cohérent :

Dans cette base d'opérateurs, la contribution des fibres au tenseur des contraintes s'écrit :

$$\sigma = (\beta_1 \underline{\underline{A}}_1 + \beta_2 \underline{\underline{A}}_2 + \beta_3 \underline{\underline{A}}_3) \underline{\underline{\varepsilon}}(v) \quad (3.35)$$

$$\beta_i = f_i(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \phi, \lambda) \quad \text{et} \quad \alpha_i = g_i(\eta, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \lambda) \quad (3.36)$$

Les fonctions f_i et g_i sont parfaitement connues. Le système d'équation (3.36) est résolu numériquement pour différentes valeurs de facteur de forme et de concentration par une méthode de Newton.

Le modèle différentiel :

Toujours en utilisant la base d'opérateurs introduite précédemment ainsi que les résultats d'Eshelby et de Poitou, le tenseur des contraintes macroscopiques recherché s'écrit à une pression près :

$$\sigma = (\alpha_1 \underline{\underline{A}}_1 + \alpha_2 \underline{\underline{A}}_2 + \alpha_3 \underline{\underline{A}}_3) \underline{\underline{\varepsilon}}(v) \quad (3.37)$$

$$d\alpha_i = f'_i(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \phi, d\phi, \lambda) \quad (3.38)$$

Les fonctions f'_i sont également connues et sont résolues numériquement en utilisant la méthode de Runge et Kutta d'ordre 4.

Les modèles auto-cohérents et différentiels peuvent s'écrire sous la forme générique introduite par Tucker. Le modèle proposé par Meslin permet de prendre en compte l'épaisseur de la fibre et est applicable aux suspensions de particules de faible facteur de forme.

Notons enfin que l'approche qui considère que les particules sont des sphéroïdes rigides, permet de rendre compte de la contribution isotrope due à la présence des particules. En effet, le terme η_I n'est pas égal à la viscosité η du solvant comme dans les modèles issus de la théorie des corps élancés. Ce facteur rhéologique a une influence capitale dans la prédiction de la viscosité en cisaillement d'une suspension de particules [100].

3.4.2 La théorie moléculaire de Doï et Edwards

D'autres théories ont été développées pour prédire le comportement rhéologique des suspensions de fibres. Citons le modèle de Doï et Edwards [56], [57] conçu à l'origine pour des polymères en solution mais qui a été appliqué aux thermoplastiques chargés de fibres par Becraft et Metzner [29]. Ils considèrent des solutions de molécules ayant la forme de bâtonnets rigides analogues à des fibres. Le modèle de Doï et Edwards prend en compte un coefficient de diffusion d'orientation dû au mouvement brownien des molécules. La diffusion brownienne a été négligée par beaucoup d'auteurs estimant que le mouvement d'orientation brownien est important pour des objets de la taille des macromolécules mais qu'il peut être négligé pour des fibres relativement grandes.

a) Une extension de la théorie moléculaire : les travaux de Petrie

Récemment, Petrie [106] a repris les travaux de Doi et Edwards [56], [57] estimant que la présence de la diffusion brownienne, dans le cas de solutions semi-diluées ou concentrées est significative. Il obtient une équation constitutive du champ de contrainte qui est la somme d'une contribution élastique, d'une contribution visqueuse et d'une contribution de la suspension sans charge :

$$\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{\sigma}}^{(e)} + \underline{\underline{\sigma}}^{(v)} + \underline{\underline{\sigma}}^{(s)} \quad (3.39)$$

$\underline{\underline{\sigma}}^{(s)}$ est la contribution du fluide polymère sans la charge et s'écrit dans le cas d'un fluide newtonien :

$$\underline{\underline{\sigma}}^{(s)} = 2\eta \underline{\underline{\varepsilon}}(v)$$

La contribution élastique au tenseur des contraintes est définie comme suit :

$$\underline{\underline{\sigma}}^{(e)} = 3nk_B T \underline{\underline{S}}$$

n , k_B et T désignent respectivement le nombre de particules par unité de volume, la constante de Boltzman et la température absolue. $\underline{\underline{S}}$ est un terme d'orientation défini de la manière suivante :

$$\underline{\underline{S}} = \langle \underline{p} \otimes \underline{p} - \frac{1}{3} \underline{I_d} \rangle = \underline{a_2} - \frac{1}{3} \underline{I_d}$$

et $\langle . \rangle$ désigne la moyenne spatiale sur toutes les différentes orientations possibles. La partie visqueuse du tenseur des contraintes s'écrit :

$$\underline{\underline{\sigma}}^{(v)} = \frac{1}{2} n \zeta_r \langle \underline{p} \otimes \underline{p} \otimes \underline{p} \otimes \underline{p} \rangle : \nabla \underline{u}$$

ζ_r est un « coefficient de friction rotationnel » qui dépend du coefficient de diffusion brownienne D_r de la manière suivante :

$$\zeta_r = \frac{k_B T}{D_r}$$

Toute la question est donc de savoir si le mouvement brownien a un effet significatif sur l'écoulement des thermoplastiques chargés de fibres. Le nombre de Péclet permet d'établir la limite entre le régime « diffusif » et le régime « convectif » en comparant les propriétés advectives et diffusives d'un écoulement. Il est défini comme le rapport entre le temps caractéristique de diffusion et le temps caractéristique d'advection. Pour de faibles valeurs du nombre de Péclet, le mouvement brownien est significatif alors que pour des valeurs relativement grandes, la diffusivité brownienne demeure négligeable.

b) Le modèle de Fan et al.

Récemment Fan et al. [61] ont développé un modèle qui a su faire ses preuves d'un point de vue numérique. Ils ont repris la loi de comportement de Phan-Thien et Graham [108] valable pour les suspensions semi-diluées à matrice newtonienne et ont rajouté un terme prenant en compte la diffusion liée au mouvement brownien des fibres. La contribution des fibres au tenseur des contraintes macroscopiques s'écrit :

$$\Sigma_p = f(\phi) [2A \underline{\underline{\varepsilon}}(v) : \langle \underline{pppp} \rangle + 2D_r F \langle \underline{pp} \rangle] \quad (3.40)$$

$$f(\phi) = \frac{\phi(2 - \phi/\phi_m)}{2(1 - \phi/\phi_m)} \quad (3.41)$$

$$\phi_m = 0.53 - 0.013\beta, \quad A = \frac{\beta^2}{2(\ln(2\beta) - 1.5)}, \quad F = \frac{3\beta^2}{\ln(2\beta) - 0.5} \quad (3.42)$$

Enfin, des travaux effectués sur des suspensions colloïdales ont amené certains auteurs tels que Solomon et Boger (1998) à parler de forces de Van der Waals et de forces électrostatiques. Il semblerait que ces forces soient aussi importantes que l'effet de diffusion brownienne sur la rhéologie des suspensions chargées de fibres [106].

3.4.3 Les suspensions viscoélastiques

Le cas des suspensions viscoélastiques a été étudié par Azaiez [18] ou encore Ait-Kadi et Grmela [6]. Nous allons brièvement présenter le modèle de Ait-Kadi et Grmela. [6] ainsi que les travaux de Ramazani et al. [114].

a) Travaux d'Ait-Kadi et al.

Ait-Kadi et Grmela reprennent les travaux de Dinh et Armstrong [54] pour ce qui concerne le calcul de la contribution des fibres au tenseur des contraintes macroscopiques et considèrent que la rhéologie du polymère sans charge obéit à une loi de comportement viscoélastique. Le tenseur des contraintes macroscopiques est donc la somme d'une contribution visqueuse (polymère) et d'une contribution due à la présence des fibres :

$$\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{\Sigma}}_p + \underline{\underline{\sigma}}^{(v)} \quad (3.43)$$

$$\underline{\underline{\Sigma}}_p = -\frac{nL^2}{12} \zeta_p \underline{\underline{\varepsilon}}(v) : \underline{\underline{a}}_4 = -\mu_f \underline{\underline{\varepsilon}}(v) : \underline{\underline{a}}_4 \quad (3.44)$$

$$\zeta_p = \frac{2\pi L(\eta_s + \eta)}{12 \ln(2h/D)} \quad (3.45)$$

η_s désigne la viscosité de la suspension alors que η est la viscosité du polymère sans charge. La contribution des fibres donnée par Dinh et Armstrong a donc été modifiée afin de prendre en compte le caractère non newtonien de la suspension. Pour la contribution de la matrice viscoélastique, Ait-Kadi et Grmela utilisent une formulation de type "*Poisson Bracket*" et le modèle de *FENE* (finitely extensible non-linear elastic model). Le tenseur des contraintes macroscopiques s'écrit :

$$\underline{\underline{\sigma}} = -2\rho \left(\frac{KR_o^2}{1 - \text{tr}(\underline{\underline{c}})} \underline{\underline{c}} - (1/2)k_B T \underline{\underline{I}}_d \right) - \mu_f \underline{\underline{\varepsilon}}(v) : \underline{\underline{a}}_4 \quad (3.46)$$

ρ désigne la densité du matériau, K et R_o sont des paramètres du modèle de *FENE*, $\underline{\underline{c}}$ est le tenseur de conformation et enfin k_B et T désignent la constante de Boltzmann ainsi que

la température absolue.

Le modèle proposé montre, en particulier, que le comportement de la suspension est gouverné par le comportement du fluide uniquement, pour des temps d'observation relativement courts ou pour des taux de cisaillement très élevés. En revanche, pour de faibles taux de cisaillement ou pour des temps d'observation relativement longs, la présence des fibres a une influence significative.

b) Travaux de Ramazani et *al.*

Ramazani et *al.* [114] ont étendu le modèle précédent au cas concentré en utilisant le modèle de *FENE-P* ainsi qu'une *fonction d'énergie Hookéenne*. Nous n'évoquerons pas plus loin les travaux de Ramazani vue la complexité des modèles proposés.

3.5 Synthèse et discussion

3.5.1 Comparaison de certains modèles rhéologiques

Meslin a comparé son modèle à ceux de Shaqfeh et Fredrickson et, Dinh et Armstrong. La comparaison des modèles s'effectue à travers le terme prépondérant $\eta_I N_p$. Les figures (3.6), (3.7) et (3.8) présentent l'évolution du facteur rhéologique $\eta_I N_p$ en fonction de la fraction volumique de fibres pour différents facteurs de forme.

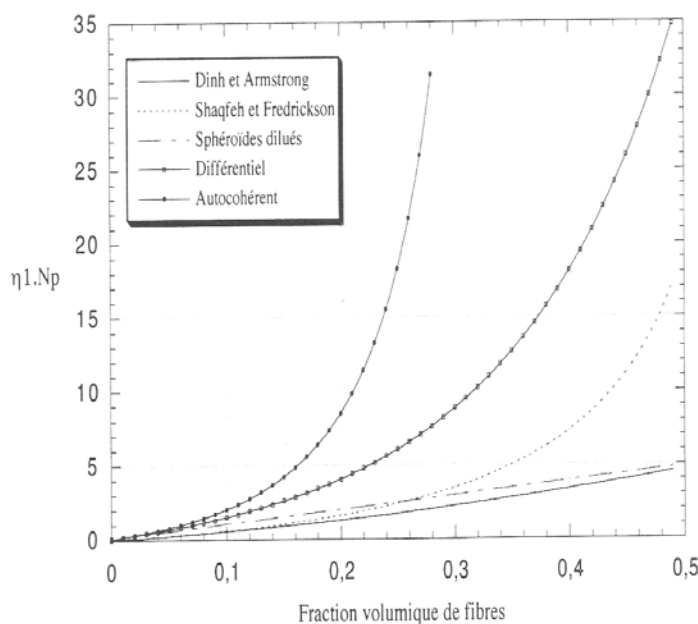
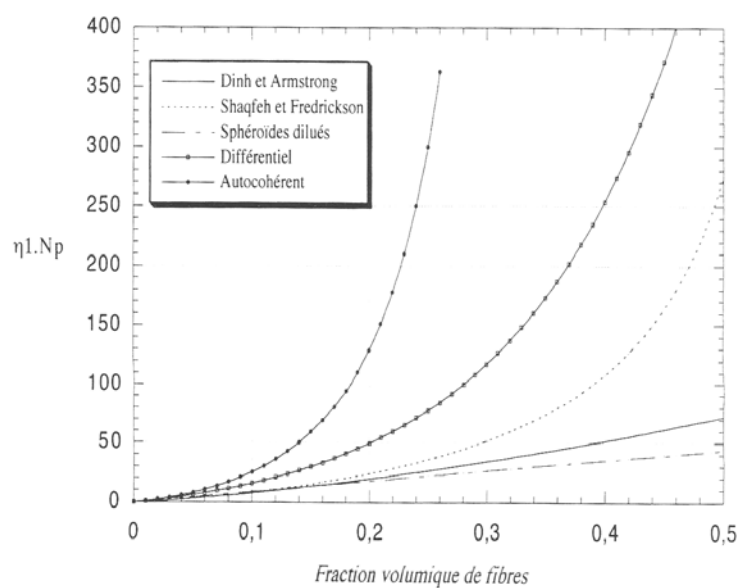
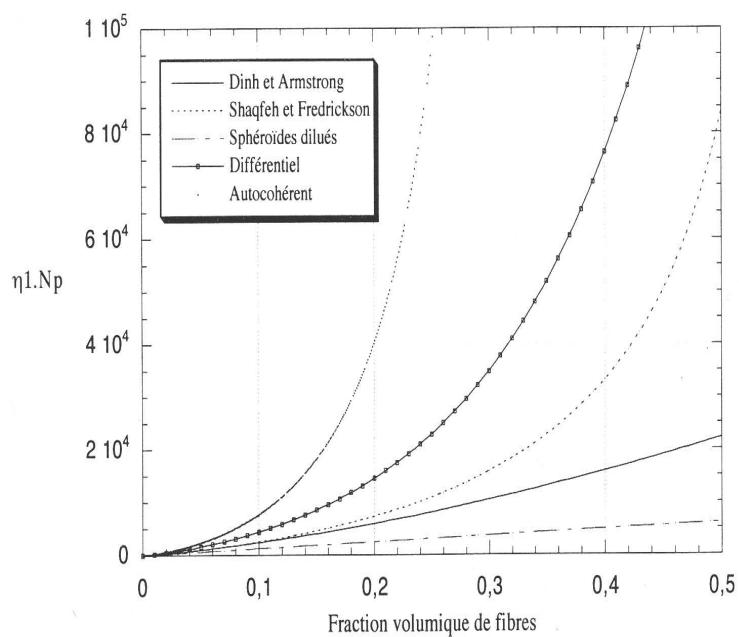


FIG. 3.6 – comparaison des modèles pour $\beta = 5$.

FIG. 3.7 – comparaison des modèles pour $\beta = 20$.FIG. 3.8 – comparaison des modèles pour $\beta = 350$.

Les courbes présentent une confrontation des modèles :

- de Dinh et Armstrong, équation (3.19),
- de Shaqfeh et Fredrickson, équation (3.20),
- différentiel, auto-cohérent, équation (3.35) et (3.37),
- de suspensions de sphéroïdes en régime dilué, équation (3.33).

Elles mettent en évidence trois points importants :

1. Les modèles différentiel et auto-cohérent, tangents au modèle pour les suspensions diluées, dans les faibles concentrations, donnent des valeurs de $\eta_I N_p$ beaucoup plus fortes que les autres modélisations.
2. Même dans les régions dites semi-diluées et pour des facteurs de forme relativement grands, les modèles de Shaqfeh et Fredrickson et de Dinh et Armstrong donnent des résultats proches du modèle pour les suspensions diluées de sphéroïde.
3. Toujours pour des grands facteurs de forme, les modèles de Dinh et Armstrong et de Shaqfeh et Fredrickson ne sont pas tangents au modèle des suspensions diluées de sphéroïdes, même pour des concentrations très faibles.

Il semble donc que considérer des particules infiniment minces induit une erreur sur les paramètres rhéologiques de la relation de comportement. Notons que d'autres comparaisons ont été faites entre les modèles de Meslin et ceux de Shaqfeh et Fredrickson. Meslin [100] a proposé d'utiliser, comme Ranganathan et Advani [117], la fonction $f(\varepsilon)$ introduite précédemment, en guise de facteur correctif, pour tenir compte de l'erreur introduite par l'utilisation de la théorie des corps élancés.

Ces dernières comparaisons ont mis en évidence la similitude des résultats pour un facteur de forme $\beta = 20$. Par contre, pour $\beta = 5$ ou $\beta = 350$, il semble que la différence devient plus marquée. Ceci est certainement dû au facteur correctif qui semble ne pas être adapté à tous les facteurs de forme des fibres.

3.5.2 En synthèse

Le tableau (3.2) met en exergue la richesse des études menées jusqu'à ce jour afin de mettre en place des lois de comportement valables dans le cadre de matériaux chargés de fibres. Plusieurs modèles empiriques sont proposés dans le cadre de matériaux newtoniens et pour des régimes de concentration semi-dilués. Les travaux les plus intéressants, valables pour une matrice non newtonienne, ne sont pas facilement implémentables d'un point de vue numérique :

- La loi de comportement de Souloumiac fait référence à la fonction de distribution de l'orientation. La simulation numérique d'une telle équation à caractère multi-dimensionnel est délicate,
- Les lois de comportement faisant référence à la viscoélasticité de la matrice sont beaucoup trop complexes et nécessitent le calcul du tenseur de conformation ainsi que du tenseur d'orientation. La simulation de telles lois de comportement n'est pas efficace en terme de temps de calcul.

Le choix d'un modèle de comportement est un compromis. Il doit être suffisamment simple pour être facile à mettre en oeuvre mais suffisamment fin pour être prédictif sur les

paramètres clefs du dimensionnement. Notre approche s'appuie sur les travaux de Sepher *et al.* [120] qui a montré que l'on pouvait étendre les équations (3.9) obtenues pour un fluide Newtonien aux fluides pseudo-plastiques. Les paramètres intervenant dans ce modèle peuvent être identifiés par des essais de rhéologie capillaire et oscillatoire. Les travaux de Thomasset [129] proposent une extension de ce type d'approche au cas de concentrations en fibre plus élevées en introduisant un seuil de contrainte. Notre choix s'est donc penché vers une loi de comportement issue de la théorie des corps sphéroïdaux faisant intervenir η_I , N_s et N_p . On peut remarquer qu'en considérant $\eta_I = \eta$, $N_s = 0$ et $N_p > 0$, on retrouve la loi de comportement issue de la théorie des corps élancés.

Théorie	Modèle	Concentration			rhéologie de la matrice		
		Dilué	Semi- diluée	Conc- entrée	Newt- onien	pseudo- plastique	Visco- élastique
Corps élancés	Batchelor (3.11)	×					
	Batchelor (3.12)		×				
	Dinh (3.19)		×		×		
	Shaqfeh (3.20)		×		×		
	Mackaplow (3.21)		×		×		
	Souloumiac (3.24)		×			×	
	Thomasset (3.29)			×		×	
	Ait Kadi (3.46)		×				×
	Ramazani		×				×
Particule ellipsoïdales	Einstein, Hand	×			×		
	Lipscomb (3.33)	×			×		
	Meslin (3.36)		×		×		
Doï et Edwards	Petrie (3.39)		×		×		
	Fan (3.40)		×		×		

TAB. 3.2 – Récapitulatif de lois de comportement pour des matériaux chargés de fibres

3.6 Équation de fermeture et thermodynamique

Tout comme l'équation d'évolution macroscopique de l'orientation, la loi de comportement adapté aux matériaux chargés de fibres fait intervenir un tenseur d'orientation d'ordre 4 qui peut être éliminé via l'utilisation d'une équation de fermeture. Il s'agit des mêmes équations de fermeture que celles proposées pour l'équation d'évolution de l'orientation des fibres.

Cette partie met en exergue les circonstances pour lesquelles l'équation constitutive pour le champ de contrainte est compatible ou pas avec le second principe de thermodynamique.

3.6.1 Stabilité thermodynamique

Galdi et *al.* [68] puis Munganga et *al.* [103] ont étudié l'influence de plusieurs équations de fermeture (quadratique, linéaire, hybride, ORS, NAT) sur la compatibilité des lois de comportement avec le second principe de thermodynamique. Ils ont également étudié la *stabilité énergétique* de ces lois de comportement. Nous rappelons que l'expression de l'équation constitutive pour le tenseur des contraintes est donnée par la relation :

$$\underline{\underline{\sigma}} = -p\underline{\underline{I}}_d + 2\eta_I \{ \underline{\underline{\varepsilon}}(v) + N_s(\underline{\underline{\varepsilon}}(v) \underline{\underline{a}}_2 + \underline{\underline{a}}_2 \underline{\underline{\varepsilon}}(v)) + N_p \underline{\underline{\varepsilon}}(v) : \underline{\underline{a}}_4 \} \quad (3.47)$$

Les études ont alors montré que les équations constitutives pour le tenseur des contraintes sont compatibles avec le second principe de thermodynamique si et seulement si l'inégalité suivante est respectée :

$$|\underline{\underline{\varepsilon}}(v)|^2 + N_s \left(\underline{\underline{\varepsilon}}(v) \underline{\underline{a}}_2 + \underline{\underline{a}}_2 \underline{\underline{\varepsilon}}(v) \right) : \underline{\underline{\varepsilon}}(v) + N_p \underline{\underline{a}}_4 \underline{\underline{\varepsilon}}(v) : \underline{\underline{\varepsilon}}(v) \geq 0 \quad (3.48)$$

Cette inégalité traduit la notion de *stabilité thermodynamique*. En substituant dans (3.48) le terme $\underline{\underline{a}}_4$ donné par les différentes équations de fermeture on aboutit à la condition sine qua non qui traduit la stabilité thermodynamique de la loi de comportement.

3.6.2 Stabilité énergétique

Par ailleurs, Munganga et Reddy [103] définissent, dans le cadre des lois de comportement pour les matériaux chargés, la notion de *stabilité énergétique*. La notion de stabilité énergétique est respectée si et seulement si la dérivée par rapport au temps de l'énergie cinétique est négative, ce qui se traduit par l'inégalité qui suit :

$$E'(t) = - \int_{\Omega} \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\varepsilon}}(v) dx \leq 0 \quad \forall t > 0 \quad (3.49)$$

Cette inégalité se traduit comme suit en utilisant les équations (3.47) et (3.48) :

$$E'(t) = -2\eta_I \int_{\Omega} \left(|\underline{\underline{\varepsilon}}(v)|^2 + 2N_s \underline{\underline{a}}_2 : \underline{\underline{\varepsilon}}^2(v) + N_p \underline{\underline{a}}_4 \underline{\underline{\varepsilon}}(v) : \underline{\underline{\varepsilon}}(v) \right) dx \leq 0 \quad (3.50)$$

3.6.3 Conclusion de l'étude

a) Équations de fermeture compatibles avec le second principe

Galdi et Reddy ont alors montré que l'état d'équilibre n'était pas stable *au sens de Lyapunov* lorsqu'une équation de fermeture de type linéaire était utilisé et pour une valeur du paramètre rhéologique excédant une certaine valeur critique. La stabilité thermodynamique est alors observée pour :

$$N_p \leq \frac{35}{2} \quad (3.51)$$

Au delà de cette valeur critique, l'inégalité (3.48) n'est plus respectée. D'autre part, toujours pour la même gamme de N_p , l'utilisation d'une équation de fermeture linéaire est stable de manière monotone et exponentielle ($E(t) \leq E(0)e^{-\nu t} \quad \forall \nu > 0 \quad \forall t$).

L'étude a également montré que l'utilisation d'une équation de fermeture quadratique était compatible avec le second principe de thermodynamique quelle que soit la valeur de N_p et de plus, la solution est exponentiellement stable d'un point de vue énergétique (la vitesse de convergence jusqu'à l'état d'équilibre est exponentielle).

Les travaux de Munganga et *al.* ont également montré que l'équation de fermeture Naturelle $2d$ est stable et consistante pour différents types d'écoulements.

b) Équations de fermeture non compatibles

En revanche, l'utilisation d'une équation de fermeture hybride ou orthotrope (ORS), réputée être précise, n'est pas compatible avec le second principe de thermodynamique pour des écoulements arbitraires. Néanmoins, dans le cas de l'équation ORS, il est possible d'établir la consistance dans le cas d'écoulements spécifiques.

Cette étude a donc montré que le choix concernant une équation de fermeture pour la loi de comportement rhéologique était assez réduit. Dans le cas $3d$, nous avons donc le choix entre les équations de fermeture de type quadratique et linéaire avec, pour cette dernière, une restriction au niveau de la valeur de N_p . Afin de limiter cette restriction, nous avons choisi d'utiliser une équation de fermeture quadratique. La loi de comportement prend donc la forme qui suit :

$$\underline{\underline{\sigma}} = -p\underline{\underline{I}}_d + 2\eta_I \left\{ \underline{\underline{\varepsilon}}(v) + N_s \left(\underline{\underline{\varepsilon}}(v) \underline{\underline{a}}_2 + \underline{\underline{a}}_2 \underline{\underline{\varepsilon}}(v) \right) + N_p \left(\underline{\underline{\varepsilon}}(v) : \underline{\underline{a}}_2 \right) \underline{\underline{a}}_2 \right\} \quad (3.52)$$

3.7 Conclusion

Cette étude bibliographique s'articule autour de trois parties. Chacune d'elles contribue à sa manière à la compréhension des phénomènes liés à la rhéologie des suspensions de fibres.

La première partie décrit les équations constitutives du champ de contrainte susceptibles de rendre compte des écoulements de suspensions chargées de fibres. Ce travail bibliographique a montré la richesse des études menées jusqu'à ce jour. Plusieurs modèles empiriques sont proposés pour décrire le comportement rhéologique des suspensions chargées de fibres dans les cas dilués ou semi-dilués. Il s'avère que le calcul de la contribution des fibres au tenseur des contraintes macroscopiques représente un point délicat. Pour aboutir à une estimation de ce terme, les hypothèses sont nombreuses et limitent fortement le champ d'application de la loi de comportement.

En particulier, le modèle pour les suspensions de sphéroïdes est issu des travaux de Jeffery et se limite généralement aux régimes dilués. Ces modèles prédisent une augmentation de la viscosité avec la fraction volumique de fibres mais paradoxalement ne parviennent pas à prédire un accroissement de la viscosité avec le facteur de forme des particules. Meslin soulève ce paradoxe en mettant en place une loi de comportement valable pour des solutions semi-diluées de fibres. Puisque l'épaisseur des particules est prise en compte, il n'est pas nécessaire de corriger la relation de comportement par un facteur correctif qui n'est pas toujours adapté. Néanmoins, la relation proposée s'applique au cas des suspensions de particules de faibles facteurs de forme et fait intervenir de nombreux coefficients qui doivent être calculés via une résolution numérique souvent coûteuse en temps de calcul.

Il existe, par ailleurs, d'autres modèles très intéressants qui sont valables :

- pour des fluides rhéofluidifiant, avec en particulier les travaux de Souloumiac. Ce modèle très intéressant engendre le calcul de la fonction de distribution de l'orientation et donc n'est pas facilement applicable d'un point de vue numérique,
- pour des suspensions concentrées de fibres, avec notamment, les travaux de Thomasset. Ce modèle prend également en compte le caractère rhéofluidifiant du polymère. Cependant, le régime de concentration fait intervenir un seuil de contrainte dont la détermination expérimentale n'est pas aisée.

Enfin, la théorie des corps élancés permet de construire des modèles macroscopiques valables pour des suspensions en régime semi-dilué mais, en contrepartie, l'épaisseur des particules étant négligée, les modèles introduisent dans l'expression des coefficients rhéologiques une erreur qui est minimisée via l'utilisation d'une fonction de correction non adaptée à tous les facteurs de forme. Nonobstant ces faiblesses, les modèles issus de cette théorie sont largement utilisés dans la littérature pour prendre en compte le couplage entre la rhéologie et l'orientation. De plus les résultats obtenus avec ces modèles corroborent les tendances expérimentales.

Nous avons ainsi opté pour un modèle de comportement issu de la théorie des corps élancés afin de prédire le couplage entre la rhéologie et l'orientation.

En revanche, nous avons tout de même choisi d'implémenter dans le code de calcul Rem3D la loi de comportement générique des suspensions chargées de fibres. Nous rappelons que cette loi de comportement fait intervenir les paramètres rhéologiques η_I , N_s et enfin N_p .

Enfin, tout comme l'équation d'évolution macroscopique de l'orientation, la loi de comportement fait intervenir un tenseur d'ordre 4 qui peut être éliminé via l'utilisation d'une équation de fermeture. La dernière partie de ce chapitre met le doigt sur la difficulté que pose le choix d'une équation de fermeture.

Chapitre 4

Méthodes Numériques

Nous présentons dans ce chapitre les méthodes numériques ainsi que le code de calcul que nous avons développés pour simuler les écoulements des thermoplastiques chargés de fibres. Les équations à résoudre ont été décrites aux chapitres précédents. Nous avons utilisé, en particulier une loi de comportement issue de la théorie des corps élancés. Cette loi fait appel à un descripteur de l'orientation dont l'évolution au cours du temps est régie par le modèle de Folgar et Tucker pour les suspensions semi-diluées de fibres.

Ce chapitre s'articule autour de plusieurs parties : tout d'abord nous décrivons de manière succincte les travaux réalisés dans la littérature sur la simulation numérique de l'orientation de fibres. Cette partie nous permettra de justifier l'approche que nous avons adoptée pour simuler le comportement des matériaux chargés.

La deuxième partie de ce chapitre est dédiée à la description des méthodes numériques utilisées pour la résolution du problème global. Le couplage entre les fibres et la cinématique est pris en compte via une équation constitutive pour le champ des contraintes qui a été résolue par l'entremise d'une méthode éléments finis mixte P^{1+}/P^1 . Le tenseur d'orientation est alors considéré connu et le couplage est pris en compte de manière "explicite", c'est à dire que le problème mécanique et le problème de l'orientation sont résolus successivement.

Afin de résoudre l'équation d'évolution de l'orientation des fibres, nous avons utilisé un schéma spatial qui utilise une technique de Galerkin Discontinue P^0 , ce qui confère au schéma résultant une grande stabilité. Le schéma temporel est basé sur une méthode d'éléments finis espace-temps discontinus de haut degré en temps, bien adapté pour répondre aux problèmes des temps de calcul.

Enfin nous achèverons ce chapitre par une description du code de calcul.

Sommaire

4.1	État de l'art	87
4.1.1	Les méthodes numériques	87
a)	Méthodes éléments finis mixtes pour le problème mécanique	87
b)	Méthodes stabilisées et méthodes mixtes pour le problème en orientation	88
c)	Conclusion	90
4.1.2	La simulation numérique du couplage rhéologie-orientation . . .	91
a)	Écoulement en extrusion	91
b)	Écoulement avec des zones de recirculation	92
c)	Écoulement en injection	93
d)	Conclusion	95
4.2	Le problème mathématique	95
4.2.1	Les équations mises en jeu	95
4.2.2	Les conditions aux limites	96
4.2.3	Approche numérique	97
4.3	Méthode éléments finis mixte appliquée au problème mécanique	98
4.3.1	La formulation faible continue	98
4.3.2	La formulation faible discrète	101
4.3.3	La formulation algébrique	102
4.4	Méthode TGD espace-temps appliquée à l'orientation	103
4.4.1	Méthode temporelle pour la résolution du problème instationnaire	104
a)	L'élément fini espace-temps	104
b)	Le maillage du domaine spatio-temporel	104
4.4.2	La formulation faible discrète	105
a)	L'interpolation sur l'élément fini spatio-temporel	105
b)	La formulation variationnelle du problème	106
4.4.3	Discrétisation des termes constituant l'équation d'orientation . .	106
a)	Discrétisation du terme de dérivée permanent	106
b)	Discrétisation du terme de convection	108
c)	Discrétisation des termes linéaires	108
d)	Linéarisation des termes non linéaires et discrétisation des termes restants	110
e)	Discrétisation du second membre	111
4.4.4	Écriture matricielle du problème d'orientation	111
4.5	Algorithme de résolution	112
4.5.1	Couplage orientation / cinématique en extrusion	112
a)	Calcul mécanique	112
b)	Détermination de l'orientation	113
c)	Normalisation du tenseur d'orientation	114
4.5.2	Couplage orientation / cinématique en injection	115
a)	Évolution de la surface libre	115
b)	Résolution du problème dans le cadre de l'injection	116
4.6	Conclusion	118

4.1 État de l'art

La simulation numérique de l'orientation de fibres a fait l'objet de nombreux travaux ces vingt dernières années. Les progrès, en matière de puissance de calcul, ont permis la simulation de problèmes de grandes tailles.

Actuellement, il existe deux types de calculs sur des échelles d'espace très différentes :

- la simulation à l'échelle micromécanique. Les travaux portent sur la simulation directe de l'orientation d'une fibre seule ou d'une population de fibres. Il s'agit notamment de prévoir l'orientation de particules solides dans un fluide newtonien tout en quantifiant l'ensemble des interactions hydrodynamiques apparaissant dans un écoulement fluide-particules. Nous ne nous étendrons pas plus sur ce sujet [99],
- la simulation macroscopique des modèles existants, notamment ceux de Jeffery ou de Folgar et Tucker avec ou sans couplage avec la cinématique.

Après une brève description des méthodes numériques susceptibles de nous intéresser, nous nous attacherons à présenter les travaux concernant la simulation numérique à l'échelle macroscopique de l'orientation de fibres dans la littérature. Les travaux susceptibles d'être rencontrés dans la littérature étant assez nombreux, nous ne présenterons, dans la partie bibliographique, que ceux qui ont pris en considération le couplage entre la cinématique et l'orientation.

4.1.1 Les méthodes numériques

Nous présentons dans cette partie les différentes techniques numériques susceptibles d'être mises en place pour la résolution globale du problème de l'injection des matériaux chargés de fibres. Il s'agit notamment de décrire de manière succincte les méthodes numériques existantes pour la résolution du problème mécanique, typiquement ici la résolution du problème de Stokes généralisé, des techniques numériques pour la résolution de l'équation d'advection (évolution de l'orientation des fibres), suivies des techniques pour le transport de la surface libre.

a) Méthodes éléments finis mixtes pour le problème mécanique

La résolution des équations de Stokes induit l'utilisation d'une méthode éléments finis mixtes pour la discrétisation du problème mécanique. Dans la littérature, il existe deux familles de méthodes selon qu'elles s'appuient sur une discrétisation continue ou discontinue de la pression :

- pression discontinue : Cette discrétisation s'avère efficace dans le cadre bidimensionnel et de l'utilisation de solveurs directs [65]. En effet, le fait que la pression soit discontinue entraîne une augmentation du coût de calcul (car les espaces fonctionnels associés à cette discrétisation augmentent de taille) sans amélioration de la qualité des résultats. D'autre part, le conditionnement de la matrice de raideur n'est pas de bonne qualité pour l'utilisation de solveurs itératifs. Il faut donc avoir recours à des solveurs directs. Dans un cadre tridimensionnel, l'utilisation de cette technique devient rhédibitoire.

- pression continue : Cette discrétisation aboutit à un système matriciel plus petit et donc mieux adapté aux calculs 3d. De plus, cette technique se prête bien aux résolutions itératives, ce qui est un avantage considérable.

Le tableau ci-dessous montre l'intérêt de choisir une discrétisation continue de la pression [49]. La dernière colonne de ce tableau permet d'évaluer la taille du système matriciel obtenue en fonction du nombre de noeuds de la discrétisation, en considérant que dans un maillage tridimensionnel, il y a six fois plus d'arêtes que de noeuds et dix fois plus de faces que de noeuds.

	ordre d'interpolation			inconnues par			Total $\times N_{noeuds}$
	$\underline{v}$	p	$\underline{v}$ et p	noeud	arête	face	
$P1^+/P1_{cont}$	1	1	$0(h)$	4	0	0	4
$P2/P1_{cont}$	2	1	$0(h^2)$	4	3	0	22
$P1^+/P0_{disc}$	1	1	$0(h)$	3	0	1	13
$P2^+/P1_{disc}$	2	1	$0(h^2)$	3	3	1	31

TAB. 4.1 – éléments finis compatibles et taille du système matriciel

Ainsi, étant donné le nombre d'inconnues par noeuds, nous sommes naturellement amenés à privilégier les éléments compatibles à pression continue. Nous avons donc choisi d'utiliser le MINI-élément ($P1^+/P1$) car pour un ordre d'erreur donné, le choix de cet élément requiert le moins de ressource mémoire. De plus, l'avantage le plus important de cette approche est la possibilité d'utiliser un solveur itératif pour la résolution du système matriciel final. Ce solveur itératif est basé sur une méthode MINRES (*General Minimal Residual Method*) qui a prouvé son efficacité au cours des travaux antérieurs [30], [24], [124]. Enfin, cette technique convient aux applications utilisant un calcul parallèle, ce qui est également l'un de nos objectifs.

b) Méthodes stabilisées et méthodes mixtes pour le problème en orientation

L'équation d'évolution de l'orientation est une équation de transport et requiert ainsi des techniques numériques adéquates. En effet, du fait du caractère hyperbolique de l'équation, le traitement numérique des problèmes de transport engendre des difficultés de convergence. Les techniques éléments finis classiques donnent lieu à des oscillations numériques et à des solutions peu précises dès lors que la convection devient trop importante (comme dans notre cas). Une solution à ces instabilités consiste à rajouter une diffusion artificielle aux équations fortement convectives au risque de dénaturer la solution.

Les méthodes stabilisées :

Les méthodes dites *stabilisées* ont pour effet d'optimiser ce type d'approche. Il existe dans la littérature diverses techniques :

- Les méthodes SU ou SUPG [34] qui consistent à perturber les fonctions test w_h pour les termes de convection en rajoutant un terme qui s'apparente à la diffusion numérique :

$$\tilde{w}_h = w_h + \lambda \underline{v} \nabla w_h$$

où λ est un paramètre à déterminer (Méthode de type *Streamline upwind* : SU). Les méthodes de types SUPG, *Streamline upwind Petrov Galerkin* consistent à utiliser des fonctions test perturbées non seulement pour le terme de convection mais aussi pour les autres termes. Ce dernier schéma est quant à lui stabilisant mais également consistant. La technique SUPG est l'une des plus utilisées parmi les méthodes de stabilisation.

- La méthode des caractéristiques est une autre méthode bien adaptée aux équations hyperboliques. L'idée de la méthode, pour les problèmes instationnaires est d'appliquer un schéma de différences finies sur l'ensemble des termes constituant la dérivée particulaire. Cette dérivée totale fait alors intervenir les trajectoires ou caractéristiques. Le principal intérêt de la méthode réside dans le fait que les termes de convection ne sont plus explicitement traités. Le point délicat de la méthode consiste à déterminer la trajectoire au cours du temps. Pour cela, il existe différentes techniques qui conduisent à la résolution d'une équation différentielle. La méthode des caractéristiques ainsi que la méthode SUPG ont un effet de stabilisation similaire .
- Il existe d'autres approches voisines de la méthode SUPG, notamment les méthodes de type GLS, *Galerkin Least Squares* [59], conceptuellement plus simples dans la mesure où elles consistent à rajouter un terme de stabilité à la formulation de départ tout en contrôlant que ce terme ne détériore pas la précision de la solution. Ces méthodes sont réputées être inconditionnellement stables et permettent d'obtenir des solutions très correctes.
- Citons également les méthodes de type SGS, *Subgrid Scale method* [83], qui s'appuient sur l'utilisation de fonctions bulles analogues à celles rencontrées pour la construction de schémas stables pour le problème de Stokes. Ces méthodes sont très peu utilisées malgré leur bonne réputation. La méthode TG, *Taylor galerkin* [58], fut proposée comme version éléments finis du schéma différences finies de lax-Wendroff. Elle permet d'améliorer la précision des méthodes précédentes tout en ayant des propriétés de stabilité similaires aux méthodes SGS.

Ces méthodes stabilisées permettent de s'affranchir des problèmes rencontrés avec les approches de type Galerkin standard mais présentent néanmoins des inconvénients :

- Elles conduisent généralement à la résolution de systèmes linéaires à matrice non symétrique et requièrent ainsi l'utilisation d'algorithmes de résolution itératifs, coûteux en temps de calcul,
- L'association de ces méthodes à des schémas temporels implicites conduit à la résolution de gros systèmes linéaires,
- Enfin, ces méthodes posent parfois des problèmes de consistance de la solution obtenue.

Les méthodes mixtes

Les méthodes *mixtes* permettent d'éviter les problèmes d'oscillations rencontrés avec les méthodes classiques, sans rajouter de terme de stabilisation susceptible de dénaturer la solution obtenue :

- Les méthodes de type Galerkin standard/ θ -Shéma [97] utilisent une discrétisation spatiale basée sur une technique de Galerkin standard associée à une intégration temporelle par une θ -méthode différence finie. Cette méthode présente un certain nombre de limitations (coût de calcul élevé, résolution de gros systèmes linéaires).
- La méthode de Taylor Galerkin Discontinu (TGD) utilise les avantages d'une méthode spatiale de Galerkin Discontinu et d'une intégration temporelle de haut degré de Taylor. Elle a été proposée par Pichelin et *al* [109] pour traiter de manière efficace le problème thermique en injection de polymères. Le schéma spatial utilise un ordre d'interpolation assez bas ($P0$), alors que le schéma temporel utilise une discrétisation de Taylor explicite. Cette méthode reste cependant limitée du fait de son caractère explicite qui se traduit par des temps de calculs très élevés et par l'interpolation spatiale de bas degré qui induit une sensibilité de la solution au maillage.
- Enfin, la Méthode de Taylor Galerkin Discontinu espace-temps [24] utilise les avantages d'une méthode spatiale de Galerkin Discontinu et d'une intégration temporelle implicite de haut degré de Taylor. Cette méthode permet de s'affranchir des problèmes d'oscillations rencontrés avec les techniques éléments finis classiques et le caractère implicite de la méthode permet une réduction notable des temps de calcul.

c) Conclusion

En guise de conclusion, il nous apparaît, d'après toutes les méthodes numériques envisageables, que le schéma de Taylor Galerkin Discontinu (TGD) espace-temps est le plus apte à répondre à nos besoins, pour ce qui concerne le calcul en orientation. Par rapport aux approches de Galerkin standard, son intérêt est immédiat : il ne génère pas d'oscillation.

Comparativement aux méthodes stabilisées, la méthode TGD espace-temps n'introduit pas de terme de stabilisation susceptible de dénaturer la solution et ne nécessite pas la résolution d'aussi gros systèmes linéaires. En outre, ce schéma possède de bonnes propriétés de stabilité et de robustesse. En revanche, ce schéma est sensible au maillage en raison du faible ordre d'interpolation en espace ($P0$ en espace).

En ce qui concerne les méthodes numériques pour le calcul des champs de vitesse et de pression, nous avons été amenés à privilégier les éléments compatibles à pression continue. Nous avons alors choisi d'utiliser le MINI-élément ($P1^+/P1$).

4.1.2 La simulation numérique du couplage rhéologie-orientation

Il existe dans la littérature un grand nombre d'études concernant le calcul numérique de l'orientation de fibres dans un écoulement donné. Divers types de procédés de mise en forme ont été étudiés : l'extrusion, l'écoulement autour d'une sphère, les écoulements en compression, les écoulements dans un canal ou encore radial entre disques, et enfin l'injection. Le nombre des publications faites sur ce sujet est très abondant.

Il existe dans la littérature trois catégories de modèles numériques :

1. Les modèles découplés où les équations de la cinématique sont résolues sans la prise en compte des fibres. Une fois le champ de vitesse obtenu, l'équation pour l'orientation des fibres est résolue pour chaque itération en temps. La littérature foisonne d'articles sur la simulation de l'orientation de fibres non couplé à l'écoulement. Divers types d'écoulements et de géométries ont été utilisés : extrusion, injection, compression, *etc.*...
2. Les modèles couplés avec l'hypothèse que les fibres sont alignées suivant les lignes de courant.
3. Les modèles couplés où les équations de la cinématique sont fonctions de l'orientation des fibres, cette dernière étant régie par une équation d'évolution.

Nous ne présenterons dans la partie qui suit que les travaux qui intègrent des modèles couplés pour divers types d'écoulements.

a) Écoulement en extrusion

Cas de la simulation bidimensionnelle :

- Papanastasiou et Alexandrou [105] ont étudié l'extrusion isotherme d'une solution semi-diluée de fibres dans un fluide newtonien. Le couplage est pris en compte via une loi de comportement de type Dinh et Armstrong et la résolution intègre une méthode éléments finis 2d. L'orientation des fibres est calculée après résolution de la fonction de distribution de l'orientation suivant des lignes de courant spécifiques. La méthode utilisée couple le calcul du champ de vitesse et des lignes de courant, au calcul de l'orientation des fibres par un algorithme de Newton. Le principal résultat de ce travail est que le gonflement en sortie de filière diminue fortement avec l'augmentation du taux de fibres et du rapport de forme des fibres. Alexandrou et Papanastasiou [8] reprennent ces travaux et introduisent les phénomènes thermiques dans ce calcul. Vanderheyden et Ryskin [132] utilisent également une loi de comportement anisotrope pour modéliser l'écoulement de polymères cristaux liquides en filière. Ils décrivent l'état d'orientation des fibres à partir des équations d'Ericksen et de Jeffery. Une méthode de calcul par différence finie est utilisée pour résoudre le problème.
- Rosenberg et al [119] présentent une méthode originale de calcul couplé d'écoulement stationnaire isotherme. L'équation de transport en $\underline{a}_2$ est résolue à la fois aux noeuds et en suivant les lignes de courant, le maillage étant formé de bandes

comprises entre deux lignes de courant. La prise en compte du couplage se fait via un modèle issu de la théorie des fluides isotropes transverses (le premier modèle étant suggéré par Ericksen). L'orientation des fibres a été obtenue en résolvant l'équation d'évolution tensorielle de l'orientation de Jeffery. L'algorithme de calcul a été appliqué au calcul, en régime dilué, de l'écoulement dans une filière plate et dans un rhéomètre à chute de bille. La simulation de l'extrusion en filière plate montre une grande dépendance du gonflement en sortie avec le taux de fibres et leur rapport de forme. L'algorithme ne converge plus dès lors que le régime devient semi-dilué.

- Altan et al [12] ont étudié le problème régi par l'orientation des fibres dans une conduite de type rectangulaire. Ils font l'hypothèse que l'orientation des fibres est plane et utilisent la loi de comportement de Dinh et Armstrong. L'orientation des fibres est obtenue en résolvant les équations d'évolution du tenseur $\underline{\underline{a}}_2$ et $\underline{\underline{a}}_4$ et utilise une équation de fermeture qui relie le tenseur d'ordre 6 en fonction du tenseur d'ordre 4.
- Nous pouvons également citer les travaux de Chono et Makino [43] ou encore de Ausias et al [17] où le couplage entre la cinématique et l'orientation des fibres a été pris en compte par l'entremise d'une équation constitutive développée par Lipscomb et al couplée à l'équation d'évolution de Folgar et Tucker. Une équation de fermeture de type quadratique vient fermer l'équation d'évolution de l'orientation.

Vers une simulation tridimensionnelle :

Nous pouvons dénombrer plusieurs études à ce sujet. La majorité d'entre elles ont également simulé l'injection de pièces et sont donc répertoriées dans la section c), [135], [134], [87], [86], [45], [44].

b) Écoulement avec des zones de recirculation

Hypothèse d'alignement local des fibres :

Les premières simulations prenant en compte un couplage entre l'orientation des fibres et la cinématique ont introduit l'orientation des fibres dans tout l'écoulement tout en supposant que les fibres sont localement alignées suivant les lignes de courant (dans la direction du vecteur vitesse) [94]. Le tenseur d'orientation prend alors une expression assez simple :

$$\underline{\underline{a}}_2 = \frac{1}{||\underline{v}||^2} \underline{v} \otimes \underline{v}^T \quad (4.1)$$

- Dans les travaux menés par Lipscomb [94], le couplage entre l'orientation et la cinématique a été pris en compte via une équation constitutive issue de la théorie des corps élastiques (équation 3.10). Le champ de contrainte est ainsi ramené à une fonction non linéaire du champ de vitesse. Il s'agit alors de résoudre des équations de Stokes anisotropes. Ils supposent également que $\lambda = 1$ ce qui est, dans ce cas précis, une hypothèse assez restrictive puisque les fibres suivent alors les lignes de courant. Malgré les importantes simplifications, la simulation numérique de ce modèle a permis de retrouver en écoulement de cisaillement certains résultats tels

que la quantification exacte de la première différence de contraintes normales ou encore la croissance de la zone de recirculation avec la fraction volumique de fibres ainsi que du rapport de forme des fibres, dans un écoulement de type contraction.

- Chiba et *al* [41] prolongent les travaux de Lipscomb et étudient le même type de suspensions en utilisant une méthode par différences finies. Les résultats numériques obtenus corroborent les tendances obtenues par Lipscomb et mettent ainsi en exergue l'importance du couplage rhéologique. Il faut tout de même garder à l'esprit que l'hypothèse d'alignement local des fibres est très réductrice étant donné que pour des écoulements de types élongationnels, l'orientation des fibres ne s'effectue pas suivant les lignes de courant.
- Baloch et Webster [20] étendent les travaux de Chiba pour des écoulements élongationnels : suivant le type d'écoulement, les fibres sont, soit alignées dans la direction de l'écoulement, soit perpendiculaires à cette direction. Ils simulent alors les écoulements en contraction et en expansion et corréler les résultats obtenus à des observations expérimentales.

Résolution globale du problème :

La résolution 2d du problème couplé a fait l'objet de nombreuses études. Nous pouvons citer les travaux de Chang et *al* [36] ou encore Chiba et *al* [38], [39], [40] qui ont beaucoup publié sur ce sujet. Le résultat principal de leurs travaux est qu'en présence de recirculations, l'orientation des fibres n'atteint un état stationnaire qu'après plusieurs passages suivant les mêmes lignes de courant. Le problème de l'orientation pour des écoulements stationnaires et en présence de recirculations a également été étudié par Azaiez et *al* [19], Poitou et *al* [111], Chinesta et Chaidron [42] ou encore Reddy et *al* [118]. Le résultat prédominant est qu'en écoulement 2d avec recirculations, les fibres s'alignent selon les lignes de courant.

Notons également les travaux de Azaiez et *al* [19], Ait-Kadi et Grmela [6] ou encore Ramazani et *al* [114], [115] qui ont pris en compte l'effet viscoélastique de la matrice. Le couplage entre l'écoulement et l'orientation a été simulé pour des écoulements dans une contraction plane.

c) Écoulement en injection

Cas de la simulation bidimensionnelle :

- Amhed et Alexandrou [5] ont étudié le remplissage d'une cavité 2d. La loi de comportement utilise le modèle de Dinh et Armstrong. La cinématique est couplée à la résolution de la fonction de distribution de l'orientation.
- L'originalité des travaux de Souloumiac [125] vient du fait que la matrice n'est plus considérée comme newtonienne mais est régie par une loi de comportement pseudoplastique anisotrope. Le calcul de l'orientation se fait après résolution de l'équation d'évolution de l'orientation écrite sous forme lagrangienne, valable pour

des concentrations diluées de fibres. Il utilise alors la méthode des caractéristiques pour la résolution de l'orientation couplée à une technique éléments finis pour la résolution des champs de vitesse, pression et température.

Simulation tridimensionnelle avec approximation de Hele et Shaw :

- Verweyst et Tucker [135], [134] ont mis au point une méthode de résolution qui traite l'orientation des fibres comme étant tridimensionnelle (approximations de Hele et Shaw). Les méthodes numériques utilisées sont basées sur une technique des éléments finis pour l'écoulement couplé à la méthode des caractéristiques pour l'évolution de l'orientation. Des simulations ont été lancées pour des géométries présentant des points de stagnation. Les résultats en orientation donnent au voisinage de ce point des valeurs non-physiques. Verweyst propose alors une méthode de correction afin de minimiser l'erreur numérique.

Simulation tridimensionnelle sans approximation :

- Kabanemi et Hétu [87], [86] ont été les précurseurs en ce qui concerne la simulation de l'injection 3d avec couplage. L'anisotropie de la matrice est prise en compte via une loi de comportement de Doi-Doraismwy-Metzner, abordée dans la section 3.4.2. Cette loi est couplée à l'équation d'évolution de Folgar et Tucker. L'écoulement du fluide est résolu via une méthode éléments finis mixte alors que l'équation d'advection qui gouverne l'évolution de l'orientation des particules est résolue par l'entremise d'une méthode de Runge et Kutta d'ordre 4. L'avancée de la surface libre est, quant à elle, résolue par l'entremise d'une méthode de type Level-set. Le code de calcul est alors appliqué à l'extrusion (écoulement de Poiseuille dans une cavité rectangulaire) et à l'injection d'une plaque.
- Chung et Kwon [45], [44] ont également étudié l'injection de pièces 3d en s'affranchissant de l'hypothèse de Hele et Shaw. La loi de comportement fait référence au modèle de Dinh et Armstrong couplé à l'équation d'évolution de Folgar et Tucker. L'équation d'advection est résolue via une méthode SUPG alors que le problème de Stokes utilise une technique éléments finis continu. Le modèle numérique ainsi développé est valable dans le cadre d'écoulements axisymétriques en vue d'une application au remplissage d'un disque injecté par le centre ainsi que d'une plaque à seuil utilisée notamment dans les travaux de Bay [25].
- Enfin, très récemment, Monton [102] présente des résultats d'orientation de fibres en injection 3d. L'orientation des fibres est régie par l'équation de Jeffery alors que l'écoulement est gouverné par une équation constitutive issue de la théorie des corps élastiques. Le problème couplé est résolu via une technique éléments finis couplée à une technique de Taylor Galerkin Discontinu explicite.

d) Conclusion

En guise de conclusion nous pouvons noter le faible nombre de travaux prenant en compte le caractère tridimensionnel dans le procédé d'injection. La majorité des travaux pré-cités prennent en compte le couplage via une loi de comportement issue de la théorie des corps élastiques.

4.2 Le problème mathématique

Après un bref rappel des équations nécessaires à la résolution du problème lié à l'injection d'un polymère chargé de fibres, nous présentons les méthodes numériques employées pour la résolution du problème complet. L'algorithme de calcul fait appel à différents solveurs à chaque itération en temps :

- un *solveur mécanique* qui intègre la résolution du problème en vitesse-pression par une méthode éléments finis mixtes. Le tenseur d'orientation est alors considéré connu et l'orientation initiale $\underline{a}_2^{t0}$ est isotrope,
- un *solveur orientation* qui permet la résolution de l'équation de Folgar et Tucker par une méthode éléments finis espace temps Galerkin Discontinu. L'orientation initiale est également supposée isotrope et le champ de vitesse est supposé connu.
- un *solveur du domaine fluide* qui détermine le déplacement du front de matière après résolution de l'équation de transport de la fonction caractéristique, associée au domaine fluide.

Nous utilisons ainsi un couplage dit *explicite*, c'est à dire que le problème mécanique et le problème de l'orientation des fibres ne sont pas résolus simultanément.

4.2.1 Les équations mises en jeu

Un thermoplastique chargé de fibres est assimilable à un milieu continu, aussi son écoulement est régi par les principes fondamentaux de la mécanique des milieux continus. La matière injectée doit donc vérifier :

- la conservation de la masse,
- la conservation de la quantité de mouvement,
- la conservation de l'énergie.

Ces principes se traduisent mathématiquement par :

- l'équation de continuité :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \underline{v}) = 0 \quad (4.2)$$

- l'équation de l'équilibre dynamique :

$$\rho \frac{d\underline{v}}{dt} - \nabla \cdot (\underline{\sigma}) = \rho \underline{f} \quad (4.3)$$

- l'équation de conservation de l'énergie :

$$\rho \frac{dE}{dt} = -\nabla \cdot (\underline{q}) + \dot{\omega} \quad (4.4)$$

où ρ désigne la masse volumique, $\underline{v}$ la vitesse d'une particule matérielle, $\underline{\underline{\sigma}}$ le tenseur des contraintes, $\underline{f}$ la densité massique des forces extérieures, e l'énergie spécifique interne, $\underline{q}$ le flux de chaleur et enfin $\dot{\omega}$ l'apport d'énergie par dissipation visqueuse.

Le système est fermé par une équation constitutive entre contraintes et déformations donnée par la loi de comportement (3.47). Nous rappelons que cette loi de comportement nécessite la connaissance d'une équation de fermeture. Nous avons utilisé dans cette étude une équation de fermeture quadratique donnée par la relation (2.33).

Cette loi de comportement fait apparaître un descripteur de l'orientation via le tenseur $\underline{a}_2$. Il est alors nécessaire de fermer à nouveau ce système en faisant intervenir l'équation d'évolution de l'orientation des fibres. Pour ce faire, nous rappelons au lecteur que nous avons choisi d'utiliser le modèle macroscopique de Folgar et Tucker donnée par l'équation d'évolution (2.30).

Si nous considérons que le thermoplastique chargé de fibres est un matériau incompressible et que les forces de masse et d'inertie sont négligeables devant les forces visqueuses, pendant la phase de remplissage, alors les équations de conservation de la masse et de l'équilibre se réécrivent :

$$\begin{cases} \nabla \cdot \underline{\underline{\sigma}} = 0 \\ \nabla \cdot \underline{v} = 0 \end{cases} \quad (4.5)$$

Soit Ω le domaine matériel contenant le polymère fondu. En substituant l'expression de $\underline{\underline{\sigma}}$ dans le système (4.5), nous montrons que le problème d'écoulement à résoudre se ramène à un problème de Stokes généralisé :

trouver $\underline{v}(\underline{x}, t)$ et $p(\underline{x}, t)$ tels que $\forall (\underline{x}, t) \in \Omega \times [t_0; t]$

$$\begin{cases} \nabla \cdot (2\eta_I \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{v}) + N_s(\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{v}) \underline{a}_2 + \underline{a}_2 \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{v})) + N_p(\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{v}) : \underline{a}_2) \underline{a}_2) - \nabla p = 0 \\ \nabla \cdot \underline{v} = 0 \\ \frac{D\underline{a}_2}{Dt} = \underline{\underline{\Omega}}(\underline{v}) \underline{a}_2 - \underline{a}_2 \underline{\underline{\Omega}}(\underline{v}) + \lambda(\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{v}) \underline{a}_2 + \underline{a}_2 \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{v}) - 2 \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{v}) : \underline{a}_4) + 2C_I \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}(I - 3\underline{a}_2) \\ \underline{a}_4 = F(\underline{a}_2) \end{cases} \quad (4.6)$$

où la fonction $F(\underline{a}_2)$ fait référence à une équation de fermeture déjà abordée au paragraphe 2.4.2.

4.2.2 Les conditions aux limites

Les conditions aux limites sont les suivantes :

- sur Γ_{in} , nous imposons une condition de vitesse et de pression : $\underline{v} = \underline{v}_d(x)$ pour la vitesse, $\underline{v} - (\underline{v} \cdot \underline{n}) \underline{n} = \underline{0}$ et $(\underline{\underline{\sigma}} \underline{n}) \cdot \underline{n} = -p_d$ pour la pression,
- sur Γ_{pa} , un contact collant est imposé, ce qui se traduit par $\underline{v} = \underline{0}$,

- sur Γ_{in}^- (surface correspondant à la zone d'injection d'entrée), nous imposons généralement un état d'orientation initial des fibres isotrope : $\underline{\underline{a}}_2^{t_0} = \frac{1}{3}\underline{\underline{I}}_d$. Cette donnée est facilement modifiable.

où Γ_{in} et Γ_{pa} désignent respectivement les morceaux de frontières du domaine correspondant à la(es) zone(s) d'injection et à la zone de contact avec les parois du moule d'injection avec $\Gamma_{in} \cup \Gamma_{pa} = \partial\Omega$, et $\underline{n}$ désigne la normale sortante au point frontière considéré.

La figure 4.1 présente les différentes frontières introduites pour la mise en place des conditions aux limites.

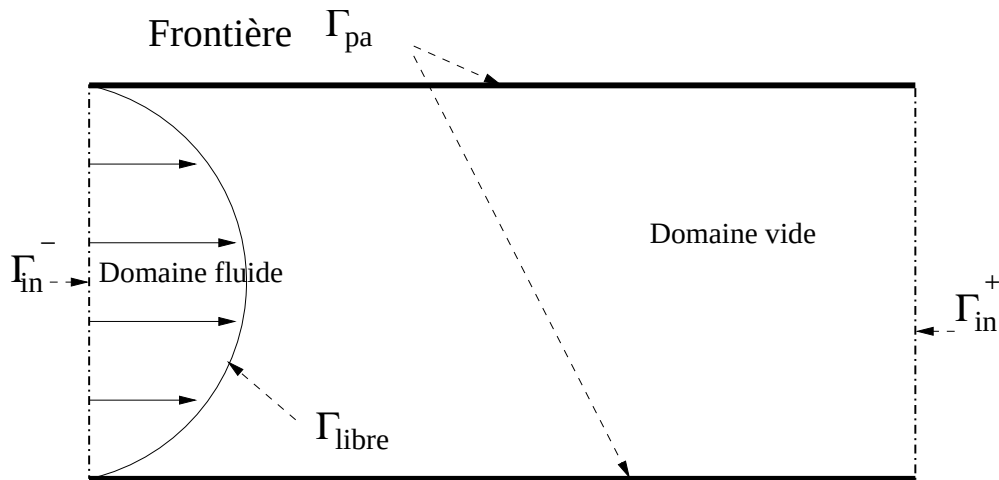


FIG. 4.1 – Représentation des différentes frontières et des différents domaines

Remarque :

Pour être plus précis, il est nécessaire de rajouter une condition de surface libre dans les conditions aux limites : $\underline{\underline{\sigma}}\underline{n} = \underline{0}$ sur la frontière libre Γ_{libre} (avec $\partial\Omega = \Gamma_{in} \cup \Gamma_{pa} \cup \Gamma_{libre}$). Cette surface libre est l'interface entre la partie remplie du moule d'injection que l'on appellera domaine fluide et le domaine vide. Dans le cas d'une approche eulérienne, Coupez et al [51] font disparaître la condition de surface libre en étendant les équations de Stokes à tout le domaine (fluide mais également vide). Ceci permet de se ramener à la résolution d'un problème de Stokes confiné, c'est à dire des conditions aux limites (ici de type dirichlet) sur la vitesse uniquement.

4.2.3 Approche numérique

Le système (4.6) définit la modélisation mathématique que nous avons utilisée pour traiter le problème du remplissage de matériaux chargés de fibres. Nous rappelons au lecteur que ce système algébrique est fortement non linéaire.

Il existe deux grandes classes de résolution des problèmes numériques régis par le système (4.6) :

1. la méthode couplée que nous appellerons *couplage implicite*. Il s'agit d'une approche monolithique : les équations discrétisées sont résolues simultanément pour toutes les inconnues $(\underline{v}, p, \underline{a}_2(\underline{v}))$. Cette approche conduit à la résolution d'un système algébrique de matrice de grande taille surtout en $3D$. Le coût de calcul est alors d'autant plus élevé,
2. la méthode couplée dite *explicite*, développée ci-après et que nous utilisons dans notre étude.

Nous séparons donc notre système formé par les équations (4.6) en deux sous-systèmes formant les problèmes :

- $\mathcal{P}b_1$ Équation d'équilibre et de conservation pour un champ d'orientation donné. Ici, nous récupérons le tenseur d'orientation calculé à l'incrément de temps précédent. A l'instant initial, le tenseur d'orientation est considéré isotrope. Nous résolvons donc à chaque pas de temps un problème de *Stokes généralisé* et l'extra-contrainte est calculée de manière implicite.
- $\mathcal{P}b_2$ Équation d'évolution de l'orientation pour un champ de vitesse donné.

4.3 Méthode éléments finis mixte appliquée au problème mécanique

En vue de développer la méthode éléments finis utilisée pour résoudre le problème en vitesse/pression, il est nécessaire de procéder à une écriture faible des équations.

4.3.1 La formulation faible continue

La formulation faible des équations mixtes vitesse-pression (4.6), sans la prise en compte de l'équation qui gouverne l'orientation, s'obtient en effectuant le produit scalaire (au sens L^2) par des fonctions test $\underline{w}$ et q appartenant aux espaces fonctionnels appropriés. Introduisons alors les espaces fonctionnels $L^2(\Omega)$ et $\mathcal{H}^1(\Omega)$, espaces de Hilbert et qui désignent respectivement les espaces de Lebesgue et les espaces de Sobolev. Nous définissons alors les espaces $\mathcal{V}$ et $\mathcal{P}$ tels que :

$$\mathcal{V} = \{\underline{w} \in (\mathcal{H}^1(\Omega))^3\} \quad (4.7)$$

$$\mathcal{P} = \{q \in \mathcal{L}^2(\Omega)\} \quad (4.8)$$

Après application du théorème de la divergence et prise en compte des conditions aux limites pré-citées, le problème variationnel à résoudre est le suivant :

Trouver $(\underline{v}, p)$ tel que $\forall (\underline{w}, q) \in \mathcal{V} \times \mathcal{P}$

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_{\Omega} 2\eta \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{v}) : \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{w}) d\Omega + \int_{\Omega} 2\eta N_p(\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{v}) : \underline{\underline{a}}_2) \underline{\underline{a}}_2 : \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{w}) d\Omega - \int_{\Omega} p \nabla \cdot \underline{w} \\ \quad \quad \quad = \int_{\Omega} 2\eta N_s(\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{w}) : \underline{\underline{a}}_2 + \underline{\underline{a}}_2 : \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{w})) d\Omega \\ - \int_{\Omega} q \nabla \cdot \underline{v} = 0 \end{array} \right. \quad (4.9)$$

Si $\underline{\sigma}_n$, $\underline{\sigma}_p$ et $\underline{\sigma}_s$ désignent respectivement la contribution du fluide, la contribution des fibres via le terme N_p et la contribution des fibres via le terme N_s au tenseur des contraintes, nous avons, d'après les différentes valeurs prises par les termes N_s et N_p :

$$\begin{cases} |\underline{\sigma}_n + \underline{\sigma}_p| \gg |\underline{\sigma}_s| \\ |\underline{\sigma}_p| \gg |\underline{\sigma}_s| \\ |\underline{\sigma}_p| > |\underline{\sigma}_n| \end{cases} \quad (4.10)$$

Compte tenu des inégalités obtenues, nous avons choisi de traiter le terme faisant intervenir N_s de manière explicite. Ce terme se retrouve donc au second membre.

Soient a et b deux formes bilinéaires définies respectivement sur $\mathcal{V} \times \mathcal{V}$ et sur $\mathcal{V} \times \mathcal{P}$ telles que :

$$\begin{aligned} a(\underline{v}, \underline{w}) &= \int_{\Omega} 2\eta \underline{\varepsilon}(\underline{v}) : \underline{\varepsilon}(\underline{w}) + 2\eta N_p(\underline{\varepsilon}(\underline{v}) : \underline{a}_2)(\underline{a}_2 : \underline{\varepsilon}(\underline{w})) d\Omega \\ b(\underline{v}, p) &= \int_{\Omega} p \nabla \cdot \underline{v} \end{aligned}$$

La formulation variationnelle (4.9) peut alors s'écrire :

Trouver $(\underline{v}, p)$ tel que $\forall (\underline{w}, q) \in \mathcal{V} \times \mathcal{P}$

$$\begin{cases} a(\underline{v}, \underline{w}) + b(\underline{w}, q) = \langle \underline{\sigma}_s, \underline{w} \rangle \\ b(\underline{v}, q) = 0 \end{cases} \quad (4.11)$$

L'existence et l'unicité de la solution pour ce problème sont obtenues sous les conditions suivantes :

- La forme bilinéaire a doit être coercive sur $\mathcal{V}$:

$$\exists \alpha > 0 \quad \text{tel que} \quad a(\underline{w}, \underline{w}) \geq \alpha \|\underline{w}\|_{\mathcal{V}}^2 \quad \forall \underline{w} \in \mathcal{V} \quad (4.12)$$

- la forme bilinéaire b doit satisfaire la condition *inf-sup* sur $\mathcal{V} \times \mathcal{P}$:

$$\exists \beta > 0 \quad \text{tel que} \quad \inf_{q \in \mathcal{P}} \sup_{\underline{v} \in \mathcal{V}} \frac{b(\underline{v}, q)}{\|\underline{v}\|_{\mathcal{V}} \|q\|_{\mathcal{P}}}, \quad \forall (\underline{v}, q) \in \mathcal{V} \times \mathcal{P} \quad (4.13)$$

Démonstration :

La condition inf-sup décrite par l'inégalité (4.13) n'est pas modifiée avec l'introduction de la contribution des fibres au tenseur des contraintes. La démonstration est donc identique au problème de Stokes classique.

Démontrons donc la coercivité de la forme bilinéaire $a(., .)$.

D'après l'inégalité de Korn :

$$\exists c_0 > 0 \quad \text{tel que} \quad \int_{\Omega} 2\eta \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{w}) : \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{w}) \geq c_0 \|\underline{w}\|_{\mathcal{V}}^2, \quad \forall \underline{w} \in \mathcal{V}$$

Il ne reste plus qu'à démontrer que :

$$\exists c_1 > 0 \quad \text{tel que} : \quad \int_{\Omega} 2\eta N_p(\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{w}) : \underline{\underline{a}}_2)(\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{w}) : \underline{\underline{a}}_2) \geq c_1 \|\underline{w}\|_{\mathcal{V}}^2, \quad \forall \underline{w} \in \mathcal{V}$$

Il suffit simplement de poser ($\underline{\underline{a}}_2$ étant définie positive) :

$$c_1 = 2\eta N_p \left(\frac{\|\underline{\underline{a}}_2\|}{2} \right) \quad \text{et donc} \quad \alpha = c_0 + 2\eta N_p \left(\frac{\|\underline{\underline{a}}_2\|}{2} \right) \quad (4.14)$$

Le symbole $\|\cdot\|$ désigne ici la norme du tenseur défini comme le produit doublement contracté du tenseur $\underline{\underline{a}}_2$ avec lui même. La solution $(\underline{v}, p)$ d'un tel problème existe et elle est unique.

L'élément fini mixte

Nous avons intégré, dans notre schéma numérique, un solveur éléments finis Stokes existant déjà au Cemef¹. Les éléments géométriques utilisés sont des tétraèdres comme l'indique la figure (4.2).

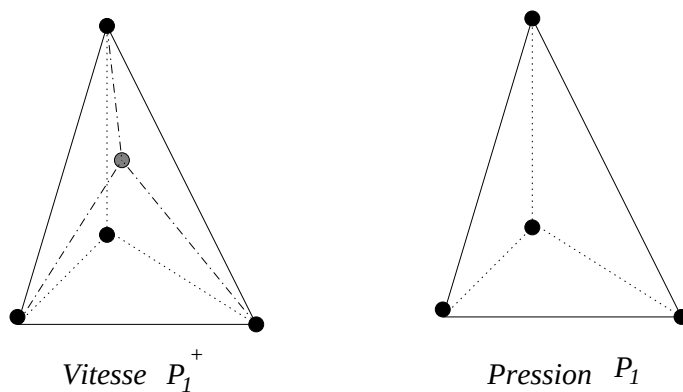


FIG. 4.2 – L'élément fini mixte P_1^+/P_1 .

Nous avons utilisé l'élément fini P_1^+/P_1 ou MINI ELEMENT, introduit par Arnold et al qui utilise une interpolation linéaire en vitesse et en pression. Afin de satisfaire la condition de compatibilité, l'interpolation en vitesse est enrichie par une fonction bulle, servant essentiellement à contrôler la condition d'incompressibilité via une fonction bulle pyramidale [48], nulle sur la frontière de l'élément et affine par morceau sur les quatre sous-tétraèdres internes à l'élément.

¹Centre de Mise en Forme des Matériaux de l'Ecole des Mines de Paris

Les champs de vitesse et de pression sont les suivants :

- la pression est linéaire et continue,
- la vitesse se décompose en une partie linéaire $\underline{v}$ et une partie bulle b . Cette décomposition est unique.

Intéressons nous à présent à la discrétisation du problème.

4.3.2 La formulation faible discrète

La discrétisation par éléments finis du problème de Stokes (4.6) consiste à calculer la solution de sa formulation variationnelle (4.9) non plus dans les espaces continus $\mathcal{V}$ et $\mathcal{P}$ (de dimension finie) mais dans des sous-espaces d'approximations de dimension finie $\mathcal{V}_h$ et $\mathcal{P}_h$. Ces sous-espaces d'approximations sont définis sur une triangulation $\mathcal{T}_h(\Omega)$ du domaine :

$$\Omega = \bigcup_{K \in \mathcal{T}_h(\Omega)} K$$

A chaque élément K de la triangulation, nous associons des fonctions de base pour approcher $(\underline{v}, p)$ qui assurent la condition d'inclusion suivante :

$$\begin{aligned} \mathcal{V}_h &\subset \mathcal{V} \\ \mathcal{P}_h &\subset \mathcal{P} \end{aligned} \tag{4.15}$$

Les sous espaces d'approximations $(\mathcal{V}_h, \mathcal{P}_h)$ s'expriment sous la forme :

$$\begin{aligned} \mathcal{V}_h &= V_h \oplus \mathcal{B}_h \\ V_h &= \{ \underline{v}_h \in (\mathcal{C}^0(\Omega))^3 \quad ; \quad \underline{v}_h|_K \in (P_1(K))^3 \} \\ \mathcal{B}_h &= \{ \underline{b}_h \in (\mathcal{C}^0(\Omega))^3 \quad ; \quad \underline{b}_h = \underline{0} \text{ sur } \partial\Omega \text{ et } \underline{b}_h|_{K_i} \in (P_1(K_i))^3, 1 \leq i \leq 4 \} \\ \mathcal{P}_h &= \{ p_h \in \mathcal{C}^0(\Omega) \quad ; \quad p_h|_K \in P_1(K) \} \end{aligned}$$

avec :

- $(K_i)_{i=1,\dots,4}$: la représentation du tétraèdre K en quatre sous-tétraèdres partageant le centre du tétraèdre pour sommet comme l'indique la figure (4.2).
- $P_1(K)$: l'espace des polynômes de degré inférieur ou égal à 1 sur l'élément K .

Le problème discret associé au problème de Stokes avec fibres s'écrit de la façon suivante : Trouver $(v_h, b_h, p_h) \in V_h \times \mathcal{B}_h \times \mathcal{P}_h$ tel que $\forall ((w_h, b_h^*, q_h)) \in (V_h \times \mathcal{B}_h \times \mathcal{P}_h)$

$$\left\{ \begin{aligned} &\int_{\Omega} 2\eta \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{v}_h) : \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{w}_h) d\Omega + \int_{\Omega} 2\eta N_p(\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{v}_h) : \underline{\underline{a}}_2)(\underline{\underline{a}}_2 : \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{w}_h)) d\Omega - \int_{\Omega} p_h \nabla \cdot \underline{w}_h d\Omega \\ &\quad = \int_{\Omega} 2\eta N_s(\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{w}_h) \underline{\underline{a}}_2 + \underline{\underline{a}}_2 \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{w}_h)) d\Omega \\ &\int_{\Omega} 2\eta \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{b}_h) : \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{b}_h^*) d\Omega + \int_{\Omega} 2\eta N_p(\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{b}_h) : \underline{\underline{a}}_2)(\underline{\underline{a}}_2 : \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{b}_h^*)) d\Omega - \int_{\Omega} p_h \nabla \cdot \underline{b}_h^* d\Omega = 0 \\ &-\int_{\Omega} q_h \nabla \cdot \underline{v}_h d\Omega - \int_{\Omega} q_h \nabla \cdot \underline{b}_h d\Omega = 0 \end{aligned} \right. \tag{4.16}$$

La fonction bulle $\underline{b}_h$ possède quelques propriétés :

- $\underline{b}_h$ s'annule sur ∂K , frontière des éléments de la discrétisation,
- $\int_K \nabla \underline{v}_h : \nabla \underline{b}_h d\Omega = 0 \quad \forall \underline{v}_h \in \mathcal{V}_h \quad \underline{b}_h \in \mathcal{B}_h$

De plus le fait que $\underline{b}_h$ soit linéaire par morceaux induit que :

$$\int_K \left(\nabla \underline{v}_h : \underline{a}_2 \right) \left(\underline{a}_2 : \nabla \underline{b}_h \right) d\Omega = 0$$

Les propriétés pré-citées ont permis de découpler les deux premières équations du système (4.16).

4.3.3 La formulation algébrique

Classiquement, le système provenant de la formulation faible discrète peut s'écrire localement sous la forme d'un système algébrique :

$$\begin{pmatrix} A_{vv} & 0 & B_{vp} \\ 0 & A_{bb} & B_{bp} \\ B_{vp}^T & B_{bp}^T & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V \\ V_b \\ P \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.17)$$

où :

- V désigne le vecteur contenant les composantes des vitesses en chaque sommet des tétraèdres. $V \in \mathbb{R}^{d \times N_n}$ (N_n étant le nombre de noeuds du maillage $\mathcal{T}_h(\Omega)$)
- V_b est le vecteur contenant les composantes bulles des vitesses en chaque barycentre des tétraèdres. $V_b \in \mathbb{R}^{d \times N_e}$ (N_e étant le nombre d'éléments)
- P est le vecteur des degrés de liberté en pression. $P \in \mathbb{R}^{N_n}$
- Enfin F apparaît comme le second membre venant d'une partie de la contribution des fibres au tenseur des contraintes (terme en N_s) et de l'imposition des conditions aux limites, en vitesse, par une méthode d'élimination.

Notons que A_{vv} et A_{bb} désignent respectivement les matrices symétriques associées à la forme discrète des termes :

$$A_{vv} = \int_{\Omega} 2\eta \underline{\varepsilon}(\underline{v}_h) : \underline{\varepsilon}(\underline{w}_h) + 2\eta N_p(\underline{\varepsilon}(\underline{v}_h) : \underline{a}_2)(\underline{a}_2 : \underline{\varepsilon}(\underline{w}_h)) d\Omega$$

$$A_{bb} = \int_{\Omega} 2\eta \underline{\varepsilon}(\underline{b}_h) : \underline{\varepsilon}(\underline{b}_h^*) + 2\eta N_p(\underline{\varepsilon}(\underline{b}_h) : \underline{a}_2)(\underline{a}_2 : \underline{\varepsilon}(\underline{b}_h^*)) d\Omega$$

Enfin, les matrices B_{vp} et B_{bp} sont associées respectivement aux termes $b(v_h, p_h)$ et $b(b_h, p_h)$.

La bulle étant locale à chaque triangle, on peut la substituer par le procédé classique de condensation statique :

$$A_{bb}V_b + B_{bp}P = 0 \quad \Rightarrow \quad V_b = -A_{bb}^{-1}B_{bp}P \quad (4.18)$$

Nous obtenons ainsi une formulation classique mixte en vitesse-pression où le vecteur inconnu est uniquement constitué des champs de vitesse et de pression sur les noeuds :

$$\begin{pmatrix} A_{vv} & B_{vp} \\ B_{vp}^T & C_{vb} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V \\ P \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.19)$$

avec $C_{vb} = -B_{bp}^T A_{bb}^{-1} B_{bp}$

Le système en vitesse-pressure ainsi obtenu est résolu par une méthode itérative de type Résidu Minimal. Nous renvoyons à [50] pour plus de détail sur la résolution d'un système de ce type.

4.4 Méthode TGD espace-temps appliquée à l'orientation

Nous présentons dans cette section la méthode numérique de Taylor Galerkin Discontinu espace-temps que nous avons utilisée pour la résolution de l'équation d'évolution de l'orientation. Il s'agit notamment de rechercher un schéma qui autorise des pas de temps suffisamment élevés pour réduire les temps de calcul observés avec d'autres méthodes. En vue de répondre à l'objectif précité ainsi qu'aux contraintes inhérentes au procédé d'injection, nous avons choisi la méthode des éléments finis temporels comme base de notre schéma.

Ainsi, le schéma spatial pour la résolution du problème stationnaire est basé sur une technique éléments finis Galerkin Discontinu. Le schéma temporel utilise une méthode éléments finis espace-temps discontinus de haut degré en temps, développée au Cemef² afin de répondre aux problèmes des temps de calcul.

Nous allons, dans le paragraphe qui suit, rappeler l'équation de Folgar et Tucker dans le cas particulier où nous utilisons une équation de fermeture de type quadratique. Puis nous développerons la méthode numérique précitée sur la base de cette équation.

Dans le cas d'une approximation de fermeture de type quadratique, nous rappelons au lecteur que l'expression du tenseur d'ordre 4 est :

$$a_{ijkl}^{quad} = a_{ij} a_{kl}$$

et l'évolution du tenseur d'orientation $\underline{\underline{a}}_2$, ici noté $\underline{\underline{a}}$ par commodité d'écriture, est alors décrite par la relation qui suit :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \underline{\underline{a}}}{\partial t} + \underline{v} \cdot \nabla \underline{\underline{a}} + \frac{1}{2} [(1 - \lambda) \nabla \underline{v} - (1 + \lambda) \nabla \underline{v}^T] \underline{\underline{a}} + \underline{\underline{a}} \frac{1}{2} [(1 + \lambda) \nabla \underline{v} + (\lambda - 1) \nabla \underline{v}^T] \\ + 2\lambda (\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}} : \underline{\underline{a}}) \underline{\underline{a}} + 6C_I \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}} \underline{\underline{a}} = 6C_I \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}} \frac{I_d}{3} \end{aligned} \quad (4.20)$$

Autrement dit :

$$\begin{aligned} \frac{\partial a_{ij}}{\partial t} + \sum_k u_k \frac{\partial a_{ij}}{\partial x_k} + \frac{1}{2} (1 - \lambda) \sum_k \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_k} a_{kj} + a_{ik} \frac{\partial v_j}{\partial x_k} \right) \\ - \frac{1}{2} (1 + \lambda) \sum_k \left(\frac{\partial v_k}{\partial x_i} a_{kj} + a_{ik} \frac{\partial v_k}{\partial x_i} \right) + 2\lambda \sum_{k,l} \left(\frac{\partial v_k}{\partial x_l} a_{lk} \right) a_{ij} \\ + 6C_I \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}} \left(a_{ij} - \frac{\delta_{ij}}{3} \right) = 0 \end{aligned} \quad (4.21)$$

²Centre de Mise en Forme des Matériaux de l'Ecole des Mines de Paris

Nous avons entrepris de résoudre de manière implicite les termes faisant intervenir le tenseur d'orientation. Le second membre fera donc intervenir tous les autres termes.

4.4.1 Méthode temporelle pour la résolution du problème instationnaire

Classiquement pour la résolution numérique des équations de transport telles que celle décrite par le modèle proposé par Folgar et Tucker (4.21), les variables temps t et position $\underline{x}$ ne jouent pas le même rôle et les discrétisations en temps et en espace sont souvent découplées.

a) L'élément fini espace-temps

Le schéma numérique temporel que nous avons choisi d'utiliser fait référence aux travaux de Batkam [24]. L'idée de la méthode des éléments finis espace-temps est de proposer, contrairement aux résolutions classiques, une résolution simultanée des problèmes en espace et en temps.

Pour ce faire, on va considérer la variable t au même titre que les variables d'espace $\underline{x}$ et rajouter ainsi une dimension supplémentaire à un problème qui serait vu classiquement comme un problème spatial seul. On construit alors une nouvelle variable temps-position $\tilde{x} = (x, t)$ appartenant au domaine espace-temps $\Omega^{st} = \Omega \times]0; \tau[$ où τ représente la durée du processus étudié.

La première étape d'une résolution par éléments finis étant la discrétisation de l'espace Ω^{st} , nous allons rapidement aborder, dans ce qui suit, la notion de maillage du domaine espace-temps.

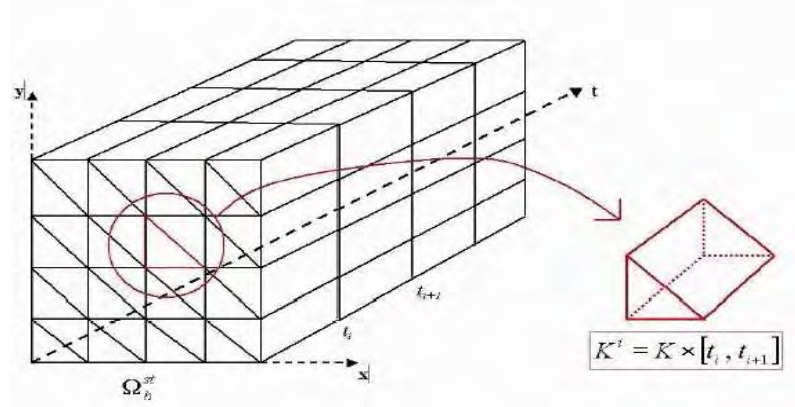
b) Le maillage du domaine spatio-temporel

La discrétisation de l'espace de définition des inconnus Ω^{st} consiste à construire un maillage du domaine spatio-temporel. Pour un problème 3D en espace, le domaine espace temps Ω^{st} est représenté par un maillage 4D comme le montre la figure (4.3).

Notons que le maillage associé à notre discrétisation a la particularité d'être *structuré en temps*, c'est à dire que la base en temps est orthogonale au domaine spatial ce qui induit une évidente simplification des équations dans la mesure où l'on pourra séparer dans toutes les intégrations les variables temps et espace.

Pour la construction du schéma temporel, nous avons choisi une interpolation discontinue en temps ce qui conduit de façon avantageuse à la résolution par balayage en temps d'un problème écrit sur une tranche $\Omega \times]t_i; t_{i+1}[$ (i étant un indice lié à la discrétisation du domaine temporel). La discrétisation en espace des tenseurs d'orientation utilise l'élément fini P^0 .

Nous introduisons dans ce qui suit les espaces d'approximations puis la discrétisation spatio-temporelle de l'équation de transport.

FIG. 4.3 – Le maillage Ω_h^{st} et l'élément spatio-temporel K^i (cas 2D) [Batkam [24]].

4.4.2 La formulation faible discrète

a) L'interpolation sur l'élément fini spatio-temporel

Soit Ω_h^{st} une discrétisation du domaine Ω^{st} en éléments spatio-temporels $K^i = K \times]t_i; t_{i+1}[$. L'indice i variant de 0 à $N - 1$ est relatif à la division de l'intervalle de temps $]0, \tau[$ où τ caractérise la durée du procédé. Nous avons alors

$$\Omega_h^{st} = \bigcup_{K \in \Omega_h} K^i = \bigcup_{K \in \Omega_h} K \times]t_i; t_{i+1}[$$

Pour construire le problème discret, nous allons au préalable définir les espaces d'approximations pour les tenseurs d'orientation. Sur l'élément spatio-temporel $K \times]t_i; t_{i+1}[$ le tenseur d'orientation est interpolé par des fonctions :

- discontinues constantes en espace ($\underline{a} \in P^0(K)$). Une base de telles fonctions est la base canonique de l'espace tensoriel.
- discontinues, polynomiales de degré n en temps ($\underline{a} \in P^n([t_i; t_{i+1}[)$). Une base de tels polynômes est constituée par les fonctions $(\alpha_j)_{j \in [0, n]}$ s'annulant en t_i telles que :

$$\alpha_j(t) = (t - t_i)^j \forall t \in [t_i, t_{i+1}] \quad (4.22)$$

Nous introduisons l'espace d'approximation τ_h^{st} défini par :

$$\tau_h^{st} = \{w_h \in L^2(\Omega^{st}), w_h|_{K^i} \in P^n([t_i, t_{i+1}[) \times P^0(K), \forall K^i \in \Omega_h^{st}\}$$

En utilisant les fonctions de base (4.22), le champ tensoriel interpolé $\underline{a}_h$ ($\underline{a}_h \in \tau_h^{st}$) discontinu aux points de discrétisation temporelle t_i , peut s'exprimer pour tout élément K^i , de la manière suivante :

$$\underline{a}_{|K^i} = \underline{a}_{K,i}(t) = \sum_{p=0}^n \underline{a}_{K,i}^p (t - t_i)^p \quad \forall t \in [t_i, t_{i+1}[\quad \forall K \in \Omega_h \quad (4.23)$$

Le terme $\underline{a}_{|K^i}^p$ désigne l'interpolation à l'ordre p du tenseur d'orientation sur le simplexe K et sur l'intervalle de temps $]t_i, t_{i+1}[$. Les inconnues à déterminer sur l'intervalle de temps $]t_i, t_{i+1}[$ sont les grandeurs $\underline{a}_{K,i}^p$, supposées constantes sur chaque élément.

b) La formulation variationnelle du problème

En se référant à l'espace fonctionnel introduit précédemment, la formulation faible discrète associée à l'équation d'évolution de l'orientation s'écrit :

Trouver $\underline{a}_h \in \tau_h^{st}$ tel que :

$$\begin{aligned}
 & \langle \frac{\partial \underline{a}_h}{\partial t}, \underline{\varphi} \rangle + \langle \underline{v} \cdot \nabla \underline{a}_h, \underline{\varphi} \rangle + \langle \frac{1}{2} [(1 - \lambda) \nabla \underline{v} - (1 + \lambda) \nabla \underline{v}^T] \underline{a}_h, \underline{\varphi} \rangle \\
 & \quad + \langle \underline{a}_h \frac{1}{2} [(1 + \lambda) \nabla \underline{v} + (\lambda - 1) \nabla \underline{v}^T], \underline{\varphi} \rangle \\
 & \quad + 2\lambda \langle \left(\dot{\underline{\varepsilon}} : \underline{a}_h \right) \underline{a}_h, \underline{\varphi} \rangle + \langle 6C_I \dot{\underline{\varepsilon}} \underline{a}_h, \underline{\varphi} \rangle \\
 & \quad = \langle 6C_I \dot{\underline{\varepsilon}} \frac{I_d}{3}, \underline{\varphi} \rangle
 \end{aligned} \tag{4.24}$$

Pour une meilleure lisibilité, nous posons :

$$\underline{B}_1 = \frac{1}{2} [(1 - \lambda) \nabla \underline{v} - (1 + \lambda) \nabla \underline{v}^T]$$

$$\underline{B}_2 = \frac{1}{2} [(1 + \lambda) \nabla \underline{v} + (\lambda - 1) \nabla \underline{v}^T]$$

La formulation faible discrète fait alors intervenir les 6 membres suivants :

$$\begin{aligned}
 & \langle \frac{\partial \underline{a}_h}{\partial t}, \underline{\varphi} \rangle + \langle \underline{v} \cdot \nabla \underline{a}_h, \underline{\varphi} \rangle + \langle \underline{B}_1 \underline{a}_h, \underline{\varphi} \rangle - \langle \underline{a}_h \underline{B}_2, \underline{\varphi} \rangle \\
 & \quad + \langle [2\lambda \left(\dot{\underline{\varepsilon}} : \underline{a}_h \right) + 6C_I \dot{\underline{\varepsilon}}] \underline{a}_h, \underline{\varphi} \rangle \\
 & \quad = \langle 6C_I \dot{\underline{\varepsilon}} \frac{I_d}{3}, \underline{\varphi} \rangle \quad \forall \underline{\varphi} \in D(\Omega^{st})
 \end{aligned} \tag{4.25}$$

Nous allons procéder, dans la section qui suit, à la discrétisation de chacun des membres de cette formulation.

4.4.3 Discrétisation des termes constituant l'équation d'orientation

a) Discrétisation du terme de dérivée permanent

Nous allons évaluer la dérivée temporelle de $\frac{\partial \underline{a}_h}{\partial t}$ au sens faible c'est à dire au sens des distributions sur Ω^{st} . Pour toute fonction test $\underline{\varphi}$ tensorielle $\in D(\Omega^{st})$, la définition du produit dual et le fait que le maillage est structuré en temps nous permet d'écrire :

$$\langle \frac{\partial \underline{a}_h}{\partial t}, \underline{\varphi} \rangle = - \sum_{K \subset \Omega_h} \sum_{i=0}^{N-1} \int_K \int_{t_i}^{t_{i+1}} \underline{a}_h \frac{\partial \underline{\varphi}}{\partial t} dt d\Omega \tag{4.26}$$

En procédant à une intégration par parties et en utilisant les notations suivantes :

$$\underline{a}_{h|K^i}(t_i^+) = \underline{a}_{K,i-1}(t_i)$$

$$\underline{a}_{h|K^i}(t_i^-) = \underline{a}_{K,i}(t_i)$$

L'équation (4.26) se réécrit de la manière suivante :

$$\begin{aligned} \langle \frac{\partial \underline{a}_h}{\partial t}, \underline{\varphi} \rangle = & \sum_{K \subset \Omega_h} \int_K \sum_{i=1}^N \underline{\varphi}(t_i) \left[\underline{a}_{K,i}(t_i^+) - \underline{a}_{K,i}(t_i^-) \right] d\Omega \\ & + \sum_{K \subset \Omega_h} \sum_{i=0}^{N-1} \int_K \int_{t_i}^{t_{i+1}} \underline{\varphi} \frac{\partial \underline{a}_h}{\partial t} dt d\Omega \end{aligned} \quad (4.27)$$

La différence $\underline{a}_{K,i}(t_i^+) - \underline{a}_{K,i}(t_i^-)$ représente le saut en temps de $\underline{a}_h$ aux points de discrétisation temporelle.

La deuxième étape de cette discrétisation consiste à appliquer :

- l'interpolation temporelle (4.22) à chacun des deux termes de la somme de l'équation (4.27),
- la projection des fonctions tests dans τ_h .

La projection des fonctions tests est telle que :

$$\underline{\varphi}_h = \underline{\psi}_q = \mathbf{1}_K \mathbf{1}_i (t - t_i)^q \quad (4.28)$$

où les fonctions caractéristiques $\mathbf{1}_K$ et $\mathbf{1}_i$ respectivement du simplex K et de l'intervalle temporel $]t_i, t_{i+1}[$ sont telles que :

$$\mathbf{1}_K(\underline{x}) \mathbf{1}_i(t) = \begin{cases} 1 & \text{si } \underline{x} \in K \text{ et } t \in]t_i, t_{i+1}[\\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (4.29)$$

En définitive, la dérivée temporelle faible $\langle \frac{\partial \underline{a}_h}{\partial t}, \underline{\psi}_q \rangle$ s'écrit pour une interpolation de haut degré en temps :

$$\langle \frac{\partial \underline{a}_h}{\partial t}, \underline{\psi}_q \rangle = |K| \left(\underline{a}_{K,i}^0 - \sum_{p=0}^n \underline{a}_{K,i-1}^p \Delta t^p \right) \delta_{0q} + |K| \sum_{p=1}^n \frac{p}{p+q} \underline{a}_{K,i}^p \Delta t^{p+q} \quad (4.30)$$

$|K|$ désigne le volume du simplex K , $\delta_{0q} = 1$ si $q = 0$, $\underline{a}_{K,i}^0$ et $\underline{a}_{K,i}^p$ désignent respectivement l'interpolation du tenseur d'orientation à l'ordre 0 et p en temps sur le simplex K et sur l'intervalle de temps $]t_i, t_{i+1}[$. Dans la suite $\underline{a}_{K,i}^0$ et $\underline{a}_{K,i}$ désigneront le même terme.

Le choix d'une interpolation de bas degré en temps P^0 est exactement équivalente à un schéma aux différences finies de type Euler implicite amont :

$$\langle \frac{\partial \underline{a}_h}{\partial t}, \underline{\psi}_0 \rangle = |K| (\underline{a}_{K,t} - \underline{a}_{K,t-\Delta t}) \quad (4.31)$$

b) Discrétisation du terme de convection

Évaluons maintenant le terme de convection $\underline{v} \cdot \nabla \underline{a}_h$ à l'aide de notre approche spatio-temporelle : pour toute fonction test $\underline{\varphi} \in D(\Omega^{st})$, on a :

$$\langle \underline{v} \cdot \nabla \underline{a}_h, \underline{\varphi} \rangle = - \sum_{K \subset \Omega_h} \sum_{i=0}^{N-1} \sum_{p=0}^n \int_{t_i}^{t_{i+1}} \int_K \underline{a}_{K,i}^p \nabla \cdot (\underline{\varphi} \underline{v}) d\Omega (t - t_i)^p dt \quad (4.32)$$

En considérant la projection $\underline{\varphi}_h$ de $\underline{\varphi}$ dans τ_h telle que définie par la relation (4.28) et en supposant que $\underline{v}$ est constant sur l'intervalle $]t_i, t_{i+1}[$ on aboutit, en développant, à la relation qui suit :

$$\langle \underline{v} \cdot \nabla \underline{a}_h, \underline{\psi}_q \rangle = - \sum_{p=0}^n \frac{\Delta t_i^{p+q+1}}{p+q+1} \sum_{F \in \partial K} [\underline{a}_{K,i}^p - \underline{a}_{K(F),i}^p] \int_F (\underline{v} \underline{n})^- d\Gamma \quad (4.33)$$

F désigne la face d'un élément et $K(F)$ désigne l'ensemble des éléments du maillage partageant la même face F , ∂K représente la frontière de l'élément K . La quantité $(\underline{v} \underline{n})^-$ désigne un flux sur la frontière ∂K^- , autrement dit un flux sur la frontière tel que $\underline{v} \underline{n} < 0$. Pour une interpolation en temps d'ordre 0 et dans le cas d'une subdivision de l'intervalle $]0, \tau[$ en segments de longueur constante, l'équation (4.33) se réduit à :

$\forall K \times]t, t + \Delta t[$

$$\langle \underline{v} \cdot \nabla \underline{a}_h, \underline{\psi}_0 \rangle = - \Delta t \sum_{F \in \partial K} [\underline{a}_{K,t} - \underline{a}_{K(F),t}] \int_F (\underline{v} \underline{n})^- d\Gamma \quad (4.34)$$

c) Discrétisation des termes linéaires

En raison de la présence de termes croisés, la discrétisation de ces termes aboutit à une formulation faisant intervenir les intégrales en temps et en espace des quantités présentes. Nous nous sommes donc plutôt penchés sur un calcul matriciel. Nous présentons donc les résultats obtenus.

Nous rappelons que :

$$\begin{aligned} \underline{\underline{B}}_1 &= \frac{1}{2} [(1 - \lambda) \nabla \underline{v} - (1 + \lambda) \nabla \underline{v}^T] \\ \underline{\underline{B}}_2 &= \frac{1}{2} [(1 + \lambda) \nabla \underline{v} + (\lambda - 1) \nabla \underline{v}^T] \end{aligned}$$

• Discrétisation des termes $\langle \underline{\underline{B}}_1 \underline{a}_h, \underline{\varphi} \rangle$

La contribution du terme $\langle \nabla \underline{v} \underline{a}_h, \underline{\psi}_0 \rangle$ à la matrice élémentaire donne , après calcul, la quantité $|K| \Delta t \underline{\underline{\Lambda}}_K$. Le champ de vitesse étant P_1 sur chaque élément, son gradient de

vitesse est constant et donc la matrice $\underline{\underline{\Lambda}}_K$ s'écrit sur chaque élément :

$$\underline{\underline{\Lambda}}_K = \begin{pmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & 0 & 0 & \frac{\partial u}{\partial y} & 0 & 0 & \frac{\partial u}{\partial z} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial u}{\partial x} & 0 & 0 & \frac{\partial u}{\partial y} & 0 & 0 & \frac{\partial u}{\partial z} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial u}{\partial x} & 0 & 0 & \frac{\partial u}{\partial y} & 0 & 0 & \frac{\partial u}{\partial z} \\ \frac{\partial v}{\partial x} & 0 & 0 & \frac{\partial v}{\partial y} & 0 & 0 & \frac{\partial v}{\partial z} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial v}{\partial x} & 0 & 0 & \frac{\partial v}{\partial y} & 0 & 0 & \frac{\partial v}{\partial z} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial v}{\partial x} & 0 & 0 & \frac{\partial v}{\partial y} & 0 & 0 & \frac{\partial v}{\partial z} \\ \frac{\partial w}{\partial x} & 0 & 0 & \frac{\partial w}{\partial y} & 0 & 0 & \frac{\partial w}{\partial z} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial w}{\partial x} & 0 & 0 & \frac{\partial w}{\partial y} & 0 & 0 & \frac{\partial w}{\partial z} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial w}{\partial x} & 0 & 0 & \frac{\partial w}{\partial y} & 0 & 0 & \frac{\partial w}{\partial z} \end{pmatrix}$$

Il s'ensuit immédiatement que la contribution du terme $\langle \nabla \underline{v}^T \underline{a}_h, \underline{\underline{\psi}}_q \rangle$ à la matrice élémentaire est $|K| \Delta t \underline{\underline{\Lambda}}_K^T$.

Finalement la contribution du terme $\langle \underline{\underline{B}}_1 \underline{a}_h, \underline{\underline{\psi}}_q \rangle$ s'écrit :

$$\frac{|K| \Delta t}{2} \left((1 - \lambda) \underline{\underline{\Lambda}}_K - (1 + \lambda) \underline{\underline{\Lambda}}_K^T \right) \quad (4.35)$$

• **Discrétisation des termes $\langle \underline{a}_h \underline{\underline{B}}_2, \underline{\underline{\varphi}} \rangle$**

De la même manière que précédemment, les contributions des termes $\langle \underline{a}_h \nabla \underline{v}^T, \underline{\underline{\psi}}_0 \rangle$ et $\langle \underline{a}_h \nabla \underline{v}, \underline{\underline{\psi}}_0 \rangle$ à la matrice élémentaire s'écrivent respectivement $|K| \Delta t \underline{\underline{\Phi}}_K$ et $|K| \Delta t \underline{\underline{\Phi}}_K^T$.

Avec :

$$\underline{\underline{\Phi}}_K = \begin{pmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial u}{\partial y} & \frac{\partial u}{\partial z} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\partial v}{\partial x} & \frac{\partial v}{\partial y} & \frac{\partial v}{\partial z} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\partial w}{\partial x} & \frac{\partial w}{\partial y} & \frac{\partial w}{\partial z} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial u}{\partial y} & \frac{\partial u}{\partial z} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{\partial v}{\partial x} & \frac{\partial v}{\partial y} & \frac{\partial v}{\partial z} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{\partial w}{\partial x} & \frac{\partial w}{\partial y} & \frac{\partial w}{\partial z} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial u}{\partial y} & \frac{\partial u}{\partial z} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\partial v}{\partial x} & \frac{\partial v}{\partial y} & \frac{\partial v}{\partial z} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\partial w}{\partial x} & \frac{\partial w}{\partial y} & \frac{\partial w}{\partial z} \end{pmatrix}$$

Nous obtenons finalement que la contribution du terme $\langle \underline{a}_h \underline{\underline{B}}_2, \underline{\underline{\psi}}_0 \rangle$ à cette même matrice élémentaire s'écrit :

$$\frac{|K| \Delta t}{2} \left((1 + \lambda) \underline{\underline{\Phi}}_K^T + (\lambda - 1) \underline{\underline{\Phi}}_K \right) \quad (4.36)$$

Cette écriture nous permettra, par la suite, d'expliciter la matrice élémentaire.

d) Linéarisation des termes non linéaires et discrétisation des termes restants

Linéarisation :

Le produit doublement contracté $(\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{v}) : \underline{a}_4)$ fait intervenir une équation de fermeture dès lors qu'on désire une expression de ce terme en $\underline{a}_2$ uniquement. Le tenseur $\underline{a}_4$ s'écrit alors comme une fonction plus ou moins compliquée du tenseur $\underline{a}_2$ et peut ainsi introduire des termes fortement non linéaires dans l'équation finale. En l'occurrence, les équations de fermeture Hybride, Naturelle 2d ou Orthotropes font intervenir des termes non linéaires du type :

$$< \alpha(\underline{a}_h) \underline{a}_h \underline{a}_h, \underline{\underline{\varphi}} > \quad (4.37)$$

où $\alpha(\underline{a}_h)$ est une fonction qui dépend des invariants de $\underline{a}_h$. En effet, dans le cadre des équations de fermeture Naturelle 2d ou Hybride $\alpha(\underline{a}_h)$ fait intervenir le déterminant de $\underline{a}_h$ alors que dans le cas des équations de fermeture Orthotropes on voit apparaître une combinaison linéaire des valeurs principales de $\underline{a}_h$ rendant délicate la linéarisation du terme (4.37).

Afin de contourner cette difficulté, nous avons choisi de linéariser cette dernière expression via une technique classique de type point fixe. Ainsi la quantité $\alpha(\underline{a}_h) \underline{a}_h$ est approchée de façon constante sur chaque élément et l'expression (4.37) devient :

$$< \alpha(\underline{a}_h^{n+1}) \underline{a}_h^{n+1} \underline{a}_h^{n+1}, \underline{\underline{\varphi}} > \longrightarrow \alpha(\underline{a}_h^n) \underline{a}_h^n < \underline{a}_h^{n+1}, \underline{\underline{\varphi}} > \quad (4.38)$$

où l'inconnue à déterminer est bien entendu $\underline{a}_h^{n+1}$, le tenseur $\underline{a}_h^n$ n'étant plus une inconnue du problème puisque nous récupérons le tenseur d'orientation calculé au pas de temps précédent.

Discrétisation :

Si nous revenons dans le cadre d'une équation de fermeture quadratique, la discrétisation de l'expression

$$< \left(2\lambda (\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}} : \underline{a}_h^n) + 6C_I \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}} \right) \underline{a}_h^{n+1}, \underline{\underline{\varphi}} > \quad (4.39)$$

se limite donc au calcul de : $< \underline{a}_h, \underline{\underline{\varphi}} >$ sur chaque élément. Pour toute fonction test $\underline{\underline{\varphi}} \in D(\Omega^{st})$, la définition du produit dual nous permet d'écrire :

$$< \underline{a}_h, \underline{\underline{\varphi}} > = \sum_{K \in \Omega_h} \sum_{i=0}^{N-1} \int_K \int_{t_i}^{t_{i+1}} \underline{a}_{K,i}^p (t - t_i)^p \mathbf{1}_K \mathbf{1}_i (t - t_i)^q dt d\Omega$$

Pour une interpolation d'ordre 0 en temps l'équation précédente se simplifie et la discrétisation du terme global devient :

$$2\lambda < (\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}} : \underline{a}_h) + 6C_I \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}} \underline{a}_h, \underline{\underline{\psi}}_0 > = \left(2\lambda (\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}_K : \underline{a}_{K,t-\Delta t}) + 6C_I \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}_K \right) |K| \Delta t \underline{a}_{K,t} \quad (4.40)$$

e) Discrétisation du second membre

Le second membre fait intervenir la quantité $\langle 6C_I \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}} \underline{\underline{I_d}}/3, \underline{\underline{\varphi}} \rangle$. La discrétisation est évidente et le second membre s'écrit sous la forme matricielle :

$$\langle 6C_I \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}} \underline{\underline{I_d}}/3, \underline{\underline{\psi_0}} \rangle = 6C_I \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}_K \mid K \mid \Delta t \underline{\underline{b}} \quad (4.41)$$

avec $\underline{\underline{b}} = (1/3, 0, 0, 0, 1/3, 0, 0, 0, 1/3)^T$

4.4.4 Écriture matricielle du problème d'orientation

Nous rappelons ci-après le bilan de la formulation faible discrète (ordre 0 en temps) :

$$\langle \frac{\partial \underline{\underline{a_h}}}{\partial t}, \underline{\underline{\psi_0}} \rangle = \mid K \mid (\underline{\underline{a_{K,t}}} - \underline{\underline{a_{K,t-\Delta t}}}) \quad (4.42)$$

$$\langle \underline{\underline{v}} \cdot \nabla \underline{\underline{a_h}}, \underline{\underline{\psi_0}} \rangle = -\Delta t \sum_{F \in \partial K} [\underline{\underline{a_{K,t}}} - \underline{\underline{a_{K(F),t}}}] \int_F (\underline{\underline{v}} \cdot \underline{\underline{n}})^- d\Gamma \quad (4.43)$$

$$\langle \underline{\underline{B_1}} \underline{\underline{a_h}}, \underline{\underline{\psi_0}} \rangle = \frac{\mid K \mid \Delta t}{2} \left((1 - \lambda) \underline{\underline{\Lambda_K}} - (1 + \lambda) \underline{\underline{\Lambda_K^T}} \right) \underline{\underline{a_{K,t}}} \quad (4.44)$$

$$\langle \underline{\underline{a_h}} \underline{\underline{B_2}}, \underline{\underline{\psi_0}} \rangle = \frac{\mid K \mid \Delta t}{2} \left((1 + \lambda) \underline{\underline{\Phi_K^T}} + (\lambda - 1) \underline{\underline{\Phi_K}} \right) \underline{\underline{a_{K,t}}} \quad (4.45)$$

$$\langle \left(2\lambda (\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}} : \underline{\underline{a_h}}) + 6C_I \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}} \right) \underline{\underline{a_h}}, \underline{\underline{\psi_0}} \rangle = \left(2\lambda (\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}_K : \underline{\underline{a_{K,t-\Delta t}}}) + 6C_I \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}_K \right) \mid K \mid \Delta t \underline{\underline{a_{K,t}}}$$

$$\langle 6C_I \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}} \underline{\underline{I_d}}/3, \underline{\underline{\psi_q}} \rangle = 6C_I \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}_K \mid K \mid \Delta t \underline{\underline{b}} \quad (4.46)$$

La résolution de l'équation qui régit l'orientation des fibres dans un écoulement conduit ainsi à la résolution d'un système linéaire.

Sur chaque élément l'écriture matricielle du problème est, compte tenu du bilan de la discrétisation :

$$\underline{\underline{M}} \underline{\underline{a_{K,t}}} + \Delta t \sum_{F \in \partial \Omega} \Delta t F_l \underline{\underline{I_d}} \underline{\underline{a_{K(F),t}}} = 6C_I \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}_K \mid K \mid \Delta t \underline{\underline{b}} + \mid K \mid \underline{\underline{a_{K,t-\Delta t}}} \quad (4.47)$$

Avec :

$$\begin{aligned} \underline{\underline{M}} = & \left(|K| - \Delta t F_l + |K| \Delta t (2\lambda (\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}_K : \underline{\underline{a}}_{K,t-\Delta t}) + 6C_I \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}_K) \right) \underline{\underline{I_d}} \\ & + \frac{|K| \Delta t}{2} \left((1-\lambda)(\underline{\underline{\Lambda}}_K + \underline{\underline{\Phi}}_K) - (1-\lambda)(\underline{\underline{\Lambda}}_K + \underline{\underline{\Phi}}_K)^T \right) \end{aligned} \quad (4.48)$$

F_l désigne le flux à travers un élément défini comme suit :

$$F_l = \sum_{F \in \partial\Omega} \int_F (\underline{v} \underline{n})^- d\Gamma \quad (4.49)$$

$\underline{\underline{a}}_{K,t}$ et $\underline{\underline{a}}_{K(F),t}$ désignent respectivement le vecteur constitué des composantes du tenseur orientation de l'élément K et de l'élément voisin de K par la face F . En d'autres termes, $\underline{\underline{a}}_{K,t} = (a_{11}, a_{12}, a_{13}, a_{21}, a_{22}, a_{23}, a_{31}, a_{32}, a_{33})^T_{K,t}$

Notons que le tenseur d'orientation $\underline{\underline{a}}$ étant symétrique, le vecteur qui le représente peut être affecté uniquement de 6 composantes par élément. Par conséquent, ce vecteur se réduit à :

$$\underline{\underline{a}}_{K,t} = (a_{11}, a_{12}, a_{13}, a_{22}, a_{23}, a_{33})^T_{K,t} \quad (4.50)$$

Les matrices élémentaires associées se ramènent ainsi par "symétrisation" à des matrices 6×6 au lieu de 9×9 comme présentées ci-dessus. Cette symétrisation contribue à un gain en temps de calcul considérable.

4.5 Algorithme de résolution

4.5.1 Couplage orientation / cinématique en extrusion

Nous présentons ci-après l'algorithme de résolution générale utilisé dans le cadre de la simulation du procédé d'extrusion.

a) Calcul mécanique

Comme indiqué sur l'organigramme, le programme débute par un calcul mécanique où le tenseur d'orientation n'est pas considéré comme une inconnue du problème. La donnée de $\underline{\underline{a}}_2^n$ ainsi que la lecture de certaines données initiales telles que la fraction volumique de fibres et le rapport de forme des fibres qui vont définir une valeur de N_p et de N_s , nous permet le calcul de $\underline{v}^{n+1}$ ainsi que p^{n+1} . Pour une valeur de n égale à 0, le calcul prend en compte l'orientation initiale des fibres définie lors de l'initialisation.

Cette orientation est généralement aléatoire mais elle peut prendre n'importe quelle valeur. La contribution des fibres au tenseur des contraintes est calculée de manière implicite.

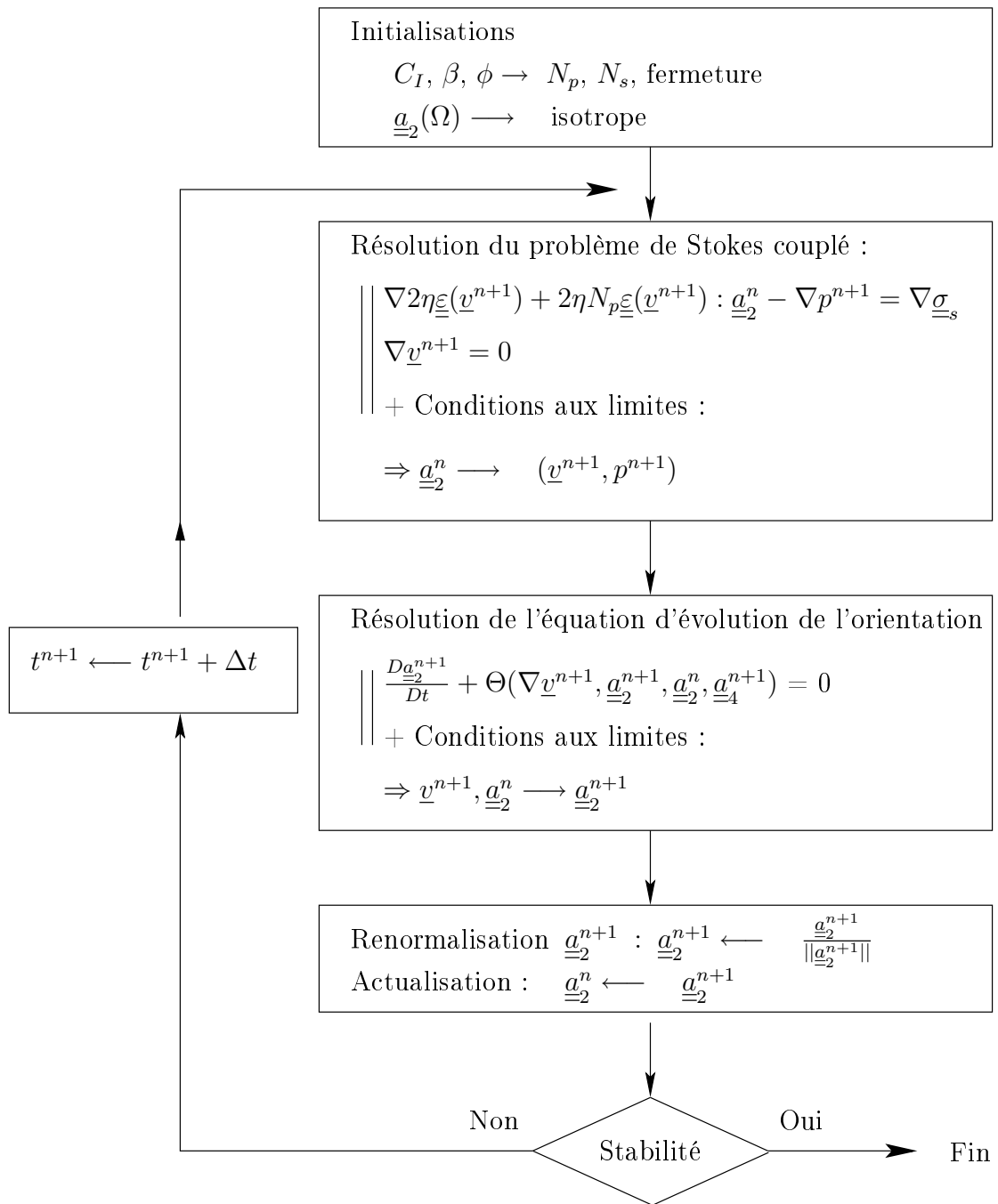


FIG. 4.4 – Organigramme du programme de calcul dans le cadre de l'extrusion

b) Détermination de l'orientation

La deuxième étape consiste à calculer le tenseur d'orientation $\underline{a}_2^{n+1}$ connaissant $\underline{v}^{n+1}$. Cette étape nécessite la connaissance de certaines données telles que le choix de l'approximation de fermeture déjà défini à l'étape d'initialisation, le coefficient d'interaction ou encore le rapport de forme des fibres.

Notons que le tenseur d'orientation étant symétrique et unitaire, nous n'avons à déterminer que 5 composantes. En réalité, nous résolvons un problème à 6 inconnues : a_{xx} , a_{xy} , a_{xz} , a_{yy} , a_{yz} ainsi que a_{zz} qui, en théorie, peut être déterminé via la relation :

$$a_{zz} = 1 - a_{xx} - a_{yy}$$

Remarque relative à la Population de fibres :

Le code de calcul est capable de prédire plusieurs orientations correspondant à des populations de fibres différentes. Comme dans le cas de la viscoélasticité où pour chaque mode, nous avons une orientation propre de chaque bras, il est possible de définir plusieurs populations de fibres ayant des rapport de forme, des coefficients d'interaction, des valeurs de N_p et de N_s qui leur sont propres. Pour chaque population de fibres, on détermine alors un tenseur d'orientation sur chaque élément du maillage. On calcule au final une orientation moyenne dans tout l'écoulement.

A l'heure actuelle, cette technique ne présente aucun intérêt car il n'y a pas d'interaction entre les différentes populations de fibres. Cependant l'idée est intéressante et il y a encore un travail de « modélisation numérique » à faire dans ce sens afin de pouvoir déterminer un état d'orientation plus réaliste, susceptible de prendre en compte un coefficient d'interaction, une distribution de longueur, une fraction volumique de fibre et donc une rhéologie non homogène dans l'écoulement.

c) Normalisation du tenseur d'orientation

Le terme $\left(\underline{\underline{\varepsilon}}(v) : \underline{\underline{a}}_2\right) \underline{\underline{a}}_2$ dans l'équation de Folgar et Tucker garantit la trace unitaire du tenseur d'orientation. Ce terme est linéarisé par une méthode de type point fixe. Cette approximation engendre une perte d'information qui peut se traduire par un tenseur qui perd son caractère unitaire. Afin de remédier à cela, une fois les 6 inconnues obtenues, nous calculons la trace du tenseur d'orientation afin de procéder à sa normalisation. Ce dernier est alors actualisé comme suit :

$$\underline{\underline{a}}_2^{n+1} \longleftarrow \frac{\underline{\underline{a}}_2^{n+1}}{\|\underline{\underline{a}}_2^{n+1}\|} \quad (4.51)$$

La «renormalisation» du tenseur $\underline{\underline{a}}_2^{n+1}$ ne perturbe pas la solution finale et ne modifie que très peu ses composantes.

4.5.2 Couplage orientation / cinématique en injection

Nous présentons dans cette partie l'agencement des différentes méthodes numériques dans le programme de calcul (Rem3d ®). Mais tout d'abord nous présentons le calcul de l'évolution du domaine fluide.

a) Évolution de la surface libre

L'étude du remplissage d'un moule conduit en particulier à déterminer la position du front de matière au cours du temps. L'évolution du domaine fluide est calculée ici à l'aide d'une méthode de type VOF (Volume of fluid) basée sur une approche de type Galerkin Discontinu (GD). Pour cela, on utilise une fonction caractéristique 1_{Ω_f} de la région fluide Ω_f définie dans tout le domaine Ω [24]. L'approche est eulérienne et l'approximation GD de la fonction caractéristique 1_{Ω_f} fait apparaître justement le taux de remplissage de chaque élément :

$$1_{\Omega_f}^h|_K = \frac{|K \cap \Omega_f|}{|K|} \quad (4.52)$$

L'évolution du domaine fluide est alors donnée par la résolution d'une équation de transport :

$$\frac{D1_{\Omega_f}^h}{Dt} = \frac{\partial 1_{\Omega_f}^h}{\partial t} + \underline{v} \cdot \nabla 1_{\Omega_f}^h = 0 \quad (4.53)$$

Une fois la fonction caractéristique calculée, il suffit simplement d'intégrer les équations de Stokes et l'équation qui régit l'orientation des fibres sur tout le domaine de calcul en pondérant chaque terme par la fonction de présence. En effet, nous pouvons étendre chaque équation, définie dans le domaine fluide Ω_f , à tout le domaine de calcul Ω de la manière suivante :

Soit $\mathcal{D}$ l'espace des variables inconnues de Ω_f $(\underline{v}, p, \underline{a}_2)(\underline{x}, t)$. La formulation faible des équations de Ω_f peut être résumée à :

$$\int_{\Omega_f} A(X, Y) d\Omega_f = \int_{\Omega_f} L(Y) d\Omega_f \quad (4.54)$$

où A désigne l'opérateur approprié et $(X, Y) \in \mathcal{D}^2$. En introduisant un nouvel opérateur $\tilde{A}$ qui permet de prolonger par continuité les variables de $\mathcal{D}$, les équations sur Ω_f peuvent être étendues à tout Ω :

$$\int_{\Omega} 1_{\Omega_f} A(X, Y) d\Omega + (1 - 1_{\Omega_f}) \tilde{A}(X, Y) d\Omega = \int_{\Omega} 1_{\Omega_f} L(Y) d\Omega \quad (4.55)$$

Cette fonction caractéristique devient une inconnue du problème et est régie par l'équation d'évolution (4.53) dans tout le domaine Ω .

b) Résolution du problème dans le cadre de l'injection

Nous présentons ci-après l'organigramme du programme de calcul permettant la prédiction du remplissage de matériaux chargés de fibres.

Comme dans le cadre de l'extrusion, le calcul débute par un calcul mécanique suivi du calcul de l'orientation des fibres. Nous ne détaillerons donc pas ces étapes. Le lecteur pourra se référer au paragraphe 4.5.1.

Avancée du front de matière :

L'étape suivante consiste à déterminer l'avancée du front de matière en calculant la fonction caractéristique 1_{Ω_f} du domaine fluide. Rappelons que l'ensemble des équations sont résolues dans tout le domaine de calcul *Fluide* mais également *Air*.

L'équation mécanique :

$$\int_{\Omega} 1_{\Omega_f} 2\eta \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{v}) : \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{w}) d\Omega + \int_{\Omega} 1_{\Omega_f} 2\eta N_p \left(\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{v}) : \underline{a}_2 \right) \underline{a}_2 d\Omega - \int_{\Omega} 1_{\Omega_f} p \nabla \cdot \underline{w} = 0 \quad (4.56)$$

L'équation de Folgar et Tucker est également résolue dans tout le domaine. Le domaine vide est caractérisé par un coefficient d'interaction assez important ($C_I = 10$) dans le seul but d'éliminer dans l'équation de Folgar et Tucker tous les termes qui ne sont pas du même ordre de grandeur que C_I . L'équation d'évolution de l'orientation se réduit ainsi à :

$$2C_I \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}(I_d - 3\underline{a}_2) = 0 \quad (4.57)$$

Le domaine vide est alors caractérisé par une orientation des fibres qui reste toujours isotrope.

Calcul thermique :

L'algorithme se termine par le calcul du champ de température dans tout le domaine. En principe, la conductivité thermique est anisotrope et dépend de l'état d'orientation des fibres. Dans ce cas précis, cette conductivité thermique est décrite par un tenseur $\underline{k}$ dont les composantes prennent la forme qui suit :

$$k_{ij} = k_a \delta_{ij} + k_b a_{ij} \quad (4.58)$$

k_a désigne la conductivité thermique de la matrice et k_b est un paramètre qui dépend de la conductivité thermique k_a , de la fraction volumique de fibres ainsi que du rapport de forme des fibres [79], [37].

A noter que dans nos travaux nous avons négligé l'aspect anisotrope dû à la présence des fibres.

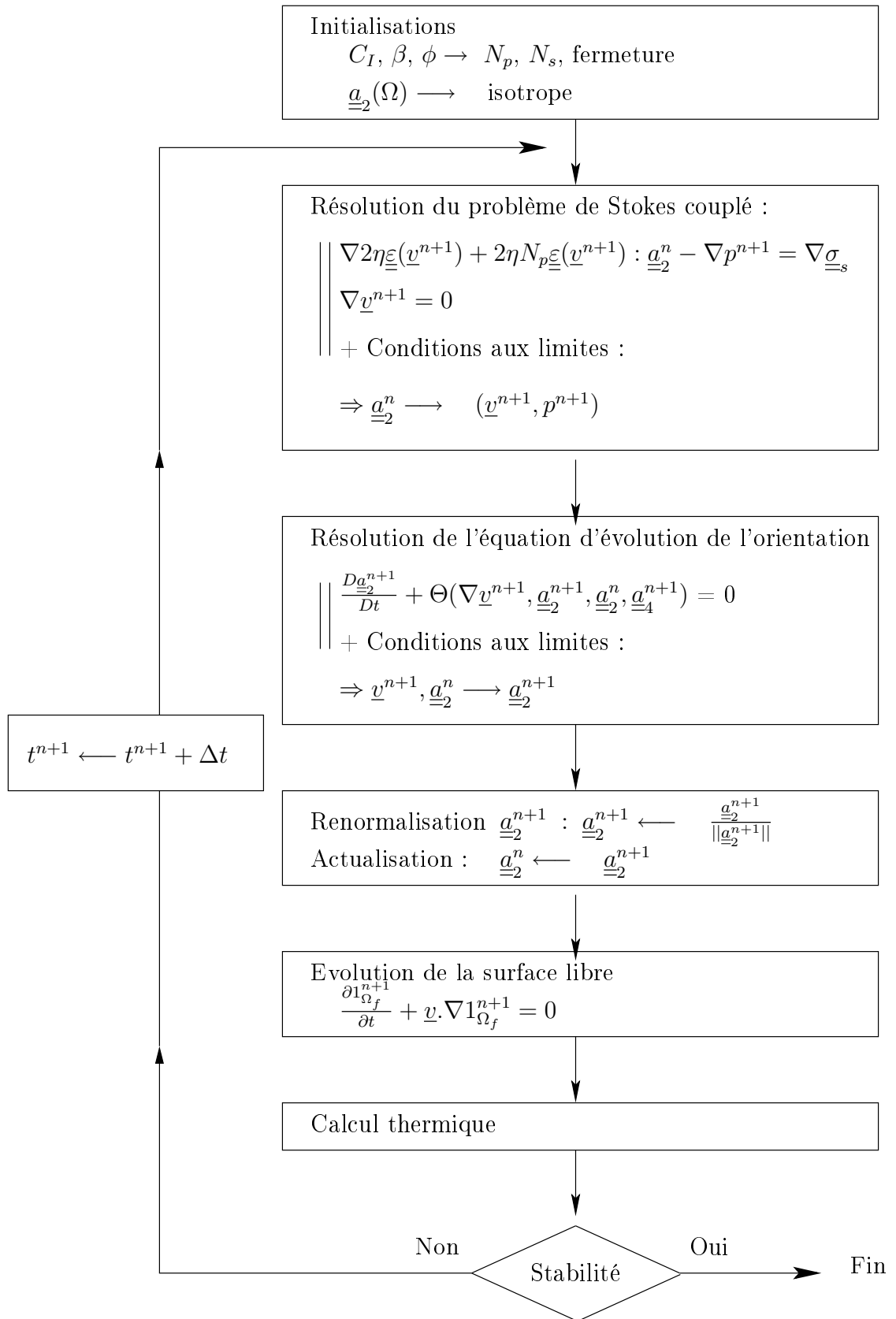


FIG. 4.5 – Organigramme du programme de calcul sous Rem3d ®

4.6 Conclusion

Nous avons présenté dans ce chapitre les méthodes de résolution utilisées pour la résolution du problème posé par la mise en forme des matériaux chargés de fibres.

Des méthodes étudiées lors de la description des différentes techniques numériques présentes dans la littérature, il apparaît que le schéma de Taylor Galerkin Discontinu (TGD) espace-temps utilisant des éléments $P0$ est le plus apte à répondre à nos besoins pour ce qui concerne la détermination de l'orientation des fibres. Par rapport aux approches de Galerkin standard l'intérêt de la méthode est immédiat : la méthode ne génère pas d'oscillations. Comparativement aux méthodes dites stabilisées, l'approche utilisée n'introduit aucun terme de stabilisation susceptible de dénaturer la solution. Enfin cette méthode est inconditionnellement stable et rapide comparativement aux approches TGD explicites.

Cette méthode est couplée à une technique éléments finis mixte $P1^+/P1$. Lors de ce couplage, nous avons utilisé une approche dite *explicite*, c'est à dire que les différents problèmes posés par la détermination des champs de vitesse et de pression puis la détermination de l'orientation, sont résolus successivement. L'approche n'est donc pas monolithique et la contribution des fibres au tenseur des contraintes a été traitée de manière implicite.

Enfin, une dernière partie de ce chapitre est dédiée à la présentation du couplage en injection. En effet, ces deux modules ont été intégrés dans un code d'injection. Les équations de la mécanique ainsi que l'équation de transport qui régit l'orientation des particules sont résolues dans tout le domaine de calcul incluant le domaine vide. Pour ce faire, il est nécessaire de prendre en considération l'évolution de la surface libre qui détermine à chaque instant l'évolution de chaque domaine. Chaque terme des équations mises en jeu est ainsi pondéré par une fonction qui détermine la présence ou pas du domaine fluide.

Chapitre 5

Les écoulements et les mécanismes d'orientation pour des géométries simplifiées

Dans ce chapitre, nous effectuons un retour dans le domaine des procédés de mise en forme, avec notamment l'utilisation du logiciel REM3D ® pour l'étude du procédé d'injection et d'extrusion de fluides chargés de fibres.

Il s'agit de valider le calcul de l'orientation en imposant d'une part un champ de vitesse simple et d'autre part de voir sur des problèmes simplifiés les différents mécanismes qui influencent l'orientation des fibres. Le but est d'analyser le comportement de la méthode galerkin discontinu espace-temps pour le calcul du tenseur orientation.

Cette validation du code de calcul nous permettra pour des écoulements simples d'analyser la capacité des méthodes numériques à calculer le tenseur orientation. L'étude de sensibilité des divers paramètres (C_I , relation de fermeture, ...) intervenant dans l'équation de Folgar et Tucker ayant déjà donné lieu à de nombreuses publications, nous nous sommes attachés à regarder les effets 3D, l'action de l'effet fontaine, de la géométrie de la filière et du couplage rhéologie-orientation.

Sommaire

5.1	Introduction	121
5.1.1	Le logiciel REM3D	121
5.1.2	Les conditions aux limites	122
5.1.3	Les calculs effectués	122
5.2	Validation du module calcul d'orientation sur des solutions analytiques	124
5.2.1	Écoulement de cisaillement simple : écoulement dit de «Couette»	124
a)	Cas des rapports de forme des fibres finis	124
b)	Cas d'un rapport de forme des fibres infini	126
5.2.2	Écoulement élongationnel	127
5.3	L'écoulement de Poiseuille	128
5.3.1	Le Poiseuille 2D en extrusion	128
a)	La géométrie et les paramètres du calcul	128
b)	Effet de la rhéologie de la matrice	128
c)	Influence du coefficient d'interaction	132
d)	Le rapport de forme des fibres	134
5.3.2	Écoulement de Poiseuille 3D en injection	135
a)	La géométrie et les paramètres du calcul	135
b)	Influence du maillage	137
c)	Influence de la relation de fermeture	139
5.4	La contraction plane 2D : le rôle du couplage	139
5.5	Injection d'un moule 3D : formation des lignes de soudure	142
5.5.1	Géométrie et paramètres de calculs	142
5.5.2	Résultats numériques	143
5.6	La géométrie de type contraction-expansion	146
5.6.1	Géométrie et conditions initiales	146
5.6.2	Résultats pour un écoulement en extrusion	147
a)	Effet de la rhéologie de la matrice	148
b)	Influence du coefficient d'interaction	150
c)	Le rôle du couplage rhéologie-orientation	152
5.6.3	Écoulement d'injection	155
a)	Le rôle de l'effet fontaine	155
b)	Le rôle du couplage	157
c)	L'orientation initiale des fibres	161
5.7	Conclusion	164

5.1 Introduction

5.1.1 Le logiciel REM3D

Le cadre général pour la résolution numérique de l'orientation est le logiciel REM3D®. Ce logiciel à vocation industrielle résout le problème de l'injection et de l'extrusion pour un fluide Newtonien généralisé. De cette manière, nous avons pu bénéficier des développements antérieurs : le solveur mécanique, le solveur thermique, la prise en compte de la dépendance de la viscosité en fonction de la température et du cisaillement ainsi que le déplacement de l'interface. L'organigramme du code de calcul présenté au chapitre précédent est résumé sur la figure 5.1. Notre travail a consisté à inclure le solveur orientation et à modifier le solveur mécanique pour prendre en compte de manière implicite l'extracontrainte due aux fibres.

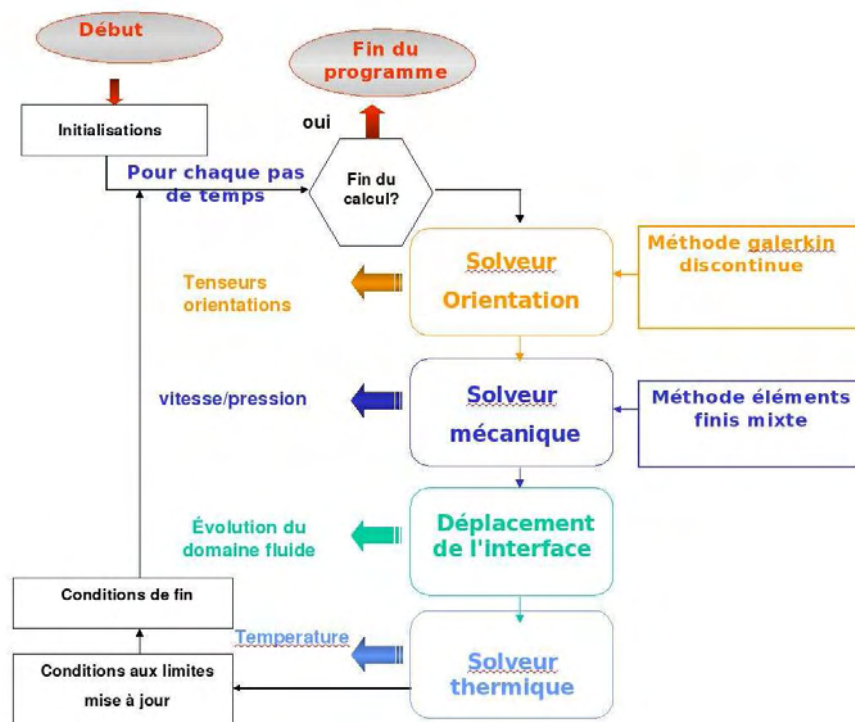


FIG. 5.1 – Organigramme simplifié du code de calcul REM3D®

Cet organigramme prend en compte les développements réalisés dans le cadre de la thèse : introduction d'un solveur orientation et prise en compte de la présence des fibres dans le tenseur des contraintes (couplage rhéologie-orientation). Paradoxalement, travailler avec un code industriel a imposé quelques contraintes notamment pour tester la méthode numérique sur des cas simples. En effet, REM3D impose de travailler sur des géométries 3D et permet un choix restreint pour les conditions aux limites (les conditions aux limites proposées par REM3D étant liées aux applications du logiciel). Par exemple, pour étudier l'orientation 3D des fibres pour un écoulement 2D, nous avons construit des maillages ayant un seul élément dans l'épaisseur en ajoutant des conditions de symétrie dans la direction transverse.

5.1.2 Les conditions aux limites

Pour un fluide newtonien la forme faible de l'équation de Stokes s'écrit :

$$\int_{\Omega} \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\epsilon}}(\underline{v}) \, d\Omega = \int_{\Gamma} (\underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{n}) \cdot \underline{v} \, d\Gamma \quad (5.1)$$

Dans le cas $2D$, l'intégrale sur Γ peut être explicitée en considérant la normale $\underline{n} = (1, 0)$. Les différentes conditions aux limites deviennent alors :

$$\int_{\Gamma} (\underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{n}) \cdot \underline{v} \, d\Gamma = \int_{\Gamma} [(2\eta \, \partial_{x_1} u_1 - p) v_1 + \eta (\partial_{x_2} u_1 + \partial_{x_1} u_2) v_2] \, d\Gamma \quad (5.2)$$

En plus de la condition de non glissement à la paroi, nous avons différents types de conditions aux limites :

- La pression en entrée du canal peut être fixée : $p = p_0$, $u_2 = 0$ et u_1 reste à déterminer. De plus, les fonctions test vérifiant les conditions aux limites de Dirichlet, nous avons $v_2 = 0$. L'équation (5.2) se simplifie et devient :

$$\int_{\Gamma} (\underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{n}) \cdot \underline{v} \, d\Gamma = \int_{\Gamma} [(2\eta \partial_{x_1} u_1 - p_0) v_1] \, d\Gamma \sim - \int_{\Gamma} p_0 v_1 \, d\Gamma \quad (5.3)$$

Les termes provenant de $\underline{\underline{\epsilon}}(\underline{u})$ sont éliminés car, après discrétisation, nous avons une approximation $P0$ sur chaque élément et nous imposons qu'ils soient nuls sur les éléments frontières. Cela peut entraîner une erreur de la solution sur la frontière. Finalement cette condition sur la pression revient à ajouter le terme source (5.3) à la forme faible de l'équation de Stokes

$$\int_{\Omega} 2\eta \, \underline{\underline{\epsilon}}(\underline{u}) : \underline{\underline{\epsilon}}(\underline{v}) \, d\Omega - \int_{\Omega} p \, \nabla \cdot \underline{v} \, d\Omega = - \int_{\Gamma} p_0 v_1 \, d\Gamma \quad (5.4)$$

Nous pouvons remarquer que la pression p finalement calculée peut être différente de celle qui est imposée p_0 .

- nous fixons $\sigma \cdot n = 0$ et dans ce cas le terme (5.2) est nul.
- nous pouvons imposer un débit, $\int_{\Gamma} u_1 \, d\Gamma = Q$ et $u_2 = 0$. Pour cela nous imposons un profil de vitesse correspondant à ce débit. Ce profil de vitesse est calculé en prenant une viscosité constante. Pour un fluide rhéofluidifiant cette vitesse n'est pas la solution du système d'équations et nous avons une zone transitoire siège d'une réorganisation du profil de vitesse où il y a un écoulement élongationnel. Pour cette condition aux limites le second membre de (5.2) est nul car les fonctions tests sont nulles sur la frontière.

5.1.3 Les calculs effectués

Dans un premier temps nous avons validé le module orientation par comparaison avec des solutions analytiques connues. Nous avons, par la suite, effectué des calculs où l'écoulement est calculé via le solveur mécanique de REM3D. L'objectif est d'utiliser le solveur orientation dans différentes géométries afin de tester notre programme dans des situations proches des applications. Il faut noter que, si l'écoulement peut être bidimensionnel, l'orientation est toujours regardée dans les trois directions.

Cela nous a permis de voir l'influence de certains paramètres sur l'orientation finale des fibres :

- paramètres intrinsèques au modèle utilisés pour le calcul de l'orientation de fibres : rapport de forme, coefficient d'interaction, équation de fermeture, orientation initiale et fraction volumique de fibres à travers notamment l'influence du couplage sur l'orientation des fibres
- paramètres relatifs au procédé : l'effet fontaine (via une comparaison entre écoulement en injection et écoulement en extrusion) ainsi que la rhéologie de la matrice.

La différence entre un calcul de type extrusion et injection réside dans le fait que dans le cadre de l'extrusion l'orientation finale est stationnaire tandis que pour l'injection l'orientation est figée à la fin du remplissage du moule.

Le fluide utilisé dans les calculs suit une loi puissance pour la rhéologie et une loi d'Arrhénius pour la thermo-dépendance.

$$\eta = \eta_0 |\dot{\gamma}|^{m-1} \quad ; \quad \eta_0(T) = \eta_0(T_{ref}) \exp \left[\beta \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{ref}} \right) \right] \quad (5.5)$$

Sauf mentions contraires, les valeurs des coefficients apparaissant dans ces relations sont données dans le tableau 5.1. Ceux de l'équation de Folgar et Tucker sont dans le tableau 5.2.

Rhéologie	Thermo-dépendance
$K = 0.00123 MPa.s$ $m = 0.75$ densité = 1 000 kg/m ³	température de référence = 300 °C $\beta = 3027.76$ conductivité = 0.1814 W/m °C chaleur spécifique = 2 180 J/kg °C

TAB. 5.1 – Caractérisation du polymère utilisé pour une loi puissance et une loi d'Arrhenius

Paramètres du modèle d'orientation	Valeur
orientation initiale	isotrope 3d
équation de fermeture	quadratique
coefficient d'interaction C_I	0.01
rapport de forme	10
Coefficient de Couplage N_p	0

TAB. 5.2 – Paramètres utilisés pour le modèle de Folgar et Tucker

5.2 Validation du module calcul d'orientation sur des solutions analytiques

Cette section a pour objectif de présenter une validation du code de calcul macroscopique, dans le cadre d'écoulements simples en cisaillement et en élongation. Pour ce faire, nous comparons les solutions analytiques existantes issues de la résolution analytique de l'équation de Jeffery dans le cas bidimensionnel, aux solutions obtenues par le module orientation. Ce calcul s'est fait en dehors de l'environnement REM3D® décrit dans l'introduction et en négligeant les termes de transport (nous ne considérons pas l'avancée du front de matière ce qui revient à simuler un cas d'extrusion).

5.2.1 Écoulement de cisaillement simple : écoulement dit de «Couette»

Nous étudions donc ici l'évolution de l'orientation d'une fibre au cours du temps pour un écoulement de cisaillement simple caractérisé par un champ de vitesse, dans le repère fixe $(0, x, y, z)$ dont la forme est donnée par la relation suivante :

$$\underline{v} = (\dot{\gamma}y, 0, 0)^T$$

L'orientation initiale des fibres correspond à une orientation isotrope dans le plan (x, y) . Le fluide est considéré Newtonien et le coefficient d'interaction C_I est nul. Afin d'étudier l'évolution de l'orientation d'une fibre au cours du temps, nous avons éliminé de l'équation de Jeffery le terme de transport intervenant dans la dérivée particulière de $\underline{a}_2$, si bien que pour chaque pas de temps l'orientation des fibres est identique pour chaque élément du maillage. Nous nous intéressons à l'évolution temporelle des composantes du tenseur d'orientation pour un élément du maillage. Pour le calcul de l'orientation, nous avons utilisé un schéma temporel d'ordre 0 ce qui revient à utiliser une méthode d'Euler implicite.

La théorie prévoit que pour un écoulement de cisaillement, avec un fluide newtonien, une fibre subit un mouvement de rotation périodique, dont la période est inversement proportionnelle au taux de cisaillement et proportionnelle au rapport de forme de la fibre :

$$T = \frac{2\pi}{\dot{\gamma}} \left(\beta + \frac{1}{\beta} \right)$$

Nous allons donc valider le code de calcul dans le cadre de deux simulations prenant en compte des rapports de forme de fibres différents et donnant lieu à des solutions distinctes.

a) Cas des rapports de forme des fibres finis

Le premier exemple concerne un écoulement de Couette pour des fibres ayant un rapport de forme constant égal à 10. Le taux de cisaillement $\dot{\gamma}$ est égal à 10 s^{-1} . Nous avons également choisi d'utiliser une équation de fermeture quadratique, bien adaptée pour les écoulements en cisaillement qui orientent les fibres dans la direction de l'écoulement. La courbe 5.2 présente l'évolution de la première composante du tenseur d'orientation en fonction du temps.

Nous comparons ainsi la courbe provenant de la solution analytique de l'équation de Jeffery à la courbe obtenue numériquement via notre logiciel. Nous rappelons ci-après la solution

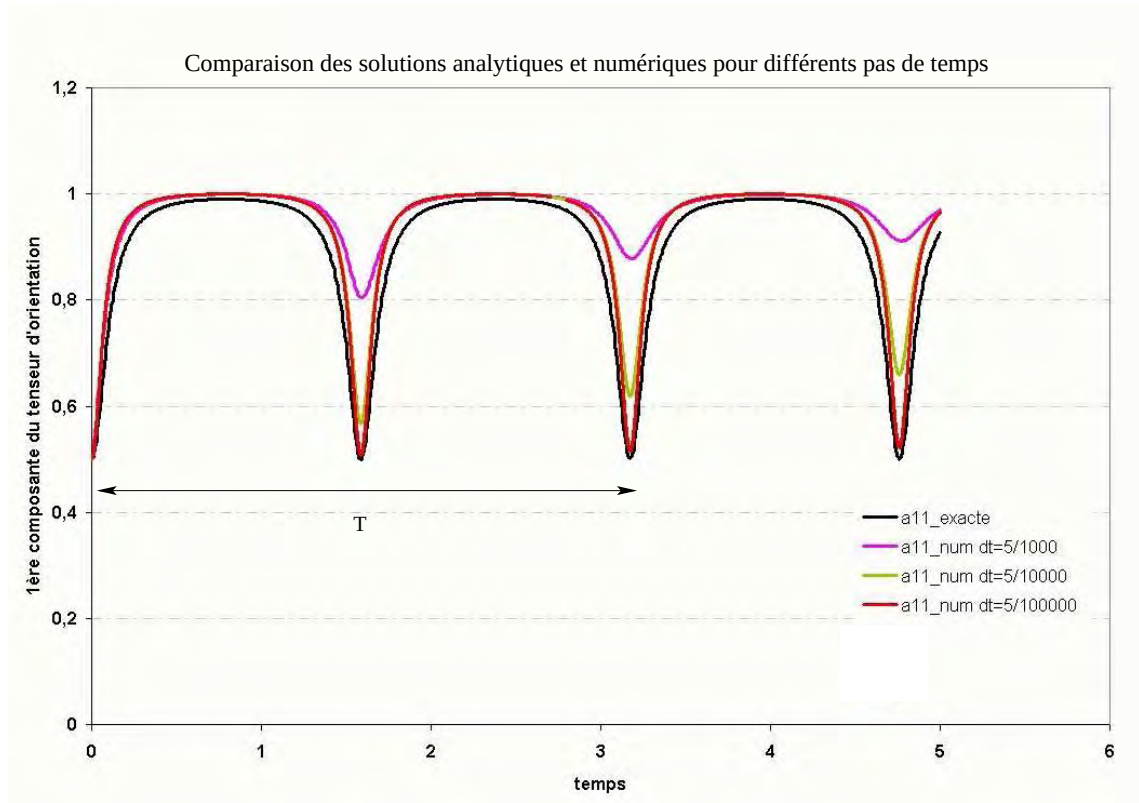


FIG. 5.2 – Comparaison d’une solution analytique et numérique pour un écoulement de cisaillement simple : $\dot{\gamma} = 10 \text{ s}^{-1}$; $\beta = 10$ et $\lambda = .980$

analytique de l’équation de Jeffery :

$$a_{11} = \frac{1}{2} \frac{1 + \frac{\lambda}{1-\lambda} \sin^2(\omega t)}{1 + \frac{\lambda^2}{1-\lambda^2} \sin^2(\omega t)}$$

avec

$$\omega = \frac{\dot{\gamma} \sqrt{\lambda^2 - 1}}{2}$$

Les résultats obtenus (courbe rouge) concordent d’un point de vue qualitatif à la solution escomptée (courbe noire). Nous retrouvons également la période de mouvement des fibres :

$$T = 2\pi \left(1 + \frac{1}{10}\right)$$

Toutefois, la comparaison solution analytique/code de calcul montre une sensibilité de la solution obtenue au pas de temps (pour une bonne concordance des courbes, les pas de temps utilisés sont de l’ordre de 10^{-5} s). Dans le même temps, cette sensibilité est accompagnée d’un phénomène d’amortissement en ce qui concerne les minima de a_{11} . Cette sensibilité au pas de temps ainsi que l’amortissement de la valeur des minima intervient uniquement lorsque le coefficient d’interaction est nul, dans une zone transitoire où la fibre tourne rapidement sur elle même.

Cette sensibilité par rapport au pas de temps doit provenir du traitement de la non linéarité (le terme quadratique). Il faudrait, à chaque pas de temps, faire une méthode de point fixe,

afin de vérifier la convergence de la solution. Cela revient, d'une certaine façon, à intégrer en temps pour un pas de temps plus petit (c'est la solution que nous avons choisi). Cette sensibilité intervient dans une région qui disparaît lorsque $C_I > 0$ (c'est à dire dès lors que l'interaction entre les fibres est prise en compte). Par conséquent, cette sensibilité au pas de temps n'est pas importante pour les applications de REM3D.

b) Cas d'un rapport de forme des fibres infini

Les résultats obtenus précédemment nous ont conduit à continuer la validation dans le cadre des fibres longues (i.e. $\lambda = 1$). Dans ce cas précis, la période de rotation tend vers l'infini et la première composante du tenseur d'orientation tend ainsi vers une valeur stable.

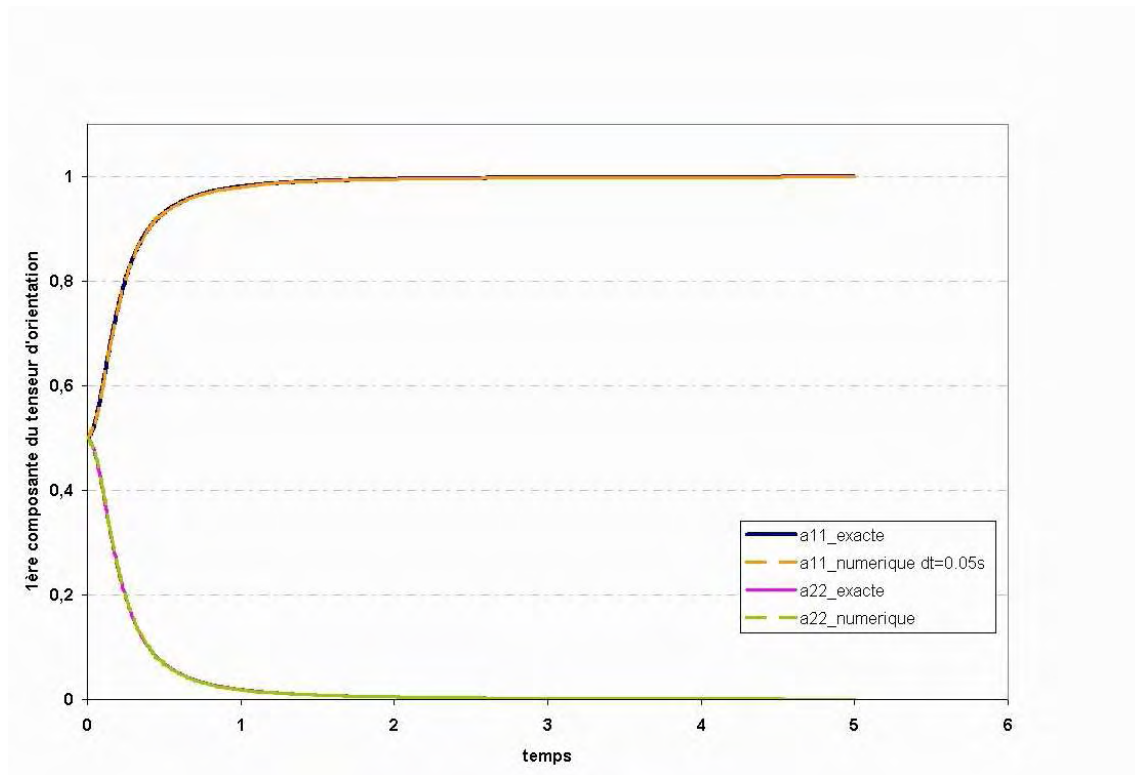


FIG. 5.3 – Comparaison d'une solution analytique et numérique pour un écoulement de cisaillement simple ($\dot{\gamma} = 10 \text{ s}^{-1}$) et un rapport de forme des fibres infini ($\lambda = 1$) ; $\delta t = 5 \cdot 10^{-2} \text{ s}$

Comme précédemment, il s'agit d'un écoulement de cisaillement simple avec un taux de cisaillement $\dot{\gamma} = 10 \text{ s}^{-1}$. Le pas de temps utilisé est de $5 \cdot 10^{-2} \text{ s}$. Nous pouvons noter, dans ce cas, la parfaite corrélation entre les solutions attendues (courbe noire et rose) et les solutions numériques.

5.2.2 Écoulement élongationnel

Enfin, le dernier exemple de validation concerne un écoulement d'élongation pure défini par un champ de vitesse de la forme :

$$\underline{v} = (\dot{\alpha}x, -\dot{\alpha}y)^T$$

D'après les travaux de Verleye, une solution analytique 2D simple est donnée par :

$$a_{11} = \frac{a_{11}^{t=0}}{a_{11}^{t=0} + (1 - a_{11}^{t=0}) \exp^{-4\lambda\dot{\alpha}t}} \quad (5.6)$$

L'orientation initiale des fibres est toujours considérée isotrope 2D. Nous nous sommes placés dans les mêmes conditions de simulation que précédemment.

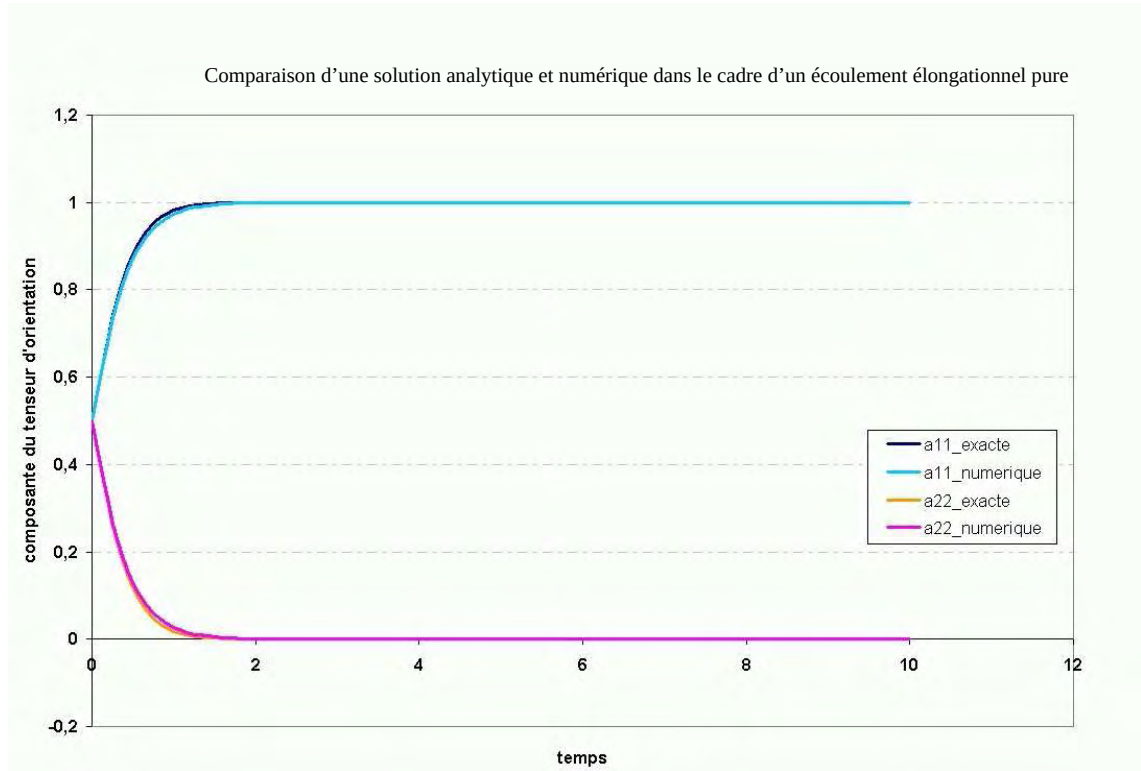


FIG. 5.4 – Comparaison d'une solution analytique et numérique pour un écoulement d'élongation pure ($\dot{\alpha} = 10$)

Les résultats numériques concordent d'un point de vue quantitatif à la solution attendue : la fibre a une orientation stable et s'oriente perpendiculairement ou parallèlement à la direction d'écoulement suivant que le taux d'élongation est négatif ou positif.

5.3 L'écoulement de Poiseuille

5.3.1 Le Poiseuille 2D en extrusion

Pour ce faire, nous avons utilisé une géométrie simple de type académique et avons simulé un procédé d'extrusion dans une conduite rectangulaire. C'est à dire que nous nous intéressons à l'orientation finale dès lors que le tenseur orientation devient stationnaire.

a) La géométrie et les paramètres du calcul

La géométrie étudiée est une cavité rectangulaire de dimension $10 \times 4 \times 2 \text{ cm}$ comme le suggère la figure 5.5. Le maillage est assez fin afin de pouvoir faire une étude de sensibilité précise. Pour cela, nous avons utilisé le mailleur anisotrope proposé par REM3D ® en considérant un élément dans l'épaisseur. Nous avons, en outre, pris en compte une condition de symétrie sur le plan (x, y) . Le maillage comporte ainsi 329 834 éléments et 86 464 noeuds.

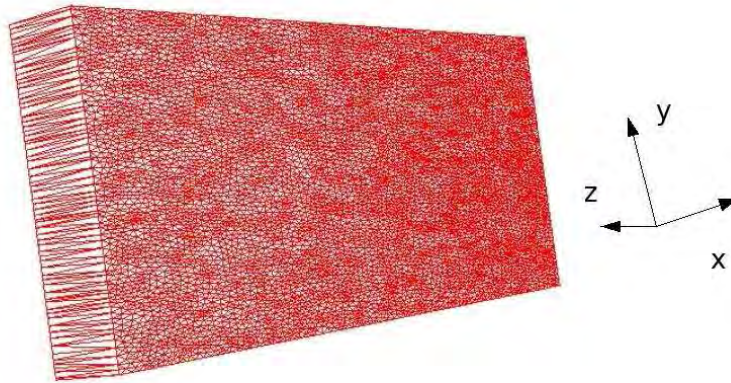


FIG. 5.5 – Maillage et géométrie utilisé

Nous imposons en entrée (plan $(x = 0, y, z)$) un débit de $500 \text{ mm}^3/\text{s}$. La température de la matière est de 250°C et la température du moule est de 30°C . Les paramètres du polymère sont indiqués dans le tableau 5.1 : la viscosité suit une loi puissance et la dépendance en température suit une loi d'Arrhenius. Les paramètres utilisés par défaut pour le calcul sont ceux du tableau 5.2.

b) Effet de la rhéologie de la matrice

Pour cette étude, nous faisons varier l'indice de pseudoplasticité m entre 0.2 et 1 jusqu'à la limite du fluide Newtonien.

Nous présentons ci-après les isovaleurs de toutes les composantes non nulles du tenseur d'orientation, obtenues le long de la cavité ($x = 5 \text{ cm}$). Nous rappelons que ces isovaleurs indiquent la probabilité d'obtenir une orientation de fibres dans les directions principales d'écoulement, respectivement dans la direction x pour a_{xx} , y pour a_{yy} et z pour a_z .

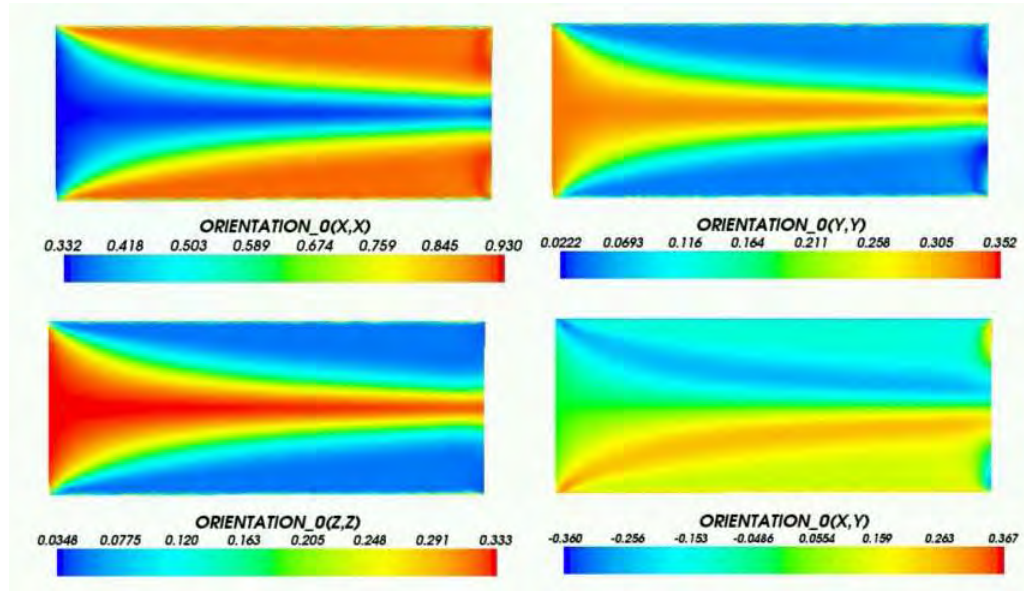


FIG. 5.6 – Composantes du tenseur d'orientation pour un écoulement de poiseuille, une orientation initiale isotrope et $m = .75$.

Le taux de déformation du fluide n'est pas homogène dans l'écoulement et donc la vitesse d'orientation des fibres est différente d'un point à un autre. La figure 5.6 montre une ré-orientation des fibres assez lente au coeur de l'écoulement et beaucoup plus rapide pour les fibres périphériques. En effet, les fibres appartenant à la zone centrale ont une vitesse maximale, le taux de cisaillement rencontré dans cette zone est faible ce qui explique l'orientation lente des fibres. Les fibres situées à la périphérie de cette zone ont des vitesses relativement faibles et le taux de cisaillement correspondant est maximal, par conséquent les fibres s'orientent d'autant plus vite.

Dans ce type d'écoulement on retrouve donc deux zones :

- une zone centrale correspondant à une ré-orientation lente des fibres due à un taux de cisaillement rencontré relativement faible. L'orientation des particules est transportée et nous retrouvons ainsi l'orientation initialement définie,
- une zone périphérique régie par un taux de cisaillement élevé où les fibres se sont orientées dans la direction de l'écoulement.

Les fibres s'orientent donc en fonction de la vitesse attribuée à l'écoulement et du taux de cisaillement rencontré. Notons que les conditions d'entrée, régies notamment par l'orientation initiale des fibres à l'instant $t = 0$, conditionnent l'orientation des fibres rencontrée à coeur.

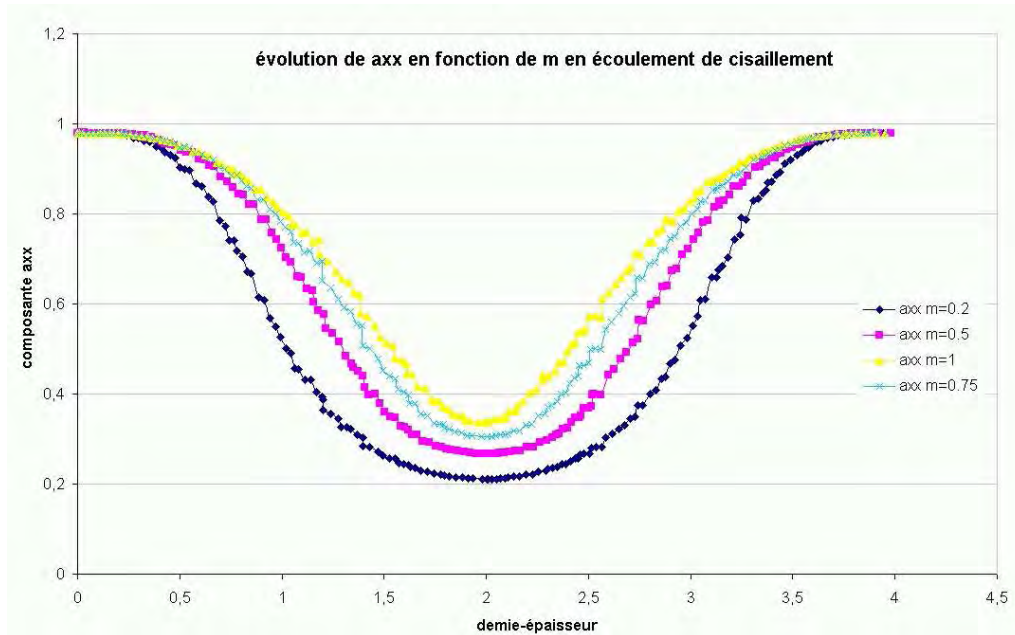


FIG. 5.7 – Influence de l'indice de pseudoplasticité m sur la composante a_{xx} du tenseur d'orientation pour $x = 5 \text{ cm}$.

La figure 5.7 présente l'influence de l'indice de pseudoplasticité m sur a_{xx} . Il s'agit d'une courbe représentant l'orientation des fibres situées au milieu de la cavité. Les résultats obtenus indiquent que l'indice de pseudoplasticité m n'a pas d'influence sur l'état d'orientation des fibres situées en paroi. En effet, les courbes présentent toutes un plateau, proche de la paroi, mettant en évidence un alignement des fibres dans la direction de l'écoulement. a_{xx} atteint la même valeur quel que soit l'indice de pseudoplasticité. Ces résultats ne sont pas étonnants, compte tenu des profils de vitesse (5.8) en paroi qui sont quasi-identiques.

En revanche, l'indice de pseudoplasticité joue un rôle majeur sur la taille de la zone de coeur ainsi que l'état d'orientation des fibres dans la zone de coeur.

En effet, nous constatons que, plus l'indice de pseudoplasticité m est faible donc plus le fluide est pseudoplastique et plus large est la zone de coeur. Parallèlement, plus l'indice m est faible et plus les fibres se trouvant dans la zone de coeur, notamment celles qui se trouvent sur l'axe de symétrie sont orientées transversalement à la direction d'écoulement. Il y a un écoulement élongationnel en entrée de la filière en raison de la condition aux limites en débit imposé qui ré-orientent les fibres dans la direction transverse à l'écoulement (a_{yy} augmente).

Les figures 5.9 et 5.10 présentent les évolutions de a_{yy} et a_{zz} en fonction de l'indice m . Les états d'orientation obtenus confirment l'influence de l'indice de pseudoplasticité : nous constatons un élargissement de la zone de coeur. En présence d'un fluide newtonien (i.e. $m = 1$), l'orientation des fibres dans cette même zone est la même que celle définie initialement.

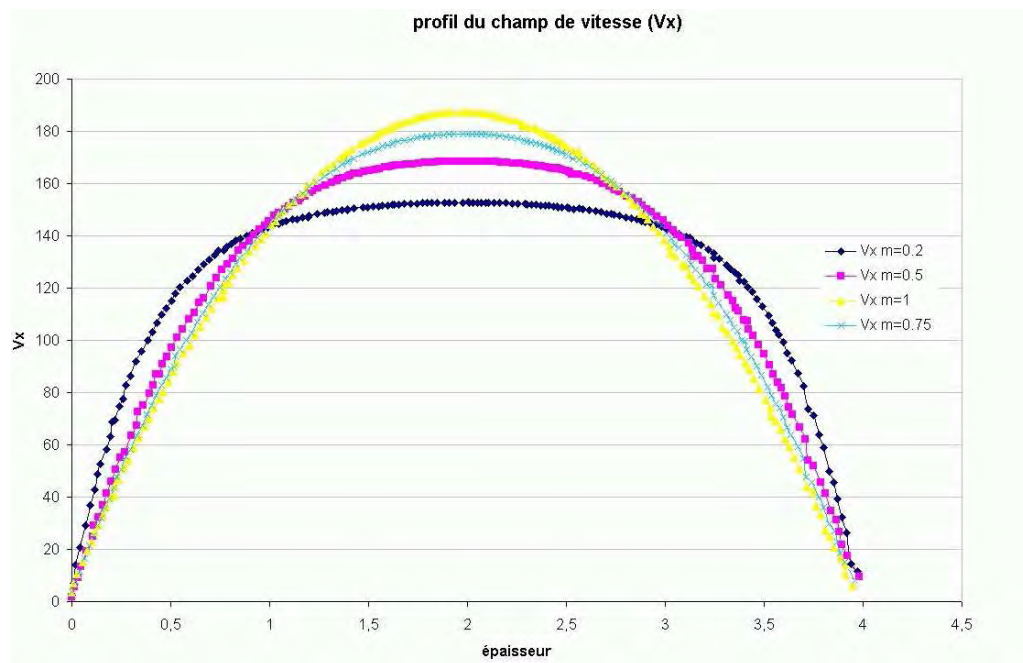


FIG. 5.8 – Influence de l'indice de pseudoplasticité m sur la première composante du champ de vitesse à $x = 5\text{ cm}$

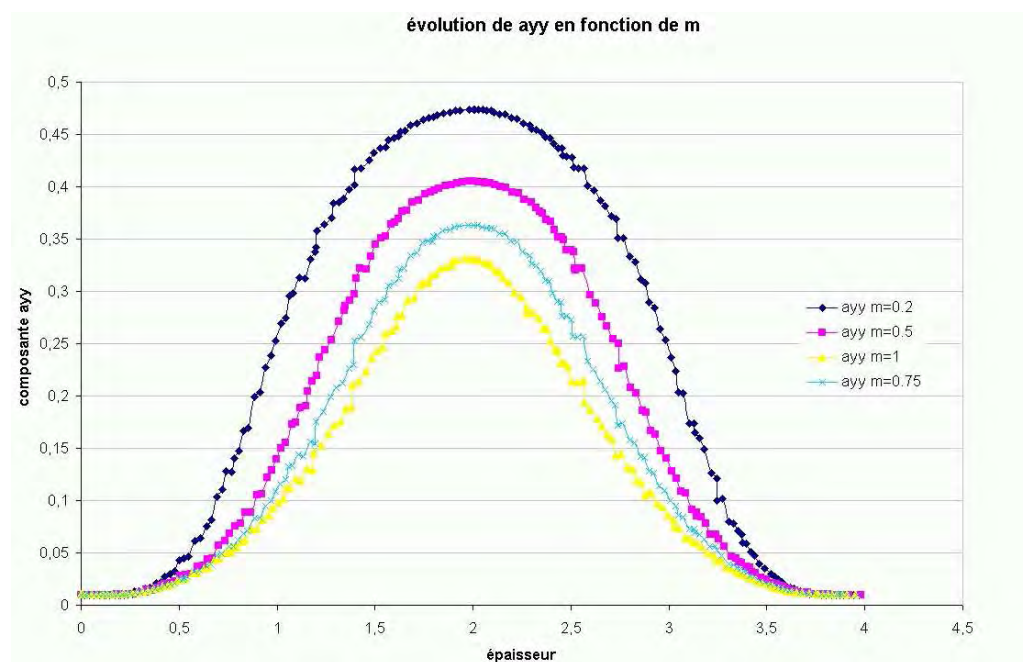


FIG. 5.9 – Influence de l'indice de pseudoplasticité m sur la composante a_{yy} du tenseur d'orientation à $x = 5\text{ cm}$

En l'occurrence, nous retrouvons ici un état d'orientation isotrope des fibres. Lorsque m diminue, les fibres ont tendance à s'orienter suivant la direction y , transverse à l'écoulement : la composante a_{yy} croît en passant de 0.33 lorsque m vaut 1 à 0.47 pour $m = 0.2$.

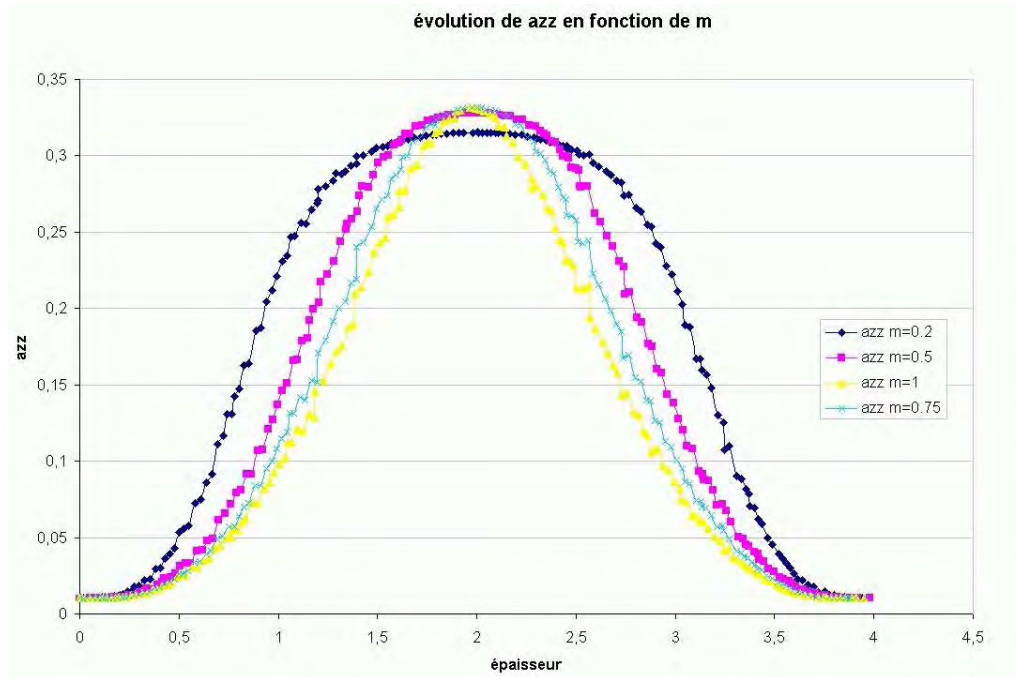


FIG. 5.10 – Influence de l'indice de pseudoplasticité m sur la composante a_{zz} du tenseur d'orientation à $x = 5 \text{ cm}$

La composante a_{zz} a une valeur maximale qui diminue : 0.33 pour $m = 1$ et 0.31 $m = 0.2$. Pour conclure, nous pouvons dire que la rhéologie de la matrice a une influence non négligeable sur l'orientation des fibres en écoulement de type cisaillement. La diminution de l'indice de pseudoplasticité tend à augmenter la taille de la zone de coeur. En raison des conditions aux limites, nous avons un phénomène additionnel du à un écoulement élongationnel qui tend à

- orienter les fibres se trouvant sur la ligne médiane de l'écoulement dans la direction transverse à l'écoulement,
- orienter les fibres se trouvant dans la zone de coeur dans le plan (y, z) .

c) Influence du coefficient d'interaction

Nous présentons ci-après l'effet du coefficient d'interaction sur les résultats en orientation. Pour ce faire, nous avons effectué 4 simulations pour un coefficient d'interaction variant de 0 à 0.1. La figure 5.11 présente l'évolution de la composante a_{xx} en fonction de C_I .

Comme attendu, plus le coefficient d'interaction est élevé, moins les fibres, en paroi, sont orientées dans la direction d'écoulement. Une augmentation du facteur C_I a pour effet d'accroître le désalignement moyen des particules. Toutefois, l'orientation des fibres à coeur est beaucoup moins influencée par la valeur du coefficient d'interaction (Figure 5.12).

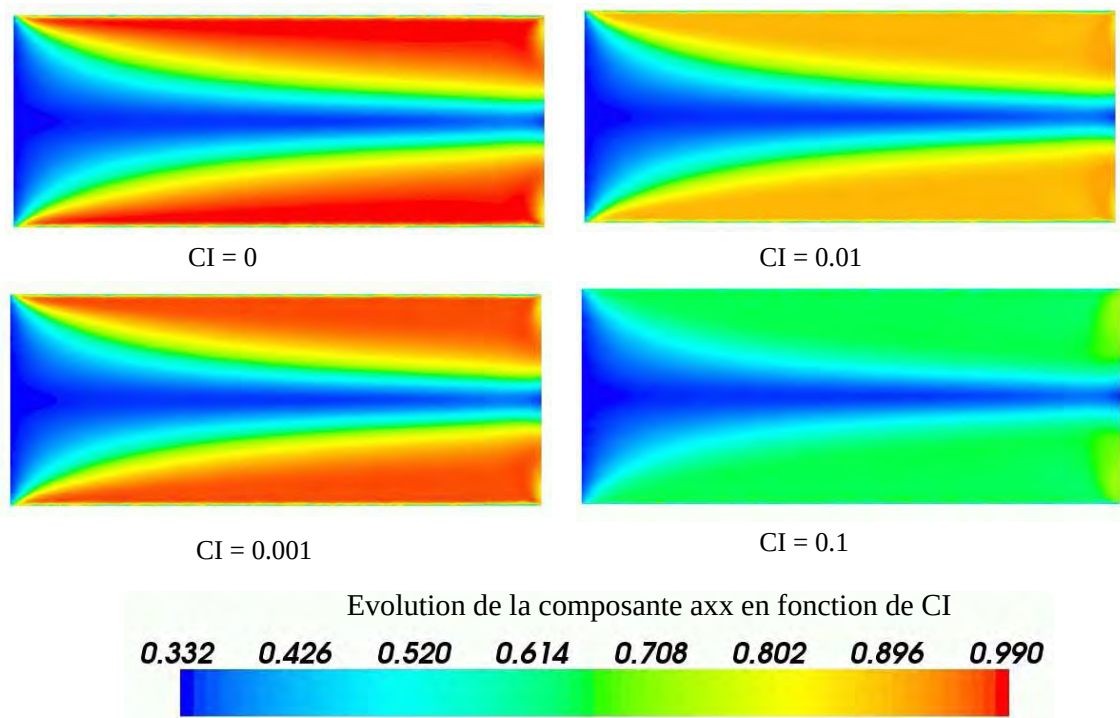


FIG. 5.11 – Influence du coefficient d'interaction sur l'orientation des fibres pour un écoulement de Poiseuille.

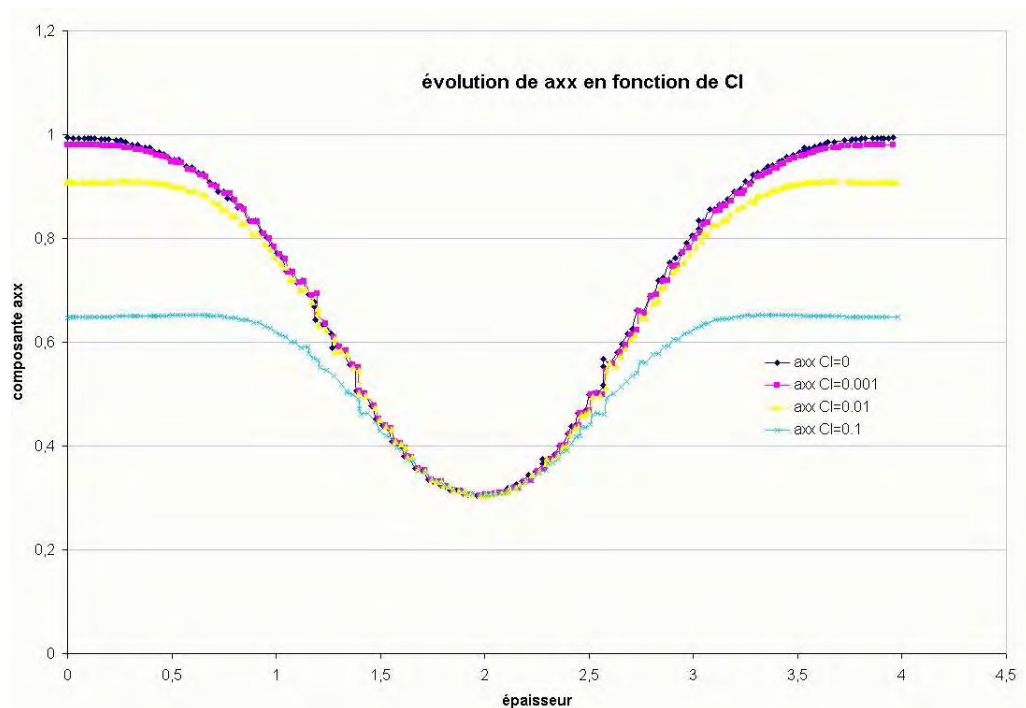


FIG. 5.12 – Influence du coefficient d'interaction C_I sur la composante a_{xx} du tenseur d'orientation à $x = 5 \text{ cm}$

Rapport de forme β	λ
4	0.882
5	0.923
8.8	0.974
10	0.980
50	0.992
500	0.999

TAB. 5.3 – Valeur de λ en fonction de β

d) Le rapport de forme des fibres

Nous présentons l'influence du rapport de forme sur les résultats en orientation de fibres et lors d'un écoulement de cisaillement. Les résultats obtenus montrent que le rapport de forme des particules pour un $\beta > 10$ a très peu d'influence sur l'état d'orientation des fibres (Figure 5.13). Ce résultat n'est pas très surprenant car si nous nous intéressons à l'évolution de λ en fonction de β (Tableau 5.3), nous nous apercevons que le paramètre λ atteint assez rapidement une valeur limite. La prise en compte du changement du rapport de forme doit se faire en modifiant aussi le coefficient d'interaction C_I et les coefficients de couplage N_p et N_s .

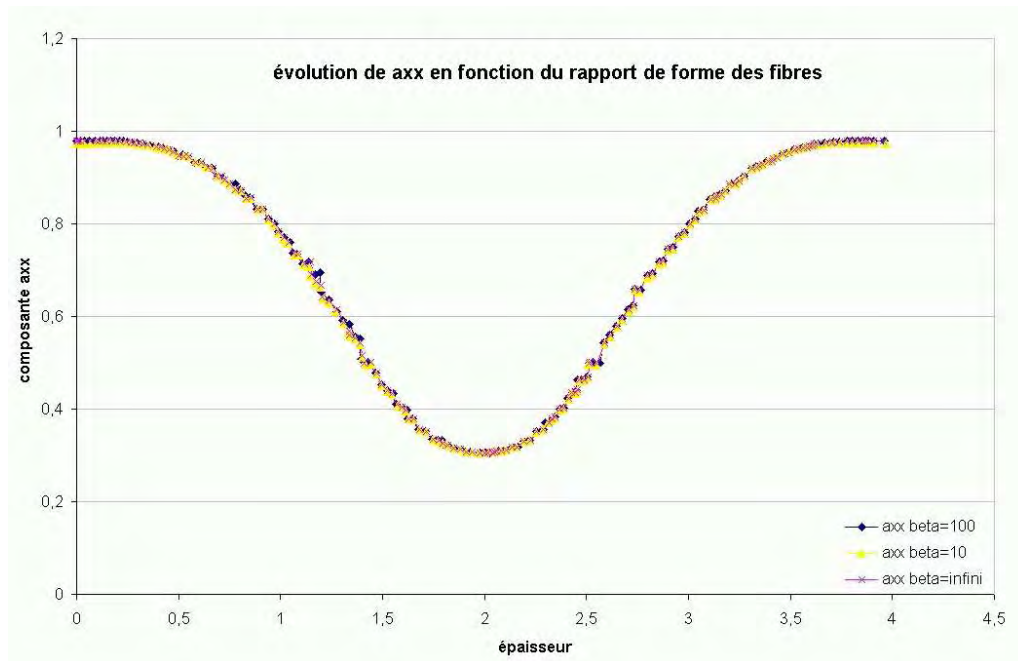


FIG. 5.13 – Influence du rapport de forme des fibres β sur la composante a_{xx} du tenseur d'orientation

5.3.2 Écoulement de Poiseuille 3D en injection

De nombreuses pièces injectées présentent des parties très minces. Lors de la phase d'injection, nous avons un front de matière qui avance et donc un écoulement essentiellement 2D correspondant à un écoulement de Poiseuille. Le logiciel REM3D qui dispose d'un maillage anisotrope est capable de faire des calculs pour ce type de géométrie car nous pouvons concentrer les éléments dans la direction la plus fine et avoir ainsi une bonne approximation du tenseur d'orientation malgré la faiblesse de l'approximation ($P0$).

Nous allons étudier l'injection d'une plaque rectangulaire pour un moule plaque utilisé par *Plastic Omnium*. Cette plaque a donné lieu à de nombreux stages et il existe des résultats expérimentaux qui permettent une comparaison avec des résultats numériques [113]. La cavité est une plaque de dimension $200 \times 600 \text{ mm}$, d'épaisseur modifiable (2 à 4 mm) qui peut être alimentée par le dessus ou le côté. (voir figure 5.14). Nous nous intéressons, dans la suite, à l'orientation des fibres obtenue numériquement pour les positions 1 à 4 correspondant aux zones où les mesures expérimentales ont été réalisées.

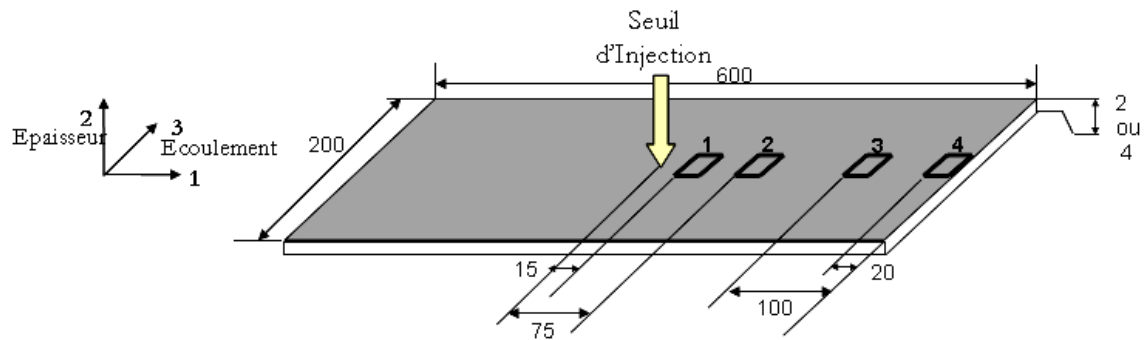


FIG. 5.14 – Géométrie de la plaque et position des échantillons pour les mesures expérimentales

a) La géométrie et les paramètres du calcul

Cette étude a été principalement menée par un stagiaire [21], l'objectif étant d'étudier l'influence du maillage, des relations de fermeture, et du rapport de forme sur les résultats d'orientation. La plaque étant alimentée par le centre, les calculs ont été réalisés sur le quart de la plaque (voir figure 5.15). Comme le montre la figure 5.15 la taille de maille est beaucoup plus petite dans l'épaisseur près du plan de symétrie et dans la carotte d'alimentation. Les plaques sont injectées en pleine peau au centre de la pièce par une carotte directe. Le matériau utilisé est un polypropylène chargé à 30 % de fibres de verre longues (PP GFL 30). La température matière est de 270°C alors que la température du moule est de 30°C . Le temps d'injection est de 3.99 s pour une épaisseur de plaque de 4 mm.

Trois maillages anisotropes sont considérés :

- un maillage de référence avec 15 éléments dans l'épaisseur,
- un maillage grossier avec 7 éléments dans l'épaisseur,
- un maillage fin avec 20 éléments dans l'épaisseur

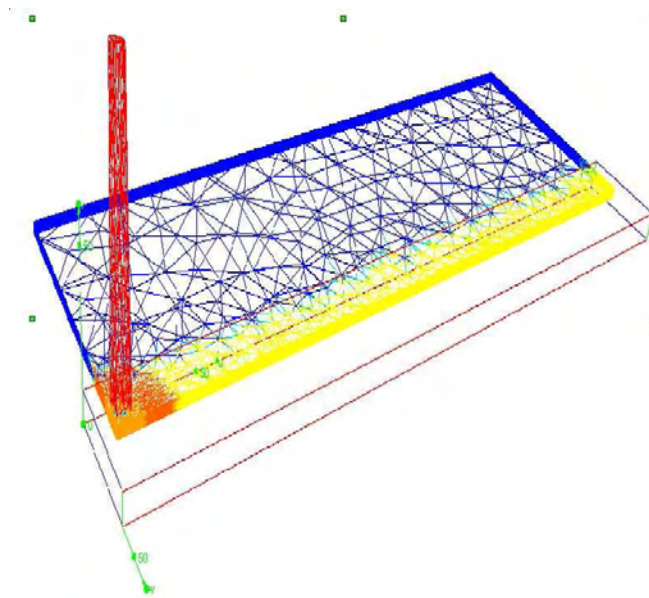


FIG. 5.15 – Visualisation du maillage utilisé

Le tableau 5.4 donne certaines précisions concernant les maillages utilisés ainsi que les temps de calcul nécessaires à l'obtention des résultats. Nous pouvons en déduire que le pas de temps doit être de 10^{-2} s. Les paramètres par défaut pour l'équation de Folgar et Tucker sont donnés dans le tableau 5.5.

Type de maillage	Nbr de noeuds	Nbr d'éléments	tps de calcul	Nbr d'incréments
Maillage de référence	10471	52000	2 h 12 min 37 sec	287
Maillage grossier	4249	19048	0 h 48 min 44 sec	257
Maillage fin	17974	91238	4 h 48 min 05 sec	338

TAB. 5.4 – Informations sur la taille des maillages et sur les temps de calcul.

Paramètres du modèle d'orientation	Valeur
orientation initiale	isotrope 3d
équation de fermeture	quadratique
coefficient d'interaction	0.001
rapport de forme	8.8
N_p, N_s	0

TAB. 5.5 – Paramètres utilisés pour le modèle de Folgar et Tucker

b) Influence du maillage

Le calcul est arrêté à 98 % du remplissage et l'étude consiste à comparer les résultats obtenus pour la première composante du tenseur d'orientation, pour chaque échantillon (P_1 , P_2 , P_3 et P_4) et pour les trois maillages (Figures 5.16 et 5.17).

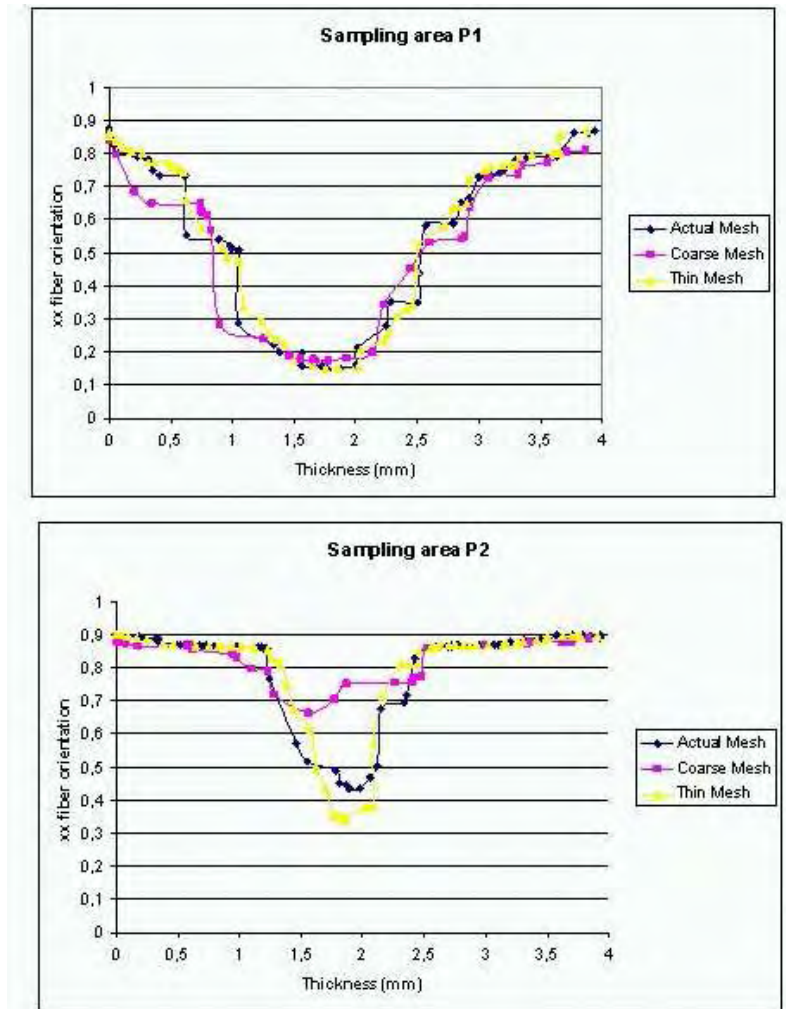


FIG. 5.16 – Influence du maillage sur la composante a_{xx} du tenseur d'orientation aux points P_1 et P_2

Les résultats révèlent que la zone de coeur caractérisée par une orientation des fibres transverse à la direction d'écoulement est la plus sensible à la qualité du maillage. Plus le maillage est fin, plus la composante a_{xx} dans la zone de coeur est faible. Ce qui est assez logique car une approximation P_0 donne la valeur moyenne par élément et plus l'élément est grand plus cette valeur va être importante dans la zone de coeur. Au fur et à mesure que l'on s'éloigne de la zone d'alimentation (c'est à dire pour les zones d'analyse P_3 et P_4) la valeur minimale de a_{xx} augmente et la zone de coeur finit par disparaître. Cette tendance est plus marquée pour les maillages les moins fins. Cela peut s'expliquer par la nature de l'équation d'évolution de l'orientation de fibres qui transporte les orientations précédemment calculées. L'erreur d'interpolation obtenue dans la zone d'analyse P_2 du fait de l'utilisation d'un maillage grossier se répercute alors dans les zones avals.

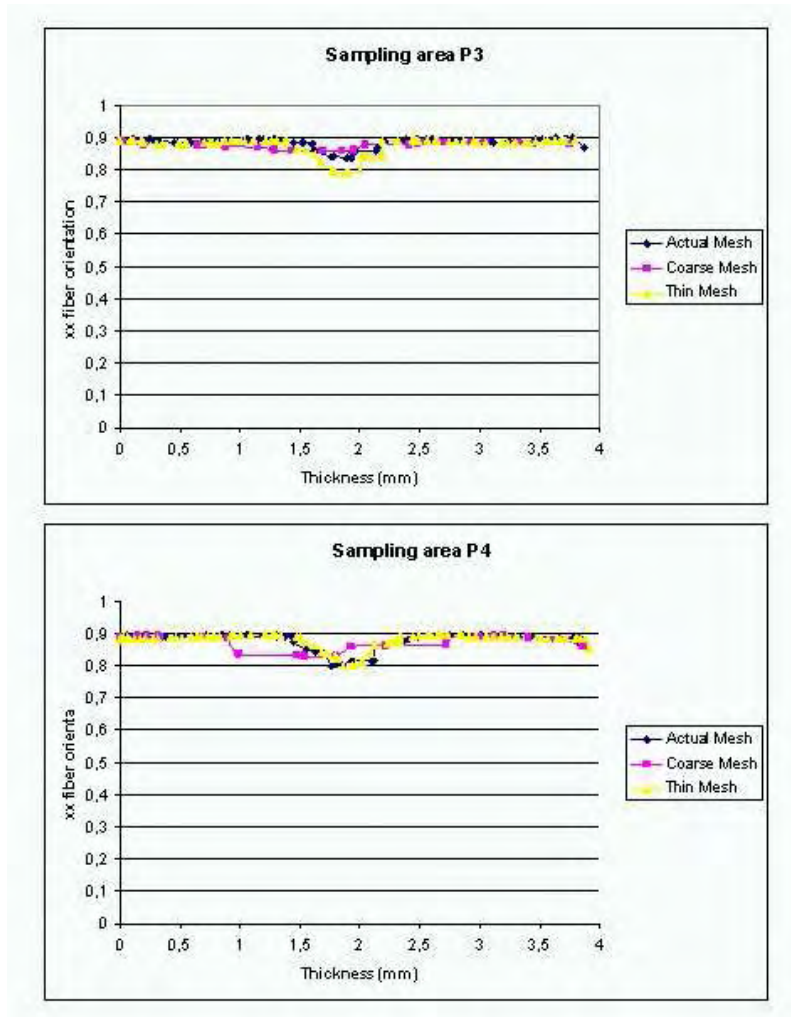


FIG. 5.17 – Influence du maillage sur la composante a_{xx} du tenseur d'orientation aux points P_3 et P_4

Notons, cependant, que le maillage n'a pas d'incidence sur la taille de la zone de coeur mais plutôt sur la valeur minimale de a_{xx} , donc sur l'état d'orientation des fibres dans cette zone.

Les résultats montrent, en outre, que près du seuil d'injection l'influence du maillage est beaucoup moins marquée que dans les autres zones d'analyse ce qui tend une nouvelle fois à montrer que l'erreur d'interpolation croît au fur et à mesure que les orientations sont transportées.

En conclusion, la méthode utilisée pour la résolution de l'équation de Folgar et Tucker est certes robuste mais sensible à la finesse du maillage. Pour une bonne prédiction de l'état d'orientation des fibres, notamment dans des zones telles que les zones de coeur, il est nécessaire d'utiliser un nombre d'éléments dans l'épaisseur de la pièce conforme à la finesse des résultats attendus. Nous préconisons, pour une bonne représentativité de l'état d'orientation, d'utiliser au moins une dizaine d'éléments dans l'épaisseur de la pièce. Dans une optique d'optimisation des temps de calcul il est donc nécessaire d'utiliser un meilleur

anisotrope permettant de définir dans chaque direction des tailles de mailles différentes et d'optimiser ainsi le nombre d'éléments requis pour le calcul de l'orientation. A l'heure actuelle, des travaux sont en cours afin de mettre en place un solveur d'orientation *P1* qui s'affranchirait de la sensibilité des résultats au maillage.

c) Influence de la relation de fermeture

L'influence des équations de fermeture sur l'orientation des fibres a été largement traitée dans la littérature. Le module d'orientation de REM3D prend en compte diverses équations de fermeture issues de la bibliographie :

- les approximations simples telles que les équations quadratiques, linéaires et hybrides,
- les approximations à coefficients ajustables telles que la clôture Naturelle 2D ou encore la famille des équations orthotropes.

Sur cette même géométrie, nous avons également testé les relations de fermeture. Les résultats issus de ce stage [21] corroborent les tendances obtenues dans la littérature :

- l'orientation des fibres est sensible à l'équation de fermeture,
- l'équation de fermeture quadratique surestime l'orientation des fibres dans la direction d'écoulement,
- L'équation de fermeture hybride semble la plus appropriée, lorsque le coefficient d'interaction n'est pas connu.

5.4 La contraction plane 2D : le rôle du couplage

Afin de mettre en exergue l'influence de la présence des fibres sur la rhéologie, Lipscomb et *al.* [94] ont visualisé les lignes de courant dans une contraction 4,5 :1 axisymétrique. La suspension de fibres est alors composée d'une matrice newtonienne (sirop de maïs) et de fibres de verre de 3 mm de longueur et de 11 μm de diamètre. La figure 5.18 montre les lignes de courant photographiées avec une matrice non chargée, puis chargée à 0.045 % en volume de fibres. Nous constatons que les fibres, même à faible concentration, modifient considérablement la taille des recirculations. Ces observations expérimentales montrent clairement que l'écoulement du composite oriente les fibres ; la présence des fibres perturbe l'écoulement : les deux phénomènes sont couplés.

Afin de retrouver ce résultat classique de la littérature, nous avons considéré une contraction plane (Figure 5.19). La hauteur H du réservoir est de 10 mm alors que la filière aval présente une hauteur h de 1.25 mm, soit un rapport de hauteur de 8. La longueur L de la géométrie est de 40 mm. Nous avons, en outre, considéré une condition de symétrie sur l'axe $y = 0$.

Nous imposons en entrée ($x = -20$) un écoulement de Poiseuille caractérisé par un profil de vitesse parabolique défini comme suit :

$$\underline{V} = ((y - 10)(y + 10), 0)^T \quad (5.7)$$

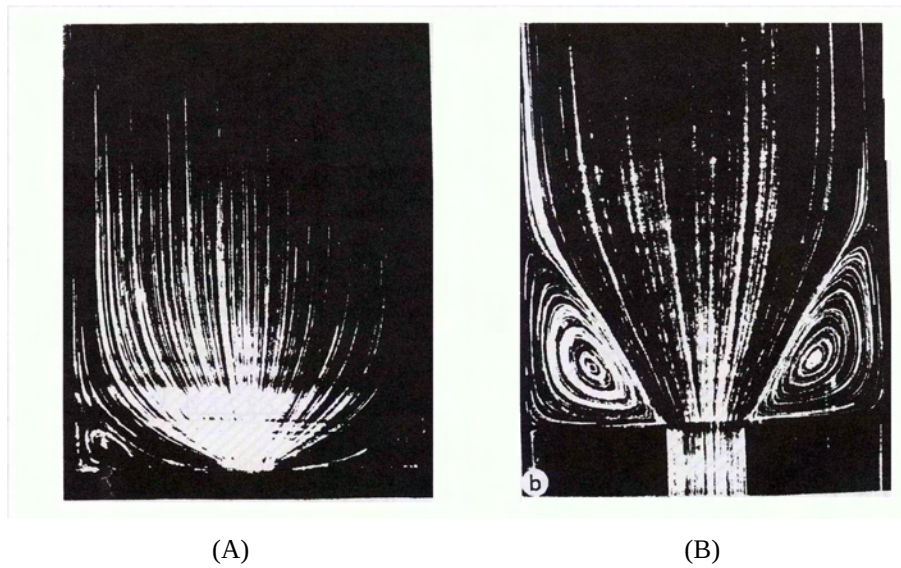


FIG. 5.18 – Lignes de courant dans une contraction : A sans fibres et B avec fibres.

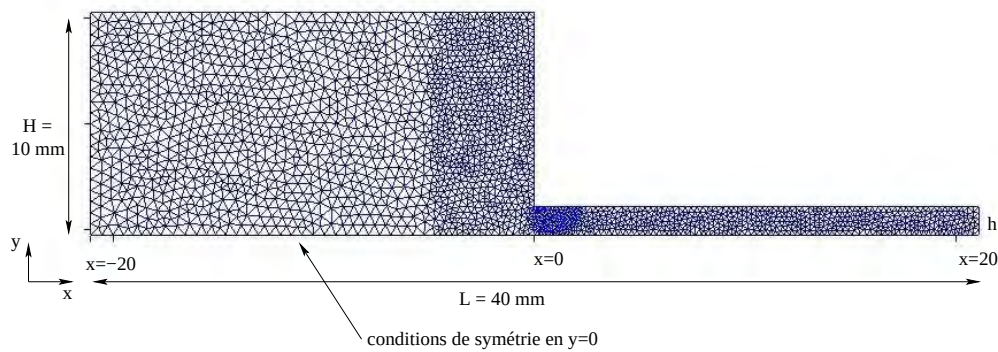


FIG. 5.19 – Maillage et géométrie de la pièce

Une condition de non glissement à la paroi est donc imposée. Nous avons considéré un fluide newtonien de viscosité $\eta = 1 \text{ Pa.s}$. Le pas de temps imposé est de 10^{-2} s et nous visualisons les résultats obtenus au bout de 1000 incréments (lorsque la solution en orientation est stable). Les données pour le calcul d'orientation sont résumées dans le tableau 5.6.

La figure 5.20 montre les lignes de courant obtenues au bout de 10 s d'écoulement. Les lignes de flux indiquent clairement une zone de recirculation au passage de la zone de contraction. Elles mettent de plus en évidence une augmentation de la vitesse au voisinage de l'axe de symétrie. Comme attendu, la taille de la recirculation augmente lorsque le couplage est pris en compte. Les résultats ainsi obtenus concordent, d'un point de vue qualitatif, avec ceux issus de la littérature.

La figure 5.21 présente les orientations de fibres obtenus au voisinage de la contraction. Là aussi, nous obtenons un résultat connu dans la littérature : en écoulement bidimensionnel, les fibres s'alignent avec les lignes de courant ($C_I=0$).

orientation initiale	isotrope
rapport de forme	100
coefficient d'interaction	0.001
équation de fermeture	quadratique
N_p	10

TAB. 5.6 – Données pour le calcul d'orientation

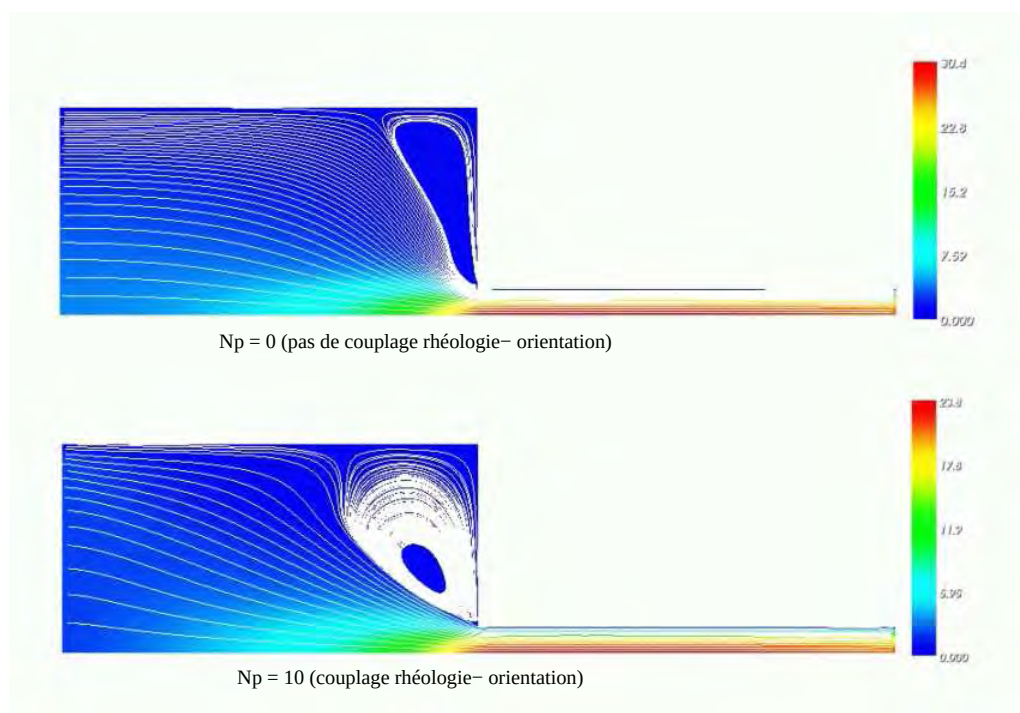


FIG. 5.20 – Lignes de courant à travers une contraction avec et sans couplage.

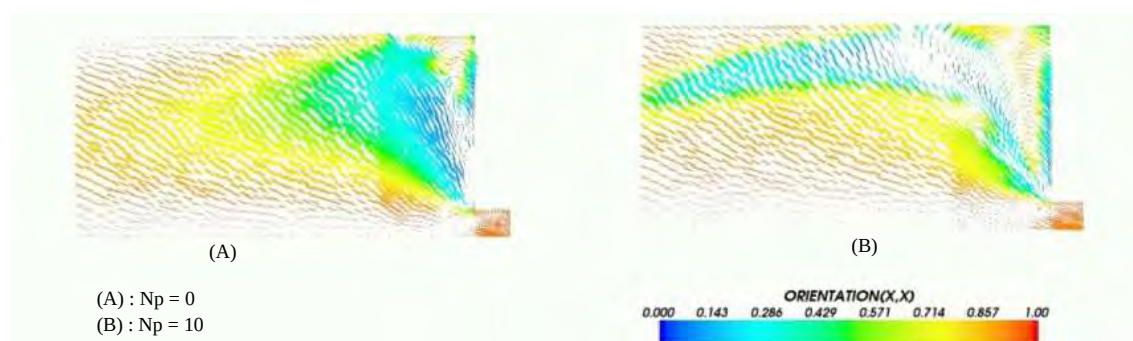


FIG. 5.21 – Orientation des fibres au voisinage de la recirculation

Un calcul similaire a été réalisé dans le cas d'une contraction 3D. Comme attendu, nous obtenons une augmentation de la taille de recirculation. Néanmoins, l'étude de la recirculation n'a pas été évidente en raison de l'analyse délicate des résultats 3D.

5.5 Injection d'un moule 3D : formation des lignes de soudure

Nous présentons, dans cette partie, certains résultats relatifs au remplissage de pièces 3d avec des intersections de front de matière. L'objectif de cette simulation est de tester notre capacité à prévoir les lignes de soudure en injection et en présence de fibres.

La figure 5.23 présente des orientations de fibres, modélisées sous forme d'ellipsoïdes en début de remplissage. Nous rappelons que sur chaque élément, nous calculons un tenseur d'orientation $\underline{a}_2$ qui peut être représentés par des ellipsoïdes. Les axes principaux de chaque ellipsoïde indiquent le sens préférentiel d'orientation. Plus l'ellipse est allongée, plus la probabilité d'obtenir une fibre orientée dans la direction principale de l'ellipse est élevée. Ainsi une orientation de fibres isotrope est définie par un sphéroïde. Enfin, les isovalues de chaque composante indiquent la probabilité d'obtenir une orientation de fibres dans la direction souhaitée. Nous rappelons que le domaine vide est caractérisé par un coefficient d'interaction important ($C_I = 10$) ce qui explique l'orientation sous forme de sphéroïdes. Cet artifice numérique ne présente aucun sens physique, mais cela nous a permis la résolution de l'équation de Folgar et Tucker dans tout le domaine (fluide et vide). Le vide étant ainsi caractérisé par des sphéroïdes.

Nous allons pouvoir ainsi visualiser l'influence de l'effet fontaine sur l'orientation des particules.

5.5.1 Géométrie et paramètres de calculs

Pour ce faire, nous avons considéré une pièce massive 3d comportant certains trous et dont les dimensions sont reportées sur la figure 5.22.

mm

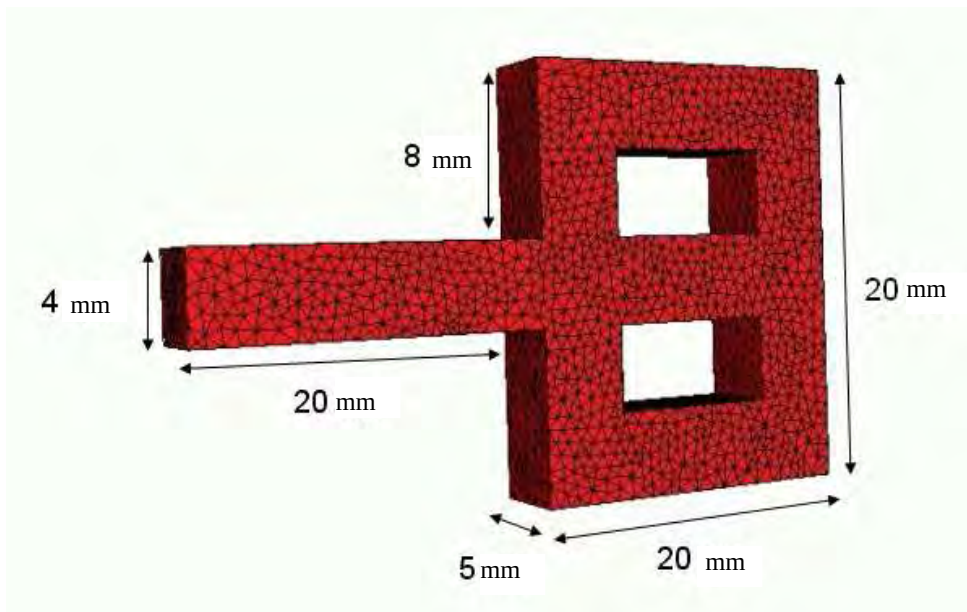


FIG. 5.22 – Maillage et géométrie de la pièce

Le maillage, obtenu via le mailleur anisotrope de REM3D ®, est composé de 55 398 éléments tétraédriques et 11 586 noeuds. Nous avons, en outre, pour une bonne représentativité de l'état d'orientation des fibres, considéré une dizaine d'éléments dans les deux directions x et y .

La pièce est injectée à un débit de $200 \text{ mm}^3/\text{s}$ (injection de gauche à droite). Les paramètres du fluide de l'équation de Folgar et Tucker sont ceux des tableaux 5.1 et 5.2. La température matière est de 260°C alors que la température du moule est de 30°C . Nous considérons, de plus, que le fluide est incompressible.

5.5.2 Résultats numériques

Comme le montre la figure 5.23, l'orientation des fibres est calculée dans tout le domaine. Le domaine vide est caractérisé par une orientation isotrope des fibres représentée par des sphéroïdes.

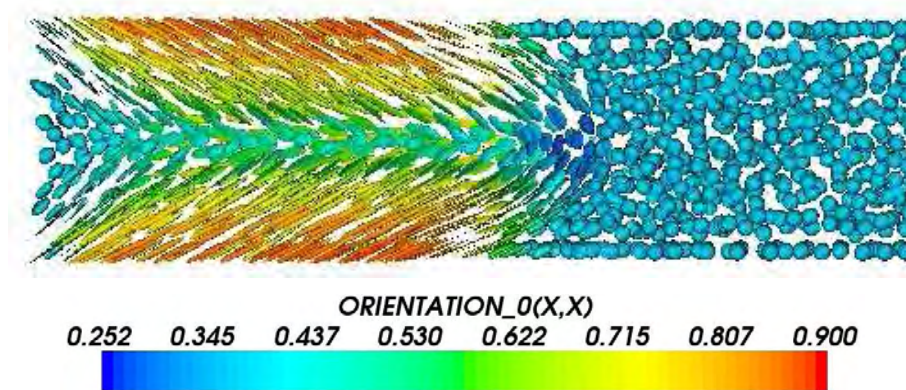


FIG. 5.23 – Orientation des fibres en début de remplissage

Les figures 5.24 et 5.25 présentent une coupe de l'orientation des fibres dans la mi-épaisseur de la pièce. Nous retrouvons une orientation des fibres classique :

- la première composante du tenseur d'orientation est plus élevée près des parois, où le cisaillement atteint sa valeur maximale : les fibres s'orientent dans la direction de l'écoulement.
- dans la zone centrale de l'écoulement, les fibres conservent plus ou moins l'orientation initialement attribuée.

Nous pouvons remarquer qu'au fur et à mesure de l'écoulement, cette structure à deux couches a tendance à disparaître.

Ce qui est intéressant, dans le cadre de cette étude, c'est la capacité de REM3D à gérer la collision de deux fronts de matière. Un second résultat intéressant est la visualisation des lignes de soudure qui apparaissent en fin d'écoulement. Au niveau des lignes de soudure, les fibres suivent les lignes de courant à l'interface fluide/air. Celles-ci sont localisées dans les coins en fin de calcul (cf. figure 5.26).

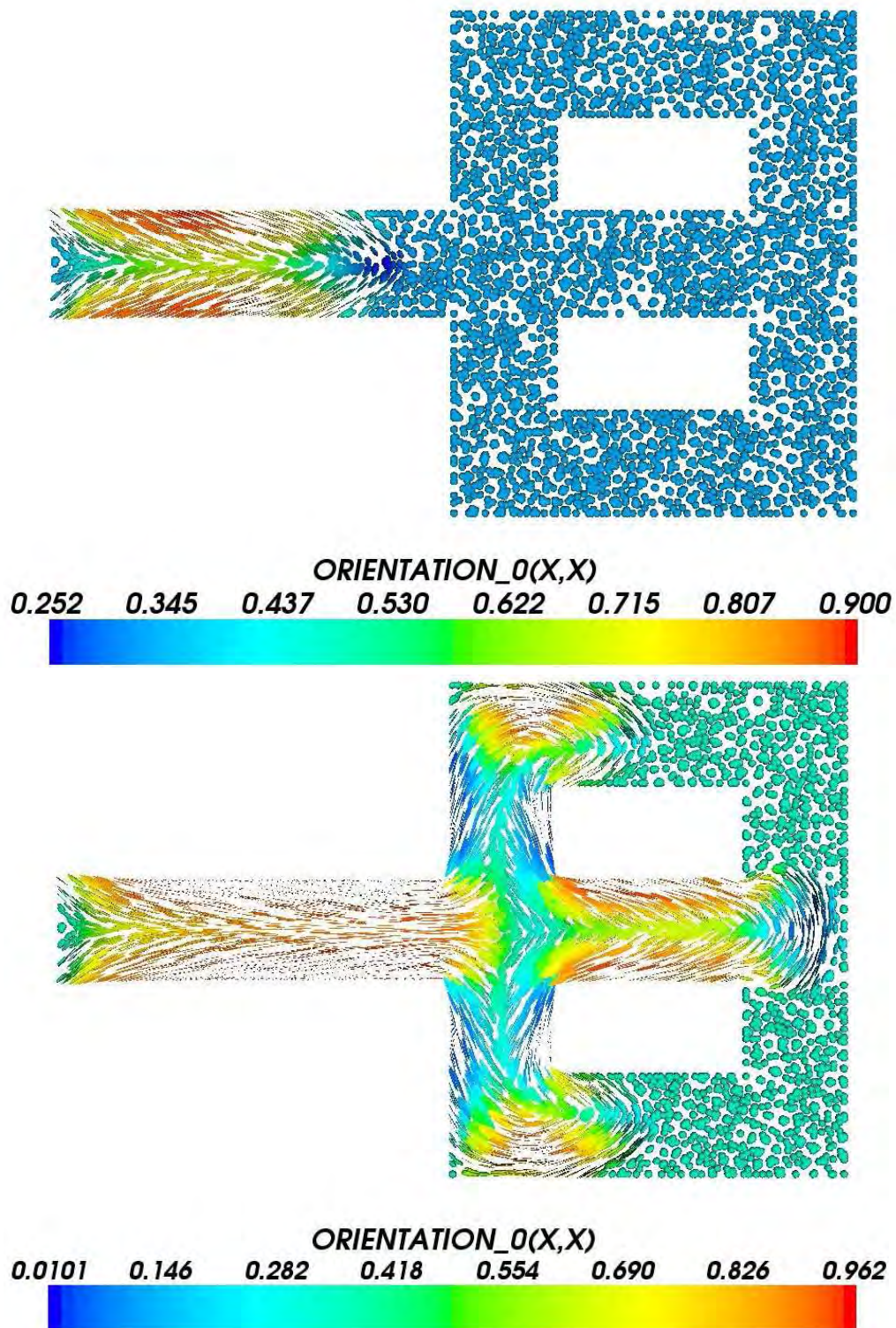
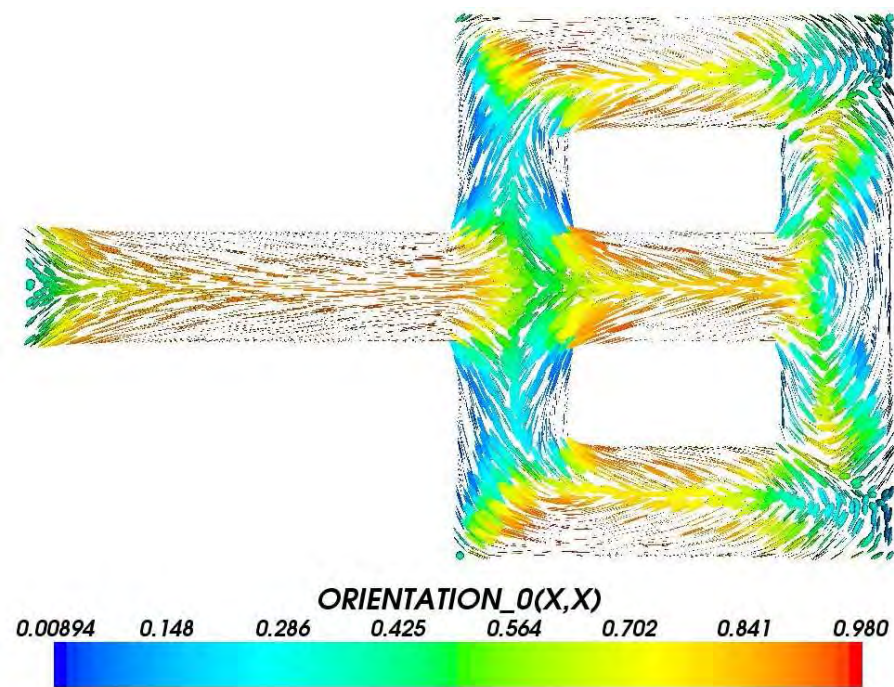
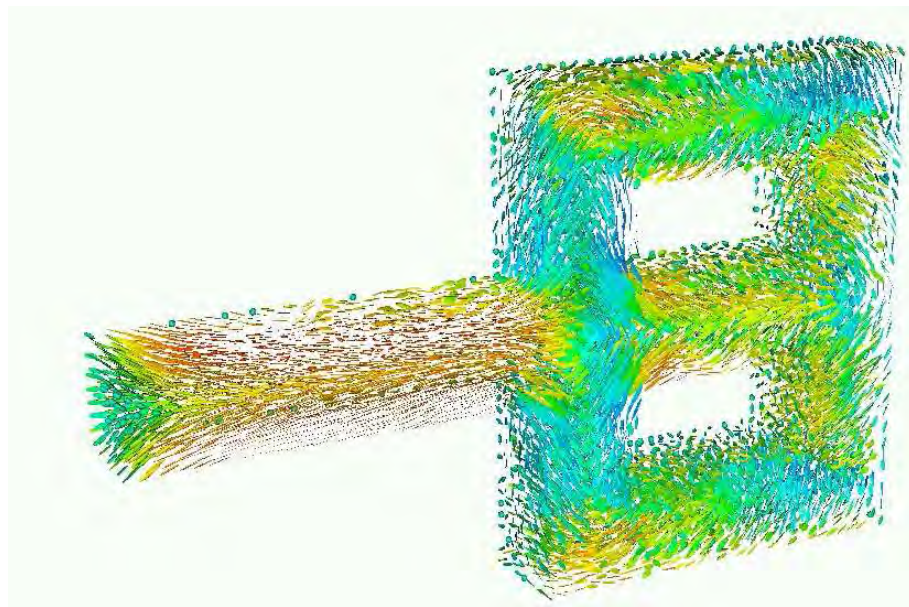


FIG. 5.24 – Composante a_{xx} du tenseur d'orientation à différents instants de remplissage

FIG. 5.25 – Composante a_{xx} du tenseur d'orientation en fin de remplissageFIG. 5.26 – Composante a_{xx} du tenseur d'orientation en fin de remplissage dans toute la pièce

5.6 La géométrie de type contraction-expansion

Nous avons choisi d'étudier une géométrie de type contraction-expansion. Cette géométrie est intéressante car elle peut représenter le seuil d'une pièce avec un divergent à la jonction seuil-cavité. Nous savons que les fibres vont être orientées dans le sens de l'écoulement dans la contraction et perpendiculaire à l'écoulement dans la partie expansion. Nous allons analyser l'influence du couplage, de l'effet rhéofluidifiant et de l'effet fontaine sur ce mécanisme d'orientation.

5.6.1 Géométrie et conditions initiales

Nous considérons dans cette section un écoulement élongationnel dans une géométrie de type contraction-expansion 3d. Les dimensions de la pièce sont données dans la figure 5.27. Nous avons défini deux plans de symétrie (les plans $(x, y, z = 4)$ et $(x, y = 0, z)$) afin d'avoir directement l'écoulement et l'orientation à l'intérieur de la pièce sur les faces de visualisation.

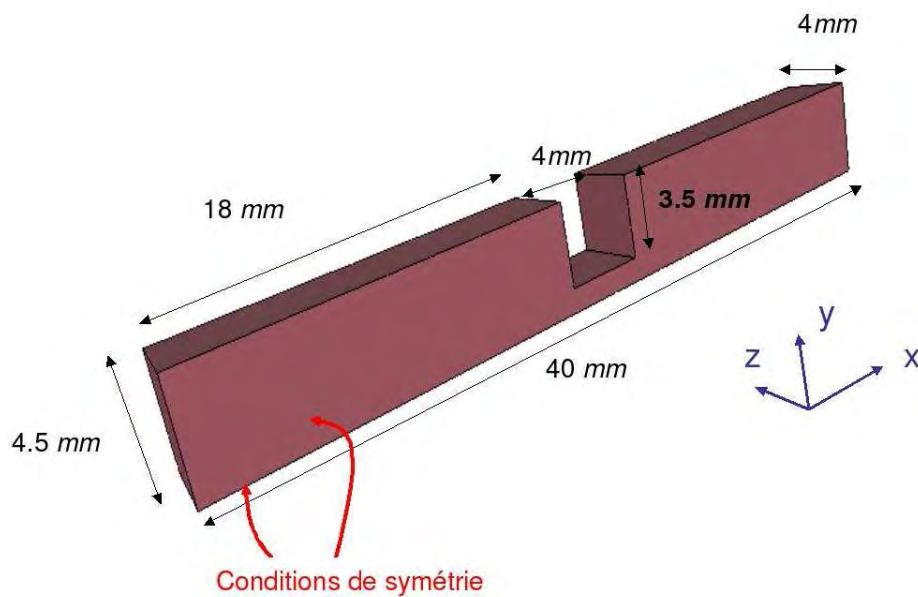


FIG. 5.27 – Géométrie de la contraction-expansion

Nous avons imposé en entrée (sur le plan $(x = 0, y, z)$) un débit de $600 \text{ mm}^3/\text{s}$. La température de la matière est de 230°C . Les calculs seront fait sans prendre en compte les effets thermiques. En injection, cette pièce se remplit en moins d'une seconde. Nous avons choisi un pas de temps de $\Delta t = .001$.

Le maillage anisotrope est composé de 40060 éléments tétraédriques et de 8540 noeuds.

5.6.2 Résultats pour un écoulement en extrusion

La figure 5.28 montre que nous avons essentiellement un écoulement de cisaillement dans la plus grande partie de la pièce. Les écoulements élongationnels sont concentrés dans une petite zone près de la contraction. La figure 5.29 montre clairement l'action de cet écoulement élongationnel : les fibres sont orientées verticalement dans la zone de recirculation avant la contraction ; les fibres sont alignées horizontalement dans la contraction ; il y a un désalignement des fibres après la contraction.

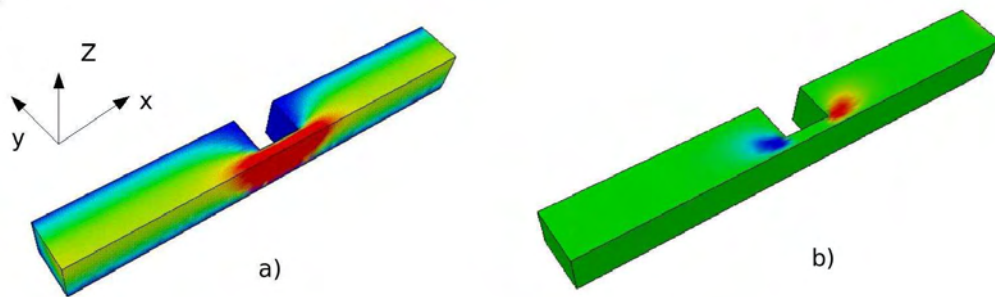


FIG. 5.28 – Isovaleurs du champ de vitesse pour un calcul en extrusion : a) vitesse horizontale v_x ; b) vitesse verticale v_y .

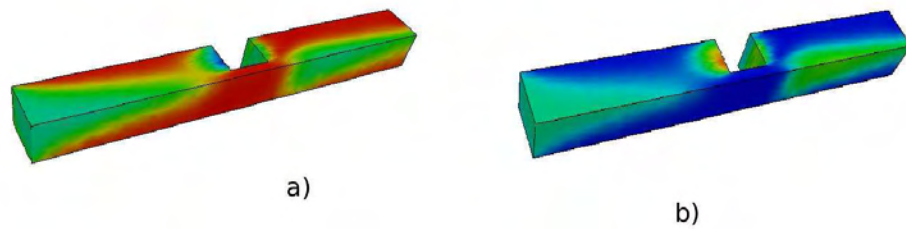


FIG. 5.29 – Isovaleurs du tenseur orientation (rouge = 1, bleu = 0) : a) composante a_{xx} ; b) composante a_{yy} .

Dans la suite nous allons étudier le rôle de l'effet rhéofluidifiant, du coefficient C_I et du couplage sur l'orientation dans la deuxième partie de la filière. Ce qui se passe dans la première partie de la filière a été étudié dans les chapitres concernant l'étude de l'écoulement de Poiseuille et sur le rôle du couplage pour une contraction 2d.

Nous analyserons les résultats en traçant l'évolution dans la direction y du champ de vitesse et des composantes du tenseur orientation pour $(x = 21 \text{ mm}, z = 4 \text{ mm})$; $(x = 22.5 \text{ mm}, z = 4 \text{ mm})$ et $(x = 31 \text{ mm}, z = 4 \text{ mm})$. Ces lignes se situent respectivement dans la contraction, la sortie de la contraction et avant la fin de la filière.

a) Effet de la rhéologie de la matrice

Nous considérons le fluide pseudoplastique du tableau 5.1 mais en faisant varier l'indice de pseudoplasticité m entre 0.2 et 1. Nous nous intéressons à l'influence de ce paramètre sur l'état d'orientation des fibres. Les résultats sont rassemblés sur la figure 5.30.

Nous pouvons observer que :

- Pour $x = 21 \text{ mm}$, l'effet rhéofluidifiant a une influence sur la composante v_x . Néanmoins, toutes les fibres sont orientées dans le sens de l'écoulement puisque $a_{xx} \sim 1$.
- Pour $x = 22.5 \text{ mm}$ nous avons un écoulement élongationnel, il n'y a pas beaucoup d'influence de l'indice de pseudoplasticité m . Nous pouvons remarquer que près de la paroi, nous conservons l'orientation initiale car il n'y a pas d'écoulement (les composantes v_x et v_y sont nulles près du bord).
- Pour $x = 31 \text{ mm}$, nous nous trouvons après la zone d'expansion et nous retrouvons un écoulement de cisaillement. Les résultats montrent que l'indice de pseudoplasticité a une influence non négligeable sur la taille de la zone de coeur : celle-ci augmente lorsque l'indice m diminue.

Cette influence peut être directement reliée à l'effet rhéofluidifiant qui modifie le profil de vitesse (c.f. figure 5.30 pour $x = 31 \text{ mm}$). A la différence des résultats rencontrés pour le Poiseuille 2D (c.f. figure 5.7), l'orientation est isotrope à coeur. En effet, il n'y a pas de réorganisation de l'orientation en raison de l'écoulement élongationnel provenant des conditions aux limites.

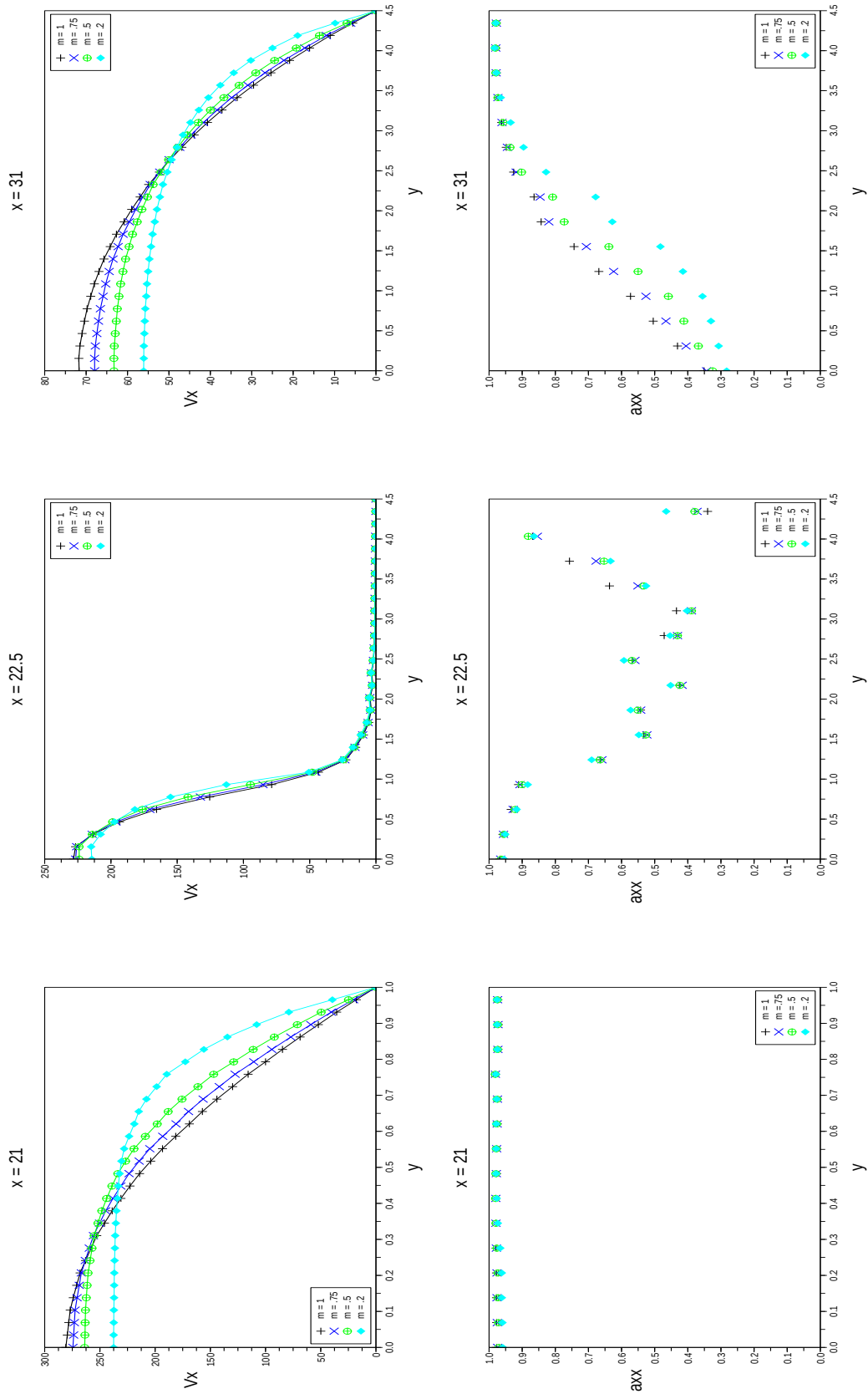


FIG. 5.30 – Influence de l'indice de pseudoplasticité m sur la composante a_{xx} du tenseur d'orientation et sur la composante v_x du champ de vitesse pour $x = 21$, 22.5 , 31 mm et $z = 4$ mm.

b) Influence du coefficient d'interaction

Nous présentons l'effet du coefficient d'interaction sur les résultats en orientation. La rhéologie du fluide est donnée au tableau 5.1 et nous faisons varier le coefficient d'interaction C_I entre 0 et 0.1. La figure 5.31 présente l'évolution de la composante a_{xx} en fonction de C_I .

Nous pouvons observer que :

- Pour $x = 21 \text{ mm}$, ce coefficient provoque un désalignement des fibres près de la paroi. Ce résultat a déjà été montré en présence d'un écoulement de cisaillement (cf. partie 5.3.1).
- Pour $x = 22.5 \text{ mm}$, l'influence de C_I est plus importante près du centre où l'écoulement élongationnel est le plus important.
- Pour $x = 31 \text{ mm}$, nous retrouvons une influence de C_I dans la zone de coeur et à la paroi.

Les résultats obtenus montrent que pour un écoulement élongationnel le coefficient d'interaction tend à orienter les fibres situées au coeur de l'écoulement dans la direction transverse à cet écoulement. En effet, plus le coefficient d'interaction est élevé, plus les fibres situées au coeur de l'écoulement sur la ligne médiane s'orientent dans la direction y tandis que les fibres périphériques restent à un état d'orientation isotrope.

Par conséquent en fin de filière, nous obtenons la conjonction de deux effets : au coeur nous retrouvons une orientation dans la direction y plus prononcée en raison de l'écoulement élongationnel ; à la paroi, l'orientation dans la direction x est moins prononcée en raison de l'écoulement de cisaillement.

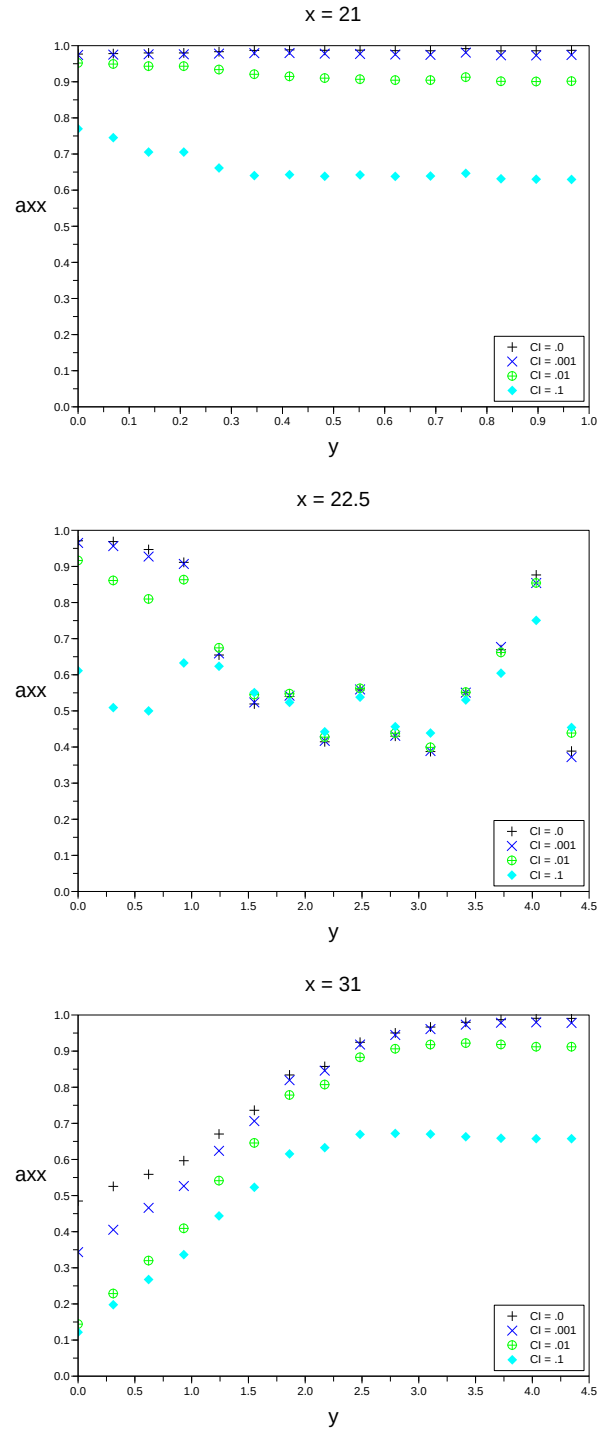


FIG. 5.31 – Influence du coefficient d'interaction C_I sur la composante a_{xx} du tenseur d'orientation pour $x = 21, 22.5, 31$ mm et $z = 4$ mm.

c) Le rôle du couplage rhéologie-orientation

Nous présentons, dans cette section, l'effet du paramètre de couplage N_p sur les résultats en orientation. L'étude bibliographique a montré que l'augmentation de ce coefficient peut traduire une augmentation de la fraction volumique ou du rapport de forme des fibres. Dans la suite la rhéologie du fluide est donnée par le tableau 5.1 et nous faisons varier le coefficient de couplage N_p entre 0 et 200. Nous présentons dans la figure 5.32 les isovalues pour la composante a_{xx} pour 0.37 s d'écoulement et différentes valeurs de N_p .

La figure montre que la présence du couplage modifie l'état d'orientation des fibres :

- Dans la première cavité de la pièce, nous constatons un élargissement de la zone de coeur lorsque N_p augmente. Dans le même temps, plus N_p est grand, plus la valeur minimale atteinte par a_{xx} est faible ce qui montre que le couplage rhéologique contraint les fibres situées dans la zone de coeur à s'orienter dans la direction transverse à l'écoulement. De plus l'orientation des fibres, dans la zone située juste en amont de la restriction au niveau de la zone de recirculation est différente. Le modèle couplé prévoit une orientation des fibres plus hétérogène que le modèle découplé.
- Dans la deuxième cavité de la pièce, la zone centrale de l'écoulement est moins étendue en présence du couplage. Plus N_p augmente moins la zone de coeur est longue. Plus la valeur de N_p augmente plus la zone de coeur est large.

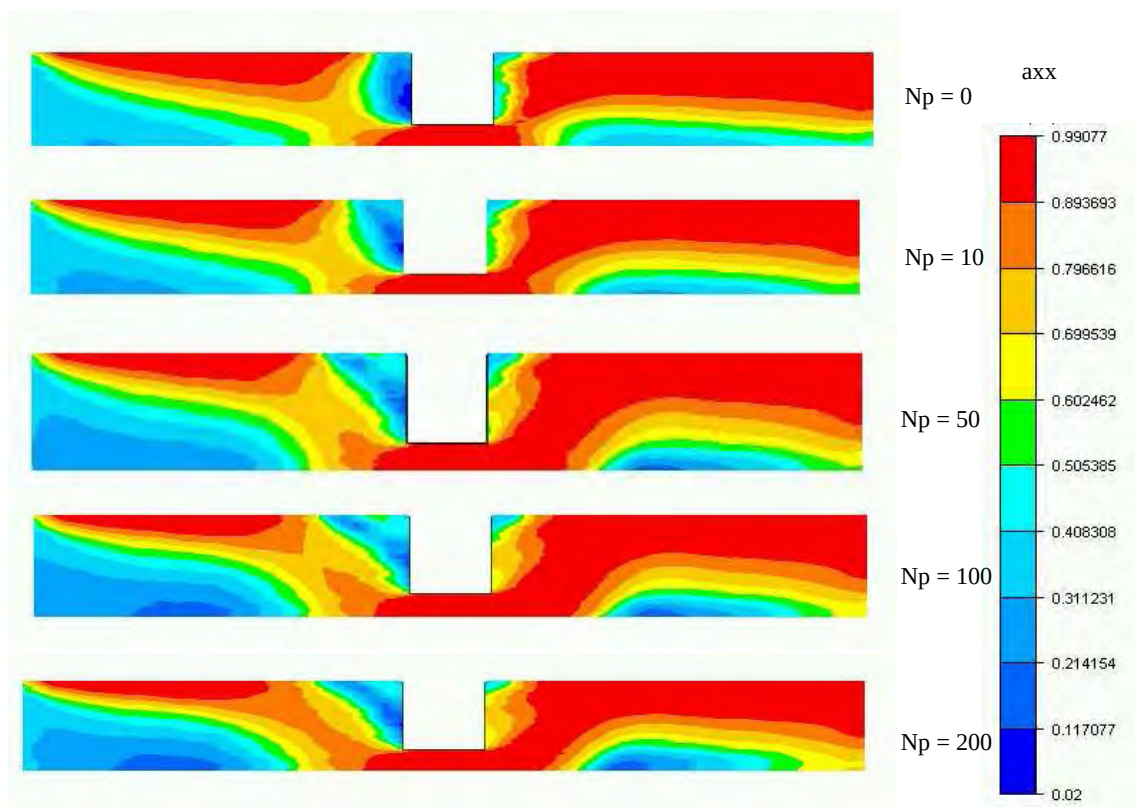


FIG. 5.32 – Évolution de l'orientation des fibres pour différentes valeurs de N_p

Ces observations peuvent être complétées en regardant plus précisément l'évolution de la vitesse et du tenseur d'orientation pour différentes valeurs de x . Cela va nous permettre de faire des comparaisons avec les résultats issus des parties précédentes. Les résultats sont rassemblés sur la figure 5.33 et nous pouvons établir les remarques suivantes :

- Pour $x = 21 \text{ mm}$ dans la contraction, il n'y a aucune influence de N_p sur la vitesse et l'orientation des fibres.
- Pour $x = 22.5 \text{ mm}$, nous pouvons observer que le couplage agit sur le champ de vitesse de la même façon que l'indice de pseudoplasticité m . Cependant l'orientation près de la paroi est différente car il y a une zone où la composante a_{xx} est plus grande dans le cas couplé.
- Pour $x = 31 \text{ mm}$, nous avons une modification du champ de vitesse avec la création d'un écoulement bouchon. Pour l'orientation, nous n'observons aucune modification près de la paroi. Cependant la simulation prévoit une légère augmentation de la zone de coeur. De plus le minimum au coeur est plus petit que la valeur isotrope $1/3$.

Après comparaison des figures 5.33 et 5.30 nous pouvons conclure que pour $x = 31 \text{ mm}$ le couplage agit un peu comme si il y avait un effet rhéofluidifiant : un écoulement bouchon se forme et la zone de coeur est plus grande. Dans le cas du couplage il y a une orientation plus importante dans la direction y car ce couplage modifie aussi l'orientation dans la région où il y a un écoulement élongationnel. Ce dernier point présente une différence par rapport à l'influence de l'indice de pseudoplasticité.

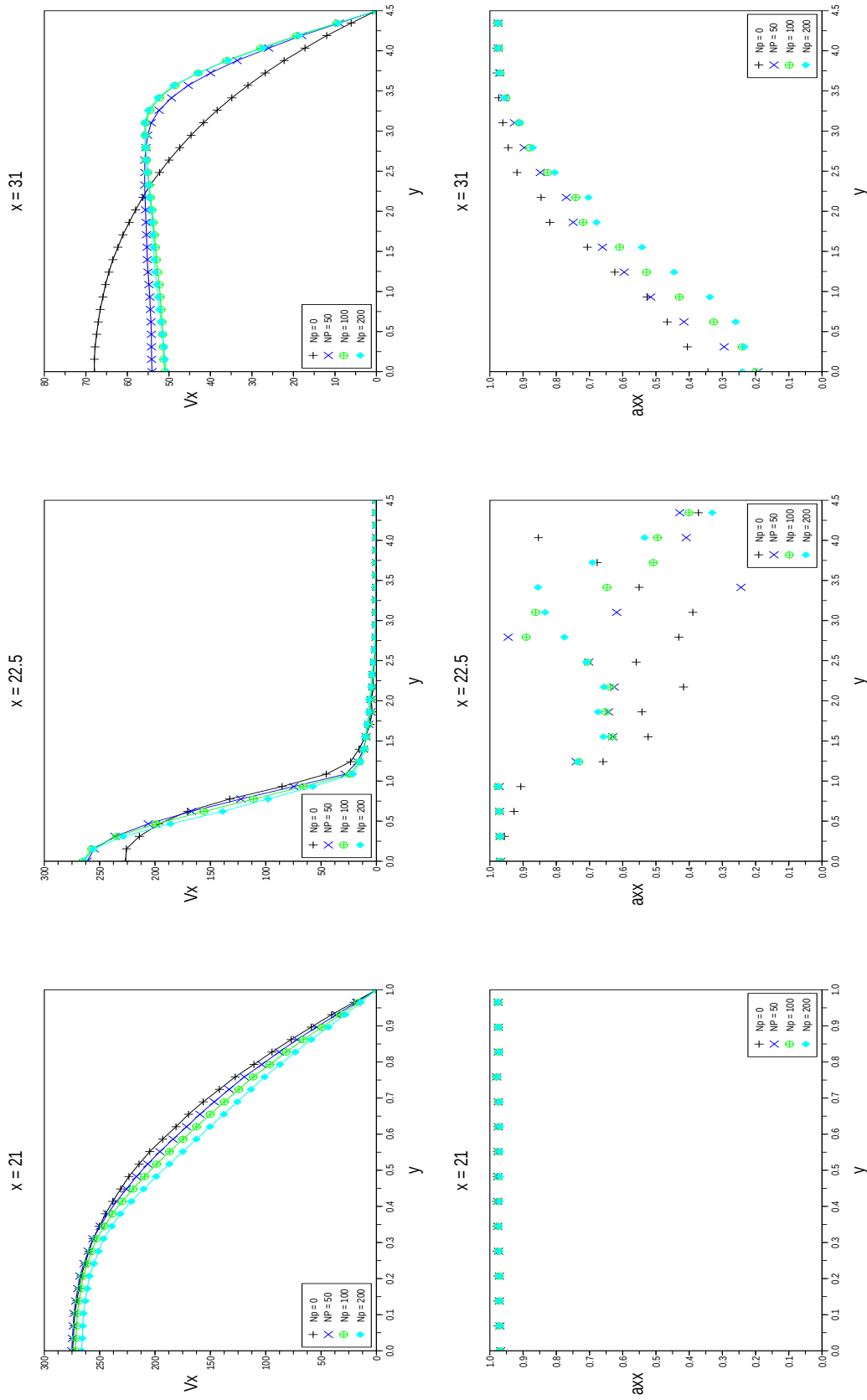


FIG. 5.33 – Influence de la valeur de N_p sur la composante a_{xx} du tenseur d'orientation et sur la composante v_x du champ de vitesse pour $x = 21$, 22.5 , 31 mm et $z = 4$ mm.

5.6.3 Écoulement d'injection

Les calculs que nous présentons dans cette section considèrent la même géométrie que précédemment ainsi que les mêmes conditions aux limites. Nous considérons, néanmoins, un écoulement d'injection. L'orientation des fibres est étudiée à la fin du remplissage du moule. L'écoulement d'injection va permettre de mettre en évidence le rôle de l'effet fontaine qui peut être important si la thermique est prise en compte notamment avec la solidification du polymère qui vient en contact du moule. Le mécanisme est le suivant : pendant la phase d'injection, une couche de polymère solidifiée se forme, en paroi, dans laquelle les fibres ne sont pas orientées de façon préférentielle. L'effet fontaine a un rôle majeur puisqu'il ramène la matière du centre vers les parois froides du moule où les fibres vont être figées avec une orientation désordonnée. L'épaisseur de cette couche va, bien évidemment, dépendre de la vitesse de refroidissement du polymère.

Dans la suite, nous avons négligé les effets thermiques et nous avons préféré étudier le couplage entre la rhéologie et l'orientation des fibres. En effet le champ de vitesse perturbé par la présence des fibres peut avoir une influence sur l'évolution de la surface libre. Pour cela nous allons comparer les calculs pour des coefficients de couplage $N_p = 0, 50$.

a) Le rôle de l'effet fontaine

Durant le procédé d'injection, l'effet fontaine joue un rôle non négligeable en ce qui concerne l'orientation des fibres près du front de matière. La figure 5.34 présente l'évolution de cette surface libre à différents instants du remplissage ainsi que l'évolution de la première composante du tenseur d'orientation. Le polymère est caractérisé par une couleur rouge alors que le vide est représenté en bleu.

L'effet fontaine, comme le montrent les figures 5.34 et 5.35 a pour effet d'orienter les fibres perpendiculairement à la direction d'écoulement au niveau de la surface libre ($a_{xx} \sim 0$). En effet, sur l'axe de symétrie de la géométrie, la valeur de a_{xx} diminue lorsque nous nous rapprochons de la surface libre ; les fibres s'orientent dans une direction perpendiculaire à la direction d'écoulement (a_{yy} croît). L'effet fontaine crée ainsi un écoulement divergent au voisinage de la surface libre.

En retrait du front, le cisaillement est majoritaire en paroi et oriente ainsi les fibres dans la direction d'écoulement.

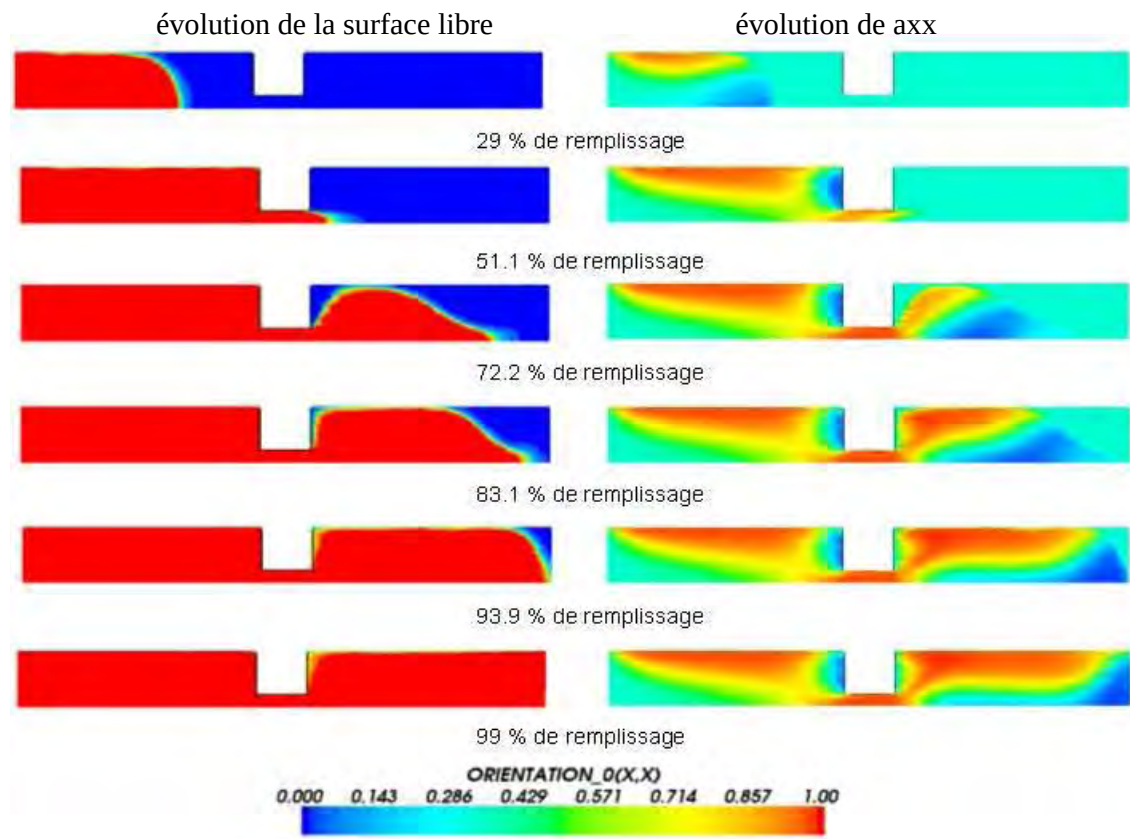


FIG. 5.34 – Remplissage 3d d'une géométrie de type contraction-expansion et évolution de l'orientation de fibres

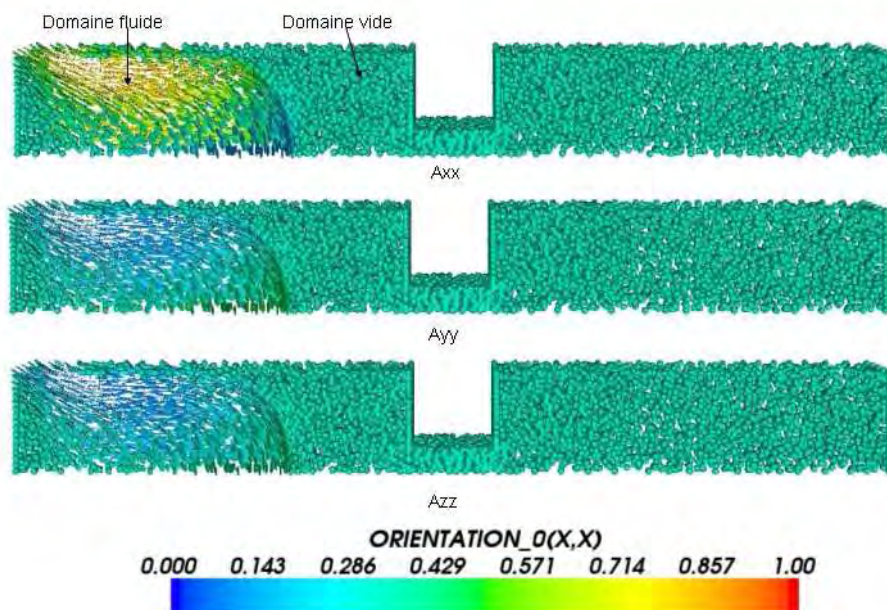


FIG. 5.35 – Orientation 3d au bout de 29 % de remplissage : effet fontaine

b) Le rôle du couplage

La figure 5.36 présente, pour différents instants de remplissage, l'évolution de la surface libre pour le modèle couplé et découplé. Les résultats montrent qu'en présence des fibres, la forme et la position de la surface libre n'évoluent pas de manière similaire au cas non couplé. En présence de couplage, le fluide a dans les zones de cisaillement un comportement plus "rhéofluidifiant" et cela modifie le déplacement du front de matière. Cette observation est en parfait accord avec les observations expérimentales issues de la bibliographie.

En revanche, nous constatons, à la sortie de la contraction, un léger gonflement de la surface libre. Ce résultat contredit les observations expérimentales qui montrent qu'en présence de fibres, le gonflement en sortie de filière diminue, en raison de l'augmentation de la première différence de contrainte normale. Les résultats numériques peuvent être attribués à la loi de comportement des matériaux chargés qui ne rend pas compte des effets élastiques de la matrice.

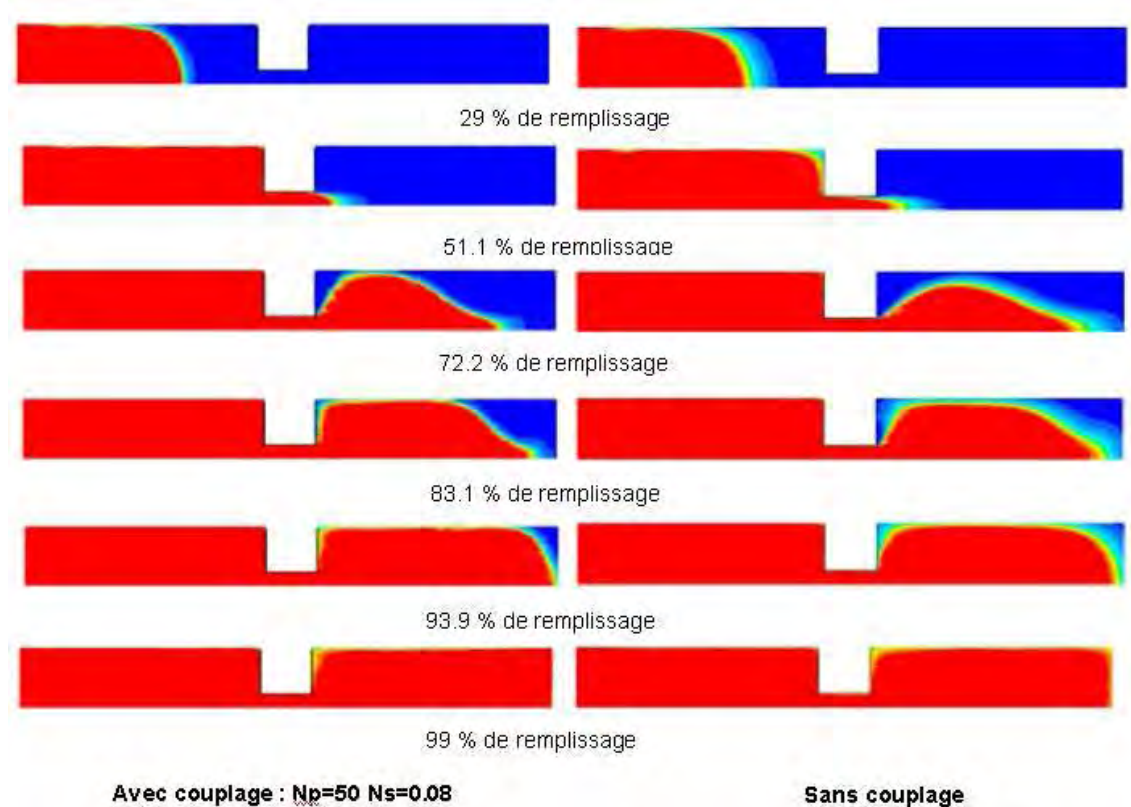


FIG. 5.36 – Influence du couplage sur l'évolution de la surface libre

En conclusion, nous pouvons dire que la présence du couplage rhéologie-orientation modifie la dynamique d'écoulement de la matière.

La figure 5.37 présente l'évolution de la composante a_{xx} , pour différents instants de remplissage. Nous confrontons, pour chaque instant de remplissage, les résultats issus du modèle découplé à ceux issus du modèle couplé. La dynamique d'écoulement de la matière n'étant pas la même, les évolutions d'orientation de fibres diffèrent quantitativement. Qualitativement, nous retrouvons des résultats similaires :

- en paroi de la pièce, les fibres sont orientées dans la direction d'écoulement. Toutefois, le modèle couplé propose, en fin de remplissage, une zone de peau plus longue que le modèle découplé. Ce résultat est dû à l'évolution de la surface libre qui, pour le modèle couplé, touche plus rapidement la paroi de la pièce et oriente ainsi les fibres dans la direction de l'écoulement.
- à coeur, les fibres ont une orientation préférentielle transverse à la direction d'écoulement. La taille de la zone de coeur semble être plus importante en présence du couplage. En outre, la zone de coeur, dans la première cavité de la pièce, est plus allongée pour le modèle couplé.

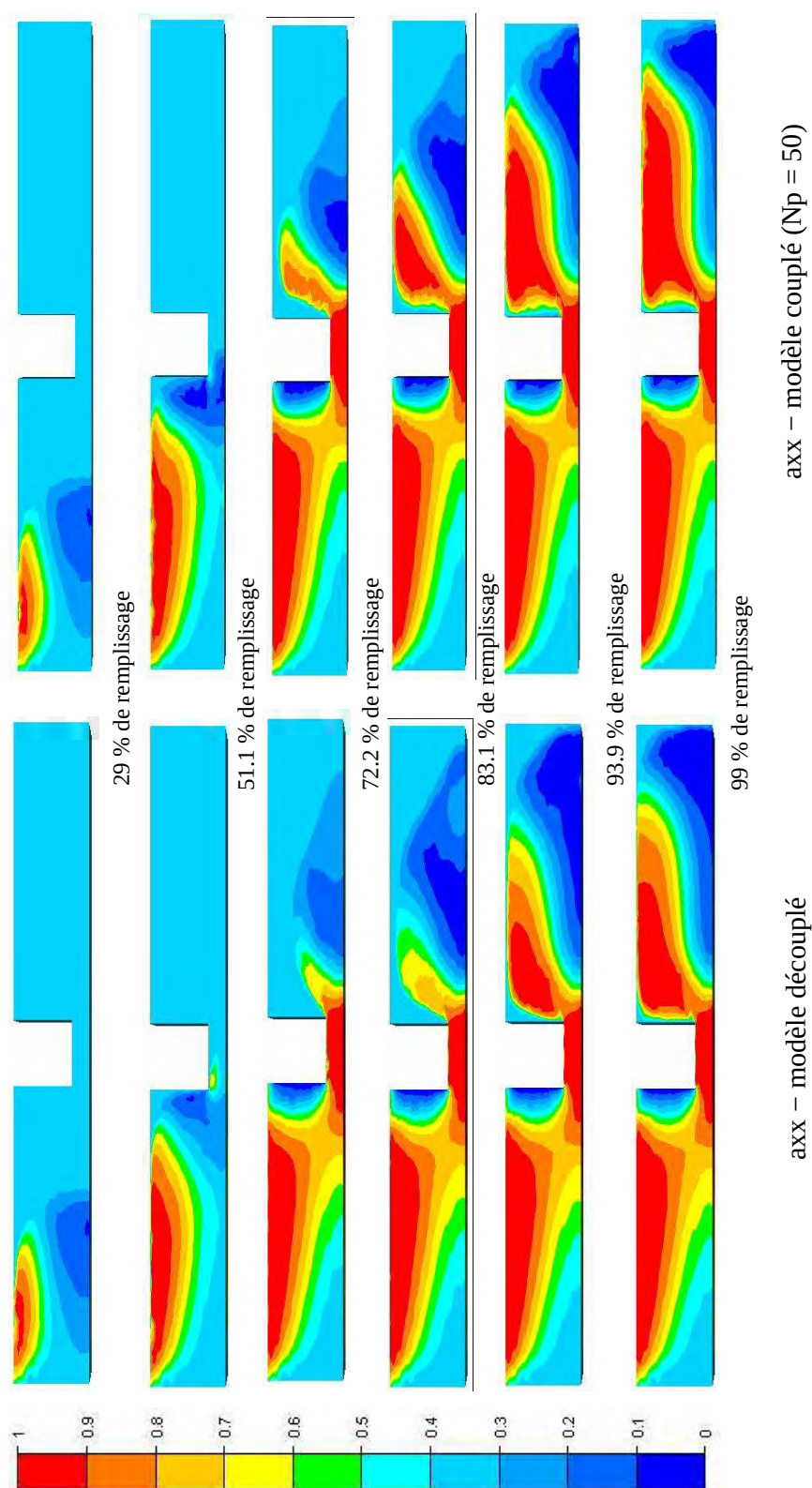


FIG. 5.37 – Orientation des fibres pour différents instants de remplissage
comparaison du modèle couplé et découplé

Qualitativement les deux modèles proposent donc les mêmes profils d'orientation. Cependant des différences subsistent d'un point de vue quantitatif : la zone de coeur, dans la première cavité de la pièce, ainsi que la zone de peau dans la deuxième cavité est plus allongée, pour le modèle couplé. Le modèle couplé propose une zone de coeur plus importante

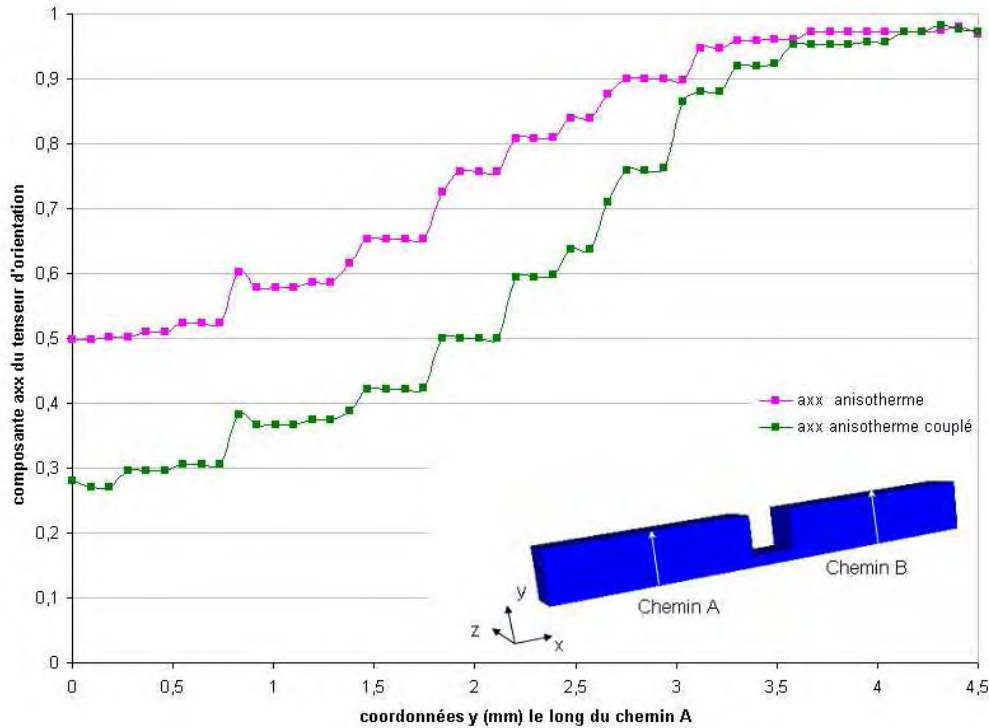


FIG. 5.38 – Composante a_{xx} du tenseur d'orientation le long du chemin A à la fin du remplissage : comparaison entre le modèle couplé et découplé

Nous présentons dans la figure 5.38 le profil d'orientation obtenu le long du chemin A situé dans le plan (x, y) en $z = 4 \text{ mm}$ et $x = 9 \text{ mm}$. Le calcul numérique prédit pour les deux modèles une zone centrale où les fibres sont moins orientées. Le modèle couplé prévoit une valeur minimale pour a_{xx} plus faible que le modèle découplé. Le modèle découplé a donc tendance, dans la zone centrale de l'écoulement, à orienter les fibres moins rapidement dans la direction de l'écoulement. Comme observé précédemment cela provient de la modification du profil de vitesse qui prend la forme d'un écoulement "bouchon" quand on augmente le couplage. La prise en compte du couplage rhéologique entraîne l'obtention d'une taille de zone de coeur plus importante.

Le même profil d'orientation est présenté, dans la figure 5.39, en $x = 31 \text{ mm}$, le long du chemin B. Les résultats obtenus montrent que :

- Au niveau de la paroi de la pièce, la présence du couplage augmente la valeur de a_{xx} . Ce résultat est dû à la dynamique d'écoulement, notamment l'évolution de la surface libre qui est différente en présence des fibres.
- La taille de la zone de coeur diminue en présence du couplage. De plus, la valeur minimale de a_{xx} augmente.

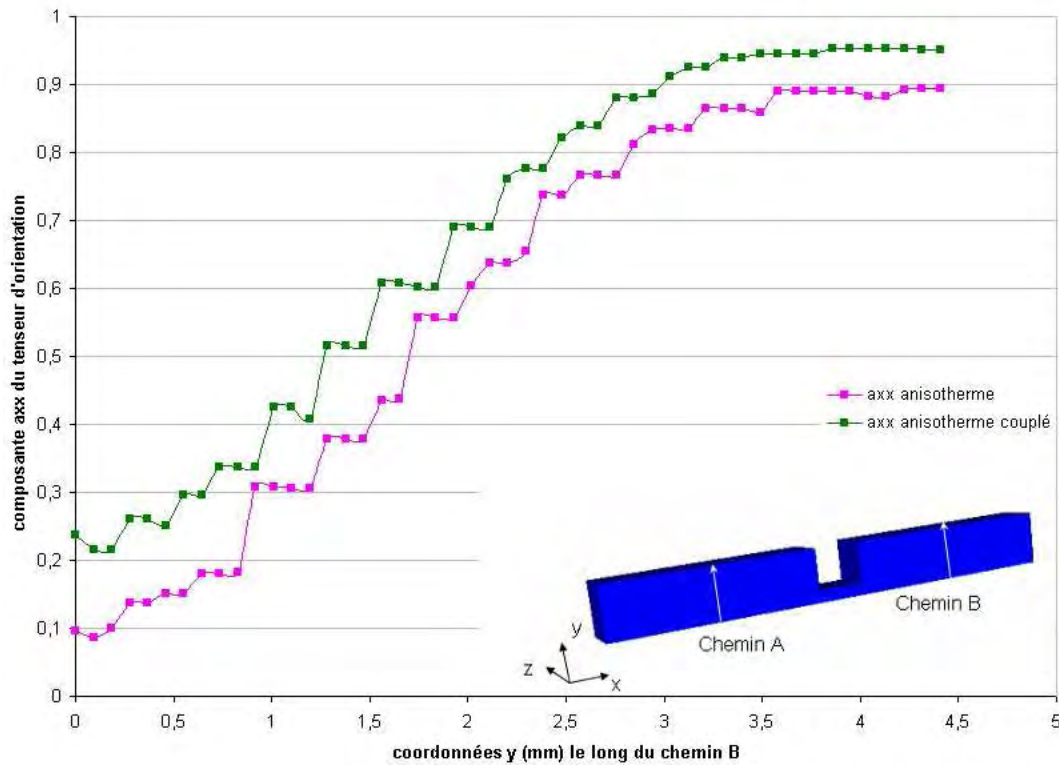


FIG. 5.39 – Composante a_{xx} du tenseur d'orientation le long du chemin B
Comparaison entre le modèle couplé et découplé

Les résultats obtenus, dans le cas de la géométrie de type contraction - expansion, montrent que le couplage en injection a une incidence sur la dynamique d'écoulement, notamment à travers l'évolution de la surface libre qui n'est plus la même, et conséquemment sur l'état d'orientation des fibres. D'un point de vue qualitatif, les résultats obtenus sont identiques. Néanmoins des différences quantitatives subsistent. Pour une bonne prédiction de l'état d'orientation des fibres, la prise en compte du couplage semble donc nécessaire.

c) L'orientation initiale des fibres

L'équation décrivant l'orientation est une équation de transport. Par conséquent la valeur initiale peut être importante car cette orientation initiale est transportée en même temps qu'elle est modifiée. La question est de voir si cette orientation initiale a une incidence sur l'orientation finale à la fin du remplissage. Notre étude va permettre de montrer l'influence de l'orientation initiale après passage dans la contraction.

Afin de déterminer l'influence de l'orientation initiale des fibres, nous avons naturellement considéré un couplage entre la rhéologie et l'orientation des particules. Pour ce faire, nous avons considéré une loi de comportement issue de la théorie des particules sphéroïdales faisant intervenir les paramètres Ns et Np ($Np = 50$ et $Ns = 0.08$).

La figure 5.40 présente l'évolution de l'orientation de fibres en considérant des orientations initiales différentes :

- une orientation initiale transverse à la direction d'écoulement : $a_{yy} = 1$, les autres composantes du tenseur d'orientation étant nulles,
- une orientation initiale isotrope dans le plan (x, y) : $a_{xx} = a_{yy} = \frac{1}{2}$, les autres composantes du tenseur d'orientation étant nulles.
- enfin, une orientation initiale isotrope 3d : $a_{xx} = a_{yy} = a_{zz} = \frac{1}{3}$ et a_{ij} pour $i \neq j$.

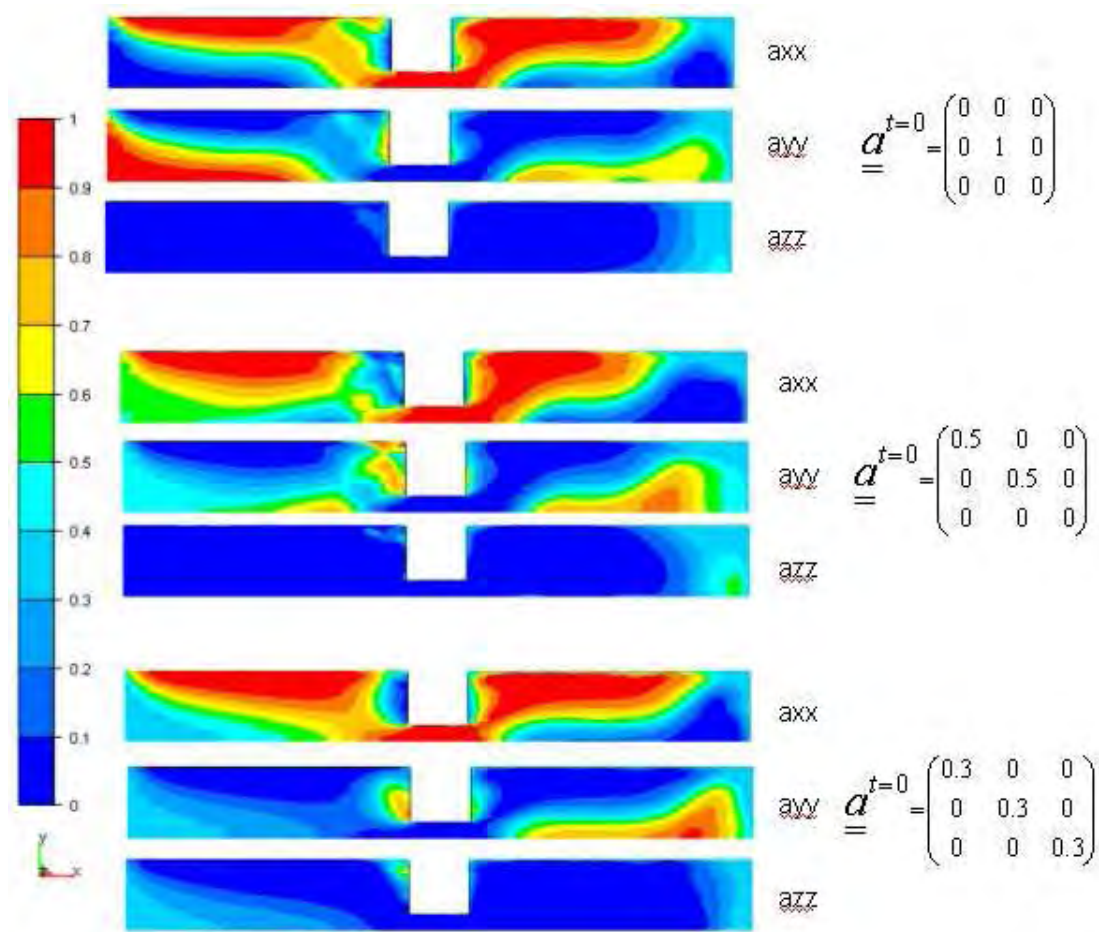


FIG. 5.40 – Influence de l'orientation initiale sur les composantes principales du tenseur d'orientation - Calcul couplé $N_p=50$, $N_s=0.08$

Les résultats montrent que dans la restriction les fibres s'orientent toutes dans la direction de l'écoulement. Par conséquent :

- en amont de la restriction l'orientation des fibres à coeur est gouvernée par l'orientation initiale des fibres,
- après passage de la restriction l'orientation des fibres à coeur est qualitativement la même quelle que soit l'orientation initiale choisie.

D'un point de vue quantitatif, des différences subsistent car les fibres n'ont pas toutes eu le temps de se réorienter. Nous avons lancé d'autres simulations dans le cadre d'écoulements en extrusion et avons considéré des cavités plus longues, sans restriction d'épaisseur. L'étude a montré qu'au bout d'une certaine longueur d'écoulement l'orientation des fibres est identique quelle que soit l'orientation initiale considérée.

En conclusion, nous pouvons dire que l'orientation initiale des fibres joue un rôle important dans les régions où le fluide a subi très peu de déformations car les fibres sont transportées et donc l' "effet mémoire" est relativement important. A partir du moment où la géométrie présente des variations abruptes créant un écoulement de cisaillement ou d'élongation relativement important, l'orientation initiale n'a pas une influence significative.

5.7 Conclusion

Nous pouvons établir un bilan concernant l'ensemble des simulations réalisées dans ce chapitre. La nouveauté par rapport aux études antérieures est la prise en compte combinée des effets 3D, du déplacement de l'interface, du comportement pseudoplastique de la matrice ainsi que du couplage rhéologie-orientation.

Pour l'effet fontaine, nous avons démontré notre capacité à calculer l'orientation des fibres sur le front de matière. Ce résultat est intéressant pour avoir l'orientation des fibres sur les lignes de soudure. Il est également possible de prévoir une modification de l'orientation près de la paroi si les conditions thermiques provoquent une solidification du fluide au contact du moule.

Un résultat intéressant est une certaine analogie entre l'orientation induite par l'effet rhéofluidifiant et celle provenant du couplage rhéologie-orientation si on a un écoulement de cisaillement. Cependant le couplage peut aussi modifier l'orientation pour un écoulement élongationnel. Nous avons également retrouvé un résultat assez connu à propos du coefficient d'interaction : ce coefficient impose l'orientation près de la paroi pour un écoulement de cisaillement. Ce résultat indique qu'il est possible de déterminer la valeur de ce coefficient à partir de l'expérience. Moins connue est l'action de ce coefficient sur l'orientation à coeur pour un écoulement élongationnel.

Enfin, une étude concernant l'influence du maillage sur le modèle d'orientation a révélé une certaine sensibilité de la solution au maillage utilisé. Pour une bonne prédiction de l'état d'orientation des fibres, notamment dans des zones telles que les zones de coeur, il est nécessaire d'utiliser un nombre d'éléments, dans l'épaisseur de la pièce, conforme à la finesse des résultats attendus. Ce résultat n'est pas étonnant, compte tenu du faible ordre d'interpolation en espace (interpolation $P0$) pour la résolution de l'équation de Folgar et Tucker. Un solveur $P1$ en espace pourrai s'affranchir de cette sensibilité au maillage, mais au prix de la robustesse de la méthode numérique utilisée.

Finalement les calculs sur la contraction-expansion ont pu démontrer notre capacité à calculer correctement l'orientation à la fin d'un écoulement élongationnel. Nous avons montré qu'il est important de prendre en compte correctement l'orientation initiale. En effet les orientations suivantes provoquées par des écoulements de cisaillement vont dépendre de cette orientation initiale. C'est particulièrement vrai pour les seuils d'injection. C'est ce que nous allons essayer de montrer dans le chapitre suivant où nous nous attacherons à étudier des applications industrielles.

Chapitre 6

Vers une application industrielle

C^E chapitre est consacré à l'application industrielle du module fibre mis en place dans le cadre de la thèse. Deux exemples seront traités, avec pour objectif la validation de l'outil numérique.

Le premier cas d'application concerne l'étude d'un seuil d'une plaque rectangulaire. L'objectif de cette étude est, outre de faire une corrélation avec les résultats expérimentaux issus de la mesure d'orientation de fibres, de mettre en évidence l'apport du couplage entre la rhéologie et l'orientation.

Le deuxième cas d'application concerne le remplissage d'une pièce que nous appellerons "la traverse", pièce type suggérée par Plastic Omnium comportant des parois minces et renforcée via un réseau de nervurage. Cette pièce est intéressante de par sa forme et sa géométrie, généralement rencontrée pour des pièces automobiles de type renforts ou poutres d'absorption au choc. La traverse révèle les problématiques généralement rencontrées sur pièces automobiles : épaisseur de pièce non constante en raison des dépouilles, présence de clips et de diverses lignes de soudure. Rem3D ® étant un logiciel d'injection 3D, nous tenons à préciser que la traverse ne constitue pas une géométrie idéale du fait de ses parois minces nervurées. Le calcul mené à bout sur ce type de pièce constitue à lui seul une validation des divers modules de Rem3D ®.

Sommaire

6.1	Un premier cas de comparaison : la plaque seuil	167
6.1.1	Géométrie du seuil et maillage	167
6.1.2	Matériau utilisé et condition d'injection	167
6.1.3	Zones d'analyses	169
6.1.4	Résultats numériques	170
6.1.5	Corrélation du code de calcul avec l'expérience	174
6.2	Application à une pièce automobile : la traverse nervurée . . .	178
6.2.1	Présentation du support de l'étude	178
a)	Le maillage	178
b)	Le matériau	179
c)	Les conditions initiales et aux limites	180
d)	La plateforme de calcul et temps cpu	180
6.2.2	Résultats de la simulation numérique	181
a)	Dynamique de remplissage de la traverse	181
b)	L'orientation des fibres	182
c)	Position d'une ligne de soudure	186
6.2.3	Corrélation du code de calcul à l'expérience	190
a)	Mesure d'orientation de fibres	190
b)	Comparaison au code de calcul	193
6.3	Autres études	196
6.4	Conclusion et perspectives	197

6.1 Un premier cas de comparaison : la plaque seuil

Les seuils d'injection constituent une géométrie d'étude fort intéressante dans la mesure où ils déterminent l'orientation des fibres en entrée de pièce. Les seuils d'injection entraînent, lorsqu'ils sont le siège d'élongation, la formation d'une zone de coeur caractérisée par une orientation de fibres transverse à la direction d'écoulement. Nous nous intéressons, dans cette partie, à l'influence du couplage rhéologie-orientation dans les seuils.

6.1.1 Géométrie du seuil et maillage

Dans une optique de confrontation entre des mesures expérimentales et les résultats numériques, nous avons choisi un seuil en nappe alimentant un moule plaque. Cette étude s'inscrit dans la continuité des résultats expérimentaux issus de la thèse de T. Giroud [71] complétés de l'étude de Vincent et al [140]. Le moule correspond à une empreinte rectangulaire de dimension 200 x 40 mm (Figure 6.1). L'épaisseur de la plaque est de 5 mm. Le seuil en nappe induit un écoulement unidirectionnel et ce dès le début de l'empreinte.

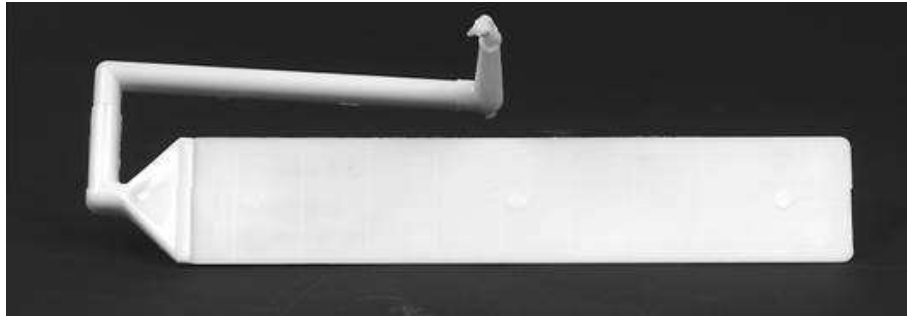


FIG. 6.1 – Photo de l'empreinte plaque et de son alimentation

Le maillage de la pièce a été obtenu via le mailleur anisotrope de Rem3d. Nous avons considéré un maillage fin au niveau du seuil d'injection (10 éléments dans l'épaisseur de la pièce). Un maillage grossier a été considéré pour le reste de la pièce car les résultats obtenus au niveau du seuil d'injection nous semblent les plus importants.

6.1.2 Matériau utilisé et condition d'injection

Le matériau étudié est un grade de polyarylamide chargé à 50% (en poids) de fibres de verre courtes (longueur 150 μm , diamètre 10 μm) fourni par la société Solvay (Ixef 1022). Le fluide utilisé dans les calculs suit une loi de Carreau-Yasuda pour la rhéologie et une loi d'Arrénus pour la thermo-dépendance.

$$\eta = \eta_0 [1 + (\eta_0 \frac{\dot{\gamma}}{\tau_c})^\alpha]^{-\frac{m-1}{\alpha}} \quad ; \quad \eta_0(T) = \eta_0(T_{ref}) \exp \left[\beta \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{ref}} \right) \right] \quad (6.1)$$

Sauf mentions contraires, les valeurs des coefficients apparaissant dans ces relations sont données dans le tableau 6.1.

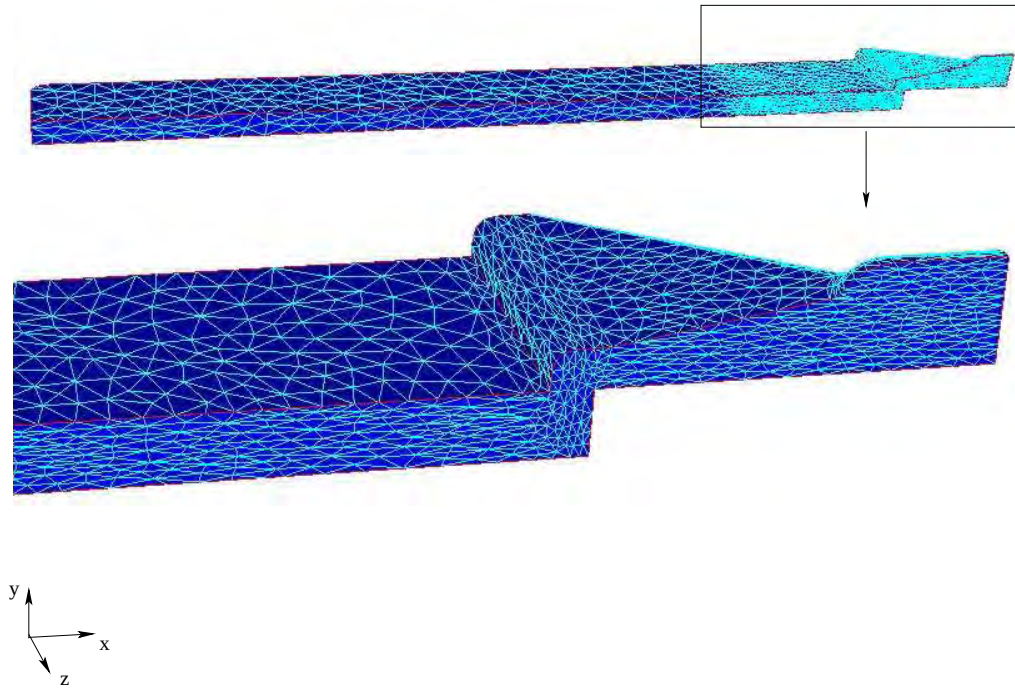


FIG. 6.2 – Maille de la plaque et du seuil d'injection

Rhéologie	Thermo-dépendance
$\eta_0 = 2.710^{-4} MPa.s$	température de référence = 275.85 °C
$m = 0.4$	$\beta = 7764 mole.K$
densité = 1 522 kg/m ³	conductivité = 0.3 W/m °C
$\tau_c = 0.0818 Pa$	chaleur spécifique = 2 180 J/kg °C
$\alpha = 0.55$	capacité calorifique = 1766 J/kg°C

TAB. 6.1 – Caractérisaton du polymère utilisé pour une loi Carreau Yasuda et une loi d'Arrhenius

La température du moule est de 130°C alors que la température d'injection est de 270°C. Le débit d'injection est de 15 cm³/s. Les données nécessaires pour le calcul d'orientation figurent dans le tableau 6.2.

Plusieurs simulations ont été lancées dans le cas non couplé ($N_s = N_p = 0$) ainsi que dans le cas couplé 6.2. Les valeurs de N_s et N_p ne sont pas basées sur des mesures. Le but était seulement de voir si ces paramètres avaient une influence sur l'orientation calculée et pouvaient permettre de mieux approcher les résultats expérimentaux. La détermination de ces paramètres nécessiterait une analyse inverse à partir de mesures de rhéologie capillaire et oscillatoire [120].

orientation initiale	isotrope
rapport de forme	10
coefficient d'interaction	0.001
équation de fermeture	hybride
N_p	100
N_s	0.08

TAB. 6.2 – données pour le calcul d'orientation de fibres

6.1.3 Zones d'analyses

Les différentes zones d'analyse choisies et leur distance par rapport à l'entrée du seuil sont indiquées sur la figure 6.3. Les positions A, B, C et D sont au milieu du seuil d'injection (coupe dans le plan (x, y) en $z = 0$). Les zones d'analyse font environ de 5 à 1.5 mm de large et d'épaisseur 5 mm. Toutes les coupes ont été effectuées dans le plan (x, y) .

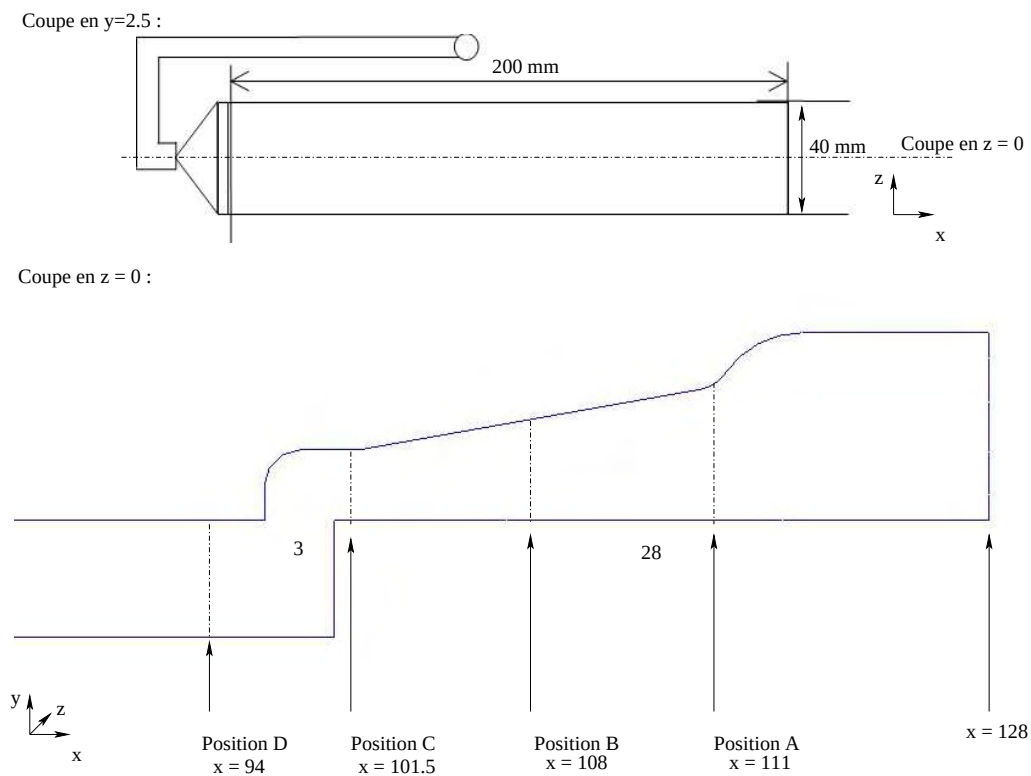


FIG. 6.3 – Géométrie du seuil et position des zones d'analyse

Les résultats expérimentaux ont été obtenus via une technique d'analyse d'image 2d [104]. La méthode consiste à observer la surface d'un échantillon, qui est au préalable polie. L'analyse de la surface se fait via un microscope électronique à balayage. L'orientation d'une fibre est alors décrite à partir de l'analyse d'image de l'ellipse formée par l'intersection du plan de coupe et de la fibre. Les fibres apparaissent sous forme de bâtonnets lorsqu'elles appartiennent au plan de coupe, ou sous forme d'ellipses lorsqu'elles forment un angle par rapport à ce plan.

Compte tenue de la méthode expérimentale, l'incertitude de mesure est relativement importante sur les valeurs des composantes du tenseur $\underline{a}_2$.

Dans la suite de cette section, nous lancerons deux simulations correspondants au cas non couplé et couplé. Nous confronterons les résultats numériques aux observations expérimentales obtenues à l'aide de la méthode précédente.

6.1.4 Résultats numériques

Les résultats numériques montrent que la composante a_{yy} du tenseur d'orientation est, dans la majorité des cas, négligeable devant les composantes dans les deux autres directions. La quasi totalité des fibres sont orientées dans le plan de la pièce, c'est à dire dans le plan (x, z) . Cet état d'orientation est principalement dû à la géométrie de la pièce et au type d'écoulement. En outre, les composantes a_{ij} lorsque $i \neq j$ sont très proches de 0. Le tenseur d'orientation étant unitaire, la donnée d'une seule des deux autres composantes permet ainsi d'en déduire la dernière ($a_{yy} \approx 0$ et $a_{zz} = 1 - a_{xx}$). La distribution de a_{xx} dans l'épaisseur de la pièce nous permet donc d'avoir une bonne représentation quantitative de la distribution d'orientation de fibres.

Nous présentons ci-après une comparaison qualitative entre les résultats numériques et une visualisation expérimentale, image obtenue via le microscope électronique à balayage. L'illustration 6.4 visualise des fibres dans deux coupes à l'entrée de la plaque injectée. Le résultat du calcul d'orientation dans la même région (composante a_{xx} et ellipsoïde) est tracé sur la figure 6.5 Ces figures montrent une bonne concordance des résultats d'un point de vue qualitatif.

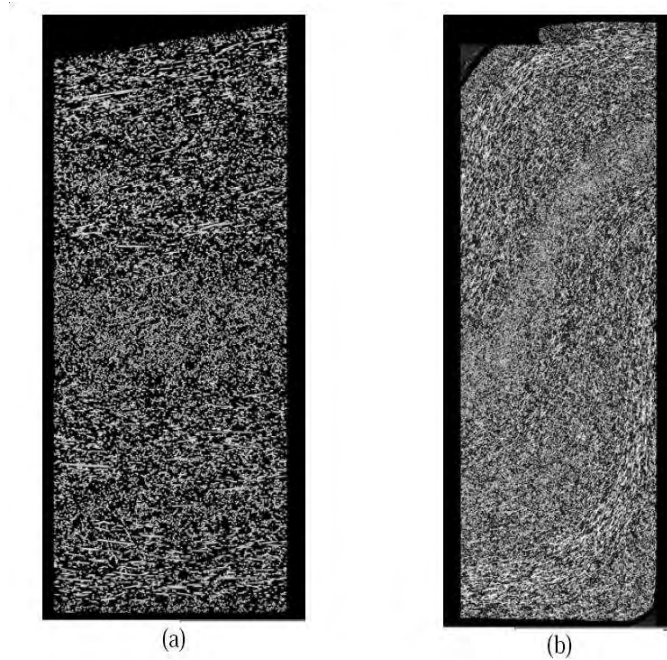


FIG. 6.4 – Observations expérimentales dans le plan (x, y) (a) dans zone d'entrée divergente et (b) dans la zone de jonction avec la plaque de 5 mm.

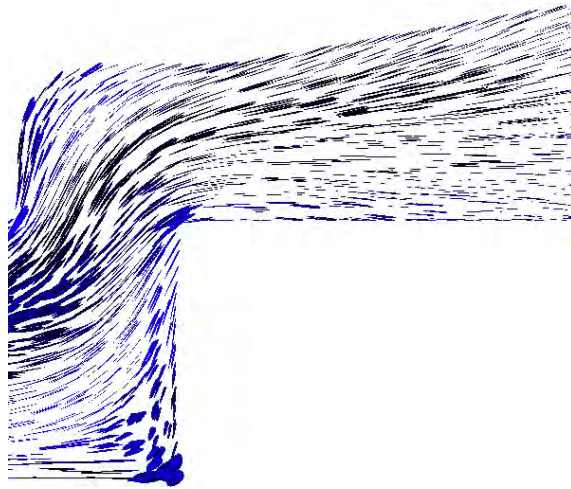


FIG. 6.5 – Ellipsoides représentant l'orientation des fibres dans le plan (x, y) de la zone d'entrée du moule. Calculs effectués sans couplage

La figure 6.6 présente les isovaleurs de a_{xx} , au niveau du seuil d'injection. Il s'agit d'une coupe dans le plan (x, y) en $z = 0$ dans les cas couplés et non couplés, à la fin du remplissage.

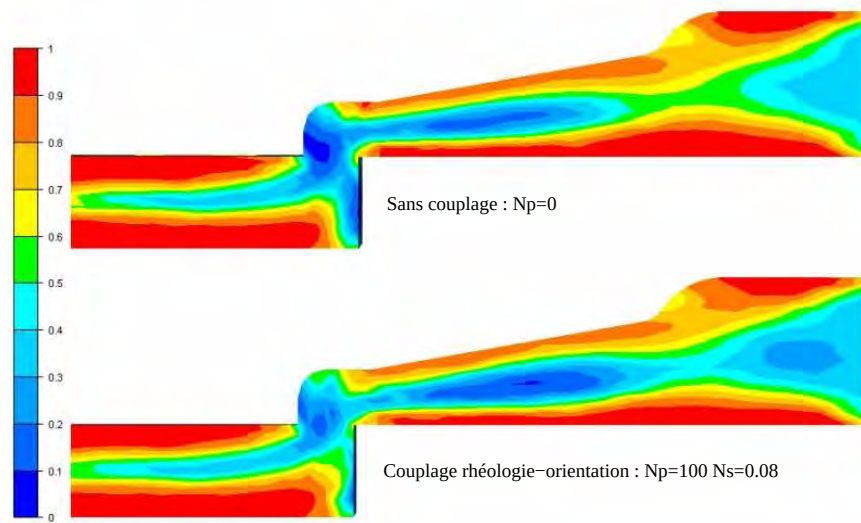


FIG. 6.6 – Isovaleur de la composante a_{xx} dans le plan (x, y) .

Qualitativement, les deux simulations donnent des résultats similaires. Nous observons :

- une couche en paroi du moule caractérisée par une orientation de fibres unidirectionnelle dans la direction d'écoulement,
- une couche centrale, siège d'une orientation transverse à la direction d'écoulement.

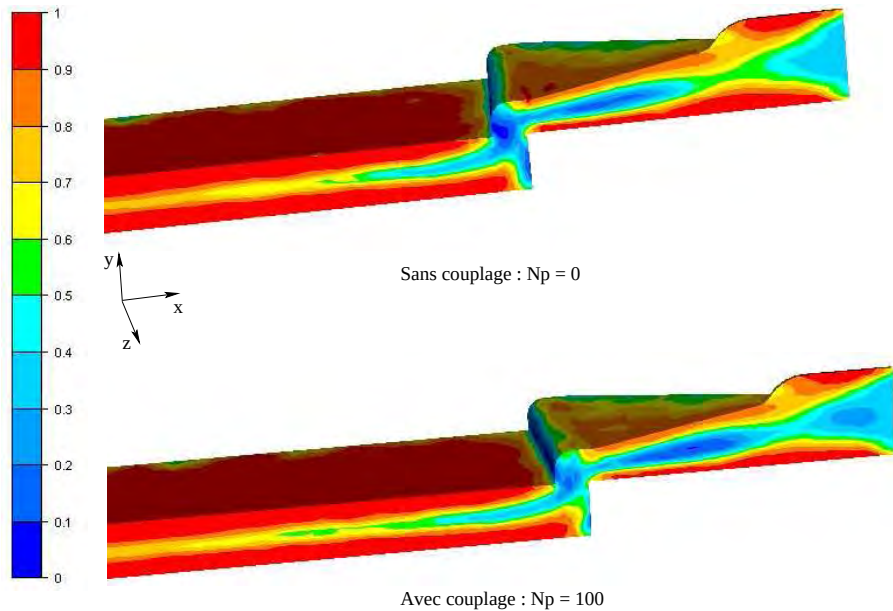


FIG. 6.7 – Isovaleur de la composante a_{xx} dans l'épaisseur de la plaque

En présence du couplage, nous notons cependant que la zone centrale est beaucoup plus large que dans le cas non couplé. Dans le même temps, la zone de peau s'amincit. En outre, après le passage du seuil, la zone centrale disparaît rapidement dans le cas non couplé alors que la présence du couplage permet de conserver un peu plus longtemps cette zone (Figure 6.7).

La figure 6.8 présente les isovaleurs de la première composante du tenseur d'orientation au niveau du plan (x, z) en $y = 0$ (dans la demi-épaisseur de la plaque).

Les résultats montrent que :

- la zone de coeur n'est pas étendue sur toute la surface de la plaque. Elle est localisée au voisinage de la sortie du seuil,
- la prise en compte du couplage augmente la surface de la zone de coeur,
- l'état d'orientation des fibres n'est pas le même dans les deux simulations ce qui indique que la dynamique d'écoulement est différente.

Les profils de pression obtenus dans l'épaisseur du seuil indiquent que la présence du couplage augmente la pression en entrée de la pièce. Il existe un rapport de 3 entre les deux valeurs de pression à l'entrée du seuil d'injection (Figure 6.9). Ce résultat montre que le couplage rhéologie - orientation a une influence sur les résultats pour le champ de pression.

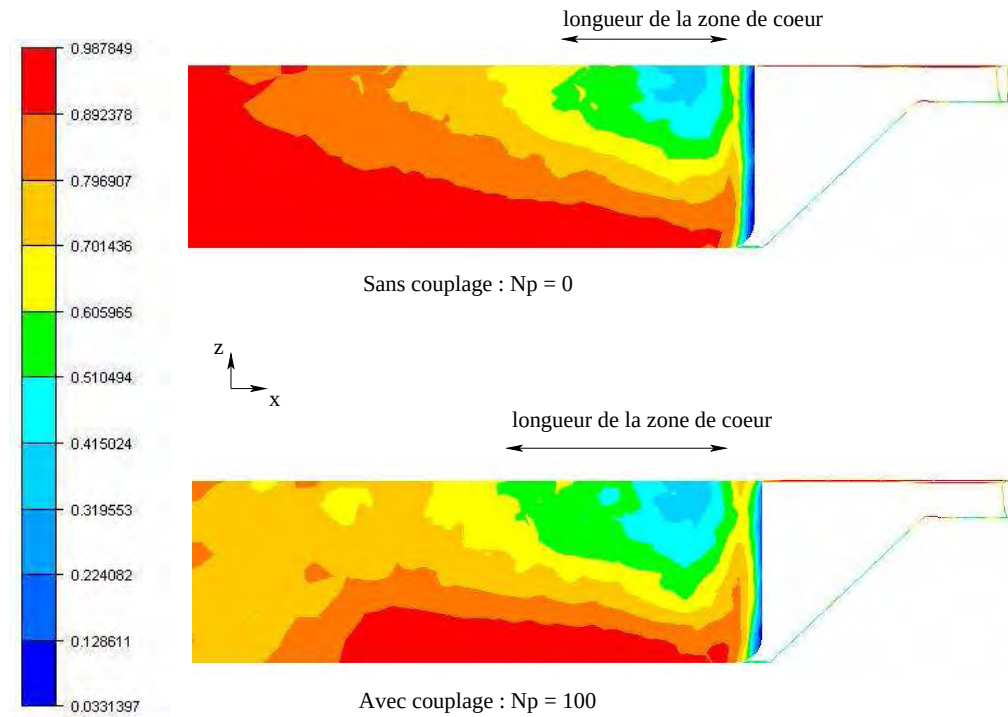
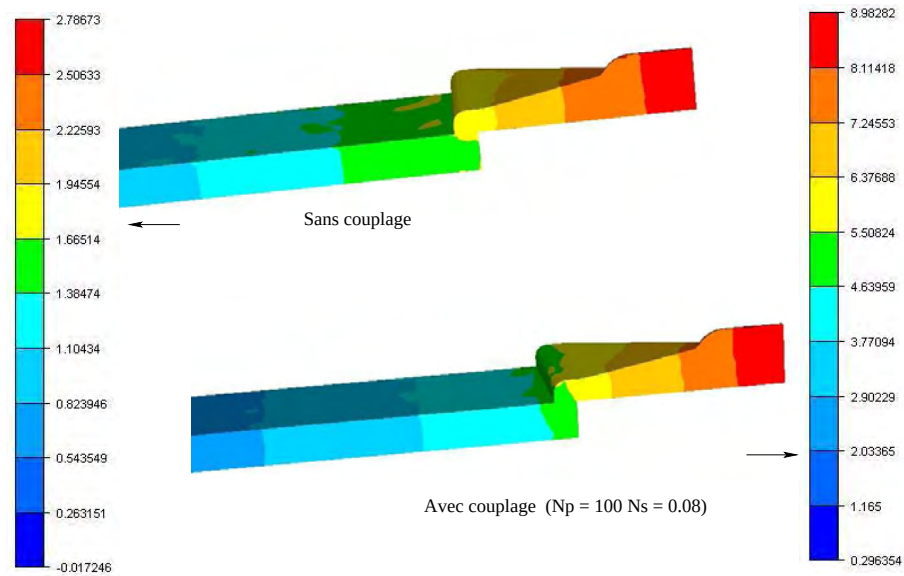
FIG. 6.8 – Isovaleurs de a_{xx} - coupe dans le plan (x, z) en $y = 0$ 

FIG. 6.9 – Comparaison des champs de pression obtenus par un calcul découplé et un calcul couplé

Les profils de vitesse pour les composantes V_x et V_y confirment les résultats précédents (Figure 6.10 et 6.11). La vitesse du fluide au coeur de la pièce est plus faible pour le modèle couplé. Ce résultat va dans le sens des tendances déjà observées pour d'autres écoulements : le profil de vitesse, en présence du couplage, s'aplatit.

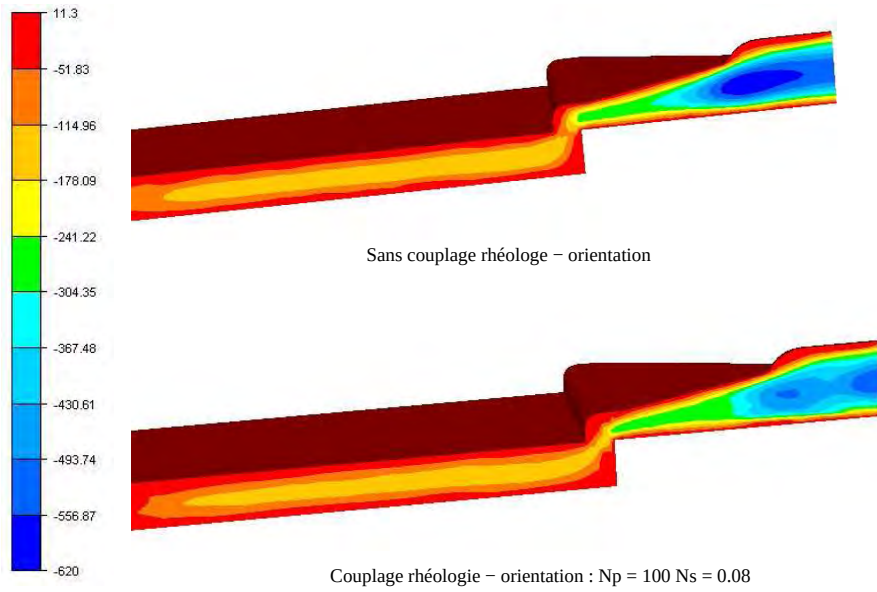


FIG. 6.10 – Comparaison des champs de vitesse obtenus par un calcul découplé et un calcul couplé : composante V_x

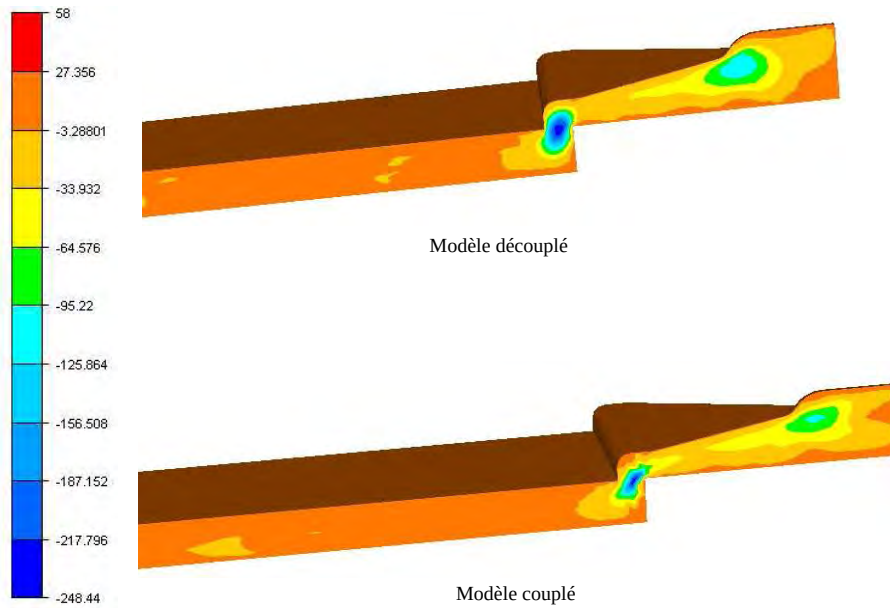


FIG. 6.11 – Comparaison des champs de vitesse obtenus par un calcul découplé et un calcul couplé : composante V_y

6.1.5 Corrélation du code de calcul avec l'expérience

Cette partie est dédiée à une comparaison entre les valeurs obtenues par le calcul numérique et les observations expérimentales issues de l'analyse d'image 2d. Nous présentons ci-après les profils de a_{xx} obtenus dans le plan (x, y) en $z = 0$ pour les 4 zones d'analyse A, B, C et D. Nous présentons ainsi les résultats pour le modèle découplé, couplé ainsi que

les valeurs issues des observations expérimentales.

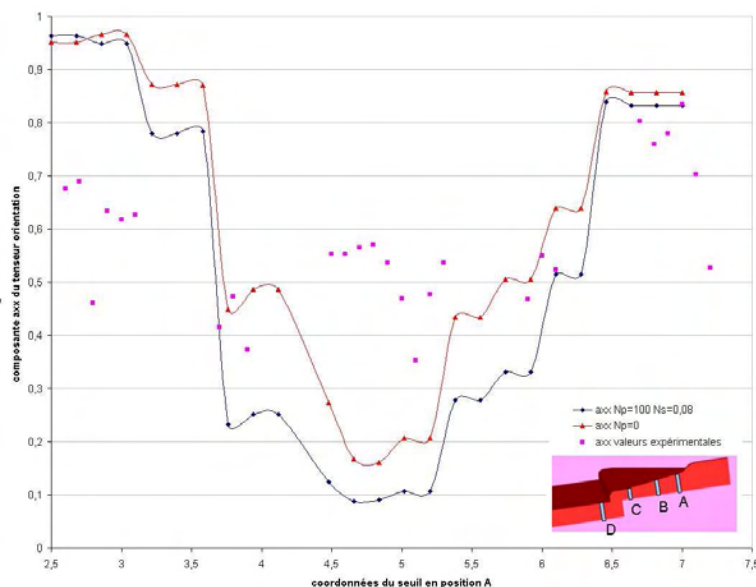


FIG. 6.12 – Comparaison des profils d'orientation dans la zone d'analyse A

La figure 6.12 montre que la présence du couplage :

- augmente fortement la taille de la zone de cœur,
- diminue la valeur minimal de a_{xx} . Nous atteignons une valeur de 0.09 dans le modèle couplé alors que le modèle découplé propose 0.16.

Le couplage rhéologie - orientation joue donc un rôle important à l'entrée du seuil.

Les résultats issus des observations expérimentales ne prédisent pas une structure cœur-peau marquée alors que le calcul numérique prédit une zone de cœur très visible. La différence peut venir du fait que le calcul démarre à l'entrée du seuil avec une orientation initiale isotrope alors que l'expérience débute dans le canal d'alimentation qui oriente les fibres dans la direction de l'écoulement. A l'entrée du seuil d'injection, les fibres sont ainsi presque toutes orientées dans la direction d'écoulement alors que le calcul considère une orientation isotrope des fibres. Pour une meilleure prédiction de l'orientation, la simulation aurait dû prendre en compte le canal d'alimentation du moule.

En paroi, nous observons que le calcul numérique suit les tendances observées expérimentalement : *i.e* les fibres présentent une orientation unidirectionnelle dans le sens de l'écoulement. Cependant, cette distribution d'orientation est surestimée dans le cadre de la prédiction numérique.

La figure 6.13 présente la distribution d'orientation obtenue dans la zone d'analyse B. La présence du couplage rhéologie-orientation augmente la taille de la zone de cœur ainsi que le minima de a_{xx} (valeur minimale vers le cœur correctement prédite). Cependant, les effets sont moindres que dans la zone d'analyse A.

Nous notons, toutefois, une sur-estimation de l'état d'orientation des fibres en paroi de la

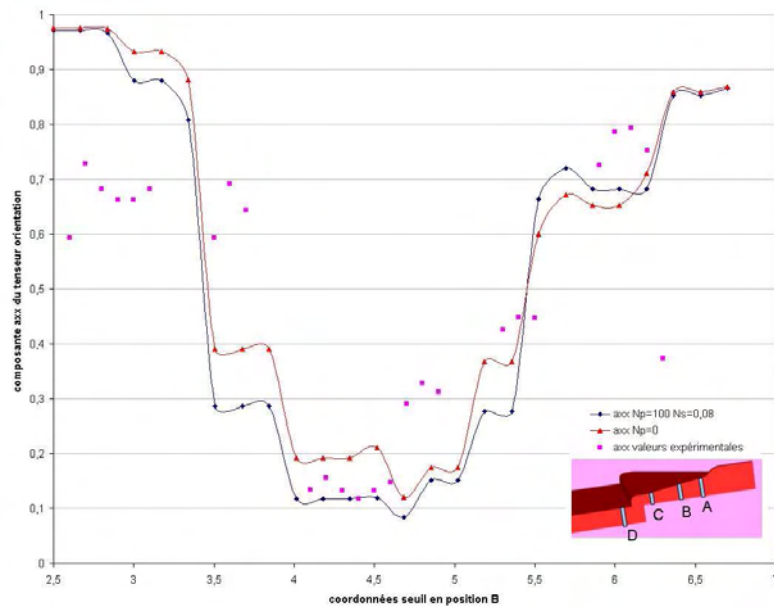


FIG. 6.13 – Comparaison des profils d'orientation dans la zone d'analyse B

pièce.

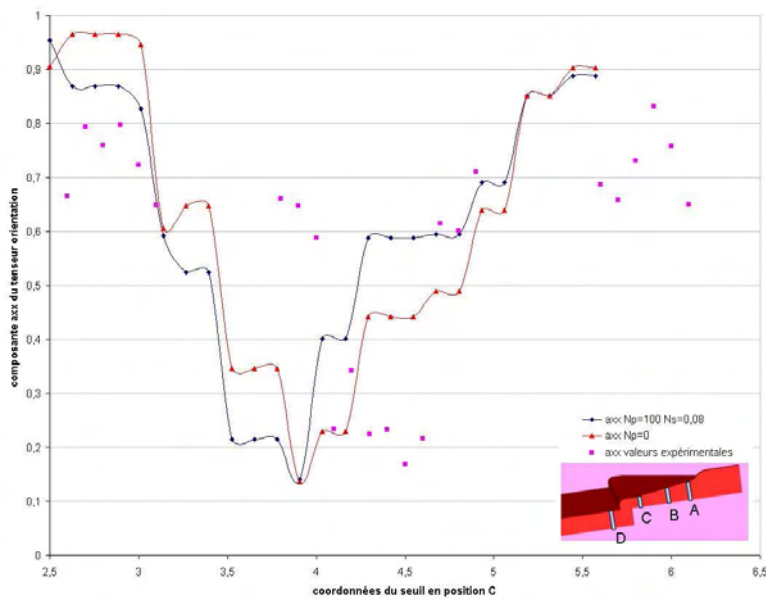


FIG. 6.14 – Comparaison des profils d'orientation dans la zone d'analyse C

Dans la zone d'analyse C (figure 6.14), les valeurs numériques observées pour a_{xx} entre le modèle couplé et découplé ne permet pas de conclure quant à l'influence du couplage rhéologie - orientation. Nous pouvons simplement observer que les deux courbes sont décalées. Ce résultat est certainement dû au maillage qui n'est pas suffisamment raffiné en zone C. Les valeurs moyennes d'orientation calculées, manquent de précisions. Dans l'objectif d'obtenir une meilleure corrélation, il convient de raffiner le maillage dans la zone de changement de courbure (en amont de la zone d'analyse C et entre les zones C et D).

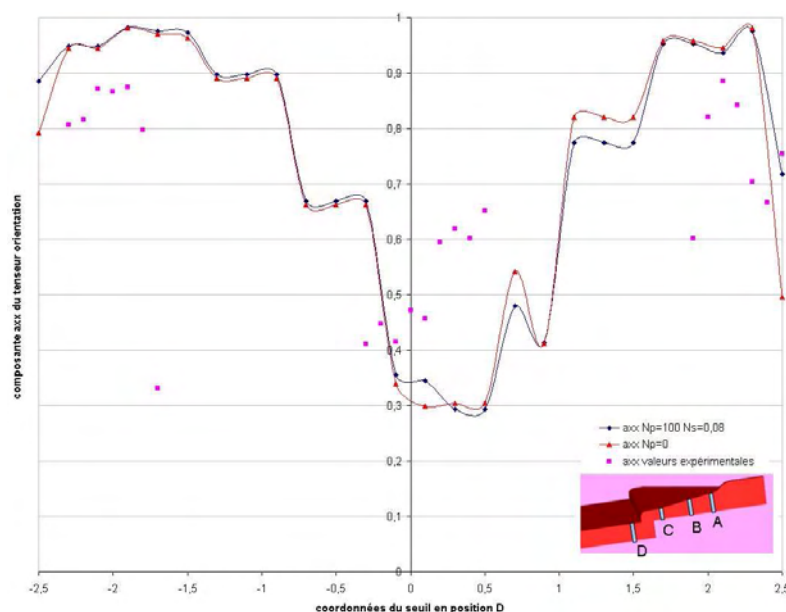


FIG. 6.15 – Comparaison des profils d'orientation dans la zone d'analyse D

De plus, nous notons certaines incohérences entre les différentes mesures expérimentales de la distribution d'orientation de fibres. En effet, la zone d'analyse expérimentale semble plus large que celle utilisée dans le calcul numérique. Les résultats observés dans la zone d'analyse C sont ainsi trop imprécis pour pouvoir tirer des conclusions sur la corrélation.

En zone d'analyse D, le couplage a peu d'effets sur l'orientation des fibres. Nous observons cependant, dans le cas du modèle couplé, une diminution de la valeur de a_{xx} au niveau de la paroi de la plaque. Le calcul couplé prédit ainsi une meilleure distribution d'orientation de fibres que le modèle découplé.

Le calcul numérique ainsi que les observations expérimentales montrent une perte de la structure coeur-peau, après le passage du seuil. La zone de coeur n'est pas assez mise en évidence avec le calcul numérique (composante a_{xx} sur-évaluée en comparaison des résultats expérimentaux) alors qu'en paroi, nous observons une bonne corrélation entre les valeurs expérimentales et le calcul couplé.

6.2 Application à une pièce automobile : la traverse nervurée

6.2.1 Présentation du support de l'étude

Nous présentons ci-après une application industrielle du code de calcul. Il s'agit d'une simulation de remplissage 3d d'une traverse comportant des parois minces et des nervures comme le montre la figure 6.16. Cette géométrie est assez représentative des pièces automobile.

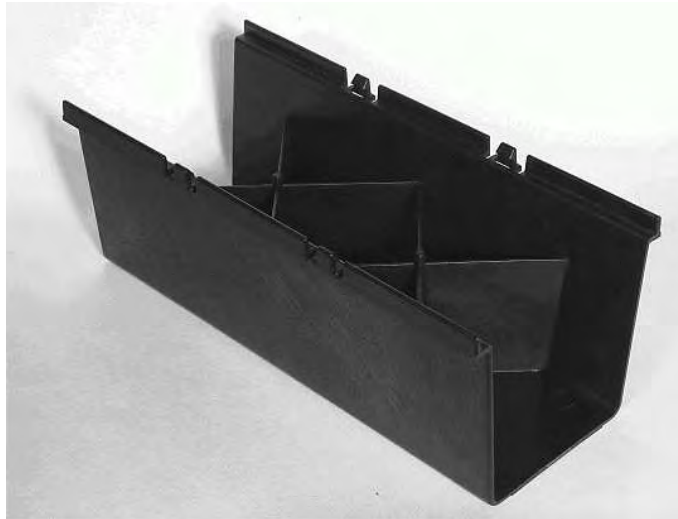


FIG. 6.16 – Photographie de la pièce réelle

Nous donnons dans les paragraphes qui suivent quelques précisions sur la construction du maillage, sur les paramètres rhéologiques et thermiques employés ainsi que sur les autres conditions de simulation.

Nous nous intéressons non seulement aux résultats sur l'écoulement global avec notamment les résultats qui concernent l'orientation des fibres, mais aussi sur le comportement local autour des lignes de soudure. En effet, un intérêt majeur des codes de calculs d'injection est leur capacité à prévoir la formation et la localisation des lignes de soudure ou des lignes de recollement. La localisation des lignes de soudure des matériaux chargés de fibres est importante car ces lignes affaiblissent la structure de la pièce finale.

a) Le maillage

Le calcul utilise un maillage généré par un mailleur topologique [74] gouverné par une métrique naturelle. Cette métrique prend en compte, pour chaque zone de la pièce, les tailles de maille désirées dans chaque direction principale. Dans l'optique de corrélérer les résultats concernant l'orientation des fibres avec des mesures expérimentales, nous avons considéré, en moyenne, 10 éléments dans l'épaisseur de la pièce. Dans les zones intéressantes pour l'écoulement et l'orientation des fibres telles que le seuil d'injection, 15 éléments ont été spécifiés dans l'épaisseur de la pièce. Dans les zones moins importantes telles que la carotte d'injection, nous nous sommes contentés de 4 éléments.

L'ensemble de ces opérations a conduit à un maillage de 53998 noeuds et 266054 éléments. Le détail concernant le maillage se trouve dans le tableau suivant.

Nombre de noeuds	53998
Nombre d'éléments	266054
Nombre d'éléments dans l'épaisseur	10 à 15
nombre d'éléments dans l'épaisseur des nervures	6

TAB. 6.3 – Paramètres pour la loi matière

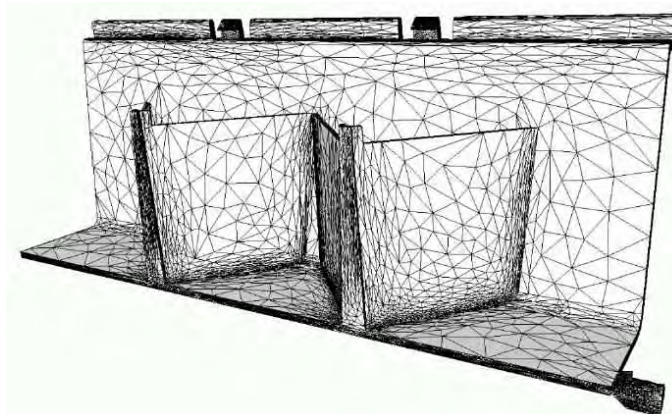


FIG. 6.17 – Maillage d'une partie de la géométrie

La figure 6.17 permet de visualiser les zones de la pièce ayant fait l'objet d'un raffinement de maillage. Cette figure met en exergue la forte anisotropie du maillage. La pièce globale n'est pas symétrique en raison de la position et de la forme de la carotte d'injection. Nous avons donc considéré un maillage complet de la pièce.

b) Le matériau

Le matériau injecté est un polypropylène fourni par SABIC, de référence "Stamax P30YM240". Ce matériau est modélisé par une loi de Carreau-Yasuda pour la rhéologie et une loi d'Arrhénius pour la thermo-dépendance.

$$\eta = \eta_0 \left[1 + \left(\eta_0 \frac{\dot{\gamma}}{\tau_c} \right)^\alpha \right]^{\frac{m-1}{\alpha}} \quad ; \quad \eta_0(T) = \eta_0(T_{ref}) \exp \left[\beta \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{ref}} \right) \right] \quad (6.2)$$

Les valeurs des coefficients apparaissant dans ces relations sont données dans le tableau 6.4 (données rhéologiques fournies par Plastic Omnium). Les paramètres pour l'air piégé à l'intérieur de la cavité ont été renseignés automatiquement par l'outil de pré-traitement.

Rhéologie	Thermo-dépendance
$K = 2.52 \cdot 10^{-4} MPa$ $m = 0.22$ densité = $1\,000\, kg/m^3$ $\alpha = 1$ $\tau_c = 0.0411 Pa$ masse volumique = $930\, Kg.m^3$	température de référence = $250\, ^\circ C$ $\beta = 4450\, mole.K$ conductivité = $0.25\, W/mK^{-1}$ chaleur spécifique = $2\,180\, J/kg\, ^\circ C$

TAB. 6.4 – Caractérisation du polymère utilisé pour une loi puissance et une loi d'Arrhenius

c) Les conditions initiales et aux limites

Concernant la température, le polymère est injecté à $250^\circ C$ et nous supposons que le moule est parfaitement régulé à $40^\circ C$. Initialement, l'air à l'intérieur de l'empreinte est également considéré à une température de $40^\circ C$.

Au niveau du seuil d'injection, le fluide est injecté à débit imposé. ce débit est calculé de manière à ce que la cavité soit remplie en 3.7 secondes, durée d'injection réelle fournie par Plastic Omnium. Le volume de la pièce étant de $189357.9\, mm^3$, le débit imposé est alors de $51177.8\, mm^3.s^{-1}$.

Pour le calcul de l'orientation des fibres, nous avons considéré un rapport de forme de fibres égale à 10, un coefficient d'interaction de 10^{-3} et une équation de fermeture de type quadratique.

Dans un premier temps, nous n'avons pas considéré de couplage écoulement/orientation pour cette application. En effet, l'objectif de cette étude était de mener jusqu'à son terme un calcul 3D prenant en compte une géométrie industrielle assez défavorable à Rem3D® (présence de paroi mince). Néanmoins, cet objectif étant atteint, la prise en compte du couplage pourra constituer une perspective dans le cadre de cette étude industrielle.

d) La plateforme de calcul et temps cpu

L'indice de pseudoplasticité du matériau étant relativement faible, il nous a fallu considérer un pas de temps relativement petit de l'ordre de $3 \cdot 10^{-4} s$ pour s'affranchir des problèmes de convergence. Le calcul a été lancé sur le cluster du Cemef.

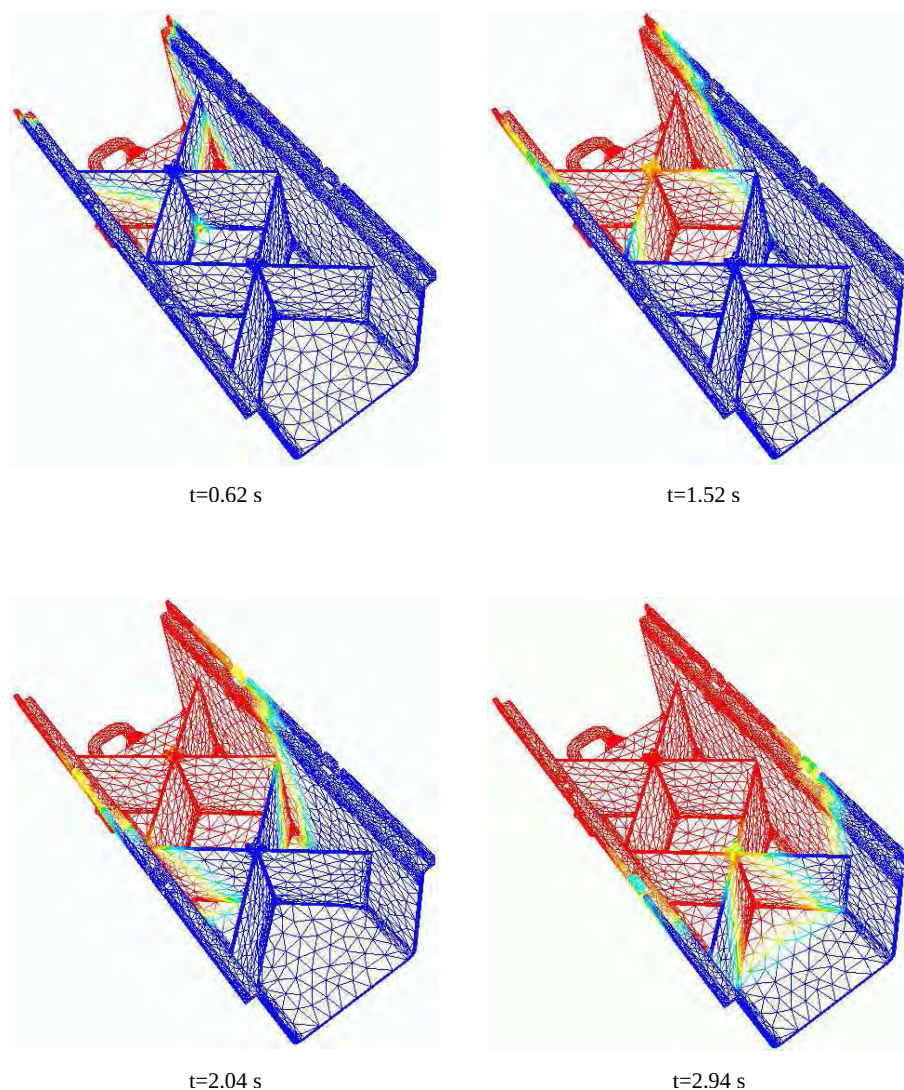
Le calcul complet considérant le calcul des champs de vitesse, pression et orientation de fibres a nécessité 191 heures et 48 minutes sur 8 processeurs. Chaque processeur est un Pentium IV 2.8 Ghz avec 1 Gb de ram. Ces processeurs sont tous reliés entre eux via un réseau de calcul de type Myrinet. L'utilisation du cluster a été possible car les modules de Rem3D sont parallélisés. Nous tenons à préciser que, compte tenu du nombre d'éléments du maillage, il n'est pas possible de faire tourner ce calcul sur une unique station de travail.

6.2.2 Résultats de la simulation numérique

Nous présentons, dans ce paragraphe, les résultats concernant l'écoulement de la matière ainsi que l'orientation des fibres.

a) Dynamique de remplissage de la traverse

Nous pouvons observer sur la figure 6.18 le remplissage de la traverse à différents instants de l'injection. La pièce initialement vide est caractérisée par du bleu ce qui correspond à une valeur nulle de la fonction caractéristique. La présence de polymère est caractérisée par du rouge. Le front de matière se situe donc à l'interface vide/polymère. La dynamique de remplissage est importante car elle permet de comprendre par la suite la dynamique d'orientation des fibres pendant l'écoulement. Nous pouvons observer un écoulement parfaitement symétrique alors que la carotte d'injection ne présente pas de symétrie



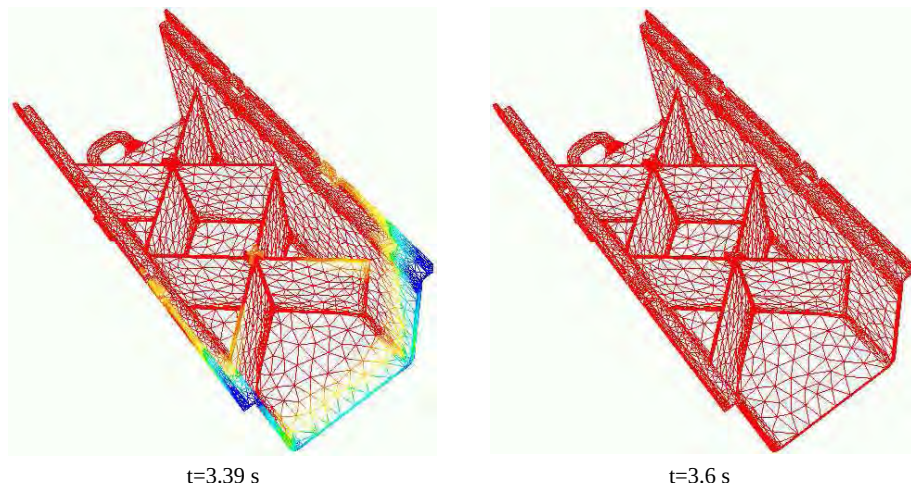


FIG. 6.18 – Dynamique de remplissage de la traverse à différents instants

La carotte d'injection se situant en haut de l'image, le front de matière progresse du haut vers le bas en remplissant simultanément le plancher, le flanc ainsi que les nervures centrales qui se croisent. En début de remplissage le flanc accuse un léger retard de remplissage en comparaison des nervures centrales. Ce retard s'estompe puis finit par s'inverser dès que la pièce est à moitié remplie.

b) L'orientation des fibres

Nous présentons, dans ce paragraphe, les résultats généraux liés à l'orientation des fibres dans la traverse. Nous nous attacherons à montrer les résultats d'orientation dans la carotte d'injection, dans l'épaisseur pièce ainsi qu'au voisinage des nervures.

La figure 6.19 présente les composantes principales du tenseur d'orientation suivant une coupe passant par le plan médian de la carotte d'injection. Le résultat montre que les fibres sont toutes orientées dans la direction de l'écoulement. La composante a_{xx} est nulle sauf à la sortie de la carotte en raison du taux de cisaillement rencontré. Globalement les fibres sont orientées suivant l'axe z sauf au niveau des deux bras de la carotte où l'orientation se fait suivant l'axe y . Nous n'observons pas de structure coeur/peau dans la carotte d'injection, peut être en raison du maillage, relativement grossier.

En sortie de carotte l'écoulement est divergent et nous pouvons remarquer, suivant une coupe dans le plan (x, y) du plancher (figure 6.20), la mise en place d'une structure coeur/peau assez particulière. En effet la zone de coeur, siège d'une orientation de fibres transverse à la direction de l'écoulement, est limitée à une petite région et ne s'étend pas sur toute la surface de la pièce.

Au fur et à mesure de l'écoulement, cette structure tend à disparaître (Figure 6.22) sauf après passage de la première nervure où la composante a_{xx} passe de 0.6 à 0.5. Il semblerait que la présence de la nervure perturbe l'orientation des fibres et tend à privilégier une orientation transverse des fibres, au coeur de l'écoulement.

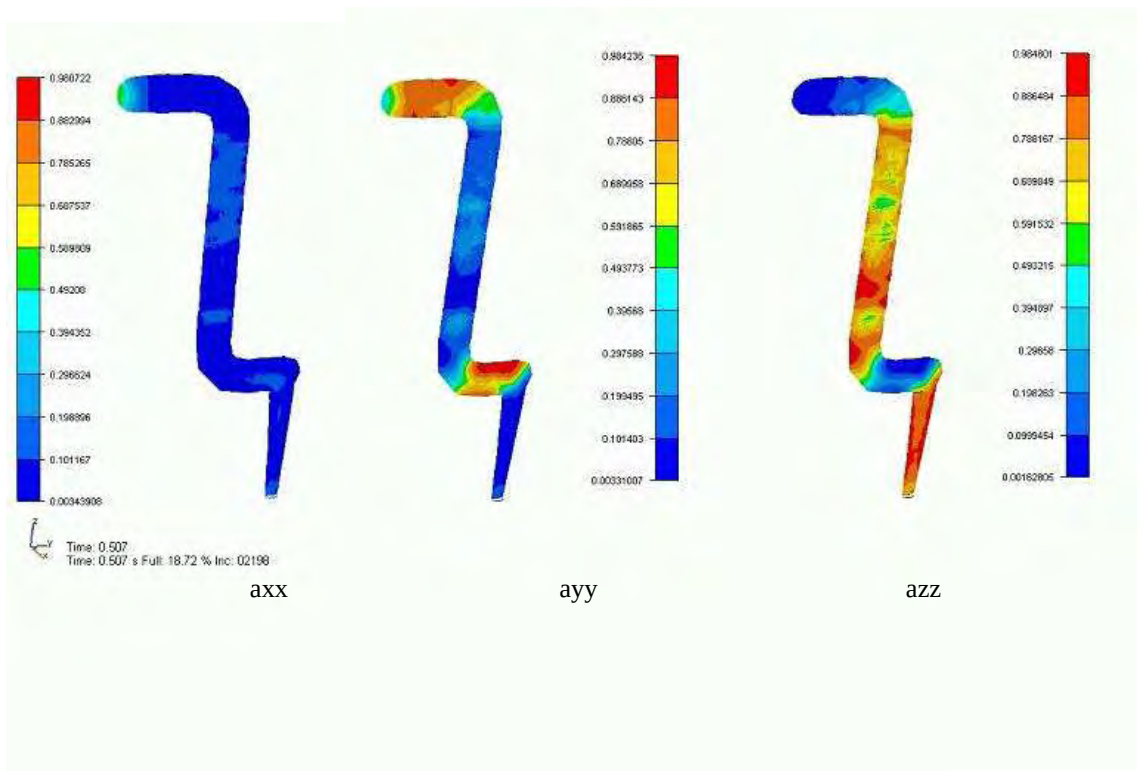
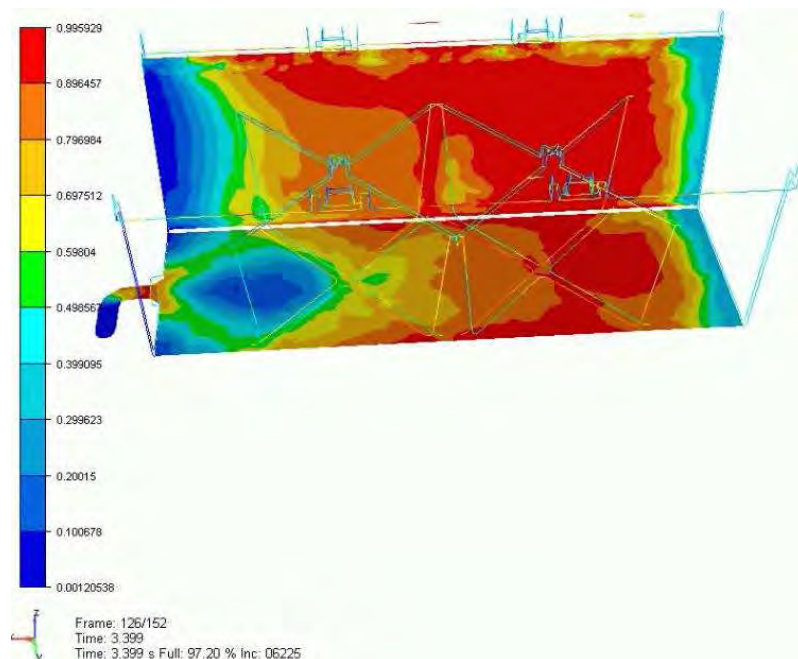
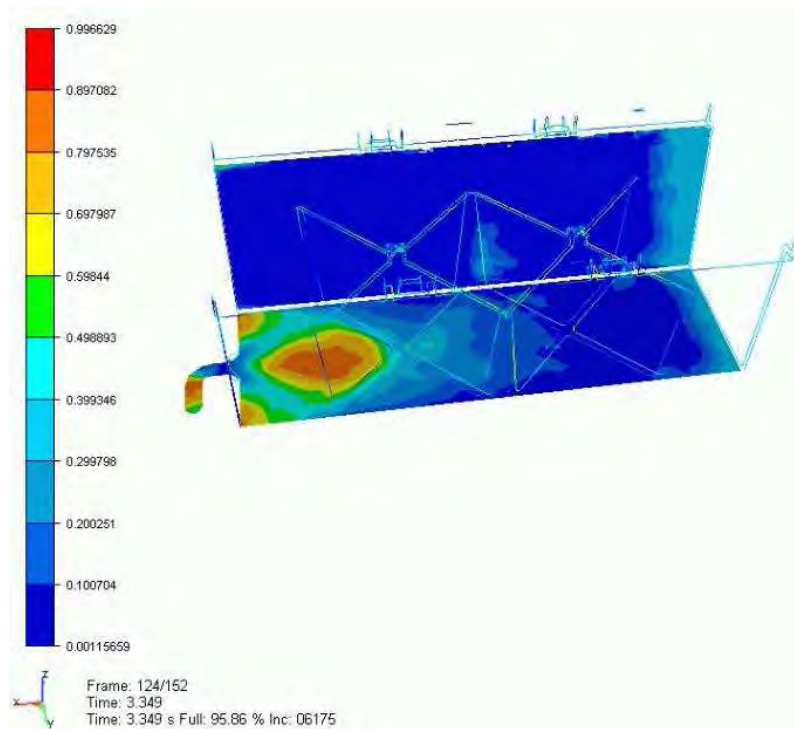
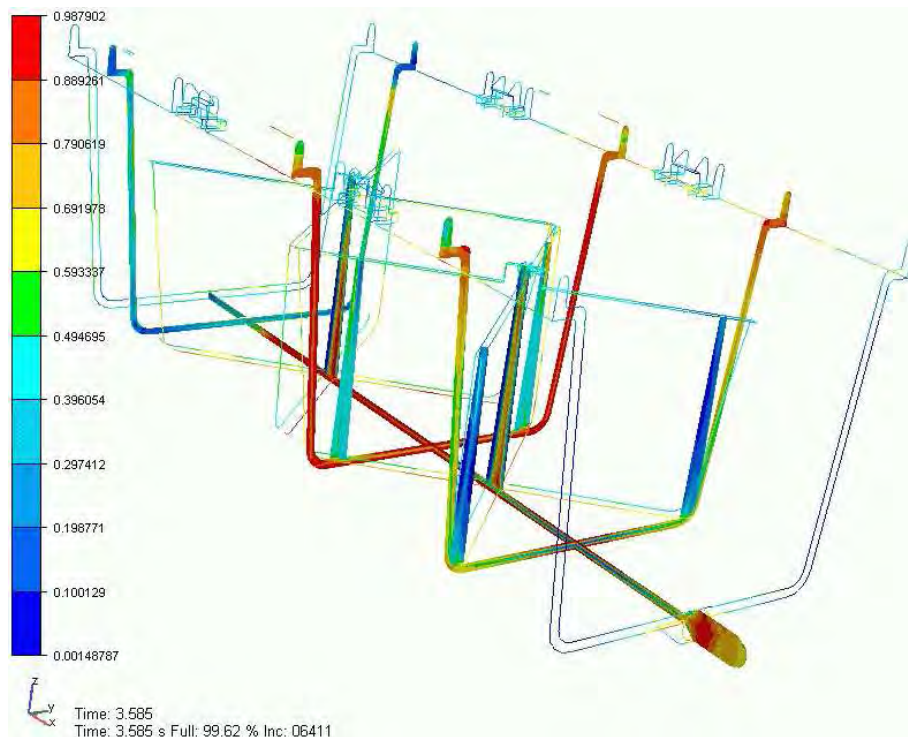


FIG. 6.19 – Orientation des fibres dans la carotte d'injection

FIG. 6.20 – Composante a_{xx} dans le plan (x, y) et (x, z) , plan médian

FIG. 6.21 – Composante a_{yy} dans le plan (x, y) et (x, z) FIG. 6.22 – Composante a_{xx} suivant différentes coupes

Au niveau des flans, la figure 6.20 présente les isovaleurs de la première composante du tenseur d'orientation suivant une coupe située à la surface interne de la pièce. Globalement, les fibres suivent la direction d'écoulement et c'est pour cela que la dynamique de remplissage est importante. L'orientation des fibres se fait initialement suivant l'axe z car l'écoulement est vertical puis suivant l'axe x une fois que la hauteur du flanc est remplie. Nous retrouvons une orientation de fibre semblable au niveau de la première nervure.

Enfin les figures 6.20 et 6.21 présentent une orientation de fibres particulières au niveau du flanc et après passage de la seconde nervure. En effet, la composante a_{xx} passe d'une valeur de 0.9 à 0.6 alors que la composante a_{yy} passe de 0 à 0.4. Cette ligne n'est autre que la ligne de soudure et nous y reviendrons dans le paragraphe qui suit.

L'orientation des fibres dans les nervures de la pièce n'est pas facile à analyser du fait de l'orientation des nervures qui ne coïncide pas avec le repère global (figure 6.23). L'idéal serait de créer localement un repère lié à la nervure pour ainsi avoir les tenseurs d'orientations locaux. Les résultats obtenus dans le repère global sont difficiles à analyser.

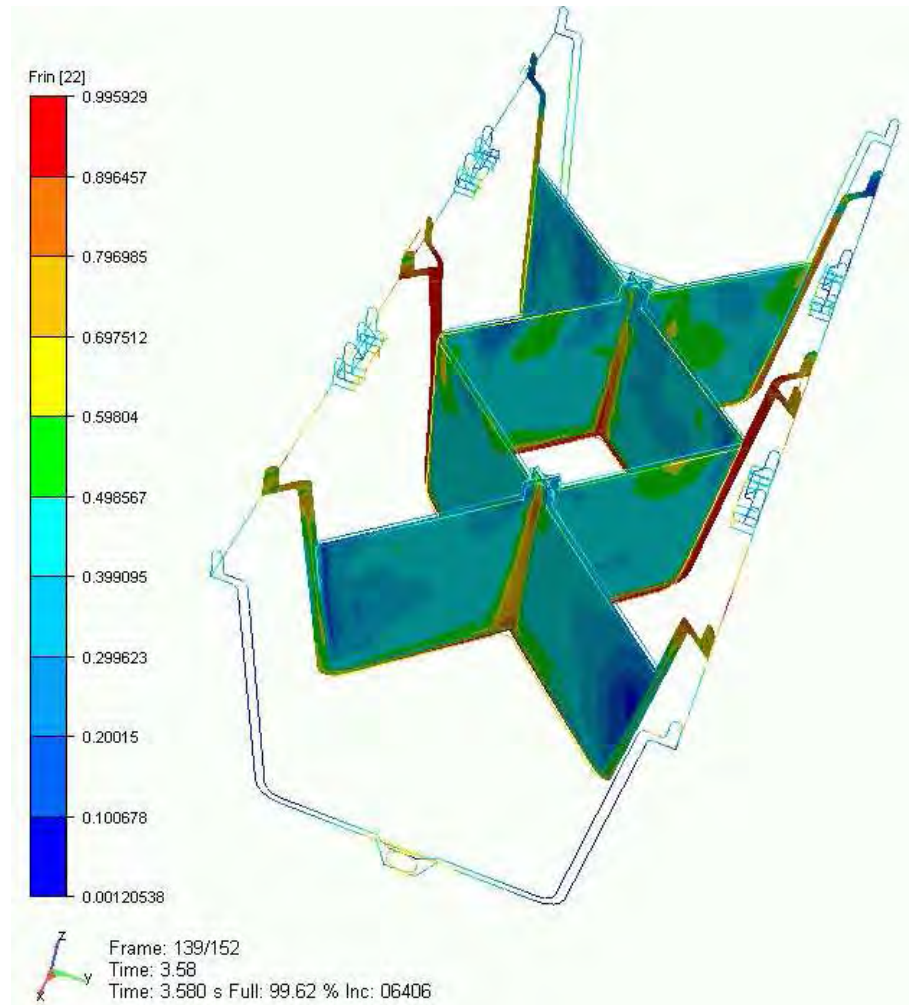


FIG. 6.23 – Composante a_{xx} suivant une coupe passant par le mi-épaisseur des nervures

La figure 6.24 représente l'orientation des fibres sous forme d'ellipsoïde. Il s'agit d'une coupe dans le plan (x, y) au niveau de la surface supérieure du plancher à l'interface entre plancher/nervure. Les résultats montrent que la présence des nervures perturbe localement l'orientation des fibres.

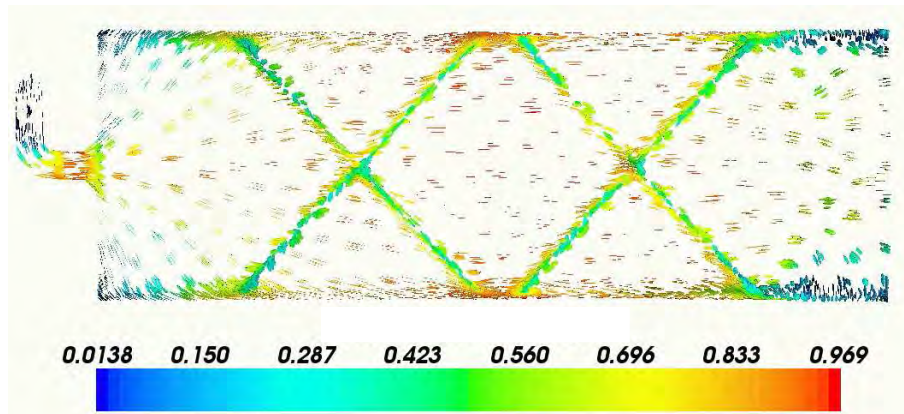


FIG. 6.24 – Composante a_{xx} suivant différentes coupes

Pour conclure, l'étude de la traverse a montré que l'orientation des fibres suit globalement la direction de l'écoulement à la surface de la pièce. Dans la zone de coeur le processus d'orientation est plus difficile à cerner : en sortie de la carotte d'injection nous retrouvons une structure coeur peau limitée à une région qui ne s'étend pas sur toute la surface de la pièce. Cette structure coeur peau tend à disparaître au fur et à mesure de l'écoulement mais la présence de nervures tend à ralentir ce processus. Enfin les résultats d'orientation ont permis de mettre en exergue une ligne de soudure au milieu de la pièce.

Remarque : La traverse possède deux lignes de soudure car les fronts en provenance du flanc et des nervures se croisent à deux reprises. La première ligne de soudure se situe au niveau du flanc, après passage de la première nervure. La deuxième ligne de soudure se situe au niveau de la deuxième rangée de nervures croisées, car le front de matière en provenance du flanc est plus rapide et a le temps de pénétrer dans la nervure. La simulation met bien en exergue la présence d'une ligne de soudure au niveau du flanc.

c) Position d'une ligne de soudure

Le remplissage de la traverse montre la présence de deux lignes de soudure :

- une ligne de soudure au niveau du flanc de la traverse,
- une ligne de soudure positionnée dans une nervure centrale.

La figure 6.25 présente un schéma de la traverse ainsi que le positionnement des lignes de soudure.

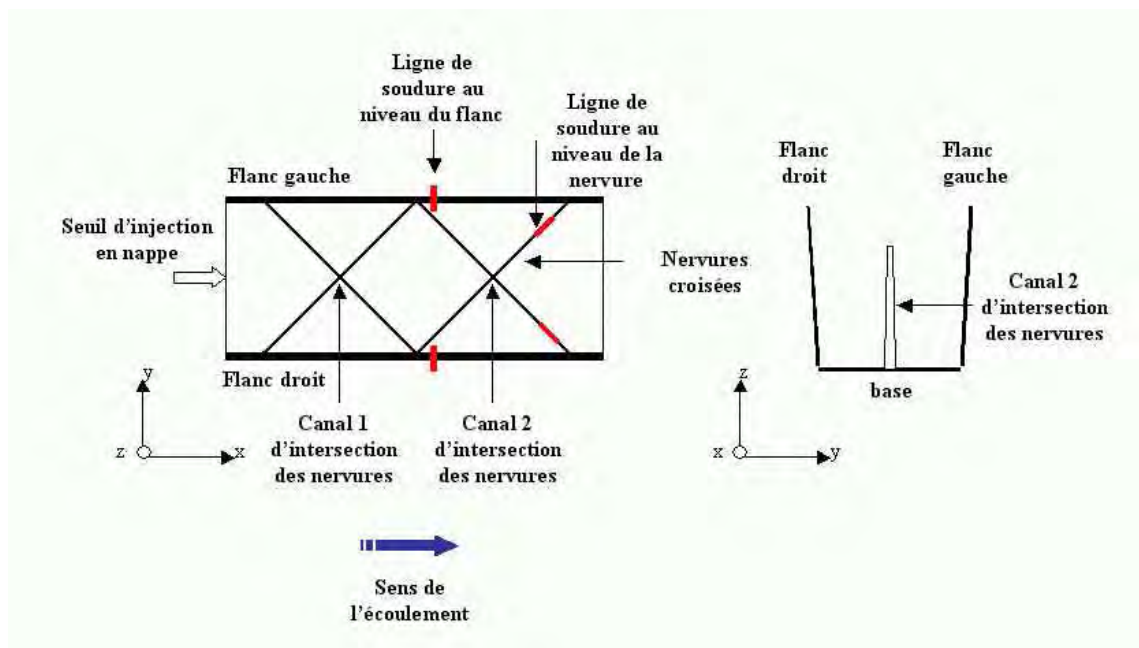


FIG. 6.25 – Schéma de la traverse nervurée et positionnement des lignes de soudure)

Nous nous intéressons dans cette partie du document à l'étude de la ligne de recollement, au niveau du flanc de la traverse. La figure 6.26 est une photographie de la pièce réelle obtenue après injection. L'injection se fait par la droite. La photographie montre :

- la présence de fibres dont nous pouvons visualiser les traces à la surface de la pièce,
- une ligne de soudure au centre de la pièce très légèrement orientée dans le sens du flux.

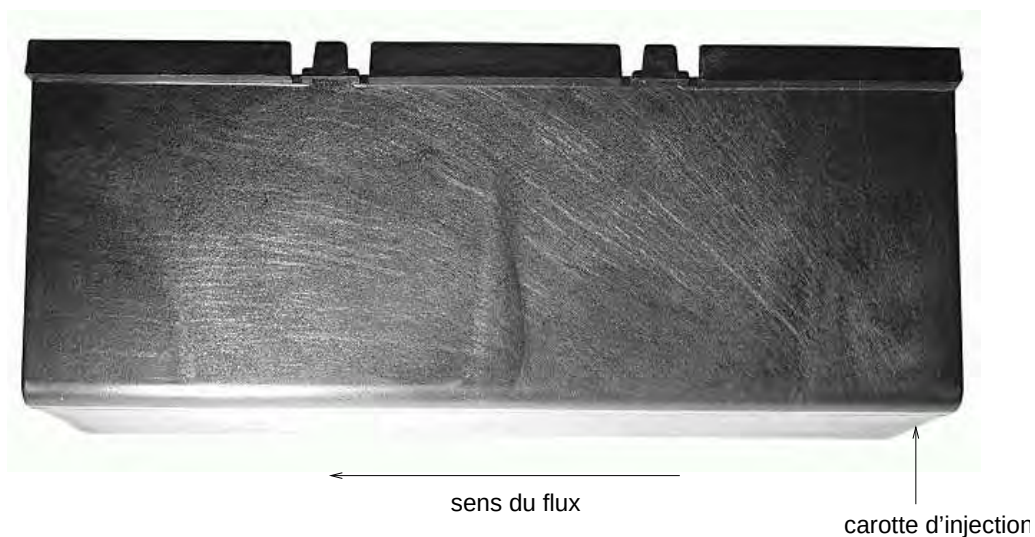


FIG. 6.26 – Photographie du flanc de la traverse (injection par la droite)

Cette ligne de soudure résulte de l'intersection du front de matière issu du flanc gauche et celui issu de la nervure centrale.

L'écoulement étant symétrique nous observons une ligne de soudure similaire sur l'autre flanc. Nous pouvons remarquer que :

- la ligne de soudure s'étend sur toute la hauteur de la nervure et non pas sur la hauteur du flanc,
- la ligne de soudure est légèrement orientée dans le sens de l'écoulement comme le montre la figure 6.27

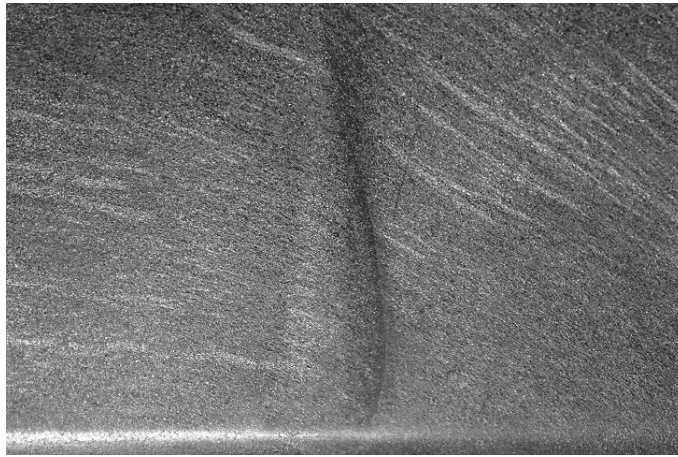


FIG. 6.27 – Aggrandissement au voisinage de la ligne de soudure

Nous présentons à travers la figure 6.28 l'évolution des composantes a_{xx} et a_{yy} à divers instants du remplissage :

- avant l'intersection des fronts de matière en provenance du flanc et de la nervure,
- à l'intersection des deux fronts,
- quasiment en fin de remplissage.

Nous présentons les isovaleurs de la première et deuxième composante du tenseur d'orientation suivant deux coupes :

- au niveau de la base : une coupe dans la mi-épaisseur de la pièce,
- au niveau du flanc : une coupe à la surface interne de la pièce.

Nous pouvons remarquer que dans la partie amont du flanc (voisinage de la carotte d'injection), les fibres ont une orientation unidirectionnelle dans le sens z ce qui se traduit par des faibles valeurs pour a_{xx} et a_{yy} . L'orientation, au niveau du flanc, devient par la suite unidirectionnelle dans le sens x : a_{xx} augmente alors que a_{yy} reste relativement faible. A l'intersection des deux fronts de matière, dans la région où se forme la ligne de soudure, nous pouvons observer une diminution de la composante a_{xx} sur toute la longueur de la ligne de soudure ainsi qu'une augmentation de la composante a_{yy} . La ligne de soudure est ainsi le siège de perturbation pour les composantes du tenseur d'orientation.

La figure 6.28 montre également que la ligne de soudure est légèrement orientée dans le sens du flux, ce qui corrobore les résultats obtenus sur pièce injecté (figure 6.27).

Le logiciel de post-traitement ne permet pas de garder une trace visuelle de la ligne de soudure. En revanche, nous pouvons deviner sa formation grâce à la carte des isovaleurs des composantes du tenseur d'orientation qu'elle laisse sur le plan de coupe. Nous avons ainsi mis en exergue la capacité de Rem3D ® à prévoir la formation de lignes de soudure via les résultats d'orientation de fibres.

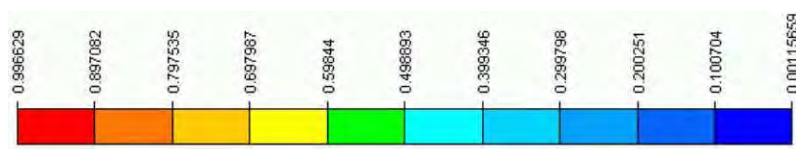
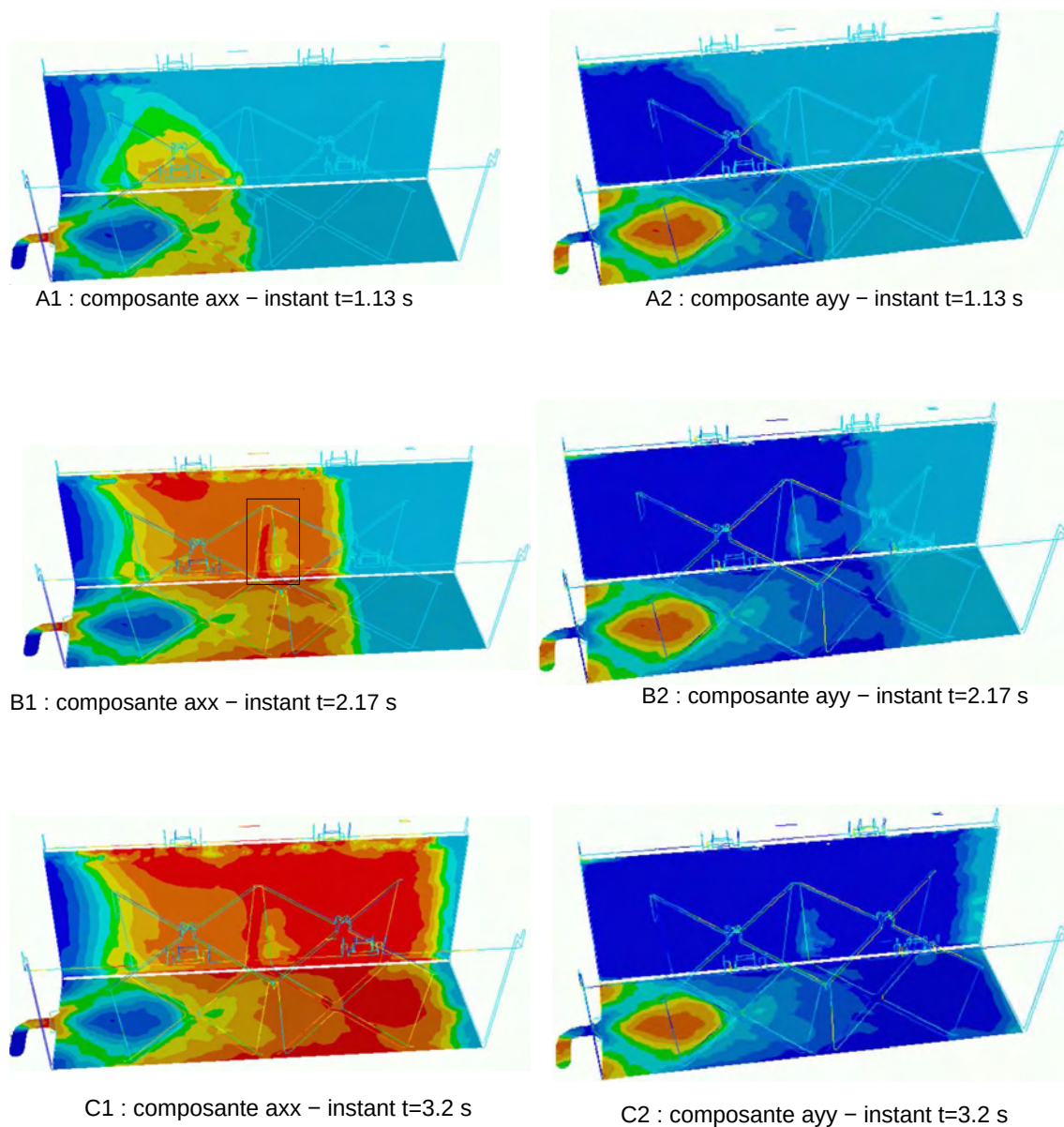


FIG. 6.28 – Composantes a_{xx} et a_{yy} du tenseur d'orientation

Remarque : Dans une optique d'optimisation de temps de calcul, le maillage utilisé est relativement grossier dans le sens de l'écoulement. Un maillage plus raffiné dans la région où se forme la ligne de soudure aurait permis de capturer avec plus de précision la forme de la ligne de soudure.

6.2.3 Corrélation du code de calcul à l'expérience

a) Mesure d'orientation de fibres

Méthode expérimentale

Les mesures d'orientation de fibres sur la traverse ont été réalisées dans le cadre d'un stage de fin d'étude [62].

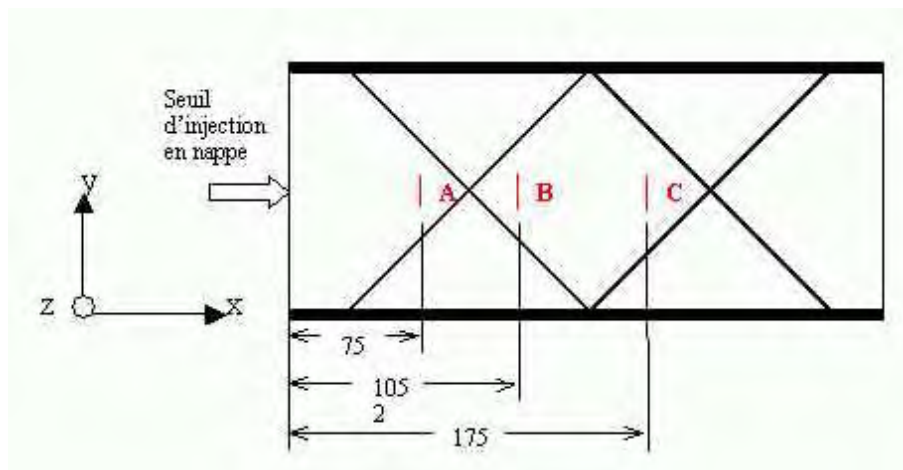


FIG. 6.29 – Zone de prélèvement des échantillons

La figure 6.29 montre les zones de prélèvement des échantillons pour la réalisation des mesures d'orientation de fibres. Comme le montre la figure, plusieurs échantillons ont été considérés dans différentes zones afin d'étudier l'influence des nervures sur l'orientation des fibres :

- en zone A en début d'écoulement,
- en zone B après passage de la première nervure,
- en zone C avant passage de la deuxième nervure.

La méthode de mesure employée consiste à observer la surface d'un échantillon qui est au préalable polie et traitée de manière à améliorer le contraste. L'analyse de la surface se fait via un microscope électronique à balayage. Le microscope couplé à un ordinateur permet une automatisation complète de la mesure et le système va donc automatiquement balayer la surface de l'échantillon. L'image obtenue a pour dimension $485 \mu m \times 360 \mu m$ et compte environ une cinquantaine de fibres.

L'analyse du résultat se fait ensuite par une procédure numérique d'analyse d'image via un logiciel appelé Visilog. L'orientation d'une fibre est alors décrite à partir de l'analyse de l'ellipse formée par l'intersection du plan de coupe et de la fibre. Les dimensions de chaque

ellipse sont déterminées à l'aide de la technique des moments.

Les données sont ensuite filtrées et corrigées dans le cadre de la construction du tenseur d'orientation. Enfin, dans l'optique de minimiser les erreurs dues aux mesures, plusieurs essais ont été réalisés successivement. La méthode de mesure a donc été validée via des essais de répétabilité.

Les résultats d'orientation sont représentés par les composantes du tenseur d'orientation. Cette représentation permet d'avoir une orientation moyenne en fonction de l'épaisseur de la pièce. Nous viendrons, par la suite, corréler les résultats obtenus à l'aide de cette méthode avec ceux obtenus via la simulation numérique.

Résultats expérimentaux

Nous présentons ci-dessous les valeurs obtenues pour les composantes du tenseur d'orientation pour chaque zone d'analyse (figures 6.30, 6.31 et 6.32).

Qualitativement, les résultats sont similaires pour les trois zones. Seules les composantes a_{xx} et a_{yy} présentent une évolution suivant l'épaisseur de la pièce, les autres composantes étant quasi-nulles. Nous retrouvons ainsi une orientation classique sous forme d'une structure coeur peau : en zone de peau les fibres sont préférentiellement orientées dans la direction de l'écoulement alors qu'à coeur nous retrouvons une orientation transverse des fibres.

Nous présenterons dans les paragraphes qui suivent seulement les résultats pour la composante a_{xx} . Le tenseur d'orientation étant unitaire et a_{zz} étant négligeable nous déduisons facilement les valeurs de a_{yy} .

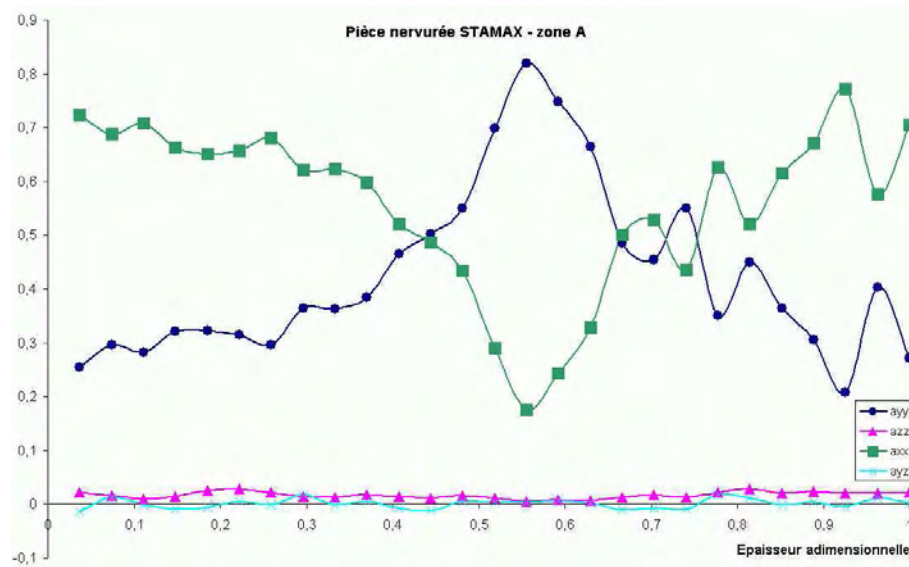


FIG. 6.30 – Évolution de l'orientation des fibres en zone A

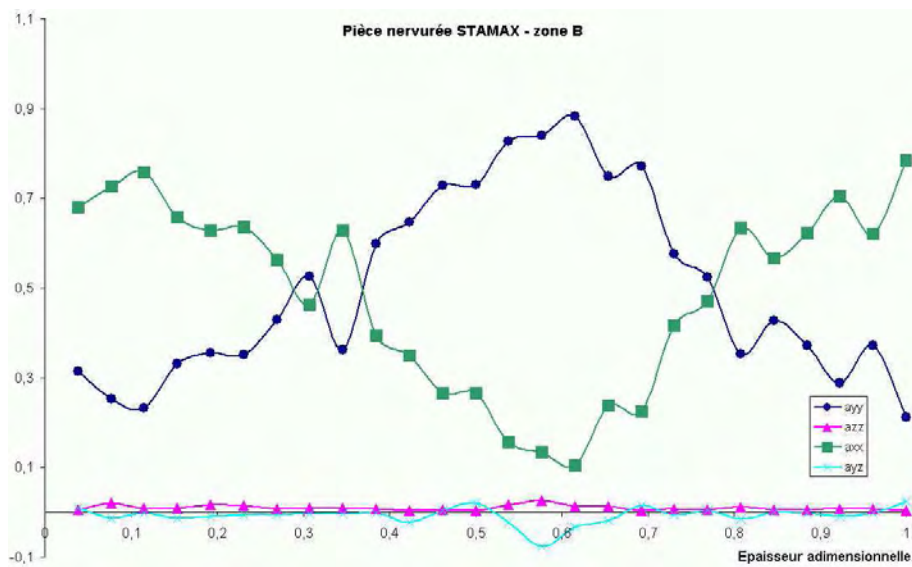


FIG. 6.31 – Évolution de l'orientation des fibres en zone B

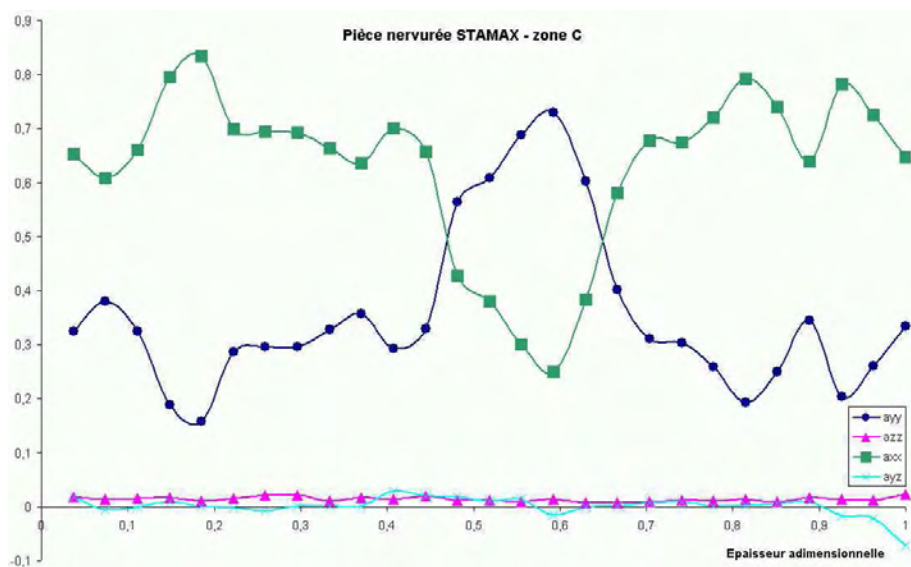


FIG. 6.32 – Évolution de l'orientation des fibres en zone C

La figure 6.33 indique les valeurs obtenues pour la composante a_{xx} du tenseur d'orientation pour les zones A, B et C.

En zone A (avant le passage d'une quelconque nervure), on trouve une orientation classique : dans la zone centrale, une zone de coeur caractérisée par une orientation de fibres transverse à la direction de l'écoulement (valeur de a_{xx} jusqu'à 0.2) et une zone de peau où les fibres sont alignées dans la direction d'écoulement (valeur de a_{xx} jusqu'à 0.7).

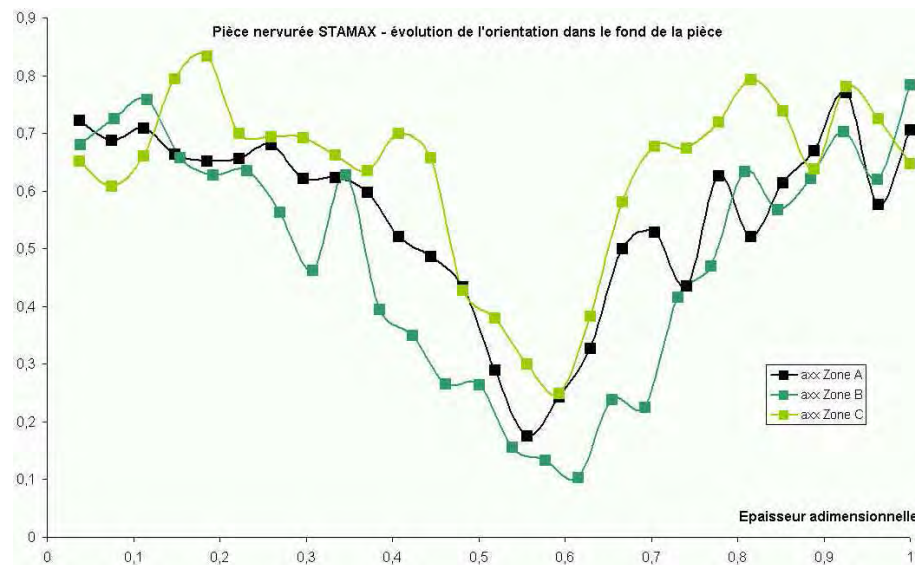


FIG. 6.33 – Évolution de la composante a_{xx} du tenseur d'orientation dans l'épaisseur de la pièce pour les différentes zones

En zone B, on constate que la zone de coeur est :

- plus prononcée, les valeurs de a_{xx} atteignent 0,1,
- plus large, car elle couvre près de 60 % de l'épaisseur.

Il semblerait, au vu de ces résultats, que la présence de la nervure perturbe l'orientation des fibres avec pour conséquence d'augmenter la taille de la zone de coeur. Ce résultat est bien entendu à confirmer sur d'autres pièces et avec des géométries de nervure différentes.

En zone C, avant le passage de la deuxième nervure, on retrouve une orientation à peu près équivalente à celle obtenue en zone A. La zone de coeur est aussi large (environ 30 % de l'épaisseur pièce), mais elle est légèrement moins marquée (la valeur de a_{xx} atteint 0,25). De plus, nous pouvons noter un léger décentrage de cette zone. Enfin, l'orientation en peau est un peu plus marquée (a_{xx} approximativement de 0,8).

b) Comparaison au code de calcul

L'objectif de ce paragraphe est de comparer les résultats issus des mesures expérimentales avec ceux issus du module fibres de Rem3D. Pour cela, nous nous sommes placés dans les mêmes conditions (matériau, process) que l'essai.

Les résultats obtenus sur la figure 6.34 montrent une concordance des résultats d'un point de vue qualitatif. Nous pouvons cependant noter que, dans la zone de peau, les fibres sont majoritairement orientées dans la direction de l'écoulement ($a_{xx} > 0,9$). Nous perdons également la structure coeur peau au fur et à mesure de l'écoulement.

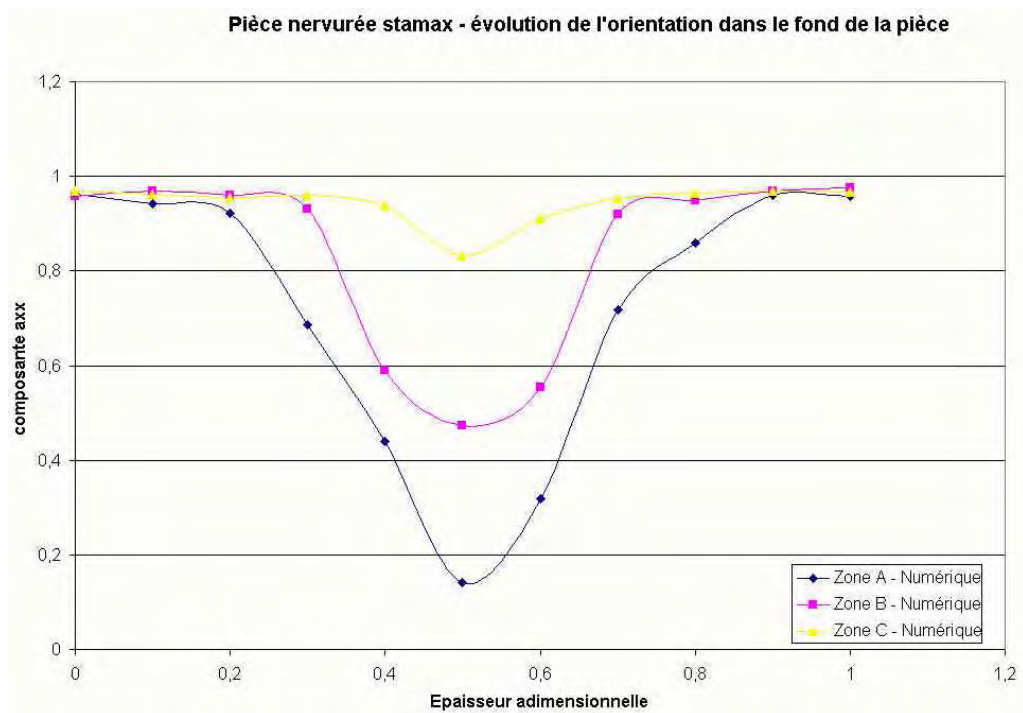


FIG. 6.34 – Résultats numériques : évolution de la composante a_{xx} dans les zones A, B, C

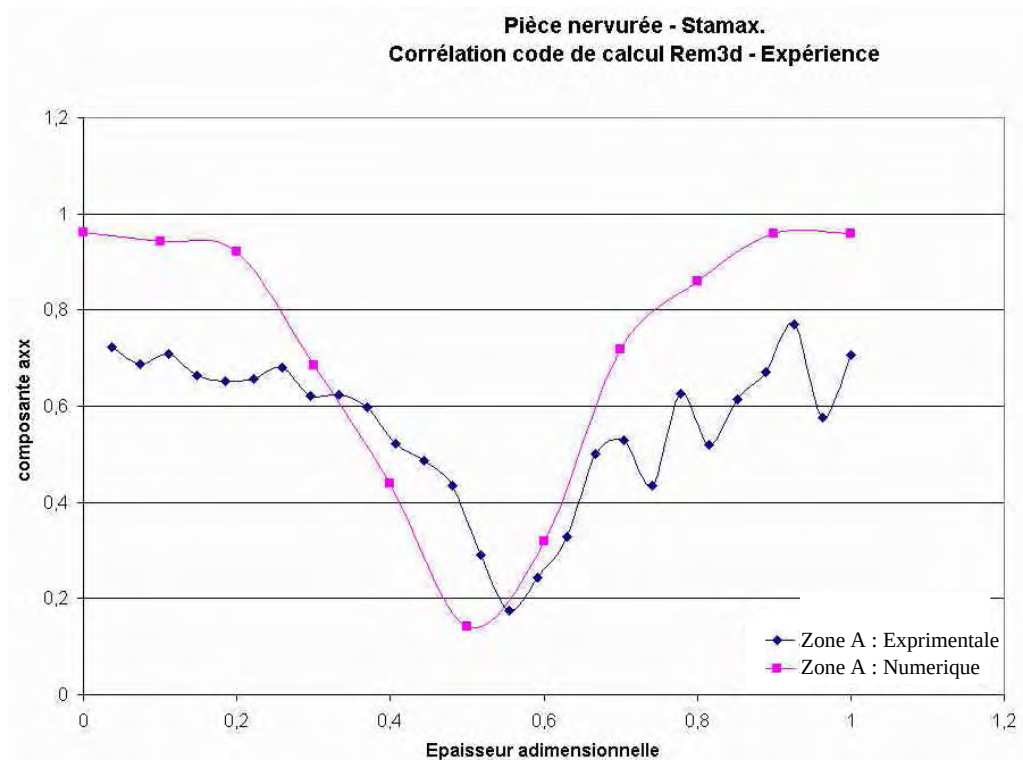
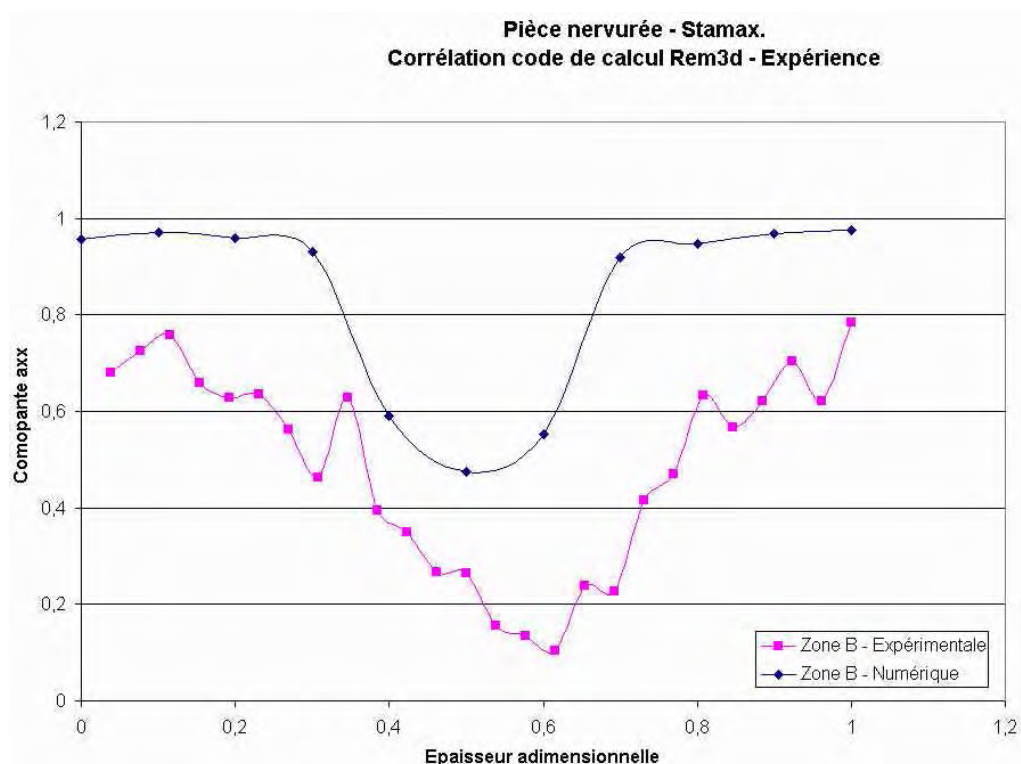
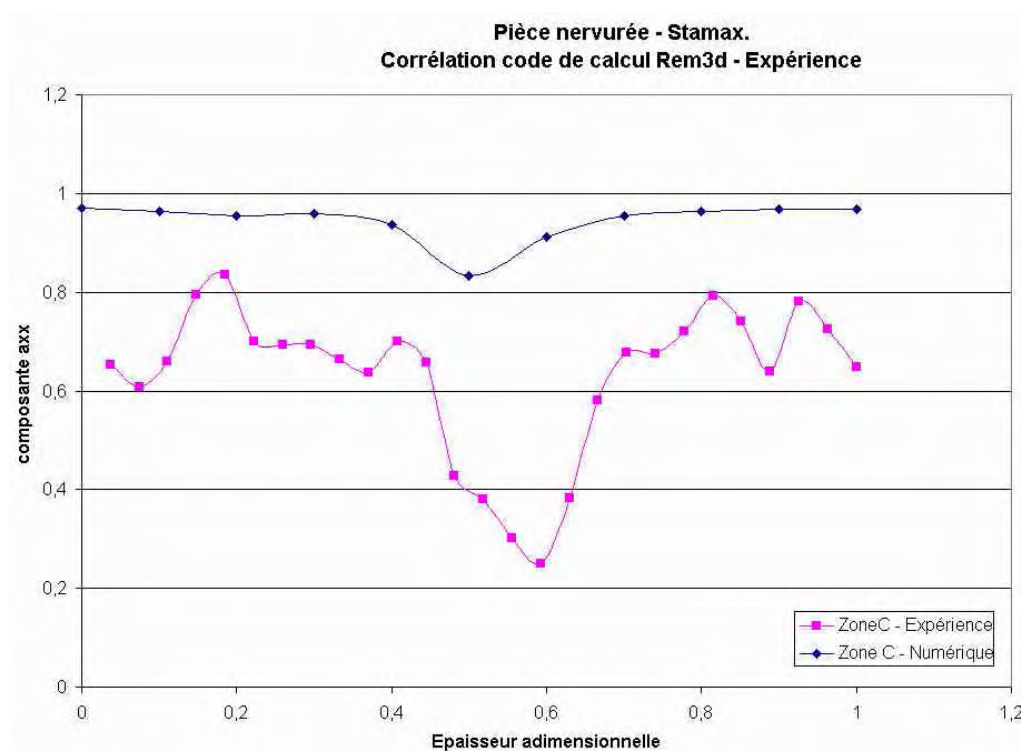


FIG. 6.35 – Corrélation : évolution de la composante a_{xx} en zone A

FIG. 6.36 – Corrélation : évolution de la composante a_{xx} en zone BFIG. 6.37 – Corrélation : évolution de la composante a_{xx} en zone C

Les figures 6.35, 6.36 et 6.37 présentent les résultats issus de la corrélation. Nous pouvons remarquer que les résultats issus de la simulation numérique :

- surestiment l'orientation des fibres dans la zone de peau,
- sous estiment la taille de la zone de coeur. Celle ci est également moins marquée,
- ne présentent pas de décalage de la zone de coeur comme prévu expérimentalement dans les zones B et C,
- présente une perte plus rapide de la structure coeur-peau.

La corrélation entre les résultats issus des mesures 2D pour l'orientation des fibres et le calcul montre ainsi que :

- qualitativement, les résultats sont concordants,
- quantitativement, des différences subsistent.

Une optimisation des paramètres renseignés dans le module fibre de Rem3D ®aurait certainement permis une optimisation de la corrélation.

En effet, nous avons considéré un coefficient d'interaction relativement faible ($C_I = 10^{-4}$). En augmentant ce coefficient, nous augmentons l'interaction entre fibres et donc nous diminuons les valeurs de a_{xx} en zone de peau. Parallèlement, nous aurions dû considérer une équation de fermeture orthotrope compatible avec le coefficient d'interaction considéré. En effet l'équation de fermeture quadratique a la réputation de surestimer l'orientation des fibres dans le sens de l'écoulement.

Nous n'avons pas considéré de couplage rhéologie-orientation dans le cadre de cette étude. Or nous savons, d'après les études menées lors du chapitre précédent, que le couplage a une influence sur la taille et l'intensité de la zone de coeur. La prise en compte du couplage aurait probablement augmenté la taille de la zone de coeur et donc retardé la perte de la structure coeur peau, améliorant ainsi la corrélation d'un point de vue quantitatif.

6.3 Autres études

Nous tenons à préciser que le module fibre de Rem3D a fait l'objet d'autres études, dans le cadre de sujets de stages. Nous pouvons citer :

- l'étude de l'écoulement et de l'orientation des particules dans le procédé de fabrication des éponges. L'objectif de cette étude, proposée par Spontex, était d'optimiser les paramètres du procédé (extrusion d'une solution de viscose, chargée de fibres cellulosiques et de cristaux de sulfate de sodium à travers une filière comportant des alvéoles) afin d'optimiser les propriétés mécaniques de l'éponge [93].
- le calcul de l'orientation des fibres dans un boîtier électrique. Cette étude, proposée par Schneider Electric a consisté à calculer l'orientation des fibres pour des pièces à paroi minces nervurées [21].
- une étude financée par BOSCH a proposé une chaîne de simulation qui pourrait être utilisée pour prédire le gauchissement de pièces injectées en thermoplastiques à fibres courtes [82]. La partie injection a été modélisée sous Rem3D puis les tenseurs d'orientation des fibres et le champ de température calculés ont été transférés sous ABAQUS. Cette étude a aussi permis de comparer REM3D et Mold Flow.

6.4 Conclusion et perspectives

L'étude menée sur la plaque seuil a permis de montrer la bonne concordance des résultats d'un point de vue qualitatif et a mis en exergue le rôle important du couplage rhéologie-orientation pour la prédiction de la structure coeur peau. Globalement, la prise en compte du couplage améliore les résultats obtenus et donc la corrélation. Le couplage rhéologie-orientation a tendance à

- augmenter la taille de la zone de coeur donc son épaisseur ainsi que son intensité c'est à dire augmente la probabilité d'obtenir une orientation transverse à la direction de l'écoulement,
- augmente la surface de la zone de coeur,
- modifie la dynamique de l'écoulement.

Nous pouvons toutefois noter que le maillage utilisé, dans le cadre de cette étude, n'est pas assez fin dans les zones de changement de courbure et la technique de mesure de l'orientation imprécise dans certaines zones. Dans le cadre de travaux futurs, il est important de prendre en compte ces dernières remarques.

La simulation numérique de la traverse a montré la capacité de Rem3D à prévoir l'écoulement 3D d'une pièce à paroi mince nervurée tout en prenant en compte le calcul de l'orientation de fibres. Nous retrouvons, via la simulation numérique de l'écoulement, la position des lignes de soudure conformément aux résultats attendus. Qualitativement les résultats issus de Rem3D sont conformes à ceux que nous retrouvons via les mesures d'orientation de fibres. D'un point de vue quantitatif, des différences subsistent, même si les tendances sont similaires. Des efforts doivent être menés au niveau de la simulation numérique mais également au niveau de la technique de mesure d'orientation de fibres pour améliorer la corrélation.

D'un point de vue numérique, il serait intéressant, dans le cadre de travaux futurs sur la compréhension des mécanismes d'orientation de fibres, de continuer cette étude en modifiant notamment les valeurs des paramètres clefs qui sont le coefficient d'interaction, l'équation de fermeture et la prise en compte du couplage rhéologique. Il serait également intéressant d'étudier l'influence du couplage rhéologie/orientation sur la forme de la zone de coeur.

D'un point de vue expérimental, des essais de mesure d'orientation de fibres doivent également être réalisés en parallèle afin de valider le fait que la zone de coeur soit limitée à une certaine région située dans la zone médiane de la pièce (résultat obtenu numériquement). Enfin une technique de mesure 3D par micro-tomographie pourrait diminuer les erreurs dues aux méthodes d'analyse surfacique et ainsi améliorer la qualité des résultats expérimentaux.

Conclusion et perspectives

L'objet de cette étude est la simulation numérique de l'orientation de fibres en injection de thermoplastiques chargés.

Deux points majeurs ont été abordés dans ces travaux :

- la mise en place, à l'aide du logiciel Rem3D, d'un module indépendant permettant un calcul 3D de l'orientation des fibres,
- l'enrichissement du modèle initial d'orientation par le biais d'un couplage rhéologie - orientation des fibres.

La dernière partie de nos travaux est consacrée à la compréhension des phénomènes d'orientation et à l'influence du couplage rhéologie-orientation sur l'orientation des fibres, basée sur une corrélation entre observations expérimentales et calculs numériques.

Le modèle numérique

Le modèle d'orientation de fibres

L'étude bibliographique sur les modèles macroscopiques décrivant l'orientation des fibres nous a conduit à implémenter le modèle phénoménologique de Folgar et Tucker. Pour la résolution de l'équation d'évolution de Folgar et Tucker, nous avons choisi d'utiliser une méthode de Taylor Galerkin discontinu espace-temps utilisant des éléments P0 en espace. La méthode de résolution intègre, outre une méthode spatiale de type éléments finis Galerkin discontinu d'ordre 0, une méthode espace temps discontinue de haut degré en temps. Cette méthode numérique, inconditionnellement stable, autorise des pas de temps suffisamment élevés pour réduire les temps de calcul. Le module fibre a été écrit en version parallèle afin de pouvoir utiliser plusieurs processeurs et ainsi minimiser les temps de calcul. La version parallèle permet ainsi le calcul de l'orientation des fibres pour des pièces présentant une géométrie 3D complexe.

Il est aussi possible d'introduire plusieurs populations de fibres. L'approche est la même que pour le modèle Pom Pom décrivant certains types de comportements viscoélastiques. Comme dans le cadre de la viscoélasticité, où pour chaque mode nous avons une orientation propre de chaque bras, il est possible de définir plusieurs populations de fibres ayant des rapports de forme, des coefficients d'interaction ou des fractions volumique de fibres différents. Un tenseur d'orientation est ainsi calculé pour chaque population de fibres.

Le couplage rhéologie-orientation

Le modèle de Folgar et Tucker est couplé à la cinématique par le biais d'une loi de comportement propre aux matériaux chargés de fibres. Cette loi de comportement plus enrichie que celle généralement rencontrée pour les matériaux isotropes intègre une contribution des fibres au tenseur des contraintes macroscopiques.

Le couplage entre les fibres et la cinématique est donc pris en compte via une équation constitutive pour le champ des contraintes, résolue par l'entremise d'une méthode éléments finis mixte P_1^+/P_1 . Le tenseur d'orientation est alors considéré connu. Le problème mécanique et le problème de l'orientation sont résolus de manière successive. Il suffit d'adapter le pas de temps pour assurer une bonne précision de la solution calculée. La contribution des fibres au tenseur des contraintes a été traitée de manière implicite.

Les deux précédents modules (le module fibre ainsi que le couplage avec la cinématique) ont été intégrés dans un code d'injection. Les équations de la mécanique ainsi que l'équation d'évolution de l'orientation des fibres sont résolues dans tout le domaine de calcul incluant le domaine vide et le domaine fluide. Il est donc nécessaire de prendre en considération l'évolution de la surface libre qui détermine à chaque instant l'évolution de chaque domaine. Chaque terme des équations mises en jeu est ainsi pondéré par une fonction qui détermine la présence ou non du domaine fluide.

L'étude de sensibilité des paramètres

Validation numérique du code de calcul

L'équation d'évolution de l'orientation a été validée dans divers écoulements de type académique :

- en écoulement de cisaillement,
- en écoulement d'élongation.

Les résultats obtenus concordent d'un point de vue qualitatif et quantitatif aux solutions analytiques. Toutefois, dans un écoulement de cisaillement simple et avec un coefficient d'interaction nul, nous avons noté une sensibilité de la solution au pas de temps dans une région où la fibre tourne rapidement sur elle même. Cette sensibilité au pas de temps doit provenir du traitement de la non linéarité du terme quadratique de l'équation d'évolution de l'orientation. Afin de vérifier la convergence de la solution, il conviendrait, à chaque pas de temps, de faire une méthode de point fixe. Cela revient, d'une certaine façon, à intégrer en temps pour un pas de temps plus petit. C'est la solution que nous avons choisie. Cette sensibilité intervient dans une région qui disparaît lorsque le coefficient d'interaction (C_I) est strictement positif ou lorsque le rapport de forme des particules est considéré infini. Dans des applications de Rem3D, cette sensibilité au pas de temps n'est pas gênante ($C_I > 0$).

Enfin, une étude sur la sensibilité du maillage a montré que la méthode utilisée pour la résolution de l'équation de Folgar et Tucker est certes robuste mais sensible à la finesse du maillage. Pour une bonne prédiction de l'état d'orientation des fibres, notamment dans des zones telles que les zones de coeur, il est nécessaire d'utiliser un nombre d'éléments dans l'épaisseur de la pièce conforme à la finesse des résultats attendus.

Etude de sensibilité des paramètres du modèle

A travers des simulations dans des géométries simples, nous avons mis en évidence la capacité de Rem 3D de prendre en compte :

- les effets 3D de l'écoulement ,
- le déplacement d'une interface fluide,
- le comportement pseudoplastique de la matrice,
- l'orientation des fibres combinée avec le couplage rhéologie-orientation.

Cet outil constitue une nouveauté par rapport aux études antérieures compte tenu de la présence combinée du calcul de l'orientation de fibres et du couplage rhéologie-orientation dans un code de calcul 3D.

L'étude de sensibilité des différents paramètres intervenants dans le modèle d'orientation couplé a permis de mettre en avant divers mécanismes d'orientation :

- En écoulement de cisaillement, l'orientation des fibres en paroi est conditionnée par la valeur du coefficient d'interaction. Ce résultat est important si nous désirons identifier cette valeur pour une suspension de fibres donnée via des essais numériques ou expérimentaux. Un résultat beaucoup moins connu est l'influence du coefficient d'interaction sur l'orientation, en écoulement élongationnel. Au coeur de l'écoulement, le coefficient d'interaction a tendance à orienter les fibres dans une direction transverse à la direction de l'écoulement alors qu'en paroi les fibres ont tendance à se désaligner de la direction d'écoulement.
- Nous avons retrouvé une analogie, en écoulement de cisaillement, entre l'effet du couplage rhéologie-orientation et l'effet rhéofluidifiant du polymère sur l'orientation des fibres. Cependant l'effet du couplage rhéologie-orientation est plus important en écoulement élongationnel : le couplage augmente la taille de la zone de coeur ainsi que la probabilité d'obtenir une fibre orientée dans la direction transverse.

Nous avons montré à travers les simulations en injection notre capacité à prendre en compte l'effet fontaine dans le calcul de l'orientation des fibres au front de matière. Il est ainsi possible d'examiner la position d'une ligne de soudure à travers notamment l'étude de l'orientation des fibres. Ce résultat est important pour le calcul de l'orientation, notamment lorsque les conditions thermiques en paroi créent une couche de polymère solidifiée.

Les calculs effectués sur la contraction-expansion ont pu montrer les effets du couplage rhéologie-orientation en cisaillement et en élongation. Nous avons montré, en injection, un gonflement de la surface libre en sortie de contraction. Ce résultat n'est pas en accord avec les observations expérimentales issues de la bibliographie. Ces observations numériques peuvent être attribuées à la loi de comportement des matériaux chargés qui ne prend pas

en compte les effets élastiques de la matrice.

La corrélation code de calcul - observations expérimentales

La dernière partie de ce document est consacrée à l'application industrielle de l'outil numérique.

Deux exemples ont été traités, avec pour objectif :

- l'apport du couplage dans un seuil d'une plaque de type éprouvette,
- le calcul numérique de l'orientation de fibres dans le remplissage d'une traverse nervurée.

La seuil plaque

L'étude menée sur la plaque seuil a permis de montrer la bonne concordance des résultats d'un point de vue qualitatif et le rôle important du couplage rhéologie-orientation pour la prédiction de la structure coeur peau. Le calcul numérique de l'orientation de fibres a de plus permis de montrer que la zone de coeur, siège d'une orientation transverse à la direction d'écoulement, s'étend à une région limitée située dans la zone médiane de la pièce.

L'introduction d'un couplage rhéologie-orientation a pour conséquence :

- une augmentation de la surface de la zone de coeur,
- un accroissement de l'épaisseur de la zone de coeur,
- une accentuation de l'intensité de la zone de coeur, c'est à dire la probabilité d'obtenir une orientation de fibres transverse à la direction d'écoulement,
- une modification de la dynamique d'écoulement.

L'effet du couplage est plus important dans la région où se trouve le seuil. Dans les régions où le cisaillement est majoritaire, l'effet du couplage devient négligeable.

La traverse nervurée

La simulation numérique de la traverse a montré la capacité de Rem3D à prévoir l'écoulement 3D ainsi que l'orientation des fibres dans une pièce à paroi mince comportant des nervures. Qualitativement les résultats issus de Rem3D sont conformes à ceux que nous retrouvons via les mesures d'orientation de fibres. D'un point de vue quantitatif, des différences subsistent, même si les tendances sont similaires. Ces différences auraient pu être minimisées :

- en optimisant les paramètres intrinsèques au modèle d'orientation, notamment le coefficient d'interaction ou l'équation de fermeture,
- en introduisant le couplage rhéologie-orientation.

Le calcul numérique de l'orientation de fibres a permis, de plus, de mettre en évidence, la prédiction de la position d'une ligne de soudure, conformément à sa position sur pièce réelle. Ce dernier résultat est important pour la prédiction des lignes de soudure, dans le cadre d'applications industrielles.

Perspectives

Nous avons montré, au cours des deux derniers chapitres, la capacité du logiciel Rem3D à calculer l'orientation des fibres pour différents procédés de mise en forme (extrusion et injection) ainsi que sa capacité à prendre en compte la présence des fibres pour la prédiction de l'écoulement (couplage rhéologie-orientation).

Cependant, quelques difficultés d'ordre pratique subsistent :

- l'analyse des résultats n'est pas toujours aisée car les résultats obtenus sont tridimensionnels. Certains résultats tels que la recirculation obtenue en introduisant le couplage dans une contraction 3D n'est pas simple à analyser,
- les tenseurs d'orientation sont obtenus dans le repère global. L'analyse des résultats dans des régions où l'écoulement ne se fait pas dans les directions principales devient difficile (exemple de la traverse nervurée).

Il serait intéressant par exemple de développer les utilitaires nécessaires à l'analyse des résultats dans des repères locaux.

Ce travail de thèse ouvre plusieurs perspectives de recherche tant d'un point de vue purement numérique que application.

D'un point de vue numérique

La méthode numérique utilisée pour la résolution de l'équation de Folgar et Tucker est une méthode $P0$ en espace et la finesse des résultats (notamment la prédiction de la zone de coeur) dépend de la finesse du maillage dans les zones d'étude. Il serait intéressant d'enrichir la méthode numérique pour le calcul de l'orientation de fibres en considérant une interpolation $P1$ en espace. Un solveur $P1$ pourrait s'affranchir de la sensibilité du module fibre au maillage et permettra ainsi une optimisation du nombre d'éléments ce qui améliorera le compromis temps de calcul/finesse des résultats. Des récents développements ont exploré cette voie [101]. La partie hyperbolique de l'équation d'orientation a été stabilisée en utilisant une méthode SUP [35] ou RFB [66]. Les comparaisons entre les deux méthodes ont montré que, malgré un nombre d'inconnues plus important pour la méthode Galerkin discontinue (les inconnues sont sur les éléments et pas sur les noeuds), elle restait performante car les temps d'assemblage et de résolution étaient plus importants pour la méthode SUPG et une approximation $P1$. Toute la difficulté, dans cet exercice, réside dans le fait qu'il faut trouver une méthode à la fois robuste et rapide.

D'un point de vue modélisation

Afin d'améliorer la prédiction du calcul de l'orientation, un travail de modélisation est nécessaire pour améliorer le modèle de Folgar et Tucker ainsi que la loi de comportement rhéologique :

- en introduisant un coefficient d'interaction anisotrope fonction de la géométrie de la pièce pour prendre en compte l'encombrement des fibres dans les restrictions d'épaisseurs,
- en améliorant l'équation de fermeture,

- en enrichissant la loi de comportement rhéologique utilisée.

Notre module fibre peut prendre en compte plusieurs populations de fibres. A l'heure actuelle, l'outil numérique calcule pour chaque population de fibres, une orientation dans tous l'écoulement avec le couplage rhéologie-orientation (le résultat est un tenseur d'orientation sur chaque élément pour chaque population). L'orientation globale (tout comme dans le cas de la viscoélasticité) étant la moyenne des orientations de chaque population de fibres, l'introduction d'une population de fibres ne nous apporte pas d'informations supplémentaires. Ce modèle peut être amélioré en introduisant une "interaction" entre les différentes populations de fibres. Cette interaction nous permettra de prendre en compte notamment une distribution de longueur de fibres. Dans le cadre de cette étude, l'outil micromécanique mis en place par Megally et al. [99] pourrait être un outil très intéressant.

La perspective la plus intéressante vient de la possibilité récente de résoudre l'équation de Fokker-Planck (2.2) par une méthode de réduction de base [13–15]. De cette manière on peut travailler directement avec la fonction de distribution de l'orientation au lieu du tenseur d'orientation d'ordre 2. Cependant, si on n'a plus de relation de fermeture à prendre en compte, il faut quand même introduire un coefficient d'interaction. De plus, l'extracontrainte due à la présence des fibres peut maintenant s'écrire en fonction de cette fonction de distribution et on pourrait ainsi prendre en compte de façon plus naturelle un fluide pseudo-plastique ou viscoélastique.

Enfin, une dernière perspective concerne la mise en place d'un modèle biphasique comprenant une phase fibre évoluant indépendamment dans une phase fluide.

D'un point de vue application

Il serait intéressant, dans le cadre de travaux futurs sur la compréhension des mécanismes d'orientation de fibres, de continuer l'étude réalisée sur la traverse nervurée en modifiant notamment les valeurs des paramètres clefs qui sont le coefficient d'interaction, l'équation de fermeture et la prise en compte du couplage rhéologique. L'ajustement de ces paramètres améliorera la corrélation code de calcul/observations expérimentales et pourra aider à une meilleure compréhension des mécanismes d'orientation impliqués. Il serait également intéressant d'étudier l'influence du couplage rhéologie/orientation sur la forme de la zone de coeur.

D'un point de vue expérimental, des essais de mesure d'orientation de fibres doivent également être réalisés en parallèle afin de valider le fait que la zone de coeur est limitée à une certaine région située dans la zone médiane de la pièce (résultat obtenu numériquement).

Enfin, il est nécessaire d'améliorer la technique de mesure de l'orientation en introduisant par exemple une technique de mesure 3D par micro-tomographie. Cette méthode pourrait diminuer les erreurs dues aux méthodes d'analyse surfacique et ainsi améliorer la qualité des résultats expérimentaux.

Les réponses à toutes ces questions sont les clefs d'une prédiction fiable et précise de l'orientation. Toutefois, le travail de recherche qui a déjà été réalisé peut être utilisé pour des prédictions très raisonnables de l'orientation. L'outil numérique mis en place, dans la

thèse, constitue un outil incontournable pour l'aide à la conception des pièces plastiques chargées de fibres.

Annexe

Les équations de fermeture de types orthotropes

L'équation de fermeture orthotrope de type « ORS »

L'approximation de fermeture de type *ORS* ou *Orthotropic Smooth* est définie de façon à satisfaire la condition d'orthotropie dans un système représenté par les vecteurs propres de $\underline{\underline{a}}_2$. Les valeurs propres de $\underline{\underline{a}}_2$ sont incluses dans l'intervalle $[0, 1]$.

Cintra et Tucker [47] ont montré que tous les états d'orientation possibles peuvent être représentés via un triangle (*UTB*) représenté dans une base de valeurs propres comme le montre la figure (6.38) : Les points *U*, *B* et *T* correspondent respectivement à un état

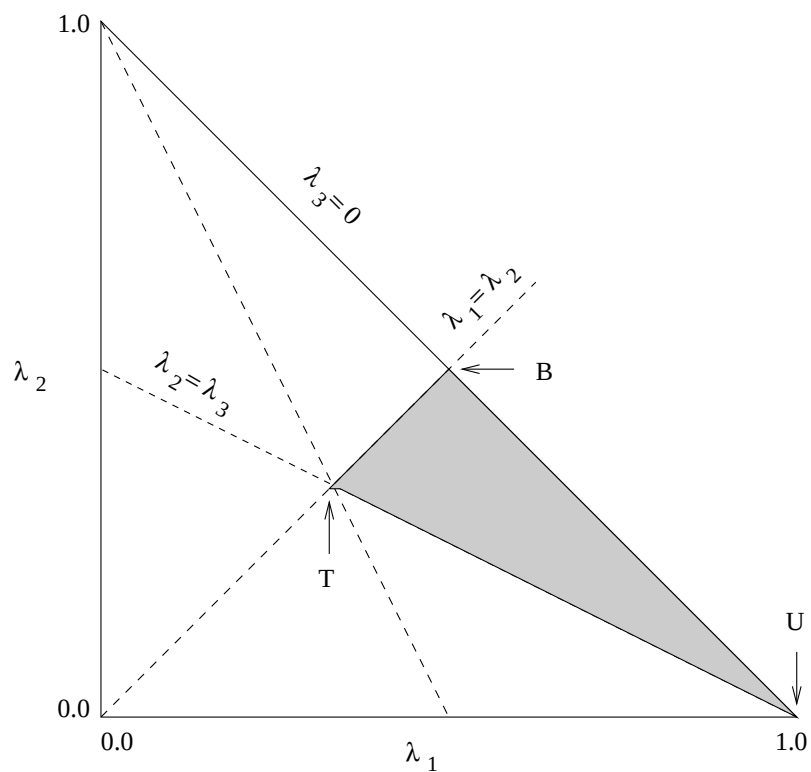


FIG. 6.38 – Domaine de tous les état d'orientation physiquement possible représenté par le triangle *UTB* (Advani et Tucker [2]).

d'orientation uniaxiale des fibres dans la direction E_1 , biaxiale dans le plan (E_1, E_2) et isotrope (triaxiale).

L'approximation de fermeture ORS correspond à une «approximation lissée». Cette approximation consiste à fixer les valeurs de l'orientation aux points U T et B et à utiliser une interpolation linéaire sur l'intérieur du triangle hachuré.

$$\bar{A}_{mm}^{ORS} = \sum_{i=1}^3 C_m^i V_i \quad \text{avec} \quad V_i = (1, \alpha_1, \alpha_2)^T \quad (6.3)$$

L'approximation de fermeture ORS s'écrit :

$$\begin{aligned} \bar{A}_{11} &= -0.15 + 1.15\alpha_1 - 0.10\alpha_2 \\ \bar{A}_{22} &= -0.15 + 0.15\alpha_1 + 0.90\alpha_2 \\ \bar{A}_{33} &= +0.60 - 0.60\alpha_1 - 0.60\alpha_2 \end{aligned} \quad (6.4)$$

Les valeurs de $\bar{A}_{44}$, $\bar{A}_{55}$ et $\bar{A}_{66}$ se déduisent du système 2.39.

L'équation de fermeture orthotrope « ORF »

Cintra et Tucker [47] ont introduit une nouvelle classe de clotûre orthotrope appelé approximation *ORF* ou *Orthotropic fitted* et qui se traduit par :

$$\bar{A}_{mm}^{ORF} = \sum_{i=1}^6 C_m^i V_i \quad \text{avec} \quad V = (1, \alpha_1, \alpha_1^2, \alpha_2, \alpha_2^2, \alpha_1\alpha_2)^T \quad (6.5)$$

Cette approximation orthotrope ajustée est formulée en prenant en compte différents type d'écoulements qui vont générer divers états d'orientation appartenant au triangle (UBT) . La fonction de distribution de l'orientation $\psi(\underline{p}, t)$ est ensuite calculée pour chaque type d'écoulement ce qui nous donne $\underline{a}_2$, $\underline{a}_4$ les valeurs et vecteurs propres de $\underline{a}_2$ et enfin $\underline{\underline{A}}_4$. Les coefficients C_m^i sont subséquemment ajustés aux valeurs obtenues et s'écrivent alors :

$$C_m^i = \begin{pmatrix} 0.060964 & 0.371243 & 0.555301 & -0.369160 & 0.318266 & 0.371218 \\ 0.124711 & -0.389402 & 0.258844 & 0.086169 & 0.796080 & 0.544992 \\ 1.228982 & -2.054116 & 0.821548 & -2.260574 & 1.053907 & 1.819756 \end{pmatrix}$$

Cette approximation de fermeture a été calculé pour $\lambda = 1$ et $C_I = 0.01$. Pour des valeurs de C_I plus faibles l'approximation de fermeture orthotrope ORF introduit des oscillations non physiques comme le montre la figure (6.39) [2].

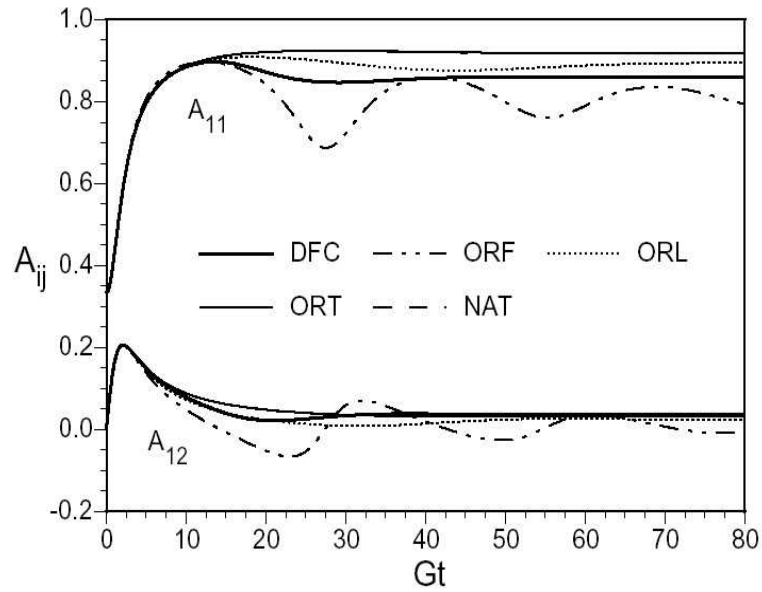


FIG. 6.39 – Composantes du tenseur d'orientation en écoulement de cisaillement simple pour $C_I = 0.001$ - Performances des différentes approximations de fermeture : DFC : fonction de distribution de l'orientation (solution exacte), NAT : approximation naturelle, ORT, ORF, ORL : approximations orthotropes

Afin d'améliorer la précision des équations de fermeture orthotropes pour les faibles valeurs du coefficient d'interaction, Cintra et Tucker ont mis en place une nouvelle approximation de fermeture : ORL valable pour $\lambda = 1$ et $C_I = 0.001$.

L'équation de fermeture orthotrope « ORT »

Cherchant à améliorer l'exactitude des approximations ORF et ORL près des frontières du triangle, Wetzel [141] imposa des contraintes supplémentaires lors de l'ajustement des coefficients. Son approximation de fermeture dite ORT s'affranchie ainsi des problèmes d'oscillations rencontrés par Cintra et Tucker. Cette approximation est valable pour $\lambda = 1$ et $C_I = 0$. Les performances de la clotûre ORT et Naturelle 3D sont quasi identiques.

L'approximation de fermeture ORT s'écrit :

$$\bar{A}_{mm}^{ORT} = \sum_{i=1}^{15} C_m^i V_i \quad (6.6)$$

où V_i désigne les composantes du vecteur $\underline{V}$, lui même défini par :

$$\underline{V} = (1, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_1\alpha_2, \alpha_1^2, \alpha_2^2, \alpha_1^2\alpha_2, \alpha_1\alpha_2^2, \alpha_1^3, \alpha_2^3, \alpha_1^2\alpha_2^2, \alpha_1^3\alpha_2, \alpha_1\alpha_2^3, \alpha_1^4, \alpha_2^4)^T$$

Les coefficients C_m^i s'écrivent :

i	$m = 1$	$m = 2$	$m = 3$
1	0.63625600	0.63625600	2.74053300
2	-1.8726630	-3.3152730	-9.1219650
3	-4.4797080	-3.0370990	-12.257058
4	11.9589560	11.8273280	34.3199020
5	3.84459700	6.88153900	13.8294700
6	11.3420920	8.43677700	25.8684750
7	-10.958262	-15.912066	-37.702911
8	-20.727799	-15.151587	-50.275643
9	-2.1162320	-6.4872890	-10.880176
10	-12.387563	-8.6389140	-26.963691
11	9.81598300	9.32520300	27.3346790
12	3.479.1500	7.74683700	15.2650680
13	11.7492910	7.48146800	26.1134910
14	0.50804100	2.28473500	3.43213800
15	4.88366500	3.59772200	10.6117410

Coefficients C_m^i de l'approximation de fermeture ORT

Il est possible de développer d'autres relations de fermeture orthotropes à paramètres ajustables en utilisant des écoulement variés pour le calcul de la solution de la fonction de distribution de l'orientation ou en proposant une expression différente de $\bar{A}_{mn}$.

Bibliographie

- [1] **Advani S.G.** *Prediction of fiber orientation during processing of short fiber composites*. PhD thesis, University of illinois, 1987.
- [2] **Advani S.G. and Tucker C.L.** The use of tensors to describe and predict fiber orientation in short fiber composites. *Journal of Rheology*, 31 : pp 751–784, 1987.
- [3] **Advani S.G and Tucker C.L.** Closure approximations for three-dimensional structure tensors. *Journal of Rheology*, 34 : pp 367–386, 1990.
- [4] **Agassant J.-F. and Avenas P. and Sergent J.-P. and Vergnes B. and Vincent M.** *La mise en forme des matières plastiques*, chapter 6, pages 394–425. Technique & Documentation, 1996. 3^{ième} édition, revue et augmentée.
- [5] **Ahmed A. and Alexandrou A. N.** Unsteady flow of semi-concentrated suspensions using finite deformation tensors. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 55 : pp 115–136, 1994.
- [6] **Ait-Kadi A. and Grmela M.** Modelling the rheological behaviour of fibre suspensions in viscoelastic media. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 53 : pp 65–81, 1994.
- [7] **Alexandrou A. N. and Ahmed A.** Unsteady flow of dilute fiber suspensions using a generalized eulerian lagrangian approach. *Polymer Composite*, 15 : pp 418–426, 1994.
- [8] **Alexandrou A.N. and Papanastasiou T.C.** Non isothermal extrusion of composite materials. *Intern. Polymer Processing V*, 5 : pp 15–19, 1990.
- [9] **Altan M.C., Advani S.G., Guceri S.G. and Pipes R.B.** Description of the orientation state for fiber suspensions in homogeneous flows. *Journal of Rheology*, 33 : pp 1289–1155, 1989.
- [10] **Altan M.C. and Tang L.** Orientation tensors in simple flows of dilute suspensions of non-brownian rigid elliso ?s, comparison of analytical and approximate solutions. *Rheol. Acta*, 32 : pp 227–244, 1993.
- [11] **Altan M.C., Guceri S. I. and Pipes R.B.** Anisotropic channel flow of fiber suspensions. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 42 : pp 65–83, 1992.
- [12] **Altan M.C., Selcuk S.S., Guceri I. and Pipes R.B.** numerical prediction of three-dimensional fiber orientation in hele-shaw flows. *Polym. Eng. Sci.*, 30 : pp 848–859, 1990.
- [13] **Ammar A., Mokdad B., Chinesta F. and Keunings R.** A new family of solvers for some classes of multidimensional partial differential equations encountered in kinetic theory modeling of complex fluids. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 139 : pp 153–176, 2006.

- [14] **Ammar A., Mokdad B., Chinesta F. and Keunings R.** A new family of solvers for some classes of multidimensional partial differential equations encountered in kinetic theory modelling of complex fluids : Part ii : Transient simulation using space-time separated representations. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 144 : pp 98–121, 2007.
- [15] **Ammar A., Ryckelynck D., Chinesta F. and Keunings R.** On the reduction of kinetic theory models related to finitely extensible dumbbells. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 134 : pp 136–147, 2006.
- [16] **Anczurowski E. and Cox R.G.** The kinetics of flowing dispersions iv. transient orientations of cylinders. *Journal of Colloid and Interface Science*, 23 : pp 547–562, 1967.
- [17] **Ausias G.** *Etude de l'extrusion de tubes en polymères thermoplastiques chargés de fibres courtes*. PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, 1991.
- [18] **Azaiez J.** Constitutive equations for fiber suspensions in viscoelastic media. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 66 : pp 35–54, 1996.
- [19] **Azaiez J., Guenette R. and Ait-Kadi A.** Investigation of the abrupt contraction flow of fiber suspensions in polymeric fluids. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 73 : pp 289–316, 1997.
- [20] **Baloch A. and Webster M. F.** A computer simulation of complex flows of fiber suspensions. *Computer Fluids*, 24 : pp 135–151, 1995.
- [21] **Barbosa P.** Simulation of the injection of reinforced thermoplastics. *Rapport de Master*, 2005.
- [22] **Batchelor G.K.** Slender body theory for particules arbitrary cross section in stokes flow. *Journal of Fluid Mechanics*, 44 : pp 419–440, 1970.
- [23] **Batchelor G.K.** The stress generated in a non dilute suspension of elongated particles by pure straining motion. *Journal of Fluid Mechanics*, 46 : pp 813–829, 1970.
- [24] **Batkam S.** *Thermique multidomaines en simulation numérique du remplissage 3D*. PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2001.
- [25] **Bay R.S.** *Fiber orientation in injection molded composites : A comparaison of theory and experiment*. PhD thesis, University of Illinois at Urbana-Champaign, 1991.
- [26] **Bay R.S. and Tucker C.L. III.** Fiber orientation in simple injection moulding. part i : Theory and numerical methods. *Polymer Composite*, 13 : pp 317–331, 1992.
- [27] **Bay R.S. and Tucker C.L. III.** Fiber orientation in simple injection moulding. part ii : Experimental results. *Polymer Composite*, 13 : pp 332–341, 1992.
- [28] **Bay R.S., Tucker C.L. III and Davis R.B.** Effect of processing on fiber orientation in simple injection moldings. *ANTEC'89, SPE Technical Papers*, New-York - USA : pp 539–542, 1989.
- [29] **Becraft M.L. and Metzner A.B.** The rheology, fiber orientation, and processing behavior of fiber-filled fluids. *Journal of Rheology*, 36 : pp 143–174, 1992.
- [30] **Bigot E.** *Simulation tridimensionnelle du remplissage de corps minces par injection*. PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2001.
- [31] **Bonhome G. and Brouwer T.** Etude de l'orientation de fibre courtes lors de la mise en oeuvre des composites. *Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris*, 1990.

- [32] **Bright P.F. , Crowson F. and Folkes M.J.** A study of the effect of injection speed on fibre orientation in simple moulding of short glass fiber-filled polypropylene. *Journal of Material Sciences*, 13 : pp 2497–2506, 1978.
- [33] **Bright P.F. and Darlington M.W.** Factors influencing fiber orientation and mechanical properties in fibre reinforced thermoplastics injection moldings. *Plastics and Rubber Processing and Application*, 1 : pp 139–147, 1981.
- [34] **Brooks A. N. and Hugues T. J. R.** Streamline upwind petrov galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible navier-stokes equations. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 32 : pp 199–259, 1982.
- [35] **BROOKS A.N. and HUGHES T.J.R.** Streamline upwind/Petrov-Galerkin formulations for convectedominated flows with particular emphasis on incompressible Navier- Stokes equations. *Comp. Meth. in Appl. Mech. Eng.*, 32 : pp 199–259, 1982.
- [36] **Chang R. Y., Shiao F. C. and Yang W. L.** Simulation of director orientation of liquid crystalline polymers in 2d flows. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 55 : pp 1–20, 1994.
- [37] **Chen C. H. and Wang Y. C.** Effective thermal conductivity of misoriented short-fiber reinforced thermoplastics. *Mechanics of Materials*, 23 : pp 217–228, 1996.
- [38] **Chiba K. and Nakamura K.** Numerical solution of fiber orientation in a recirculating flow. part 1 : Orientation of a single fiber in a recirculating flow within a slot. *Trans. J. Text. Mach. Soc. Japan*, 49 : pp 85–91, 1996.
- [39] **Chiba K. and Nakamura K.** Numerical solution of fiber orientation in a recirculating flow. part 2 : Analysis of fiber orientation in a recirculating flow within a slot using a statistical method. *Trans. J. Text. Mach. Soc. Japan*, 49 : pp 107–113, 1996.
- [40] **Chiba K., Kawata K. and Nakamura K.** Numerical solution of fiber orientation in a recirculating flow. part 3 : Fiber orientation in a recirculating flow within a salient corner of an abrupt expansion channel. *Trans. J. Text. Mach. Soc. Japan*, 50 : pp 1–8, 1996.
- [41] **Chiba K., Nakamura K. and Boger D. V.** A numerical solution for the flow of dilute fiber suspensions through an axisymetric contraction. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 35 : pp 1–14, 1990.
- [42] **Chinesta F. and Chaidron G.** On the steady solution of linear advection problems in steday recirculating flows. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 98 : pp 65–80, 2001.
- [43] **Chono S. and Makino M.** Numerical simulation of fiber suspension flow between parallel plates. *Trans-B, Mach. Soc; Japan*, 61 : pp 3190–??, 1995.
- [44] **Chung D. H. and Kwon T. H.** Numerical studies of fiber suspensions in an axisymetric radial diverging flow : the effects of modeling and numerical assumptions. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 107 : pp 67–96, 2002.
- [45] **Chung S. T. and Kwon T. H.** Numerical simulation of fiber orientation in injection molding of short-fiber-reinforced thermoplastics. *Polym. Eng. Sci.*, 35 : pp 604–618, 1995.
- [46] **Chung S. T. and Kwon T. H.** Coupled analysis of injection molding filling and fiber orientationj including in-plane velocity gradient effect. *Polym. Compos.*, 17 : pp 859–872, 1996.

- [47] **Cintra J.S. and Tucker C.L.** Orthotropic closure approximations for flow-induced fiber orientation. *Journal of Rheology*, 39 : pp 1095–1122, 1995.
- [48] **Coupez T.** *Grandes transformations et remaillage automatique*. PhD thesis, Ecole Nationale Sup?ieure des Mines de Paris, 1991.
- [49] **Coupez T.** Stable-stabilized finite element for 3d forming calculation. *Communication interne*, 11, 1996.
- [50] **Coupez T. and Marie S.** From a direct solver to a parallel iterative solver in 3d forming simulation. *International journal of Supercomputer and Application*, 11 : pp 205–211, 1997.
- [51] **Coupez T. and Pichelin E.** Solution of the 3d mold filling by a taylor discontinuous galerkin method. *Fourth World Congress on Computational Mechanics, Argentine*, 1998.
- [52] **Darlington M.W. and Smith A.C.** Some features of the injection moulding of short fibre reinforced thermoplastics in centre sprue-gated cavities. *Polymer Composite*, 8 : pp 16, 1987.
- [53] **Darlington M.W., Gladwell B.K. and Smith G.R.** Stucture and mechanical properties in injection molded discs of glass fibre reinforced polypropylene. *Polymer*, 18 : pp 1269–1274, 1977.
- [54] **Dinh S.M. and Amstrong R.C.** A rheological equation of state for semiconcentrated fiber suspensions. *Journal of Rheology*, 28 : pp 207–227, 1984.
- [55] **Doi M.** Molecular dynamics and rheological properties of concentrated solution of rodlike polymer isotropic and liquid cristallien phasses. *Journal of Polymer Science*, 19 : pp 222–243, 1981.
- [56] **Doi M. and Edwards S.F.** Dynamics of rod-like macromolecules in concentrated solution. part1. *Journal Chem. Soc. Faraday Trans II*, 74 : pp 560–570, 1978.
- [57] **Doi M. and Edwards S.F.** Dynamics of rod-like macromolecules in concentrated solution. part2. *Journal Chem. Soc. Faraday Trans II*, 74 : pp 918–932, 1978.
- [58] **Donea J.** A taylor galerkin method for convective transport problems. *International journal for Numerical methods in Engineering*, 20 : pp 101–119, 1984.
- [59] **Donea J. and Quartapelle L.** An introduction to finite element methods for transient advection problems. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 95 : pp 169–203, 1992.
- [60] **Eshelby J.D.** The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems. *Proc. Roy. Soc. london*, A241 : pp 376–??, 1957.
- [61] **Fan X.-J., Phan-Thien N. and Zheng R.** Simulation of fibre suspension flows by the brownian configuration field method. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 84 : pp 257–274, 1999.
- [62] **Flouret S.** Rhéologie et orientation de fibres dans des pièces injectées en thermoplastique renforcé. *Rapport de Master*, 2001.
- [63] **Folgar F. and Tucker C.L.** Orientation behavior of fibers in concentrated suspensions. *Journal of Reinforced Plastics and Composites*, 3 : pp 98–119, 1984.
- [64] **Folkes M.J. and Russel D.A.M.** Orientation effects during the flow of short fiber reinforced thermoplastics. *Polymer*, 21 : pp 1252–1258, 1980.
- [65] **Fortin M. and Fortin A.** Newer and newer elements for incompressible flows. *Finite element in fluids*, pages pp 171–187, 1985.

- [66] **FRANCA L.P., FREY S.L. and HUGUES T.J.R.** . Stabilized finite element methods : II the incompressible Navier-Stokes equations. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 29 : pp 209–233, 1992.
- [67] **Fujiyama M., Awaya H. and Kimura S.** Mechanical anisotropy of injection pp. *Journal of Applied Polymer Science*, 21 : pp 3291–3309, 1977.
- [68] **Galdi G.P. and Reddy B.D.** Well-posedness of the problem of fiber suspension flows. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 83 : pp 205–230, 1999.
- [69] **Gauthier F., Goldsmith H.L. and Mason S.G.** Particle motions in non-newtonian media. ii. poiseuille flow. *Trans. Soc. Rheol.*, 15 : pp 297–??, 1971.
- [70] **Gillepsie J.W., Vanderschuren J.A. and Pipes R.B.** Process induced fibre orientation : numerical simulation with experimental verification. *Polymer Composite*, 6, 1984.
- [71] **Giroud T.** *Mesure et calcul des contraintes résiduelles dans les pièces injectées en thermoplastique avec et sans fibres de renfort.* PhD thesis, Ecole des Mines de Paris, 2001.
- [72] **Goddard J.D.** Tensile behavior of power-law fluids containing oriented slender fibers. *Journal of Rheology*, 22 : pp 615–622, 1978.
- [73] **Goldsmith H.L. and Mason S.G.** *Rheology : Theory and applications*, volume 4. Academic Press, 1967.
- [74] **Gruau C. and Coupez T.** 3d tetrahedral, unstructured and anisotropic mesh generation with adaptation to natural and multidomain metric. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 194 : pp 4951–4976, 2005.
- [75] **Gupta M. and Wang K.K.** Fiber orientation and mechanical properties of short fibre reinforced injection moulding composites : simulated and experimental results. *Polymer Composite*, 14 : pp 367–382, 1993.
- [76] **Hand G.L.** A theory of anisotropic fluids. *Journal of Fluid Mechanics*, 13 : pp 33–46, 1962.
- [77] **Hand G.L.** A theory of anisotropic fluids. *Journal of Fluid Mechanics*, 13 : pp 33–46, 1962.
- [78] **Harris J.B. and Pittman J.F.T.** Equivalent ellipsoidal axis ratios of slender rod like particules. *Journal of Colloid and Interface Science*, 50 : pp 280–282, 1975.
- [79] **Hatta H. and Taya M.** Effective thermal conductivity of a misoriented short fiber composite. *Journal of Applied Physics*, 58 : pp 2478–2486, 1985.
- [80] **Hinch E.J. and Leal L.G.** Constitutive equations in suspension mechanics. part 1. general formulation. *Journal of Fluid Mechanics*, 71 : pp 481–495, 1975.
- [81] **Hinch E.J. and Leal L.G.** Constitutive equations in suspension mechanics. part 1. approximate forms for a suspension of rigid particles affected by brownian rotations general formulation. *Journal of Fluid Mechanics*, 76 : pp 187–208, 1976.
- [82] **Houlière M.** Analysis of warpage for short fiber reinforced thermoplastic materials. *Rapport de Master, ENSMP*, 2006.
- [83] **Hugues T. J. R.** Multiscale phenomena : Green’s functions, the dirichlet-to-neumann formulation, subgrid scale models, bubbles and the origins of stabilized methods. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 127 : pp 387–401, 1995.

- [84] **Jeffery G.B.** The motion of ellipsoidal particules in a viscous fluid. *Proceeding Royal Society of London*, A102 : pp 161–179, 1922.
- [85] **Jeffery G.B.** A theory of anisotropic fluids. *Proceeding Royal Society of London*, A102 : pp 161–179, 1922.
- [86] **Kabanemi K. K. and H?u J. F.** Modeling and simulation of nonisothermal effects in injection molding of rigid fiber suspensions. *Journal of Injection Molding Technology*, 3 : pp 80–87, 1999.
- [87] **Kabanemi K. K., H?u J. F. and Garcia-Rejon A.** Numerical simulation of the flow and fiber orientation in reinforced thermoplastic injection molded products. *Intern. Polymer Processing*, 2 : pp 182–191, 1997.
- [88] **Kaliske G. and Seifert H.** The extend to which fibre breakdown can be influenced when injection molding glass fibre reinforced thermoplastics. *Plaste U; kaut*, 22 : pp 739–746, 1975.
- [89] **Kamal M.R. and Singh P.** The extend to which fibre breakdown can be influenced when injection molding glass fibre reinforced thermoplastics. *Plaste U; kaut*, 22 : pp 739–746, 1975.
- [90] **Karpov V. and Kaufman M.** Injection molding of glass reinforced nylon 66. *British Plastics*, 38 : pp 498–506, 1965.
- [91] **Kenig S.** Fiber orientation development in molding of polymer composites. *Polymer Composite*, 7 : pp 50–55, 1986.
- [92] **Koch D.L. and Shaqfeh E.S.G.** The average rotation rate of a fiber in the linear flow of semi dilute suspension. *Physics Fluid*, A2 : pp 2093–??, 1990.
- [93] **Lesage C.** Etude de l'orientation de fibres dans du santoprene. *Rapport de Master, ENSMP*, 2005.
- [94] **Lipscomb G.G., Denn M.M., Hur D.U. and Boger D.V.** The flow of fiber suspensions in complex geometries. *Journal of Fluid Mechanics*, 26 : pp 297–325, 1988.
- [95] **Lipscomb G.G., Keunigs R., Marucci G. and Denn M.M.** . A continuum theory for fiber suspensions. *Proc. IX Int. Congress on rheology*, 2 : pp 497–??, 1984.
- [96] **Mackaplow M.B. and Shaqfeh E.S.G.** A numerical study of the rheological properties of suspensions of rigid, non-brownian fibres. *Journal of Fluid Mechanics*, 329 : pp 155–186, 1996.
- [97] **Manzarini M. T. and Manzarini M.** A mixed approach to finite element analysis of hyperbolic heat conduction problems. *International Journal for Numerical Methods for Heat and Fluid Flow*, 8(1) : pp 83–96, 1998.
- [98] **Mason S.G. and Manley R.St.J.** The particules motion in sheared suspensions orientations of rigid rods. *Proceeding Royal Society of London*, 238 : pp 117–131, 1957.
- [99] **Megally A.** *Modélisation de l'orientation de fibres*. PhD thesis, Ecole des Mines de Paris, 2005.
- [100] **Meslin F.** *Propriétés rhéologiques des composites fibres courtes à l'état fondu*. PhD thesis, Ecole Normale Supérieure de Cachan, 1997.
- [101] **Miled H., Silva L., Agassant J.F. and Coupez T.** Numerical simulation of fiber orientation and resulting thermo-elastic behavior in reinforced thermo-plastics. In

- P.P. Camanho et al., editor, *Mechanical response of composites*. ECCOMAS thematic Conference, 2007.
- [102] **Monton I.** *Modelización Numérica Tridimensional de la Inyección de Termoplásticos reforzados con Fibras Cortas*. PhD thesis, Universidad Politecnica de valencia, 2004.
- [103] **Munganga J.M.W., Reddy B.D. and Diatezua K.J.** Aspects of the thermodynamic stability of fibre suspension flows. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 92 : pp 135–150, 2000.
- [104] **Oukaci Y.** Etude du comportement rhéologique et de l'orientation des fibres dans des thermoplastiques injectés. *Rapport de Master, ENSMP*, 2006.
- [105] **Papanastasiou T.C. and Alexandrou A.N.** Isothermal extrusion of non-dilute fiber suspensions. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 25 : pp 313–328, 1987.
- [106] **Petrie C.J.S.** The rheology of fibre suspensions. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 87 : pp 369–402, 1999.
- [107] **Phan-Thien N. , FanX.J. and Tanner R.I.** Folgar-tucker constant for a fiber suspension in a newtonian fluid. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 103 : pp 251–260, 2002.
- [108] **Phan-Thien N. and Graham A.L.** A new constitutive model for fiber suspensions. *Rheology Acta*, 30 : pp 44–57, 1991.
- [109] **Pichelin E. and Coupez T.** A taylor discontinuous galerkin method for the thermal solution in 3d mold filling. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 178 : pp 153–169, 1999.
- [110] **Pipes R.B., Coffin D.W., Shuler S.F. and Simacek P.** Non newtonian constitutive relationships for hyperconcentrated fiber suspensions. *Journal Compos. Mat.*, 28 : pp 343–351, 1994.
- [111] **Poitou A., Chinesta F. and Torres R.** Numerical simulation of the steady recirculating flows of fiber suspensions. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 90 : pp 65–80, 2000.
- [112] **Prager S.** Stress-strain relation in a suspension of dumbbells. *Trans. Soc. Rheol.*, 1 : pp 53–??, 1994.
- [113] **Quibat A. .** Etude de l'orientation des fibres de verre dans des plaques injectées en polypropylène. *Rapport de Master*, 2003.
- [114] **Ramazani M., Ait-Kadi A. and Grmela M.** Rheological modelling of short fiber thermoplastic composites. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 73 : pp 241–260, 1997.
- [115] **Ramazani M., Ait-Kadi A. and Grmela M.** Rheology of fiber suspensions in viscoelastic media : Experiments and model predictions. *Journal of Rheology*, 45 : pp 945–962, 2001.
- [116] **Ranganathan S. and Advani S.G.** Fiber - fiber interaction in homogeneous flows of non dilute suspensions. *Journal of Rheology*, 35 : pp 1499 :1522, 1991.
- [117] **Ranganathan S. and Advani S.G.** A simultaneous solution for flow and fiber orientation in axisymmetric, diverging radial flow. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 47 : pp 107–136, 1993.
- [118] **Reddy B. D. and Mitchell G. P.** Finite element analysis of fibre suspension flows. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 190 : pp 2349 :2367, 2001.

- [119] **Rosenberg J., Denn M. M. and Keunings R.** Simulation of non-recirculating flows of dilute fiber suspensions. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 37 : pp 317–345, 1990.
- [120] **Sepehr M., Ausias G. and Carreau P.J.** Rheological properties of short fiber filled polypropylene in transient shear flow. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 123 : pp 19–32, 2004.
- [121] **Servais C.** *Flow modelling of concentrated long fibre suspensions*. PhD thesis, Ecole Polytechnique de Lausanne, 2000.
- [122] **Servais C., Luciani A., Manson J. A. E.** Fiber fiber interaction in concentrated suspension : dispersed fiber bundles. *Journal of Rheology*, 43 : pp 1005–1018, 1999.
- [123] **Shaqfeh E. and Fredrickson G.** The hydrodynamic stress in a suspension of rods. *Physics Fluid*, A2 : pp 7–24, 1990.
- [124] **Silva L. and Coupez T.** A unified model of the filling and post filling stages in 3d injection moulding simulation. *Polymer Processing Society*, 18 , 2002.
- [125] **Souloumiac B.** *Etude rhéologique, modélisation et simulation numérique de l'écoulement des thermoplastiques chargés de fibres courtes*. PhD thesis, Ecole des Mines de Paris, 1996.
- [126] **Stover C.A., Koch D. and Cohen C.** Observations of fiber orientation in simple shear flow of semi-dilute suspensions. *Journal of Fluid Mechanics*, 238 : pp 277–296, 1992.
- [127] **Tang L. and Altan M.C.** Entry flow of the fibre suspensions in a straight channel. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 56 : pp 183–216, 1995.
- [128] **Thomasset J.** *Rhéologie du polypropylène fondu renforcé par des fibres de verre longues*. PhD thesis, Université de Montréal, 1994.
- [129] **Thomasset J., Carreau P. J., Sanschagrin B. and Ausias G.** Rheological properties of long glass fiber filled polypropylene. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 125 : pp 25–34, 2005.
- [130] **Trevelyan B.J. Mason and S.G.** Particule motions in sheared suspensions : I. rotations. *Journal of Colloid Science*, 6 : pp 354–367, 1951.
- [131] **Tucker C.L.** Flow regimes for fibers suspensions in narrow gaps. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 39 : pp 239–268, 1991.
- [132] **Vanderheyden W. B. Ryskin and G.** Computer simulation of flow and molecular orientation in liquid crystal polymers. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 23 : pp 383–414, 1987.
- [133] **Verleye V.** *Simulation Numérique de l'orientation de fibres en moulage par injection de pièces complexes en matériaux composite*. PhD thesis, Université de Catholique de Louvain, 1995.
- [134] **Verweyst B. E.** *Numerical predictions of flow-induced fiber orientation in three-dimensional geometries*. PhD thesis, University of illinois at Urbana-Champaign, 2002.
- [135] **Verweyst B. E. and Tucker C. L. III.** Fiber suspensions in complex geometries : Flow/orientation coupling. *The canadian Journal of Chemical Engineering*, 80 : pp 1093–1106, 2002.
- [136] **Verweyst B. E., Tucker C. L. III and Foss P. H.** The optimized quasi-planar approximation for predicting fiber orientation in injection-molded composites. *Int. Polym. Process.*, 12 : pp 238–248, 1997.

-
- [137] **Vincent M. and Agassant J.F.** Experimental study and calculations of short glass fibre orientation in centre gated moulded disks. *Polymer Composite*, 7 : pp 73–83, 1986.
 - [138] **Vincent M. and Agassant J.F.** Numerical and experimental study of the fiber motion in reinforced thermoplastic flows. *Rheology Acta*, 26 : pp 144–??, 1988.
 - [139] **Vincent M., Devilers E. and Agassant J.F.** Fiber orientation calculation in injection moulding of reinforced thermoplastics. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 73 : pp 317–326, 1997.
 - [140] **Vincent M., Giroud T., Clarke A. and Eberhardt C.** Description and modeling of fiber orientation in injection molding of fiber reinforced thermoplastics. *Polymer*, 46 : pp 6719–6725, 2005.
 - [141] **Wetzel E.D.** Personal communication. *Internal report*, 1998.
 - [142] **Yamane Y., Kaneda Y. and Dio M.** Numerical simulation of semi-dilute suspension of rodlike particules in shear flow. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 54 : pp 405–421, 1994.

Cette thèse est relative la simulation numérique de l'orientation de fibres en injection de thermoplastiques chargés. Deux points majeurs ont été abordés dans ces travaux :

- la mise en place, à l'aide du logiciel Rem3D, d'un module indépendant permettant un calcul 3D de l'orientation des fibres,
- la prise en compte d'un couplage rhéologie-orientation des fibres.

L'étude bibliographique sur les modèles d'orientations de fibres nous a conduit à implémenter le modèle phénoménologique de Folgar et Tucker. Cette équation d'évolution a été résolue via une méthode de « Taylor Galerkin discontinu espace-temps » utilisant des éléments $P0$ en espace et une méthode espace temps discontinue de haut degré en temps. Cette méthode inconditionnellement stable permet une réduction significative des temps de calcul.

Le modèle de Folgar et Tucker est couplé à la cinématique par le biais d'une loi de comportement intégrant une contribution des fibres au tenseur des contraintes macroscopiques. Cette équation constitutive pour le champ des contraintes a été résolue de manière implicite par l'entremise d'une méthode éléments finis mixte $P1+/P1$ où le tenseur d'orientation n'est plus une inconnue du problème. Nous avons procédé à une résolution successive du problème mécanique et du problème d'orientation de fibres. Finalement le module d'orientation couplé a été intégré dans un code d'injection.

La dernière partie de ce travail, basée sur une corrélation entre observations expérimentales et calculs numériques, est consacrée à la compréhension des phénomènes d'orientation en injection et à l'influence du couplage rhéologie-orientation sur l'orientation finale des fibres.

Mots clefs : polymères renforcés, fibres, orientation, couplage rhéologie-orientation, loi de comportement, éléments finis, Galerkin discontinu, injection.

This work concerns the simulation of fiber orientation in injection of reinforced thermoplastics. Two main points has been treated in this work :

- A fully three-dimensional method has been integrated in Rem3D to calculate fiber orientation,
- The introduction of the coupling between flow and fiber orientation has been considered.

The fiber orientation is described by a second order tensor and its evolution is given by the Folgar and Tucker equation. This equation has been solved by a space time discontinuous Galerkin method, used to reduce the computational time. This method allows a simultaneous resolution in space and time where the orientation tensor is interpolated by constant and discontinuous functions in space ($P0$) and polynomial discontinuous in time functions of degree n .

Moreover the coupling between flow and fiber orientation is taken into account by adding a fiber contribution to the stress tensor. The rheological constitutive equation has been solved implicitly using a mixed $P1+/P1$ velocity-pressure formulation where the orientation tensor is considered known. A decoupled approach has been used in which the flow and fiber calculation has been successively solved. Finally the flow and fiber solver has been integrated on the Rem3D injection software.

The last part of this work, based on a correlation between experimental results and numerical simulation, focused on the understanding of fiber orientation in injection process. Coupling effects on the orientation state are analysed for different configurations.

Key words : reinforced polymers, fiber, orientation, numerical simulation, injection, coupling effects, rheological equation.