

MODELISATION ET HOMOGENEISATION DE POLYMERES THERMOPLASTIQUES RENFORCES

I. Doghri

Université catholique de Louvain, institut de Mécanique, Matériaux et Génie Civil (iMMC), pôle MEMA, bâtiment Euler, 4 Avenue G. Lemaître, B1348 Louvain-la-Neuve, Belgique. *Téléphone* : +32 10 478042, *Télécopie* : +32 10 472180, *Adresse électronique*: *issam.doghri@uclouvain.be*

Mots clés : polymères thermoplastiques, composites, modélisation, homogénéisation.

1. INTRODUCTION

Les matériaux composites au sens large (e.g., epoxy renforcé par des fibres de carbone “continues”, ou polymères thermoplastiques renforcés par des fibres de verre courtes, ou des métaux renforcés par des fibres ou des particules, ou des polymères renforcés par des fibres naturelles, etc.) permettent d’obtenir des propriétés que des matériaux homogènes ne possèdent pas. Par conséquent, les matériaux composites sont de plus en plus utilisés dans plusieurs industries (aéronautique, automobile, transport, électronique, etc.) Cependant, l’hétérogénéité et l’anisotropie des matériaux composites présentent de grands défis pour la conception et la simulation numérique prédictive de produits et structures en composites. Afin de répondre à ces défis, la tendance moderne est la modélisation multi-échelles car elle permet de prédire la réponse effective de matériaux hétérogènes à partir de leur micro-structure, et elle donne même la possibilité de concevoir de nouveaux matériaux avec des propriétés souhaitées ou optimisées. Parmi les méthodes multi-échelles, on distingue celles qui sont basées sur des calculs directs de volumes élémentaires représentatifs (RVE, en anglais) telles que la méthode des éléments finis. Ces méthodes directes peuvent être très précises, mais sont très coûteuses en termes de temps calcul et aussi de temps utilisateur (par exemple, pour obtenir un bon maillage). Par contre, la méthode d’homogénéisation par champs moyens (MFH en anglais, pour « mean-field homogenization ») est une méthode (semi-)analytique qui permet de prédire la réponse de matériaux composites avec une précision acceptable, tout en ayant un coût calcul très largement inférieur à celui des méthodes directes, notamment pour des problèmes anélastiques. Dans un calcul de structures, on couple une méthode par éléments finis au niveau macro à une méthode MFH au niveau micro (en chaque point de Gauss du maillage macro).

Cette présentation comprend deux parties. Dans la première, on développe un modèle constitutif pour des polymères thermoplastiques. Dans une seconde partie, on présente une méthode MFH pour des polymères thermoplastiques renforcés.

2. UN MODELE CONSTITUTIF POUR DES POLYMERES THERMOPLASTIQUES

Les polymères thermoplastiques présentent un comportement anélastique complexe, illustré notamment sous des chargements non-monotones. Ceci a été expliqué ou modélisé par la viscoélasticité (VE), la viscoplasticité (VP), l’écrouissage isotrope, l’écrouissage cinématique (effet Bauschinger) et l’endommagement. Plusieurs généralisations de la mécanique de l’endommagement continu (CDM en anglais) ont été proposés pour des polymères (Voyiadjis and Dorgan, 2007; Darabi et al., 2011; Voyiadjis et al., 2011; Abu Al-Rub and Darabi, 2012; Voyiadjis et al., 2012). Krairi et Doghri (2014) ont proposé récemment un modèle constitutif pour modéliser le comportement anélastique et l’endommagement progressif de polymères thermoplastiques sous l’hypothèse de petites déformations et sous conditions isothermes. Ce modèle contient deux contributions importantes. La première est qu’il couple la viscoélasticité, la viscoplasticité, l’écrouissage isotrope, l’écrouissage cinématique non-linéaire et l’endommagement ductile. La seconde contribution est que

le modèle est développé rigoureusement suivant le formalisme de la thermodynamique des processus irréversibles, sous des chargements multi-axiaux, non-monotones et non-proportionnels. Le formalisme thermodynamique est inspiré des travaux de Christensen (1982) en viscoélasticité linéaire et ceux de (Lemaitre, 1985b; Chaboche, 1997) sur la viscoplasticité. Le modèle suppose une décomposition de la déformation totale en parties viscoélastique et viscoplastique. La contrainte de Cauchy non-endommagée ou effective est reliée à l'histoire des déformations VE via une intégrale de Boltzmann. Les modules de relaxation VE en cisaillement et en compressibilité suivent des séries de Prony générales, avec des nombres arbitraires de temps de relaxation. La réponse VP combine l'écrouissage isotrope et l'écrouissage cinématique non-linéaire. L'évolution de l'endommagement ductile dépend de celle du taux de déformation viscoplastique accumulée. Des expressions analytiques simples de la force thermodynamique Y associée à la variable d'endommagement D , et des différents termes dissipatifs sont trouvées. Les effets de la dépendance du temps, de la vitesse de déformation, de l'effet Bauschinger et de l'endommagement ductile sont modélisés.

2.1 Equations constitutives

La dérivation des équations constitutive est détaillée dans (Krairi et Doghri, 2014). On donne ci-après un résumé des équations obtenues.

$$\left\{ \begin{array}{l} \boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}^{ve} + \boldsymbol{\varepsilon}^{vp} \\ \boldsymbol{\sigma}(t) = (1 - D(t)) \int_{-\infty}^t \mathbf{C}^{ve}(t - \eta) : \frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}^{ve}(\eta)}{\partial \eta} d\eta, \\ \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{vp} = \frac{3}{2} \frac{(\tilde{\mathbf{s}} - \mathbf{X})}{(\tilde{\boldsymbol{\sigma}} - \mathbf{X})_{eq}} \dot{p}, \\ \dot{\mathbf{X}} = (1 - D)(a\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{vp} - b\mathbf{X}\dot{p}), \\ \dot{r} = (1 - D)\dot{p} = g_v((\tilde{\boldsymbol{\sigma}} - \mathbf{X})_{eq}, r) \geq 0, \text{ if } f > 0 \text{ otherwise : } \dot{r} = 0 \\ \dot{D} = \left(\frac{Y}{S}\right)^s \dot{p} \geq 0 \text{ if } p > p_D \text{ until } D = D_c \rightarrow \text{crack initiation} \\ Y = \frac{\tilde{\mathbf{s}}_\infty : \tilde{\mathbf{s}}_\infty}{4G_\infty} + \frac{(\tilde{\sigma}_{H_\infty})^2}{2K_\infty} + \sum_{i=1}^I \frac{\tilde{\mathbf{s}}_i : \tilde{\mathbf{s}}_i}{4G_i} + \sum_{j=1}^J \frac{(\tilde{\sigma}_{H_j})^2}{2K_j} \end{array} \right.$$

Le variables internes sont désignées par

$$(\boldsymbol{\varepsilon}^{vp}, \mathbf{V} = \{r, \boldsymbol{\alpha}, D\})$$

Elles représentent respectivement : la déformation VP (tenseur d'ordre 2 symétrique), l'écrouissage isotrope (un scalaire), l'écrouissage cinématique (un tenseur d'ordre 2 symétrique) et l'endommagement ductile (un scalaire). Les forces thermodynamiques associées à ces variables sont

$$(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{A} = \{R, \mathbf{X}, -Y\})$$

et représentent respectivement la contrainte de Cauchy, le rayon de la surface seuil dans l'espace des contraintes, la translation du centre de la surface dans cet espace et la force thermodynamique associée à l'endommagement. Par ailleurs, on définit la contrainte de Cauchy effective (ou non-endommagée) comme suit :

$$\tilde{\sigma}(t) = \frac{\sigma(t)}{1 - D(t)}$$

Par rapport au modèle VE-VP de (Miled et al., 2011) le présent modèle apporte en plus : l'écrouissage cinématique non-linéaire, l'endommagement ductile et une écriture thermodynamique.

2.2 Simulations numériques

On donne ci-dessous quelques résultats numériques extraits de (Krairi et Doghri, 2014). Les données complètes ainsi que d'autres résultats se trouvent dans cette référence.

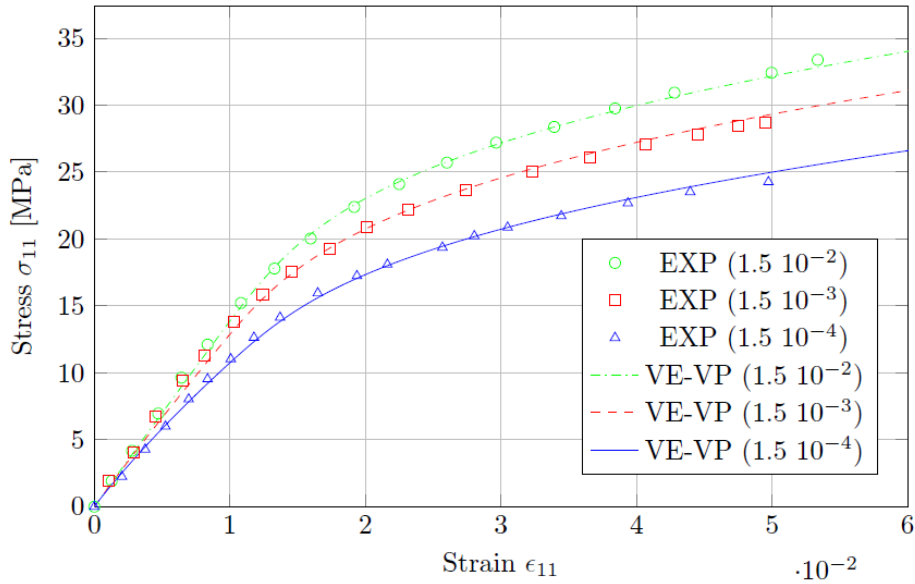


Figure 4: Prediction of the Polypropylene response under tensile loading with different strain rates. Fitted material parameters are listed in table 1. Dots stands for experimental results Kästner et al. (2012) and solid lines for numerical simulations with VE-VP model.

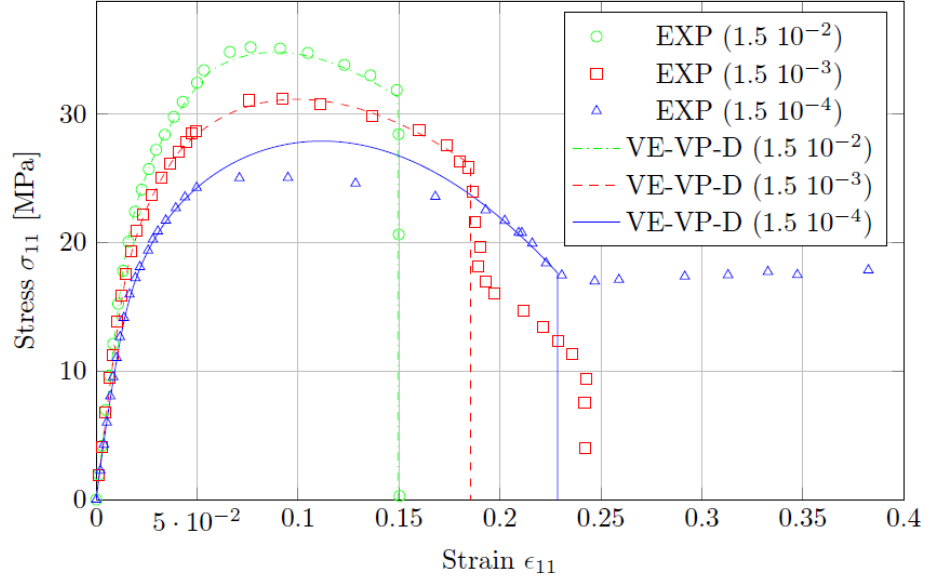


Figure 5: Prediction of the Polypropylene response under tensile loading with different strain rates. Fitted material parameters are listed in table 1. Dots stands for experimental results Kästner et al. (2012) and solid lines for numerical simulations with VE-VP-D model.

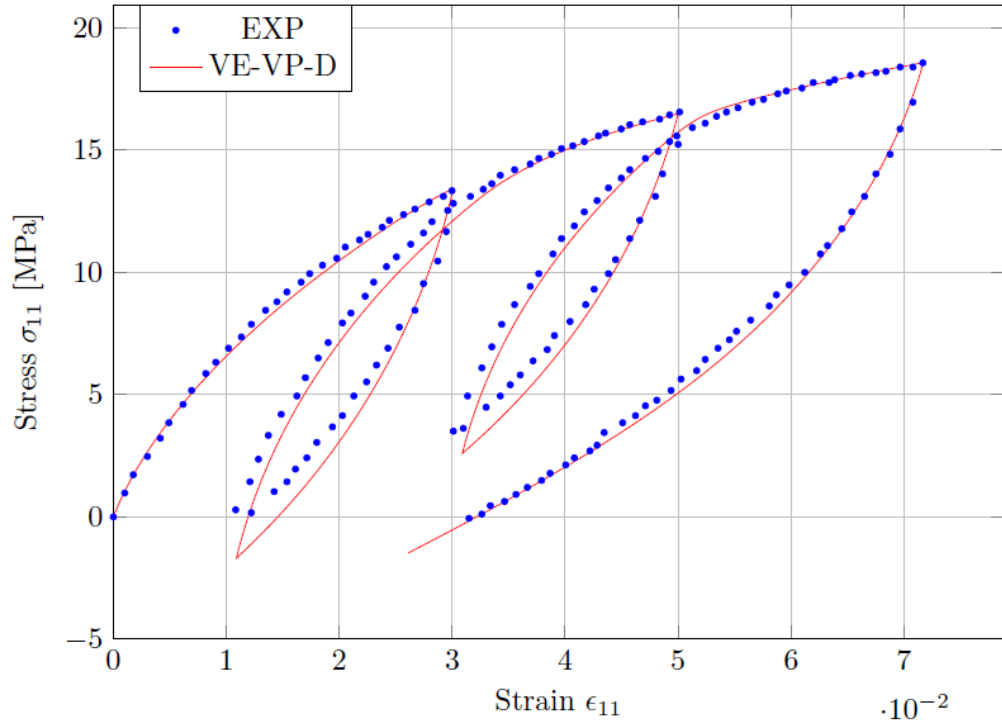


Figure 7: Prediction of the behaviour of HDPE under cyclic tensile loading at a strain rate of $(\pm 10^{-4} s^{-1})$: (a) Undamaged using VE-VP model; (b) VE-VP-D model coupled with damage. Fitted material parameters are listed in table 1.

3. HOMOGENEISATION DE POLYMERES THERMOPLASTIQUES RENFORCES

Les méthodes d'homogénéisation par champs moyen (MFH en anglais, pour « mean-field homogenization ») sont des méthodes de transition d'échelles basées sur des relations supposées entre les moyennes de déformations ou de contraintes entre les différentes phases d'un matériau composite au sens large. En général, on arrive à simplifier le problème à celui d'une inclusion ellipsoïdale isolée dans une matrice fictive et « infinie » soumise à certaines conditions sur la frontière. Les propriétés de cette matrice fictive et les conditions frontières font la spécificité d'un modèle MFH par rapport à un autre. En élasticité linéaire, le problème de l'inclusion ellipsoïdale isolée a une solution exacte due à Eshelby (1957), qui est à l'origine du coût calcul très réduit des méthodes MFH. Un modèle MFH particulièrement représentatif pour les composites est celui de Mori-Tanaka (1973) qui considère le vrai matériau matrice et des déplacements linéaires sur la frontière correspondant à la moyenne des déformations dans la phase matrice du vrai composite (à inclusions multiples).

Dès qu'on sort de l'élasticité linéaire, il devient difficile de généraliser MFH, mais le cadre général consiste à définir un composite linéaire de comparaison (LCC en anglais), qui est souvent défini en deux étapes. D'abord, une linéarisation du comportement local (ou micro, par phase). On trouve ainsi notamment les approches sécante, incrémentale tangente et affine. La seconde étape consiste à définir un matériau de comparaison fictif où la phase anélastique est remplacée par une phase à opérateur tangent ou sécant uniforme.

Dans ce cadre général, un modèle MFH a été développé pour des matériaux thermoplastiques renforcés. La matrice obéit au modèle couplé viscoélastique-viscoplastique (VE-VP) de la section 2. Pour le moment, l'écrouissage cinématique et l'endommagement n'ont pas encore été pris en compte et la formulation MFH est celle proposée par Miled et al. (2013). Une méthode de linéarisation incrémentalement affine a été développée sur base du modèle constitutif VE-VP local et de l'algorithme numérique correspondant proposé par Miled et al. (2011). La formulation incrémentalement affine dérive une relation entre les incréments de contrainte et de déformation totale via un opérateur tangent algorithmique. Le point de départ est une linéarisation des équations d'évolution du tenseur de déformation plastique et des autres variables internes au début d'un pas de temps autour des valeurs en fin de pas. Ensuite, on utilise une intégration numérique dans le temps suivant un schéma d'Euler implicite. On trouve ainsi un comportement local linéarisé sous une forme similaire à celle de la thermo-élasticité linéaire, ce qui permet d'utiliser des modèles MFH - comme celui de Mori-Tanaka (MT)- par pas de temps et itérativement.

3.1 Equations

On donne ci-dessous quelques équations importantes. Le reste des équations, et le détail des dérivations sont donnés dans (Miled et al., 2013). Le développement de la méthode de linéarisation incrémentalement affine donne lieu à l'équation suivante :

$$\Delta \sigma = C^{\text{alg}}(t_{n+1}) : (\Delta \epsilon - \Delta \epsilon^{\text{af}})$$

A gauche de l'égalité, on a l'incrément de la contrainte de Cauchy, alors qu'à droite on voit apparaître l'opérateur tangent algorithmique, l'incrément de déformation totale et l'incrément de déformation affine (une nouvelle variable introduite par la méthode). Par ailleurs, en thermoélasticité linéaire, les relations locales s'écrivent :

$$\begin{aligned}\sigma(x) &= \mathbf{E}^{\text{el}}(x) : (\epsilon(x) - \epsilon^{\text{th}}(x)), & \epsilon^{\text{th}}(x) &= \alpha(x) \Delta T \\ &= \mathbf{E}^{\text{el}}(x) : \epsilon(x) + \beta(x), & \beta(x) &= -\mathbf{E}^{\text{el}}(x) : \alpha(x) \Delta T\end{aligned}$$

On voit donc qu'il y a une similarité entre les équations linéarisées en VE-VP et celles de la thermo-élasticité linéaire, si on effectue les substitutions suivantes à chaque pas de temps et chaque itération :

$$\sigma \longrightarrow \Delta\sigma, \quad \mathbf{E}^{\text{el}} \longrightarrow \mathbf{C}^{\text{tan}}, \quad \epsilon \longrightarrow \Delta\epsilon, \quad (\beta) \longrightarrow -\mathbf{C}^{\text{tan}} : \Delta\epsilon^{\text{af}}$$

Cette substitution permet d'utiliser les modèles MFH de la thermoélasticité linéaire. Par exemple pour un composite à deux phases (matrice et inclusions), donc une au moins est VE-VP, la moyenne des contraintes dans le composite est donnée comme suit :

$$\begin{aligned}\langle \Delta\sigma \rangle &= \bar{\mathbf{C}} : \langle \Delta\epsilon \rangle - v_0 \hat{\mathbf{C}}_0^{\text{tan}} : \Delta\hat{\epsilon}_0^{\text{af}} - v_1 \hat{\mathbf{C}}_1^{\text{tan}} : \Delta\hat{\epsilon}_1^{\text{af}} \\ &\quad - v_1 (\hat{\mathbf{C}}_1^{\text{tan}} - \hat{\mathbf{C}}_0^{\text{tan}}) : (\mathbf{A} - \mathbf{I}) : (\hat{\mathbf{C}}_1^{\text{tan}} - \hat{\mathbf{C}}_0^{\text{tan}})^{-1} : (\hat{\mathbf{C}}_1^{\text{tan}} : \Delta\hat{\epsilon}_1^{\text{af}} - \hat{\mathbf{C}}_0^{\text{tan}} : \Delta\hat{\epsilon}_0^{\text{af}})\end{aligned}$$

Où $\mathbf{A}$ est un un tenseur de concentration de déformations, et le « chapeau » (^) désigne des opérateurs de comparaison (qui sont par définition supposés uniformes par phase). Pour les détails, voir (Miled et al., 2013).

3.2 Simulations numériques

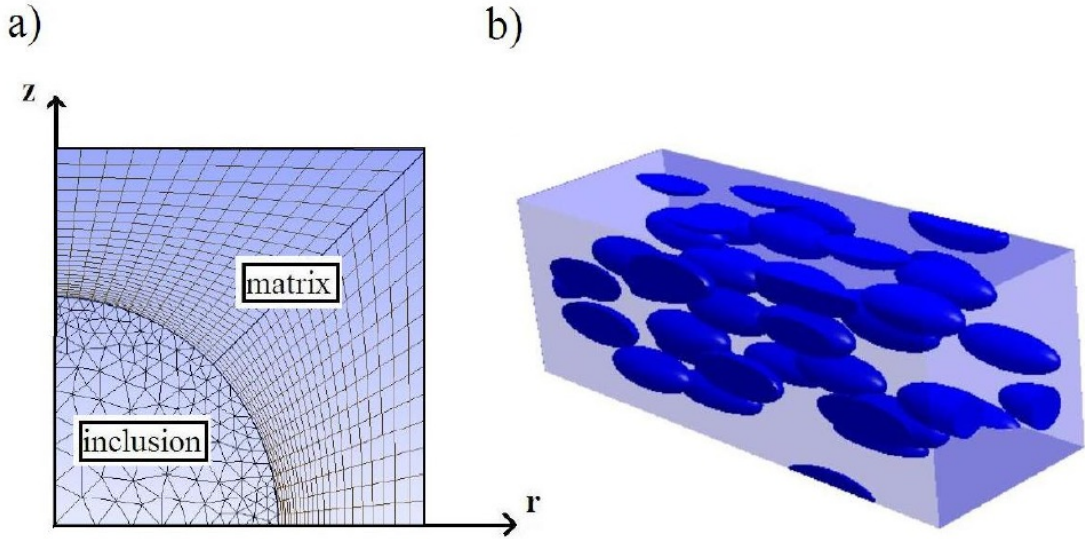


Figure 1: (a) 2D Unit cell representation of a two-phase composite with periodic microstructure under axisymmetric loading, (b) Representative volume element (RVE) containing ellipsoidal inclusions

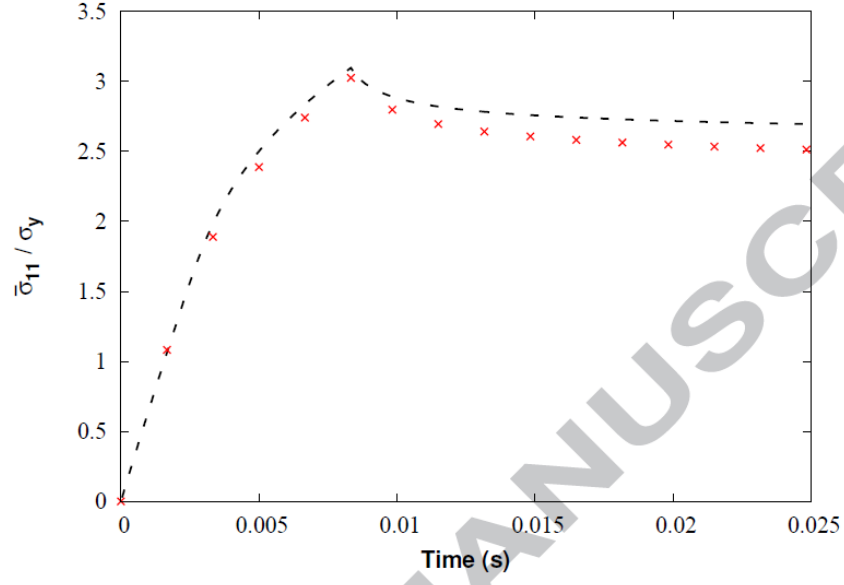


Figure 8: Finite-element (Symbols) and incrementally affine homogenization (dashed line) results for a volume fraction of inclusions of 15%. Two-stage uniaxial load: (1) strain rate of 6 s^{-1} up to time $t = 0.00833\text{ s}$, (2) relaxation. Fitted matrix material parameters are listed in Table 1

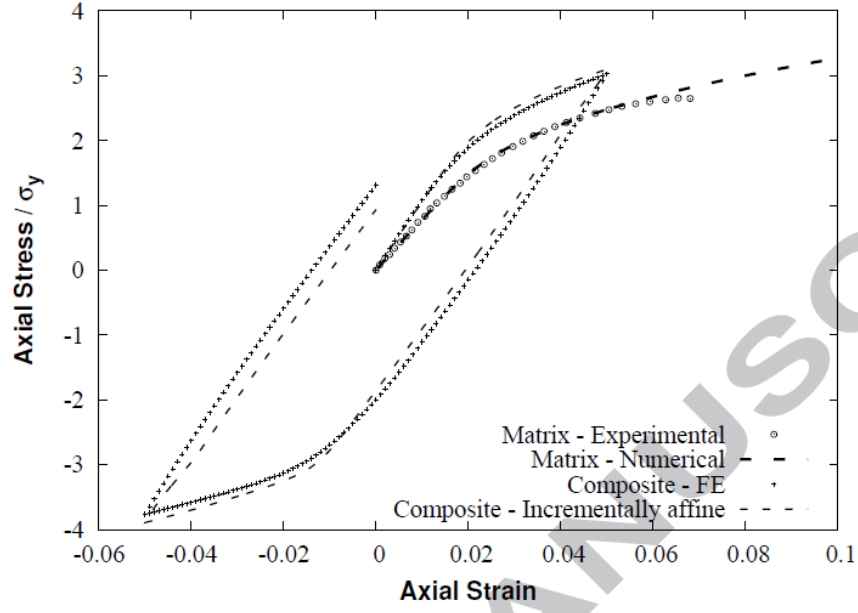


Figure 5: Polycarbonate matrix reinforced with elastic spherical particles. Uniaxial cyclic loading at the strain rate of 6 s^{-1} for a volume fraction of inclusions equal to 15%. Comparison between FE simulations and predictions of the proposed incrementally affine theory. Fitted matrix material parameters are listed in Table 1

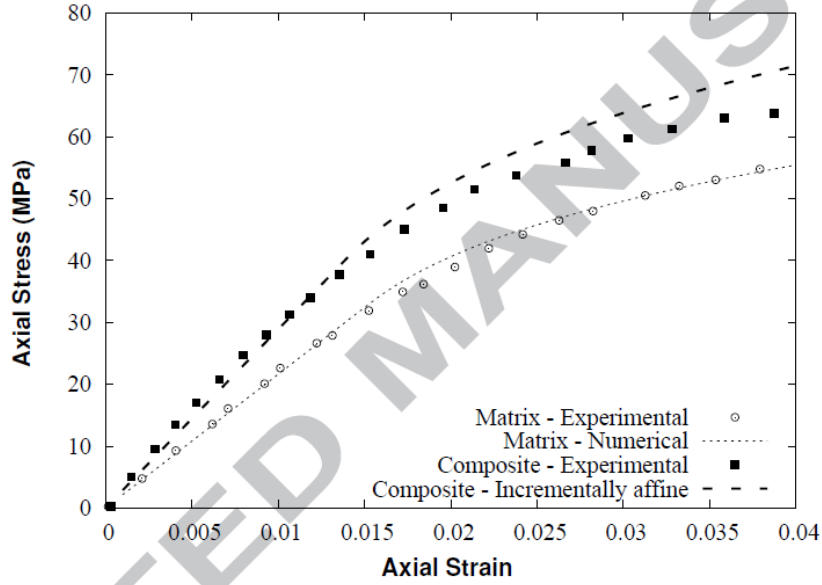


Figure 14: Polycarbonate matrix reinforced with 10% of short glass fibers (with an aspect ratio of the order of 100) under uniaxial tension test at the strain rate of 0.0011 s^{-1} . Experimental data from Drozdov et al. (2003). Fitted matrix material parameters are listed in Table 1 (except that $\sigma_y = 32 \text{ MPa}$ and $k = 120 \text{ MPa}$)

4. DISCUSSION ET CONCLUSIONS

Des résultats récents concernant la modélisation et l'homogénéisation de matériaux polymères renforcés ont été présentés. Pour un polymère homogène, un modèle constitutif couplant la viscoélasticité (VE), la viscoplasticité (VP) et l'endommagement ductile a été développé dans le cadre du formalisme de la thermodynamique des processus irréversibles. La partie VE n'est pas restreinte à un modèle en particulier mais suppose des séries de Prony générales pour les modules de relaxation. La partie VP combine l'écrouissage isotrope et un écrouissage cinématique non-linéaire. L'évolution de l'endommagement ductile est liée à celle du taux de déformation viscoplastique accumulée. Les résultats numériques sont prometteurs. Néanmoins, le modèle doit être enrichi suivant au moins une des voies suivantes : couplage thermique et auto-échauffement, grandes déformations, prise en compte de la pression hydrostatique dans le critère VP, endommagement unilatéral traction-compression.

Pour un polymère renforcé par des fibres ou des des particules, une formulation d'homogénéisation par champs moyens (MFH en anglais) a été développée. Le point essentiel est la linéarisation des équations constitutives locales (micro)VE-VP suivant une méthode dite incrémentalement affine. Ceci permet d'utiliser des modèles MFH de la thermoélasticité linéaire tels que celui de Mori-Tanaka. Là aussi, les résultats numériques sont prometteurs mais la précision de la méthode doit être améliorée, notamment pour des renforts fibreux. Par ailleurs, la formulation MFH n'inclut pas pour le moment les parties du comportement local concernant l'écrouissage cinématique et l'endommagement.

Les modèles développés n'ont pas encore été appliqués à des matériaux bio-sourcés, bien qu'ils soient utilisables a priori, en tenant compte de certaines spécificités. Par exemple, du point de vue modélisation, les différences notables entre des fibres végétales et des fibres de verre par exemple sont les suivantes. Les premières ont une variabilité assez importante de certaines de leurs propriétés, il y aussi une plus grande dispersion concernant leur longueur, elles ont tendance à devenir curvilignes et non plus droites avec l'augmentation de leur facteur de forme, et elles ne sont pas en général bien dispersées dans le volume (effet d'amas). Ces aspects ressemblent à ceux observés pour les fibres de verre dites longues (facteur de forme supérieur à 100) mais pas « continues », qui sont l'objet de beaucoup d'intérêt en industrie automobile. Différents travaux de recherche sont actuellement en cours pour étendre les méthodes d'homogénéisation à des polymères thermoplastiques renforcés par des fibres de verre longues, qui peuvent être adaptés aux polymères renforcés par des fibres naturelles.

QUELQUES REFERENCES

Miled, B., I. Doghri, L. Delannay, "Coupled viscoelastic-viscoplastic modeling of homogeneous and isotropic polymers: numerical algorithm and analytical solutions", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 200, 3381-3394, 2011.

Miled, B., I. Doghri, L. Brassart, L. Delannay, "Micromechanical modeling of coupled viscoelastic-viscoplastic composites based on an incrementally affine formulation", *International Journal of Solids and Structures*, 50/10, 1755-1769, 2013.

Krairi, A., I. Doghri, "A thermodynamically-based constitutive model for thermoplastic polymers coupling viscoelasticity, viscoplasticity and ductile damage", *International Journal of Plasticity*, submitted, 2014.