



**HAL**  
open science

# Simulation numérique du comportement et de l'endommagement d'un matériau composite à fibres courtes : application au PA6/GF30 sous conditions environnementales

Ahmed Ammar

► **To cite this version:**

Ahmed Ammar. Simulation numérique du comportement et de l'endommagement d'un matériau composite à fibres courtes : application au PA6/GF30 sous conditions environnementales. Génie mécanique [physics.class-ph]. Université de Picardie Jules Verne; École nationale d'ingénieurs de Sfax (Tunisie), 2021. Français. NNT : 2021AMIE0080 . tel-03953734

**HAL Id: tel-03953734**

**<https://theses.hal.science/tel-03953734v1>**

Submitted on 24 Jan 2023

**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.



## **Thèse de Doctorat en cotutelle**

*Mention : Sciences pour l'ingénieur  
Spécialité : Mécanique*

Présentée à *l'Ecole Doctorale en Sciences Technologie et Santé (ED 585) de  
l'Université de Picardie Jules Verne*

*et*

*à l'Ecole Doctorale Sciences et Technologies « EDST »  
de l'Ecole Nationale d'Ingénieurs de Sfax*

par

**AMMAR Ahmed**

pour obtenir le grade de Docteur de l'Université de Picardie Jules Verne

***Simulation numérique du comportement et de  
l'endommagement d'un matériau composite à fibres courtes:  
Application au PA6/GF30 sous conditions environnementales***

**Soutenue le 09/12/2021, après avis des rapporteurs, devant le jury d'examen :**

**M. I. IORDANOFF, Directeur de Recherche, ENSAM  
M. J.Y. DELENNE, Directeur de Recherche, INRAE  
M. S. MEZLINI, Professeur des Universités, ENIM  
M. Y. MAALEJ, Professeur des Universités, ENIT  
M. H. HADDAD, Maître de Conférences, UPJV  
M. M. GUESSASMA, Professeur des Universités, UPJV  
M. N. HADDAR, Professeur des Universités, ENIS  
M. W. LECLERC, Maître de Conférences, UPJV**

**Président  
Rapporteur  
Rapporteur  
Examineur  
Examineur  
Directeur de thèse  
Directeur de thèse  
Co-Directeur**

# Remerciement

Il me sera très difficile de remercier tout le monde car c'est grâce à l'aide de nombreuses personnes que j'ai pu mener cette thèse à son terme.

Je voudrais tout d'abord remercier grandement mes directeurs de thèse, Mohamed GUESSASMA et Nader HADDAR, pour toute leur aide. Je suis ravi d'avoir travaillé en leur compagnie car outre leur appui scientifique, ils ont toujours été là pour me soutenir et me conseiller au cours de l'élaboration de cette thèse.

Je tiens à remercier Willy LECLERC, co-directeur de thèse, qui m'a encadré tout au long de cette thèse et qui m'a fait partager ses brillantes intuitions.

Jean-Yves DELENNE et Salah MEZLINI m'ont fait l'honneur d'être rapporteurs de ma thèse, ils ont pris le temps de m'écouter et de discuter avec moi. Leurs remarques m'ont permis d'envisager mon travail sous un autre angle. Pour tout cela je les remercie.

Je tiens à remercier Ivan IORDANOFF pour avoir accepté de participer à mon jury de thèse et pour sa participation scientifique ainsi que le temps qu'il a consacré à ma recherche.

Je remercie également Yamen MAALEJ pour l'honneur qu'il me fait d'être dans mon jury de thèse.

Je tiens à remercier particulièrement Hamza HADDAD pour toutes nos discussions et ses conseils qui m'ont accompagné tout au long de cette thèse.

Il m'est impossible d'oublier ma famille qui m'a toujours encouragé et soutenu tout au long de ma carrière. Je pense à ma mère Mounira et mon père Mansour, ainsi que mes chers frères Khaled et Bilel.

Je remercie toutes les personnes avec qui j'ai partagé mes études et notamment ces années de thèse.

Mes derniers remerciements vont à mon âme sœur qui a tout fait pour m'aider, qui m'a soutenu et surtout supporté dans tout ce que j'ai entrepris.

# Table des matières

Remerciement	i
--------------	---

Introduction générale	1
-----------------------	---

## **Chapitre I État de l'art** **7**

I.1 Introduction	8
I.2 Les matériaux composites	8
I.3 Influence des paramètres procédés sur les propriétés des matériaux composites obtenus par injection	14
I.4 Vieillissement hygrothermique	17
I.5 Modélisation des matériaux composites à fibres courtes	22
I.6 Modélisation de l'endommagement interfacial des matériaux composites	33
I.7 Modélisation du vieillissement hygromécanique dans les matériaux composites	37
I.8 Conclusion	40

## **Chapitre II Matériaux, procédé d'élaboration et caractérisation expérimentale du composite à fibres courtes PA6/GF30** **42**

II.1 Introduction	43
II.2 Matériaux	43
II.3 Procédé de mise en forme et caractérisation morphologique du PA6/GF30	46
II.4 Caractérisation expérimentale du PA6/GF30	52
II.5 Conclusion	61

<b>Chapitre III</b>	<b>Modélisation par la MED du comportement mécanique du PA6/GF30</b>	<b>62</b>
III.1	Introduction . . . . .	63
III.2	Modélisation discrète des milieux continus en élasticité . . . . .	64
III.3	Modélisation par la MED de la décohésion interfaciale induite par effort mécanique . . . . .	73
III.4	Conclusion . . . . .	87
<b>Chapitre IV</b>	<b>Modélisation par la MED du couplage hygro-thermo-mécanique dans le composite PA6/GF30</b>	<b>89</b>
IV.1	Introduction . . . . .	90
IV.2	Modélisation du transfert hygrothermique dans un matériau homogène . . . . .	90
IV.3	Simulation par la MED des transferts hygrothermiques sous conditions environnementales par la MED dans un matériau hétérogène : le PA6/GF30 . . . . .	104
IV.4	Modélisation du gonflement hygroscopique et validation dans le cadre d'un matériau homogène PA6 . . . . .	113
IV.5	Modélisation du gonflement hygroscopique et de l'endommagement induit dans un matériau hétérogène . . . . .	116
IV.6	Conclusion . . . . .	123
	<b>Conclusions générales et perspectives</b>	<b>125</b>
	<b>Annexe A</b>	<b>131</b>
	<b>Bibliographie</b>	<b>133</b>
	<b>Production scientifique</b>	<b>152</b>
	<b>Encadrement de stages de fin d'études</b>	<b>155</b>

# Table des figures

1	Exemples d'équipements et de composants automobiles en polyamide renforcé de fibres de verre [2] . . . . .	2
2	Évolution des dégradations environnementales du PA6/GF30 . . . . .	2
I.1	Différents types de polymères [9] . . . . .	10
I.2	Moulage d'un pare-chocs en SMC [10] . . . . .	11
I.3	Principe du moulage au contact [10] . . . . .	12
I.4	Principe du moulage par RTM [10] . . . . .	13
I.5	Principe du procédé d'injection [10] . . . . .	13
I.6	Observation MEB des faciès de rupture des nanocomposites en polyamide 6 avec 5% de montmorillonite (MMT) renforcés de fibres de verres à (a) 5%, (b) 10% et (c) 15% [11] . . . . .	14
I.7	Évolution (a) du module de Young et (b) de la résistance à la traction du PA6 en fonction du taux de fibres de verre [11] . . . . .	15
I.8	Évolution (a) de l'allongement à la rupture et (b) de la résistance au choc IZOD en fonction du taux de fibres de verre [11] . . . . .	15
I.9	Structure Peau/Coque/Cœur dans les matériaux composites injectés [23] . . . . .	16
I.10	Micrographie par MEB des faciès de rupture du PA6/GF30 (a) sans agent de couplage (b) avec agent de couplage [33] . . . . .	17
I.11	Courbes gravimétriques d'absorption d'un liquide [42] . . . . .	18
I.12	Processus de plastification [45] . . . . .	19
I.13	Schématisation de la pénétration d'eau dans le matériau polymérique [46] . . . . .	20
I.14	Évolution du taux de variation volumique pour un matériau en époxy immergé dans l'eau à 40°C en fonction du taux d'eau absorbée [47] . . . . .	21
I.15	Observation au MEB du PA6/GF30 avant et après vieillissement hygrothermique dans de l'eau distillée à 90 °C à différents instants [55] . . . . .	22
I.16	Modèle de Mori-Tanaka . . . . .	25

I.17	Exemple d'un VER d'un matériau composite à microstructure complexe [77] . . . . .	27
I.18	Modèle et maillage d'un VER d'un matériau composite de fraction volumique de 13.5% et de facteur de forme de 10 par la MEF [82] . . . . .	28
I.19	VER tridimensionnel de fibres denses aléatoires utilisé dans l'approche XFEM [93] . . . . .	29
I.20	Exemple de modèles voxelisés de VER de résolution $125 \times 250 \times 500$ pour (a) une microstructure unidirectionnelle et (b) une microstructure aléatoire [100] . . . . .	30
I.21	Exemple d'un VER cubique constitué de particules sphériques [107] . . . . .	31
I.22	Évolution du champ de contrainte par la MED avec (a) 1, (b) 70, (c) 540, (d) 1720 ED par Halo [70] . . . . .	32
I.23	Exemple d'un VER d'un matériau composite par la MED à (a) une seule fibre (b) fibres multiples [113] . . . . .	33
I.24	Loi constitutif du modèle d'adoucissement bilinéaire (a) contact normal (b) contact tangentiel [113] . . . . .	35
I.25	Décohésion interfaciale et fissuration matricielle au sein d'un composite à (a) une seule fibre (b) multi-fibres [113] . . . . .	36
I.26	Évolution de la concentration d'une tablette au cours du temps pour un système à trois composants contenant 20% en poids de médicament, avec une fine couche de polymère autour de la tablette [159] . . . . .	39
II.1	Schéma de synthèse du PA6 . . . . .	45
II.2	Schéma d'une extrudeuse bi-vis [165] . . . . .	47
II.3	Diagramme décrivant le cycle d'injection [166] . . . . .	48
II.4	Dimensions d'une éprouvette haltère normalisée ISO 527-2 type 1A . . . . .	49
II.5	Mouvement d'une fibre dans un écoulement élongationnel [168] . . . . .	50
II.6	Observations MEB d'une section perpendiculaire dans le sens d'injection d'un échantillon de PA6/GF30 . . . . .	50
II.7	Observations optiques des fibres de verre (a) avant injection, (b) après injection . . . . .	51
II.8	Histogramme de la distribution de la longueur des fibres de verre du PA6/GF30 (a) avant et (b) après le processus de moulage par injection . . . . .	53

II.9	(a) Courbes contrainte/déformation résultantes des essais de traction sur le PA6/GF30, (b) Montage expérimental de l'essai de traction . . . . .	54
II.10	(a) Schématisation d'un système CID, (b) Éprouvette avec mouchetis (agrandissement $\times 5$ ) . . . . .	54
II.11	(a) Évolution de la contrainte en fonction de la déformation obtenue à l'aide de la corrélation d'images, (b) Détermination du coefficient de Poisson relatif au PA6/GF30 . . . . .	55
II.12	(a) Courbe contrainte déformation d'un essai de traction de type charge/décharge du PA6/GF30, (b) Courbes d'endommagement en fonction de la déformation viscoplastique équivalente du PA6/GF30 . . . . .	56
II.13	(a) Rupture des fibres (b) Présence de vides due à la décohésion à l'interface fibre/matrice . . . . .	57
II.14	(a) Grossissement de cavité due à la plasticité locale autour de l'interface (b) déchaussement des fibres . . . . .	57
II.15	Superposition (a) des courbes de prise de masse et (b) des courbes de traction du PA6/GF30 immergé dans l'eau distillée pour différentes températures après 50 jours de vieillissement . . . . .	59
II.16	Observation au MEB du PA6/GF30 vieilli 50 jours dans l'eau distillée après des essais de traction [174] . . . . .	60
III.1	Effet du paramètre $\varepsilon$ (a) cas $\varepsilon = 0$ (b) cas $\varepsilon > 0$ . . . . .	65
III.2	Modèle cohésif de type poutre . . . . .	66
III.3	Méthodologie pour modéliser le PA6/GF30 en utilisant la MED et le concept de VER [177] . . . . .	69
III.4	Effet du (a) nombre de voxels le long de chaque direction et (b) RE sur le module de Young longitudinal effectif . . . . .	70
III.5	Influence du nombre d'ED sur la fraction volumique $V_f$ de fibres . . . . .	70
III.6	(a) VER du composite à fibres courtes PA6/GF30 (FF=18 et RE=1,5), (b) Vue agrandie mettant en évidence comment chaque ED est associé à une phase donnée : PA6 ou GF30 . . . . .	71
III.7	(a) Configuration du test DCB, (b) Loi d'adoucissement bilinéaire en mode I . . . . .	73
III.8	(a) Courbes force/déplacement, (b) Courbes longueur de la fissure/déplacement associées à l'essai DCB . . . . .	75
III.9	Propagation de la fissure à (a) $\Delta = 0,5$ mm et (b) $\Delta = 1,04$ mm . . . . .	76

III.10	(a) Configuration du test ELS, (b) Loi d'adoucissement bilinéaire en mode II . . . . .	76
III.11	(a) Courbes force/déplacement, (b) Courbes longueur de la fissure/déplacement associées à l'essai ELS . . . . .	78
III.12	Propagation de la fissure à (a) $\Delta = 13,5$ mm et (b) $\Delta = 17$ mm . . . . .	78
III.13	(a) Configuration du test MMB, (b) Loi d'adoucissement bilinéaire en mode mixte . . . . .	79
III.14	(a) Courbes force/déplacement, (b) Courbes longueur de la fissure/déplacement associées à l'essai MMB . . . . .	82
III.15	Propagation de la fissure à (a) $\Delta = 5$ mm et (b) $\Delta = 7$ mm . . . . .	82
III.16	(a) Configuration et conditions aux limites appliquées au VER du composite mono-fibre, (b) Modèle ED correspondant . . . . .	83
III.17	(a) Courbe force/déplacement et motifs de décohésion du composite mono-fibre, (b) Courbe longueur de fissure/déplacement et zone de décohésion du composite mono-fibre. . . . .	84
III.18	Configuration et conditions aux limites associées au composite multi-fibres . . . . .	85
III.19	(a) Courbe force/déplacement et motifs de décohésion du composite multi-fibres, (b) Courbe longueur de fissure/déplacement et zone de décohésion (plan de coupe $Y = 1$ mm) du composite multi-fibres. . . . .	86
IV.1	Modèle de transfert thermique par conduction à l'échelle du contact particulière . . . . .	92
IV.2	Échange hygrothermique du matériau avec l'atmosphère à travers la couche limite . . . . .	94
IV.3	Conditions hygrothermiques appliquées à l'échantillon cubique durant le processus de séchage . . . . .	96
IV.4	Représentation schématique des trois phases constitutives du milieu modélisé . . . . .	97
IV.5	Identification de la Conductivité Thermique Effective (CTE) par la MED . . . . .	99
IV.6	Variation du coefficient $C_t$ en fonction du nombre d'ED . . . . .	99
IV.7	Variation de (a) la masse d'eau dans l'échantillon et (b) la concentration d'eau au centre de l'échantillon en fonction du temps de séchage . . . . .	100

IV.8	Champs de concentration dans l'échantillon à différents instants par (a) la MED et (b) la MEF . . . . .	101
IV.9	Modèle de Halo introduit à l'échelle mésoscopique . . . . .	102
IV.10	Évolution du gradient de concentration d'eau en moyenne dans les 8 extrémités de l'échantillon cubique en fonction du temps de séchage . . . . .	103
IV.11	Champs de gradient de concentration d'eau dans l'échantillon à différents instants par (a) la MED et (b) la MEF . . . . .	103
IV.12	(a) VER du composite à une seule fibre en PA6/GF30 , (b) fibre en GF30 de forme cylindrique . . . . .	104
IV.13	Conditions aux limites appliquées à l'échantillon cubique en PA6/GF30 durant le processus d'absorption d'eau . . . . .	105
IV.14	Activité de l'eau du PA6 à 70°C [200] . . . . .	106
IV.15	Variation de la masse d'eau dans le PA6/GF30 en fonction du temps durant le processus d'absorption d'eau . . . . .	106
IV.16	Variation de la concentration d'eau dans le PA6/GF30 en fonction du temps durant le processus d'absorption d'eau . . . .	107
IV.17	Évolution du gradient de concentration d'eau dans le PA6/GF30 en fonction du temps durant le processus d'absorption d'eau . .	108
IV.18	Champs de concentration dans l'échantillon à différents instants par (a) la MED et (b) la MEF dans le plan de coupe YZ avec $Z=0,5L$ . . . . .	109
IV.19	Champs de concentration dans l'échantillon à différents instants par (a) la MED et (b) la MEF dans le plan de coupe XY avec $Z=0,5L$ . . . . .	110
IV.20	Champs du gradient de concentration dans l'échantillon à différents instants par (a) la MED et (b) la MEF dans le plan de coupe YZ avec $Z=0,5L$ . . . . .	111
IV.21	Champs du gradient de concentration dans l'échantillon à différents instants par (a) la MED et (b) la MEF dans le plan de coupe XY avec $Z=0,5L$ . . . . .	112
IV.22	Modèle de gonflement hygroscopique (cas $\Delta C > 0$ ) . . . . .	113
IV.23	Configuration cubique d'études avant et après gonflement hygroscopique . . . . .	114
IV.24	Variation (a) des déplacement macroscopiques et (b) des coefficients de gonflement hygroscopique en fonction du temps .	115

IV.25	Variation du volume de l'échantillon en PA6 par gonflement hygroscopique . . . . .	116
IV.26	Champs de contrainte équivalente de Von mises dans l'échantillon par la MED et la MEF . . . . .	118
IV.27	Champs de déplacement résultant dans l'échantillon par la MED et la MEF . . . . .	118
IV.28	Positions des points pour suivre l'évolution de la contrainte de Von Mises et du déplacement résultant . . . . .	119
IV.29	Variation (a) de la contrainte équivalente de Von Mises et (b) du déplacement résultant en fonction du temps . . . . .	120
IV.30	Schématisation du problème à étudier par le biais du modèle discret de zone cohésive . . . . .	120
IV.31	Évolution de la force de réaction et du taux de liens rompus à l'interface fibre/matrice au cours du temps et motifs de décohésion correspondants (plan de coupe X=0,25 mm) . . . . .	121
IV.32	Évolution de l'énergie potentielle élastique et du taux de liens rompus à l'interface fibre/matrice au cours du temps et motifs de décohésion correspondants (plan de coupe Z = 0,25 mm) . . . . .	122
IV.33	Chronologie du développement du code MULTICOR3D++ . . . . .	128
IV.34	Effet du paramètre $r_\mu$ sur (a) le coefficient de Poisson $\nu_M$ et (b) le module de Young adimensionné $E^a$ . . . . .	131

# Liste des tableaux

I.1	Les différents types et propriétés de verre [3] . . . . .	9
I.2	Les paramètres de Halpin-Tsai utilisés dans les calculs . . . . .	23
II.1	Propriétés mécaniques et caractéristiques géométriques de la fibre de verre courte de type E . . . . .	44
II.2	Propriétés mécaniques du PA6 . . . . .	45
II.3	Propriétés mécaniques du PA6/GF30 . . . . .	46
II.4	Coefficients de diffusion du PA6/GF30 à 70 et 90°C . . . . .	59
II.5	Évolution des propriétés mécaniques du PA6/GF30 sous différents états de vieillissement hygrothermique . . . . .	60
III.1	Comparaison des propriétés élastiques effectives du PA6/GF30 obtenues par différentes approches numériques, expérimentales et théoriques . . . . .	72
IV.1	Paramètres utilisés dans la simulation numérique du séchage d'aluminate de magnésium . . . . .	98
IV.2	Paramètres des constituants du composite PA6/GF30 . . . . .	105

# Introduction générale

## Contexte du travail

Le secteur du transport, en particulier celui de l'automobile, est en profonde mutation face aux défis environnementaux et sociétaux en matière de réduction des émissions de CO<sub>2</sub>, de consommation des matières premières et de respect des nouvelles normes visant à minimiser l'empreinte carbone. Le concept de mobilité durable est devenu un enjeu majeur pour tous impliquant autant les constructeurs automobiles que les acteurs économiques de ce secteur. Suite aux législations récentes de la Conférence des Parties (COP25) [1] limitant les émissions polluantes des véhicules légers, il est devenu, par conséquent, nécessaire de s'orienter vers la réduction du poids des véhicules afin de respecter les nouvelles normes de la COP25. Pour atteindre cet objectif, le recours à des matériaux composites est une solution prometteuse, notamment avec l'émergence des fibres de verre améliorant le rapport poids/ résistance mécanique. Le PA6/GF30 constitue un exemple de ces matériaux utilisés dans le secteur automobile. Ce type de composite représente une alternative aux structures métalliques en tant qu'éléments du compartiment moteur et de l'équipement intérieur des véhicules grâce à sa dualité : résistance mécanique-légèreté (Figure 1). Ce matériau est cependant soumis à des conditions environnementales sévères affectant son comportement mécanique et sa durabilité. En effet, des études ont montré qu'en raison de leur caractère hydrophile, les PA6 et PA6-6 absorbent l'humidité avec des fractions massiques supérieures à 8%. La présence de cette eau affecte les liaisons chimiques du polyamide et mène à une baisse sensible de leurs propriétés mécaniques. Dans le cas des matériaux composites où le polyamide est renforcé par des fibres courtes, la perte de ces propriétés est d'autant plus drastique que l'interface fibre-matrice se dégrade sous ambiance humide. L'eau absorbée s'y accumule réduisant la cohésion interfaciale entraînant progressivement une diminution des performances mécaniques de l'interface fibre/matrice et provoquant à terme l'endommagement du matériau (Figure 2). La qualité de l'interface est donc un point critique duquel

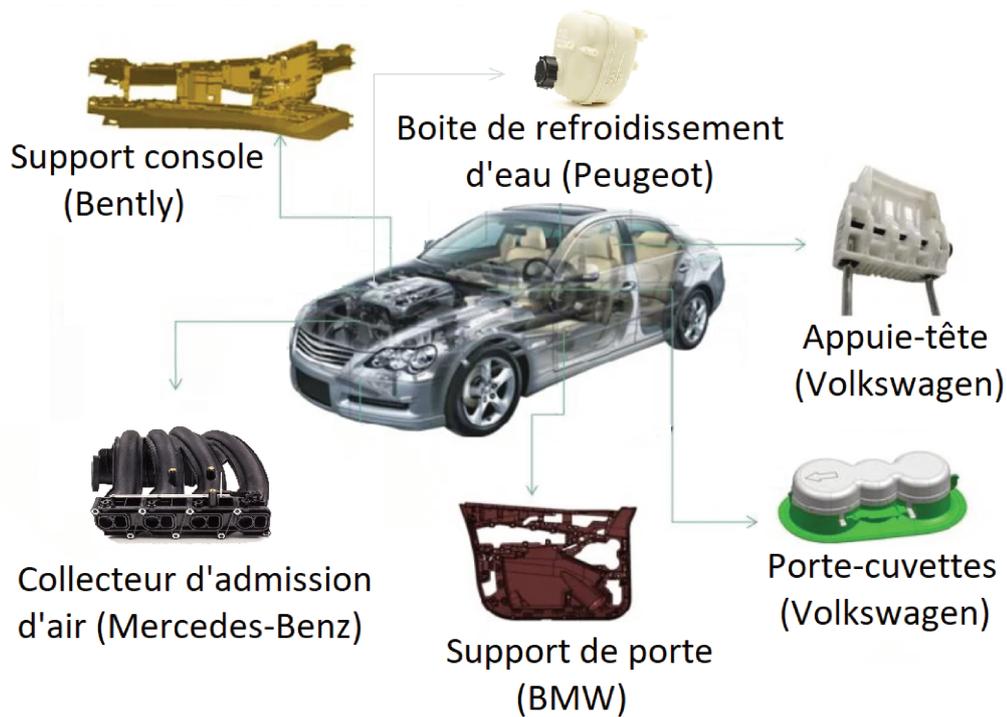


Figure 1 – Exemples d'équipements et de composants automobiles en polyamide renforcé de fibres de verre [2]

dépend à la fois les propriétés à court terme et la durabilité des structures composites en polyamide renforcé à long terme. Le sujet de thèse s'inscrit dans une

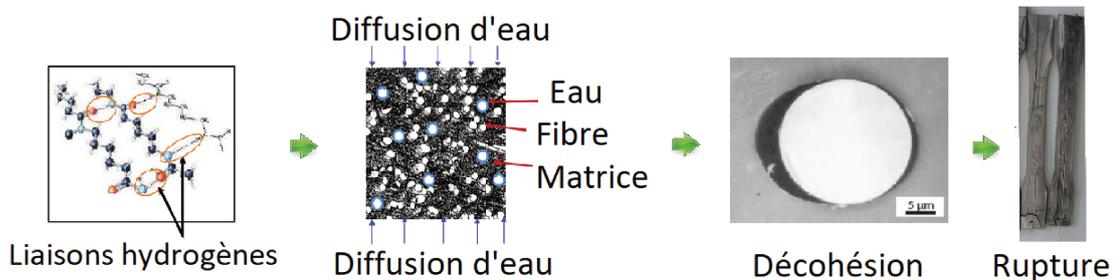


Figure 2 – Évolution des dégradations environnementales du PA6/GF30

démarche visant à développer une approche numérique permettant de prédire le comportement mécanique et l'endommagement d'un polyamide renforcé en fibres courtes sous conditions hygrothermiques (température/humidité). Il s'agit d'un travail novateur qui est mené dans le cadre d'une collaboration entre le Laboratoire de Génie des Matériaux et Environnement (LGME) de l'Ecole Nationale d'Ingénieurs de Sfax (ENIS) et le Laboratoire des Technologies Innovantes (LTI) de l'Université de Picardie Jules Verne (UPJV). Le LGME apporte son expertise en caractérisation expérimentale, afin d'étudier le comportement mécanique du composite à matrice PA6 renforcée de fibres de verre avec une fraction massique

de 30% (PA6/GF30). Le LTI apporte quant à lui son expertise dans le domaine de la modélisation numérique du comportement mécanique et de l'endommagement des matériaux composites. Il intervient également par le biais du code par éléments discrets MULTICOR3D++. Les développements numériques successifs menés depuis plusieurs années au sein de l'équipe Mécanique et Ingénierie des Matériaux (MIM) du LTI ont en effet conduit à la mise au point d'un code de calcul performant, capable de modéliser et de simuler une large gamme de matériaux et plusieurs phénomènes physiques couplés. La présente thèse contribue à la réalisation de cet objectif via la caractérisation expérimentale du PA6/GF30 en termes de propriétés mécaniques, de mécanisme d'endommagement et de vieillissement hygrothermique. Afin de modéliser le comportement mécanique du PA6/GF30 un modèle Élément Discrets (ED) est introduit dans le contexte des fibres de verre courtes. Ensuite, une approche ED basée sur un critère énergétique en mode mixte est d'abord validée sur des essais de délamination standards, puis appliquée au matériau composite PA6/GF30 pour la modélisation de la décohésion interfaciale induite par un chargement mécanique. Par la suite, un couplage hygro-thermo-mécanique est proposé afin de modéliser le processus de décohésion interfaciale dans le PA6/GF30 par gonflement hygroscopique.

## Originalités de la thèse

Les travaux menés dans le cadre de cette thèse ont permis de mettre au point un outil numérique basé sur la Méthode des Éléments Discrets (MED) afin de prédire, de manière fiable et robuste, l'endommagement interfacial d'un matériau composite à fibres courtes PA6/GF30 en prenant en compte les échanges hygrothermiques avec le milieu extérieur. Cette thèse a trois originalités :

- La première consiste en la mise en place d'une technique spécifique pour estimer le Volume Élémentaire Représentatif (VER) pour la modélisation par la MED dans le contexte des matériaux composites à fibres courtes, tels que le PA6/GF30. L'approche proposée est validée par des comparaisons avec des modèles micromécaniques et des résultats expérimentaux, en termes de propriétés élastiques effectives.
- La deuxième est liée au développement d'un modèle d'endommagement discret à mode mixte basé sur une formulation énergétique. Pour ce faire, un modèle de zone cohésive discret est d'abord mis en place et validé dans le cas des problèmes de délamination standards. Le contexte du phénomène de décohésion interfaciale se produisant dans les matériaux composites à

fibres courtes est par la suite exploré sur un matériau composite à une seule fibre UniDirectionnelle (UD) puis sur un matériau composite à fibres courtes alignées.

- La troisième originalité est l'intégration des paramètres hygrothermiques dans le modèle interfacial développé pour simuler le comportement et l'endommagement du PA6/GF30 sous conditions environnementales. L'outil numérique développé permet de simuler la décohésion interfaciale dans le PA6/GF30 induite par un processus d'absorption d'eau.

## Plan mémoire de thèse

Le premier chapitre de ce mémoire de thèse décrit les matériaux composites d'un point de vue structure, propriétés et dégradation. Un état de l'art dédié aux différentes approches micromécaniques et numériques permettant de modéliser et évaluer les propriétés effectives des matériaux composites à fibres courtes est également présenté. De plus, la modélisation de l'endommagement interfacial ainsi que le vieillissement hygrothermique des matériaux composites ont également fait l'objet d'une étude bibliographique.

Le deuxième chapitre est consacré à la caractérisation expérimentale du PA6/GF30. Ce matériau est élaboré par injection via des fibres de verre courtes de type E et d'une matrice Polyamide 6. Des essais de traction longitudinale et de flexion trois points sont réalisés, et exploités à l'aide de la corrélation d'images. Les propriétés élastiques macroscopiques en termes de modules de Young longitudinal et coefficient de Poisson sont alors déterminées. L'endommagement du matériau est aussi caractérisé à l'échelle macroscopique et microscopique respectivement à travers des essais cycliques de types charge/décharge et des observations MEB des faciès de rupture. L'effet du vieillissement hygrothermique est aussi étudié du point de vue de l'évolution du coefficient de diffusion et des propriétés mécaniques du PA6/GF30 sous conditions environnementales.

Le troisième chapitre est dédié au développement d'une approche par ED pour simuler le processus de décohésion interfaciale dans le contexte des matériaux composites à fibres de verre courtes PA6/GF30. Pour ce faire, une brève description du modèle de poutre cohésive est présentée. Ensuite, une modélisation ED en 3D dédiée aux matériaux composites à fibres courtes est mise en place, sur la base de la détermination de VER. Le modèle proposé est validé par l'estimation des propriétés élastiques effectives du PA6/GF30 en les comparant à celles déterminées par des approches micromécaniques, des méthodes numériques

et expérimentales. En outre, un Modèle de Zone Cohésive (MZC) de type discret est exploré via des essais de délamination DCB (Double Cantilever Beam), ELS (End Load Split) et MMB (Mixed Mode Bending). À des fins de validation, des comparaisons entre les solutions numériques et analytiques sont effectuées. Finalement, le cas du matériau PA6/GF30 est étudié. Deux modèles sont évalués, le cas d'un composite constitué d'une seule fibre UD et celui d'un composite multi-fibre. Des essais de flexion trois points sont par la suite simulés en considérant les deux cas afin de prédire le processus de décohésion interfacial et de suivre sa progression au cours du temps.

Le quatrième chapitre porte sur la modélisation du transfert hygrothermique par la MED. Le modèle discret est d'abord mis en œuvre pour l'étude du transfert couplé de masse et de chaleur se produisant lors du séchage d'un bloc d'aluminate de magnésium. À des fins de validation, des comparaisons sont réalisées avec la MEF et des résultats expérimentaux issus de la littérature en termes d'évolution de la masse d'eau, de concentration en eau et de gradient de concentration. Ensuite, le modèle proposé est appliqué pour la modélisation des transferts hygrothermiques ayant lieu au sein du PA6/GF30 suite à un processus d'absorption d'eau. En particulier, un modèle de gonflement hygroscopique est proposé et ensuite validé dans le cadre d'un matériau homogène PA6. Enfin, l'outil numérique développé est utilisé pour simuler l'endommagement interfaciale du PA6/GF30 au cours d'un processus de vieillissement hygroscopique. Les champs de contrainte et de déplacement ainsi que les motifs de décohésion relatifs au PA6/GF30 sont évalués.



# Chapitre I

## État de l'art

### Sommaire

---

I.1	Introduction . . . . .	8
I.2	Les matériaux composites . . . . .	8
I.2.1	Renforts : les fibres de verre . . . . .	8
I.2.2	La matrice polymérique . . . . .	9
I.2.3	Procédés de mise en forme des matériaux composites	10
I.3	Influence des paramètres procédés sur les propriétés des matériaux composites obtenus par injection . . . . .	14
I.3.1	Effet du taux de fibre . . . . .	14
I.3.2	Effet de l'orientation, la distribution et de la longueur des fibres . . . . .	15
I.3.3	Effet de l'adhésion fibre/matrice . . . . .	16
I.4	Vieillissement hygrothermique . . . . .	17
I.4.1	Généralités . . . . .	17
I.4.2	Effet du vieillissement hygrothermique sur les propriétés mécaniques . . . . .	21
I.5	Modélisation des matériaux composites à fibres courtes . . .	22
I.5.1	Approches micromécaniques . . . . .	23
I.5.2	Approches numériques . . . . .	27
I.6	Modélisation de l'endommagement interfacial des matériaux composites . . . . .	33
I.7	Modélisation du vieillissement hygromécanique dans les matériaux composites . . . . .	37
I.8	Conclusion . . . . .	40

---

## I.1 Introduction

Les matériaux composites renforcés de fibres courtes sont couramment utilisés dans diverses applications d'ingénierie, notamment dans l'industrie automobile et aérospatiale. L'efficacité de ces matériaux est principalement liée à un rapport rigidité/densité élevé, dû au renforcement par des fibres à haute rigidité. Aujourd'hui, l'utilisation de ce type des matériaux s'est progressivement étendue à des pièces soumises à des conditions environnementales caractérisées par des taux d'humidité élevés (ex. vieillissement). Il devient alors nécessaire d'avoir accès à une modélisation fiable et précise du comportement de ces matériaux composites en prenant en compte la nature de l'environnement dans lequel ils évoluent. Ce chapitre présente tout d'abord un état de l'art sur les matériaux composites ainsi que les paramètres procédés qui conditionnent les propriétés des pièces obtenues par injection. Ensuite, le vieillissement hygrothermique au sein des matériaux composites est introduit. Par ailleurs, la modélisation des matériaux composites à fibres courtes via des approches micromécaniques et numériques est discutée. Enfin, les travaux sur la modélisation de l'endommagement interfacial des matériaux composites sont passés en revue et un état de l'art sur le vieillissement hygro-mécanique est présenté.

## I.2 Les matériaux composites

### I.2.1 Renforts : les fibres de verre

Les renforts ont pour rôle d'assurer la tenue mécanique des composites. Ils peuvent se présenter sous différentes formes telles que des fibres, des flocons ou des particules. Chacune de ces dernières a ses propres propriétés qui sont susceptibles d'être apportées aux composites, et par conséquent, chacune a son propre domaine d'application. Parmi ces formes, les fibres sont les renforts les plus utilisées dans les composites, et celles qui ont le plus d'influence sur les propriétés des matériaux composites. En effet, les fibres possèdent un facteur de forme élevé, autrement dit un rapport entre la longueur et le diamètre élevé, qui permet un transfert efficace des contraintes de cisaillement entre la matrice et les fibres. Parmi les fibres les plus utilisées dans le secteur automobile, on trouve les fibres de verre. Ce type de renfort est reconnu pour ses qualités spécifiques, à savoir sa très bonne résistance mécanique, sa forte résistivité électrique, son inertie thermique et chimique [3]. Selon la composition et la propriété majeure apportée par les fibres on peut distinguer 3 types de verre : le verre E, D et R (Tableau I.1).

Principaux constituants (%)	Type de verre		
	E	D	R
Silice SiO <sub>2</sub>	53-54	73-74	60
Alumine Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	14-15		25
Chaux CaO + Magnésie MgO	20-24	0,5-0,6	9
Oxyde de Bore B <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	6-9	22-23	6
<b>Propriété spécifique</b>	Usage courant	Propriétés diélectriques (circuits imprimés)	Haute résistance mécanique

Tableau I.1 – Les différents types et propriétés de verre [3]

## I.2.2 La matrice polymérique

Dans un matériau composite, la matrice se présente comme une enveloppe entourant le renfort. Le rôle principale de la matrice consiste à protéger le renfort de l'effet de l'environnement, assurer une bonne cohésion du matériau et transmettre les efforts mécaniques au renfort de la manière la plus uniforme possible. En effet, la matrice assure toutes les fonctions autres que la tenue mécanique, et conditionne le choix du procédé de mise en forme. On distingue ainsi trois familles :

- Les Composites à Matrice Organique ou Polymérique (CMO),
- Les Composites à Matrice Céramique (CMC),
- Les Composites à Matrice Métallique (CMM).

Dans le présent travail, l'accent est mis sur la famille des composites à matrice polymérique. Celle-ci est divisée en trois grandes rubriques : les thermoplastiques, les thermodurcissables et les élastomères.

**Les thermoplastiques :** Il s'agit de matériaux formés de macromolécules linéaires capables de devenir mobiles entre elles lorsqu'on élève la température [4]. En effet, grâce à un apport externe d'énergie (chauffage) ou bien interne (frottement), la matière passe de l'état solide à l'état plastique ou fondu. Des liaisons de type van der Waals entre macromolécules se forment menant ainsi à un mécanisme de repliage des macromolécules jusqu'à leur blocage lors du refroidissement de la matière thermoplastique sous la forme désirée. Cette transformation de caractère réversible donne la possibilité de réutiliser ce type de matériau par un simple recyclage. Pour information, Il existe deux

types de polymères thermoplastiques (les **amorphes** et les **semi-cristallins** (Figure I.1(a))) dont la différenciation se fait par le biais de l'indice de fluidité [5]. En effet, les matériaux hautement cristallins sont généralement fluides alors que les amorphes sont beaucoup plus visqueux.

**Les thermodurcissables** : Il s'agit d'un matériau formé d'un réseau tridimensionnel de macromolécules. Ce réseau résulte en général d'une réaction chimique de réticulation. Par un effet combiné d'un catalyseur avec un apport de chaleur, la réaction de réticulation est ainsi déclenchée. Cette structure n'autorise que des mouvements de portions limitées du squelette macromoléculaire favorisant ainsi un pontage des macromolécules (Figure I.1(b)). Contrairement aux résines thermoplastiques, la structure obtenue après solidification possède une forme définitive. Celle-ci sera détruite mais ne fondra pas comme un thermoplastique [6].

**Les élastomères** : Il s'agit de matériaux polymères obtenus par vulcanisation après une faible réticulation (Figure I.1(c)). Ce processus de pontage entre les chaînes permet d'éviter l'écoulement du matériau, sans détruire pour autant la flexibilité des chaînes macromoléculaires [7]. Ainsi, ces matériaux se distinguent des autres polymères rigides par leur aptitude à retrouver leur géométrie initiale après cessation de la sollicitation. En effet, en restituant quantitativement l'énergie qui lui avait été fournie pour les déformer, les élastomères peuvent supporter de très grandes déformations (supérieures à 1000 %) avant la rupture [8].

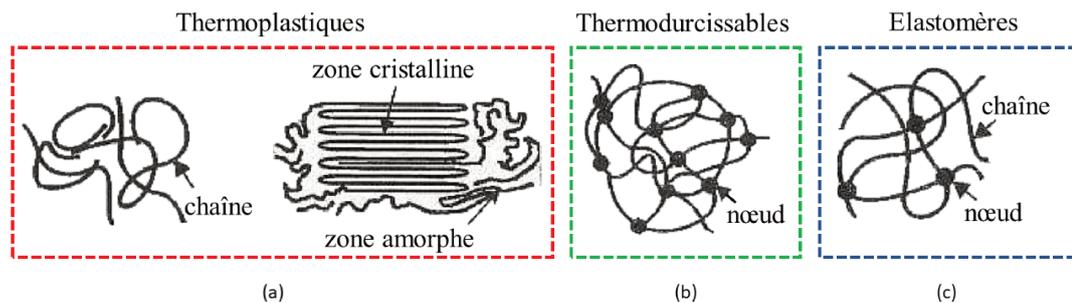


Figure I.1 – Différents types de polymères [9]

### I.2.3 Procédés de mise en forme des matériaux composites

La basse densité et la haute résilience des matrices polymériques des matériaux composites leur ouvrent une part de plus en plus grande du marché des coques, des capots, des panneaux de carrosserie et des composants structurels. Ils peuvent être élaborés par divers procédés de mise en forme. Ceux-ci se distinguent par l'état

des matières premières utilisées et de la méthode de remplissage avec des moules ouverts ou fermés. Certains procédés de mise en forme sont présentés ci-après.

### I.2.3.1 Les procédés par voie sèche

**Le moulage de pré-impregnés en feuilles (SMC) :** Il s'agit de l'un des procédés les plus économiques pour la production de grandes séries de petits à moyens composants (Figure I.2). Les compounds pré-impregnés sont des pré-mélanges de résine, de renforts coupés, d'additifs et de catalyseurs (si nécessaire). On utilise dans ce procédé un moule de métal avec des parties qui se correspondent de manière précise. On place ce dernier dans une presse chauffée. On coupe d'abord la feuille en une forme semblable à celle du moule. Le choix de découpage est fait de manière à minimiser la distance que le mélange doit parcourir pour remplir le moule qu'on referme. Pour former la pièce et faire réticuler la matière plastique, une pression de l'ordre de 50 à 120 bar et une température entre 130 et 160°C sont appliquées à la pièce.



Figure I.2 – Moulage d'un pare-chocs en SMC [10]

### I.2.3.2 Les procédés par voie humide

**Le moulage au contact :** Dans les méthodes de mise en œuvre manuelle, (moulage au contact), on enduit avec une résine un moule ouvert (fait en polymère renforcé de fibres de verre, en bois, en plâtre, en ciment ou en alliage métallique léger) pour donner au moulage une peau superficielle lisse. Lorsque celle-ci a réticulé, on dépose à la main une couche de renfort (des fibres de verre ou de carbone tissées ou tricotées), on applique la résine avec une brosse ou un pistolet vaporisateur. Par la suite, on lamine la couche pour distribuer complètement la résine à travers les fibres (Figure I.3). On répète cette opération couche après couche jusqu'à ce que l'on atteigne l'épaisseur désirée. La "drapabilité" c'est à dire

l'aptitude d'un textile à prendre la forme d'une double courbure, dépend du type de textile choisi : les non tissés ('laine de verre', souvent appelés par leur nom anglais de "mat") ainsi que les fibres tricotées ont une bonne drapabilité. Quant aux tissus avec des trames droites, ces derniers n'ont pas une bonne drapabilité. On ajoute des agents ignifugeants et des charges inertes pour réduire les coûts et améliorer les propriétés mécaniques. Dans le cas du pistolage, on mélange une résine avec des fibres coupées que l'on pistole dans un moule ; on utilise cette technique pour de grandes pièces pour lesquelles le pourcentage de renfort doit être important. Dans le moulage au sac sous vide/pression, le renfort et la résine sont appliqués dans le moule par des méthodes conventionnelles manuelles ou par pistolage. On place alors un sac sur le composite qui est en train de réticuler et on l'applique en-dessus une pression pour obtenir des matériaux denses avec de bonnes propriétés mécaniques.

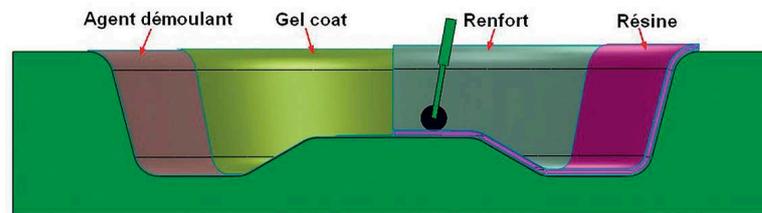


Figure I.3 – Principe du moulage au contact [10]

**Le moulage par transfert de résine (RTM) :** Il s'agit d'un moyen facile de fabriquer des pièces de forme complexe en composites renforcés de fibres sans devoir recourir à de l'outillage au coût trop élevé. Ce type de moulage nécessite un moule fermé en deux ou plusieurs parties, généralement fait en polymère renforcé de fibres de verre ou en alliages métalliques légers. Ce moule possède des points d'injection et des événements pour permettre à l'air de s'échapper. Les renforts sont coupés à dimension et placés dans le moule en même temps que les autres inserts, ou garnitures. Le moule est fermé et une résine thermodurcissable de basse viscosité (généralement du polyester) est injectée sous basse pression (environ 2 MPa) par une tête d'extrudeuse dans laquelle le durcisseur est mélangé à la résine (Figure I.4). On laisse réticuler le moulage à température ambiante. La fluidité de la résine et la basse pression de moulage donnent aux outillages une durée de vie plus longue à faible coût. Il est nécessaire d'avoir une pompe pour l'injection de résine.

**Le moulage par injection :** Les produits moulés par injection apparaissent dans tous les secteurs de la conception de produits : il peut s'agir de

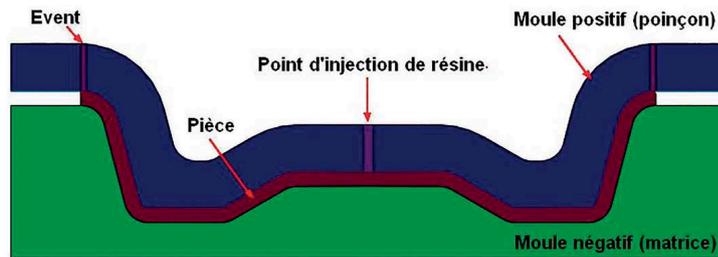


Figure I.4 – Principe du moulage par RTM [10]

produits de consommation, d'articles de bureau, de pièces industrielles, d'ordinateurs, d'instruments de communication, d'articles médicaux et dédiés à la recherche, de jouets, d'emballages de cosmétiques ou encore d'équipements de sport. L'équipement le plus courant pour le moulage des composites à matrices thermoplastiques est la presse avec vis réciproquante, représentée schématiquement à la Figure I.5. Les granulés de composite sont amenés dans une presse en spirale où ils se mélangent et se ramollissent pour atteindre une consistance pâteuse. Cette pâte fluide pénètre par un ou plusieurs canaux (carottes) dans le moule. Le matériau composite se solidifie en maintenant une pression (pression de maintien) avant l'éjection des pièces (Figure I.5). La co-injection permet le moulage de pièces avec des matériaux, des couleurs ou des caractéristiques différents. Le moulage par injection de composants allégés permet la production économique de grandes pièces moulées en utilisant un gaz inerte ou un agent de gonflage chimique, en vue de réaliser des pièces avec une peau compacte et une structure interne cellulaire.

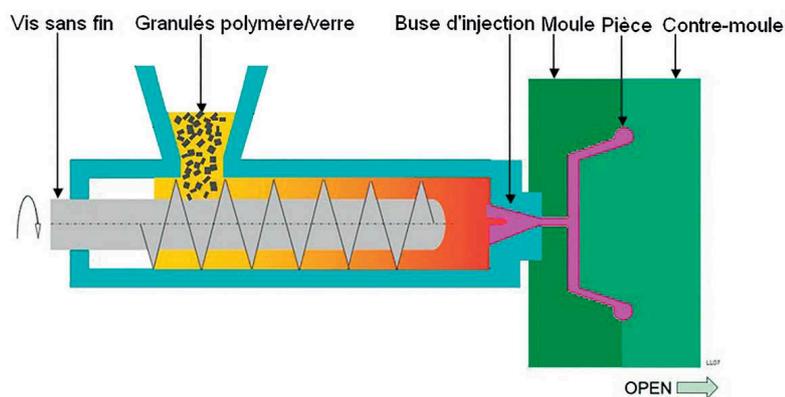


Figure I.5 – Principe du procédé d'injection [10]

## I.3 Influence des paramètres procédés sur les propriétés des matériaux composites obtenus par injection

La mise en forme des matériaux composites par injection est un procédé de fabrication très prisé du monde industriel. Cette méthode de production permet d'obtenir des pièces légères avec un bon état de surface, un faible coût et des temps de fabrication courts. Cependant, le processus d'injection affecte significativement les propriétés des composites telles que l'orientation, la distribution, la longueur des fibres et leurs propriétés mécaniques.

### I.3.1 Effet du taux de fibre

Les propriétés mécaniques du matériau composite sont assez variables et dépendent du taux de fibres incorporé dans la matrice polymérique. En effet, l'incorporation des fibres de verre dans un polyamide 6 (PA6) ou un polyamide 6,6 (PA6,6) affecte d'une manière considérable ses propriétés morphologiques et mécaniques. Des observations MEB montrent que l'aspect morphologique du composite évolue selon la teneur de fibres ajoutées en passant d'une matrice dominante vers un renfort réparti dans tout le matériau (Figure I.6). En outre,



Figure I.6 – Observation MEB des faciès de rupture des nanocomposites en polyamide 6 avec 5% de montmorillonite (MMT) renforcés de fibres de verres à (a) 5%, (b) 10% et (c) 15% [11]

l'ajout des fibres de verre dans une matrice en PA6 [11, 12, 13, 14] ou en PA6,6 [15] entraîne une augmentation de la résistance à la rupture de la rigidité (Figure I.7) avec une diminution au niveau de la ductilité (Figure I.8). Selon Y.Yoo et al. [11], un PA6 renforcé avec des fibres de verre présente un module de Young et une résistance au choc, respectivement cinq fois et quatre fois plus grande que celle du PA6 seul.

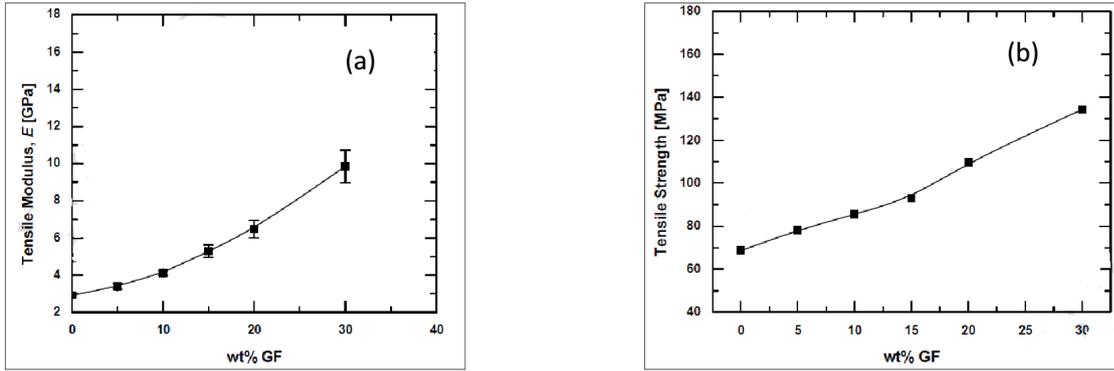


Figure I.7 – Évolution (a) du module de Young et (b) de la résistance à la traction du PA6 en fonction du taux de fibres de verre [11]

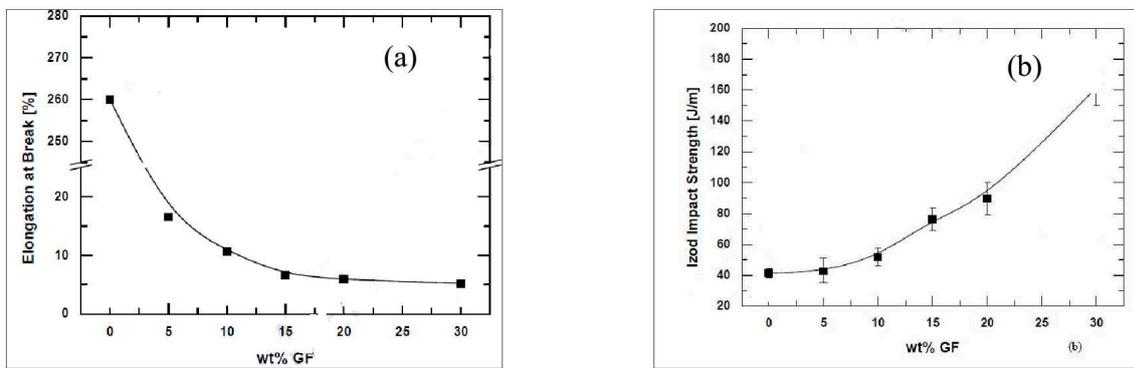


Figure I.8 – Évolution (a) de l'allongement à la rupture et (b) de la résistance au choc IZOD en fonction du taux de fibres de verre [11]

### I.3.2 Effet de l'orientation, la distribution et de la longueur des fibres

Quel que soit le type de fibres utilisé dans le composite, des variations locales de l'orientation affectent les propriétés mécaniques des matériaux composites [16]. Ces changements sont attribués à l'orientation induite par l'écoulement pendant le remplissage de la cavité du moule. Il est donc primordial de contrôler l'orientation des fibres pendant le processus de moulage et durant l'écoulement de la matière, précisément pendant l'étape de remplissage [17]. Dans cette optique, l'orientation des fibres dans l'épaisseur des pièces injectées a déjà été largement traitée dans la littérature [18, 19, 20, 21, 22]. Pour chaque pièce, plusieurs couches ont été observées avec une orientation spécifique des fibres. Une structure Peau/Cœur est typiquement trouvée, spécifique à l'écoulement transitoire, non-newtonien et non-isotherme du moulage par injection. L'orientation des fibres est régie par les effets de l'écoulement de la matière pendant le remplissage du moule [24]. Un écoulement en continu se produit et avance en donnant lieu à des fibres orientées dans la

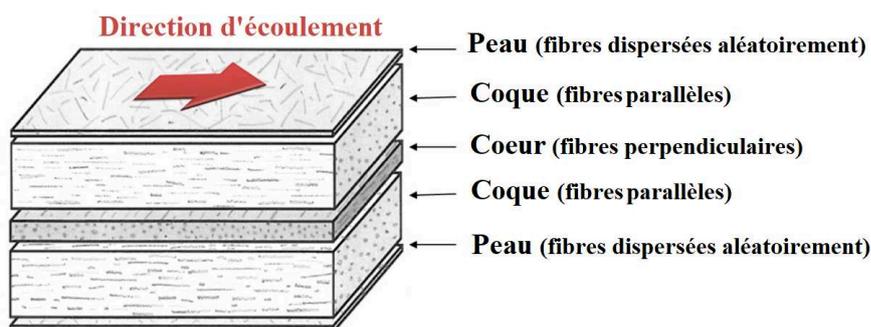


Figure I.9 – Structure Peau/Coque/Cœur dans les matériaux composites injectés [23]

direction de l'écoulement au sein de l'enveloppe (coque). Concernant les fibres dans la région centrale (cœur), elles sont préférentiellement orientées transversalement à l'écoulement puisqu'elles sont soumises à un gradient de cisaillement très faible [25]. Une représentation 3D de la microstructure du PP-GF30 est obtenue à partir des données acquises par  $\mu$ -CT [26]. Les microstructures 3D reconstruites montrent que la grande majorité des fibres s'oriente préférentiellement dans la direction de l'écoulement.

Un autre paramètre qui intervient dans la détermination des propriétés finales du matériau composite est la longueur des fibres [11, 27]. Après compoundage et injection, la fibre ne conserve pas sa longueur initiale, ce qui entraîne des modifications des propriétés du matériau composite [28]. En effet, le moulage par injection de composites renforcés par des fibres de verre entraîne une réduction substantielle de la longueur des fibres [29]. L'orientation et la distribution des fibres sont étroitement liées aux paramètres d'injection (vitesse d'injection, vitesse de la vis, température de l'essai, pression d'injection ..) [14, 30]. Cela entraîne par conséquent des modifications des propriétés mécaniques.

### I.3.3 Effet de l'adhésion fibre/matrice

Pour contrôler correctement l'interface afin d'améliorer les performances mécaniques et l'intégrité structurelle du composite, il faut comprendre les mécanismes d'adhésion spécifiques à chaque système fibre/matrice, ainsi que la caractérisation physico-chimique de l'interface en ce qui concerne l'origine de l'adhésion. Celle-ci peut être attribuée à des mécanismes tels que l'adsorption et le mouillage, l'inter-diffusion, la formation de liaisons chimiques [31]. En plus des principaux mécanismes, la liaison hydrogène, les forces de van der Waals et d'autres forces de faible énergie peuvent également être impliquées [31]. Par exemple, l'ensimage par un agent de couplage représente une modification

superficielle après fabrication qui joue un rôle primordial dans la création de la liaison renfort/matrice (ou interface). Cela affecte l'adhérence à l'interface fibre/matrice et par conséquent les performances finales du matériau composite [32, 33, 34]. E.K. Gamstedt et al. [15] et U. Göschel et al. [34] ont étudié l'effet de l'agent de couplage utilisé dans l'opération d'ensimage. Ils ont montré que l'agent de couplage réagit préférentiellement avec la phase la plus importante pour assurer une bonne liaison entre la fibre et la matrice. Göschel et al. [33] ont constaté qu'en l'absence d'un agent de couplage, la fibre présente une surface lisse. Cela mène à une mauvaise adhérence, qui sera caractérisée par une rupture adhésive (Figure I.10 (a)). Par contre, lorsque la surface de la fibre est recouverte de résidus du matériau polymérique, c'est un signe d'une bonne adhésion entre la matrice et la fibre. Dans ce cas, on parle d'une rupture de type cohésive (Figure I.10 (b)) [32, 34].

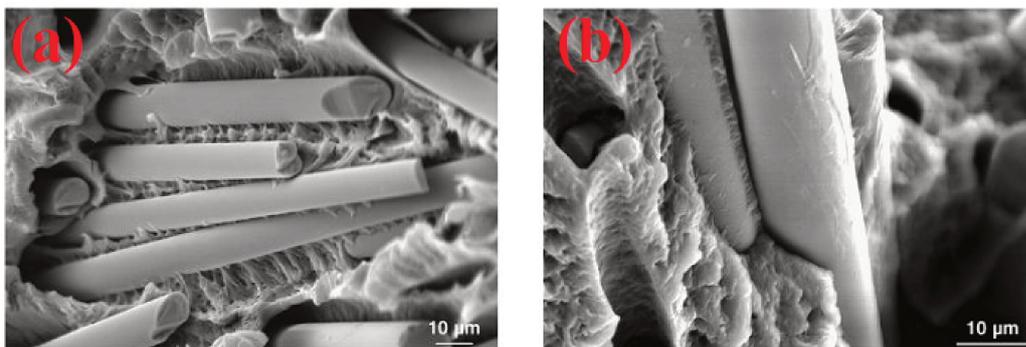


Figure I.10 – Micrographie par MEB des faciès de rupture du PA6/GF30 (a) sans agent de couplage (b) avec agent de couplage [33]

## I.4 Vieillessement hygrothermique

### I.4.1 Généralités

L'emploi des matériaux composites à matrice polymérique sous conditions environnementales nécessite une meilleure compréhension des mécanismes de vieillissements hygrothermiques. En effet, l'humidité et la température constituent deux paramètres affectant la fiabilité du matériau à long terme par différents mécanismes [35]. Pour cela, il est recommandé de définir quelques notions nécessaires pour comprendre et analyser les phénomènes physiques et chimiques pouvant survenir lors du vieillissement des matériaux composites.

### I.4.1.1 Cinétique de diffusion

Selon la nature du milieu environnant, un matériau composite a la tendance d'absorber des molécules d'eau via sa matrice à caractère hydrophile. Ces molécules d'eau occupent l'interstice entre les réseaux macromoléculaires et mènent à une augmentation au cours du temps de la masse du matériau. À noter que la cinétique d'absorption est différente d'un polymère à un autre. Cela nécessite une compréhension du mécanisme d'absorption d'humidité. Divers modèles physiques décrivant le phénomène de diffusion à l'intérieur des polymères sont disponibles dans la littérature. Parmi eux, la loi de Fick constitue le modèle le plus utilisé [36] (Figure I.10-Courbe (0)). Cependant, certains polymères présentent une diffusion fickienne atypique [37]. Dans ces cas, d'autres modèles peuvent être utilisés, comme la théorie de Langmuir [38] (Figure I.10-Courbe (2)) caractérisée par une diffusion en deux paliers ou bien le modèle pseudo-fickien [39] (Figure I.10-Courbe (1)). Pour certains polymères, l'absorption d'eau peut induire la formation d'un réseau de fissures superficiel sur le matériau ou bien favoriser la scission des chaînes macromoléculaires par des réactions chimiques. Dans ces deux cas, on parle respectivement d'une diffusion avec endommagement mécanique [40] (Figure I.10-Courbe (3)) et d'une diffusion avec endommagement chimique [41] (Figure I.10-Courbe (4)).

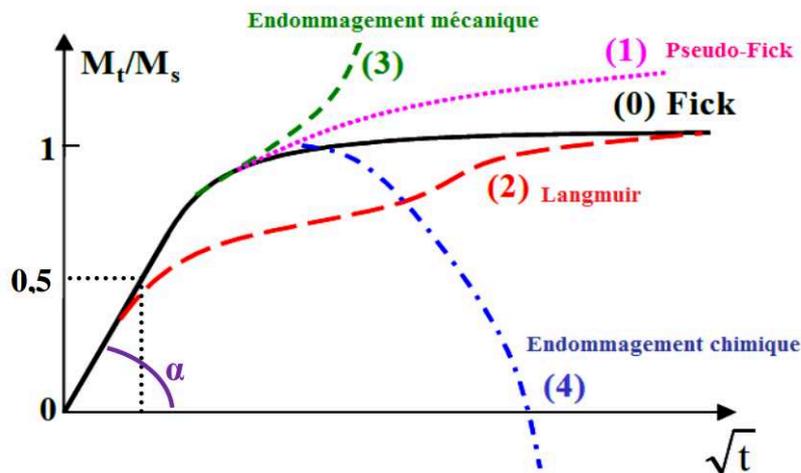


Figure I.11 – Courbes gravimétriques d'absorption d'un liquide [42]

### I.4.1.2 Vieillessement physique

**Plastification :** Les molécules d'eau absorbées par le matériau composite s'insèrent au niveau des groupes hydrophiles des chaînes macromoléculaires du polymère. Cette étape conduit à la rupture des liaisons secondaires, de type van

der Waals ou hydrogène, du réseau des chaînes moléculaires et par conséquent une amplification de la mobilité moléculaire (Figure I.12). L'effet de plastification provoque, de plus, une diminution de la température de transition vitreuse  $T_{gv}$  [43] de manière que le matériau vieilli présente une  $T_{gv}$  compris entre celle de l'eau  $T_{ge}$  et le matériau non vieilli  $T_{gnv}$  [44] :  $T_{ge} \leq T_{gv} \leq T_{gnv}$ .

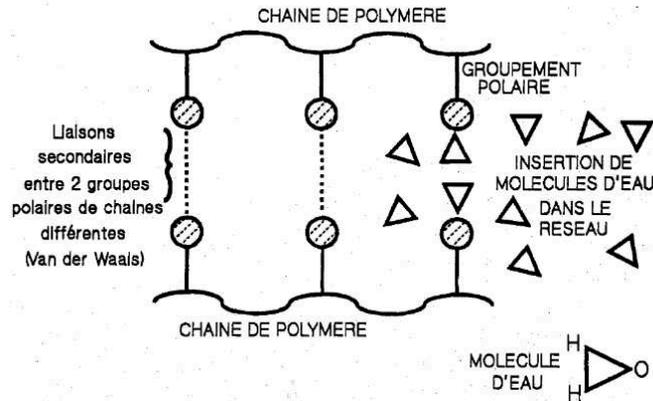


Figure I.12 – Processus de plastification [45]

**Gonflement :** La diffusion des molécules d'eau dans le polymère, suite à un processus d'absorption d'eau, provoque un changement de volume sous la forme d'un gonflement hygroscopique. En effet les molécules d'eau occupent le volume libre qui se présente sous la forme de cavités entre les chaînes macromoléculaires sans engendrer de gonflement dans un premier temps (Figure I.13(a)). Cependant, une partie de l'eau absorbée rompt, dans un premier temps, les liaisons hydrogène inter-moléculaires, provoquant un gonflement par liaison hydrogène avec la résine comme le montre le régime 1 dans la Figure I.14. Dans un second temps, la plastification et les liaisons hydrogènes favorisent, par une prise de masse, un écartement des chaînes macromoléculaires et par conséquent l'augmentation du volume du composite (Figure I.13(b)). Durant cette phase un équilibre hydrique s'établit avec une domination de la rupture des liaisons hydrogène inter-moléculaire. Au fur et à mesure que les molécules d'eau individuelles sont "retirées" du volume libre en se combinant avec la résine, elles sont remplacées par la diffusion de l'humidité provenant de l'extérieur ; d'où la correspondance entre le gonflement et le volume d'humidité absorbé dans la région de gonflement 2 présentée dans la Figure I.14. Enfin, au-delà d'une certaine concentration d'humidité, l'efficacité apparente du gonflement sera inférieure à celle observée dans les deux premières régions de gonflement. Cette faible efficacité reflète la diffusion dans des microstructures à haute densité, qui contiennent un certain

volume libre mais qui, en raison de leur état de forte réaction (dominé par la liaison covalente), ne gonflent que légèrement (Régime 3, Figure I.14). Il est à

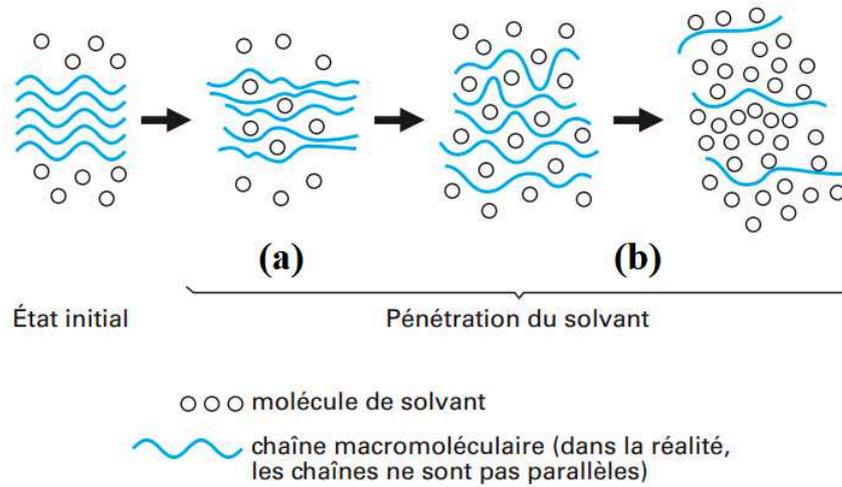
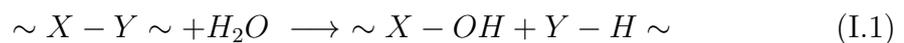


Figure I.13 – Schématisation de la pénétration d'eau dans le matériau polymérique [46]

noter que ce volume libre varie d'un polymère à un autre et selon aussi les conditions environnementales. D'après Adamson [47], ce volume peut varier de 2.64% à 3.02% pour un matériau epoxy immergé dans l'eau à 74°C et 40°C respectivement. Par conséquent, la variation du volume final réel est inférieure à celle théorique (Figure I.14).

#### I.4.1.3 Vieillessement chimique

**Hydrolyse :** Lors de la diffusion d'eau dans les matériaux polymériques, un phénomène de dégradation de nature chimique pourrait se produire. En effet, les molécules d'eau réagissent avec les groupements hydrophiles jusqu'à la scission des chaînes moléculaires du polymère. Cette coupure engendre la formation de deux parties séparées : une partie gagne l'anion hydrogène ( $H^+$ ) et l'autre partie sera liée par le cation hydroxyle ( $OH^-$ ), comme le montre l'équation chimique suivante :



Des études montrent que les groupes amides, époxydes et esters sont les groupes les plus hydrolysés en réaction avec les molécules d'eau [48]. D'autres études montrent que le phénomène d'hydrolyse provoque un endommagement chimique via une diminution de la masse moléculaire [42] connue sous le nom de « lessivage », ainsi qu'une chute irréversible des propriétés mécaniques [49].

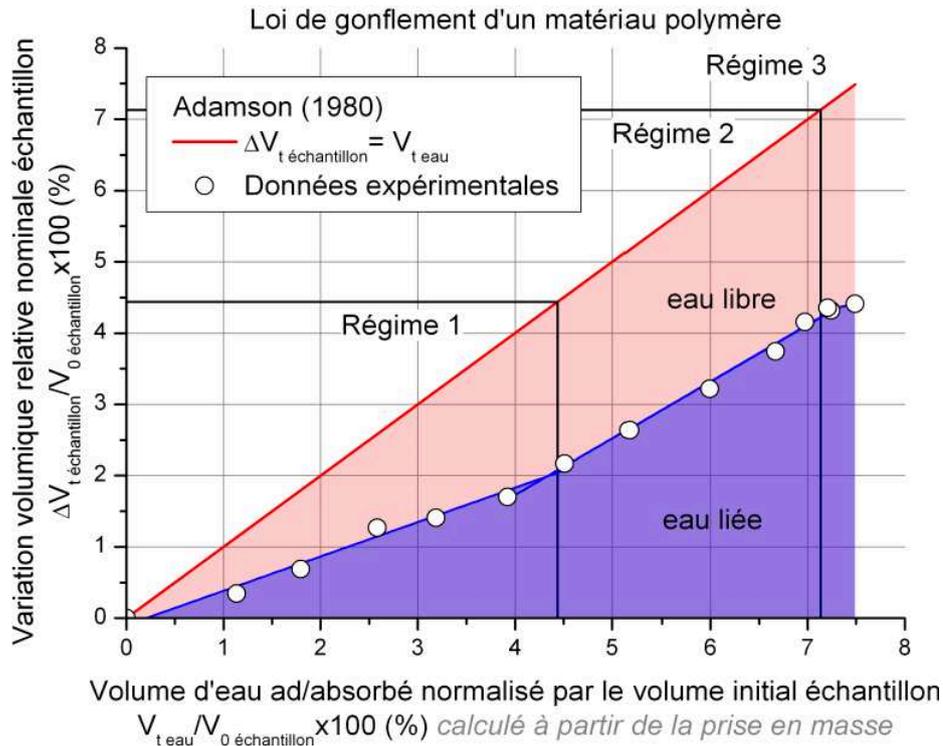


Figure I.14 – Évolution du taux de variation volumique pour un matériau en époxy immergé dans l'eau à 40°C en fonction du taux d'eau absorbée [47]

#### I.4.2 Effet du vieillissement hygrothermique sur les propriétés mécaniques

La pénétration des molécules d'eau entre les chaînes macromoléculaires affecte le comportement mécanique des matériaux composites. Dans ce contexte, Salem et al. [50] ont étudié l'effet du vieillissement hygrothermique sur le comportement tribologique des composites à matrice polyéthylène haute densité (HDPE) pour l'application de bio-implants. Ils ont montré que le comportement tribologique des composites a été affecté par les conditions de vieillissement, notamment avec la solution de Ringer, en raison du phénomène de corrosion. Il a été par ailleurs confirmé que la tenue mécanique et la durée de vie de ces matériaux composites dépendent potentiellement de la stabilité de cette région lors du processus de vieillissement [51, 52]. Ainsi, la rupture des liaisons chimiques, due à l'eau absorbée, fragilise la zone interfaciale qui assure le transfert des efforts de la matrice jusqu'aux fibres. Par conséquent, d'éventuelles défaillances au niveau de l'interface conduiront à une diminution de toutes les propriétés mécaniques des matériaux étudiés, comme démontré par Assarar et al. [53]. En effet durant leurs études sur un matériau composite verre/époxy immergé dans l'eau distillée pendant 40 jours, ils ont constaté une diminution du module élastique de 10% et de la contrainte à la rupture de 25%. Par ailleurs, d'autres travaux [52, 54] ont montré

que l'effet de vieillissement hygrothermique des matériaux composites à matrice polyamide s'explique par une chute de la rigidité accompagnée d'une diminution de la contrainte à la rupture. Toutefois, une augmentation de la déformation à la rupture est observée. D'autres études menées par Ksouri et al. [55] ont mis en évidence la défaillance au niveau de l'interface par des clichés MEB. En effet, ils ont réussi à montrer des surfaces de fibre lisses ce qui a été interprété par une perte d'adhésion après immersion dans l'eau. À ce titre, il convient de préciser qu'avant le vieillissement, la surface des fibres est bien enrobée de matrice. Cela signifie qu'il y a une bonne adhérence entre la fibre et la matrice. Par ailleurs, cette adhésion diminue petit à petit tout au long du vieillissement hygrothermique ce qui favorise un éventuel mécanisme d'endommagement interfacial (Figure I.15).

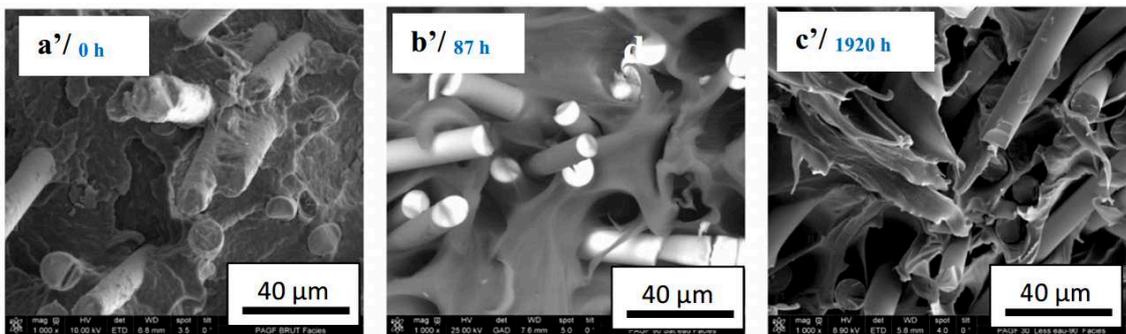


Figure I.15 – Observation au MEB du PA6/GF30 avant et après vieillissement hygrothermique dans de l'eau distillée à 90 °C à différents instants [55]

## I.5 Modélisation des matériaux composites à fibres courtes

L'utilisation de méthodes expérimentales pour mieux comprendre et estimer les propriétés mécaniques des matériaux composites à fibres courtes s'avère une approche généralement coûteuse. Une alternative consiste à recourir à la modélisation par des approches micromécaniques ou numériques afin de déterminer plus efficacement leur réponse mécanique en termes de propriétés mécaniques et de loi de comportement. Nous présentons dans cette partie quelques exemples d'approches micromécaniques et numériques les plus souvent utilisées dans la littérature.

## I.5.1 Approches micromécaniques

Afin de prédire le comportement des matériaux composites à fibres courtes en prenant en compte l'effet de paramètres micro-structuraux, une description basée sur des modèles micromécaniques s'avère une solution adéquate pour résoudre ce type de problème. De nombreuses études ont été consacrées à ce sujet dans la littérature. Ces dernières ont conduit au développement de divers modèles parmi lesquels le modèle de Halpin-Tsai, de Mori-Tanaka ou bien de Tandon-Weng lesquels sont présentés ci-après.

### I.5.1.1 Halpin-Tsai

Le modèle d'Halpin-Tsai [56] est l'un des modèles micromécaniques les plus utilisés pour la prédiction des propriétés élastiques des composites à fibres courtes. Ce modèle est basé sur l'approche auto-cohérente de Hill [57] et la solution de Hermans [58]. Halpin et Tsai [56] ont considéré quelques hypothèses supplémentaires afin de réduire la solution de Hermans et obtenir une forme analytique plus simple.

$$\frac{P}{P_m} = \frac{1 + \xi\eta v_f}{1 - \eta v_f} \quad \text{avec} \quad \eta = \frac{(P_f/P_m) - 1}{(P_f/P_m) + 1} \quad (\text{I.2})$$

où  $P$  représente l'un des modules élastiques du matériau composite à étudier,  $P_m$  et  $P_f$  sont les modules correspondants de la matrice et de la fibre. Il convient de préciser que les équations d'Halpin-Tsai sont toutefois semi-empiriques dans la mesure où l'un des paramètres ( $\xi$ ) est identifié en ajustant les équations aux résultats numériques. Ainsi, le paramètre  $\xi$  dépend des modules calculés comme indiqué dans le Tableau I.2. La valeur de  $\xi_{G_{12}}$  proposée par Hewitt et Malherbe

$P$	$P_f$	$P_m$	$\xi$
$E_{11}$	$E_f$	$E_m$	$2(l/d)$
$E_{22}$	$E_f$	$E_m$	2
$G_{12}$	$G_f$	$G_m$	$1 + 40v_f^{10}$
$G_{23}$	$G_f$	$G_m$	$\frac{K_m/G_m}{K_m/G_m + 2}$

Tableau I.2 – Les paramètres de Halpin-Tsai utilisés dans les calculs

est utilisée [59]. Les dimensions  $l$  et  $d$  avec lesquels  $E_{11}$  est déterminé, sont respectivement la longueur et le diamètre de la fibre. Le module de compression de la matrice,  $K_m$ , nécessaire pour le calcul du  $\xi_{G_{23}}$  est déterminé à partir de

l'équation suivante :

$$K_m = \frac{E_m}{3(1 - 2\nu_m)} \quad (\text{I.3})$$

L'avantage du modèle d'Halpin-Tsai est alors qu'une seule équation suffit pour déterminer l'ensemble des coefficients élastiques d'un matériau composite y compris le coefficient de Poisson longitudinal, lequel est déterminé à partir de la loi des mélanges :

$$\nu_{12} = \nu_f v_f + \nu_m (1 - v_f) \quad (\text{I.4})$$

Kulkarni et al. [60] ont tiré profit du modèle d'Halpin-Tsai afin de prédire les propriétés élastiques d'un matériau composite à base de polyétheréthercétone (PEEK) renforcé par des fibres courtes de carbone. Dans le même contexte, les propriétés élastiques des nanocomposites de type graphène/époxy ont été estimées via le modèle d'Halpin-Tsai [61]. Bagal et al. [62] ont constaté qu'avec l'augmentation de la fraction volumique des plaquettes de graphène dans l'époxy, le module d'élasticité et le module de cisaillement du nanocomposite graphène/époxy augmentent respectivement de 40% et 34%. Cependant, les équations d'Halpin-Tsai se sont avérées produire une très mauvaise prédiction du coefficient de Poisson transversal, donnant parfois des prédictions 2 à 3 fois plus élevées que les prédictions numériques et résultats expérimentaux [63, 64].

### I.5.1.2 Mori-Tanaka

En 1957, Eshelby a développé un modèle structural pour un problème d'inclusion ellipsoïdale unique noyée dans une matrice infinie sous l'action d'une déformation libre [65]. Mori et Tanaka ont étendu le problème d'Eshelby au cas de multiples inclusions pouvant interagir en contrainte et déformation [66]. Cette interaction entre les inclusions a été ignorée dans le modèle d'Eshelby ce qui limite sa validité pour de faibles fractions volumiques inférieures à 1% [63, 67]. L'hypothèse principale faite par Mori et Tanaka suppose qu'une fibre noyée dans un composite est soumise à la déformation moyenne de la matrice [63]. La relation entre la déformation moyenne  $\bar{\bar{\varepsilon}}_m$  et la déformation de chaque inclusion  $\bar{\bar{\varepsilon}}_i$  est alors donnée comme suit :

$$\bar{\bar{\varepsilon}}_i = T_i : \bar{\bar{\varepsilon}}_m \quad (\text{I.5})$$

où  $T_i$  est le pseudo-tenseur de localisation issue de la résolution du problème d'hétérogénéité d'Eshelby tel que :

$$T_i = (I + S_i^E : C_m^{-1} : (C_i - C_m))^{-1} \quad (\text{I.6})$$

où  $I$  est le tenseur unité,  $S_i^E$  est un tenseur d'ordre 4 reliant la déformation libre à la déformation de l'inclusion,  $C_i$  et  $C_m$  sont respectivement les matrices de rigidité de l'inclusion et de la matrice.

Avec la moyenne volumique des déformations, on obtient :

$$\bar{\bar{E}} = \sum_{k=0}^n c_k T_k : \bar{\bar{\varepsilon}}_m \quad (I.7)$$

où  $\bar{\bar{E}}$  est le tenseur de déformations,  $c_k$  est la fraction volumique de la phase  $k$  et  $n$  est le nombre de phases.

Comme  $\bar{\bar{\varepsilon}}_m$  est une constante, cela nous permet d'obtenir :

$$\bar{\bar{\varepsilon}}_m = \left( \sum_{k=0}^n c_k T_k \right)^{-1} : \bar{\bar{E}} = A_m : \bar{\bar{E}} \quad (I.8)$$

En utilisant l'équation I.5, on a :

$$\begin{aligned} \bar{\bar{\varepsilon}}_i &= T_i : \bar{\bar{\varepsilon}}_m \\ &= T_i : A_m : \bar{\bar{E}} \\ &= T_i : \left( \sum_{k=0}^n c_k T_k \right)^{-1} : \bar{\bar{E}} \\ &= A_i : \bar{\bar{E}} \quad \text{pour } k > 1 \end{aligned} \quad (I.9)$$

où  $A_i$  est le tenseur de localisation de chaque phase d'inclusion. Le tenseur de rigidité homogénéisé est donné par l'équation classique :

$$C^{MT} = C_m + \sum_{i=1}^n c_i (C_i - C_m) : A_i \quad (I.10)$$

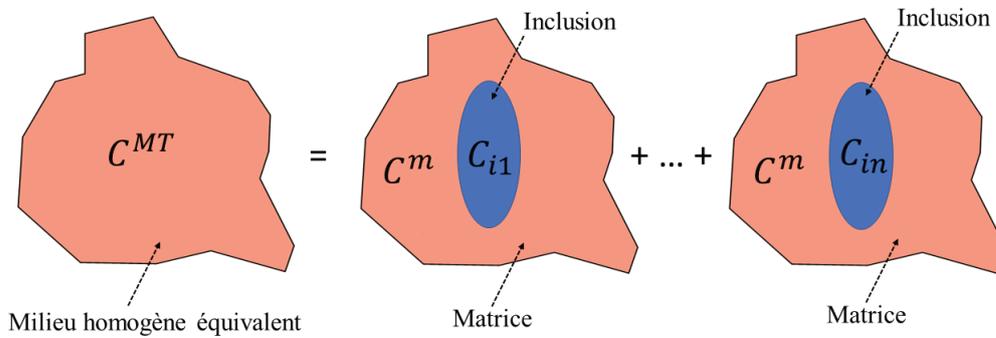


Figure I.16 – Modèle de Mori-Tanaka

Poh et al. [68] ont adopté le modèle de Mori-Tanaka pour estimer les propriétés

effectives d'un matériau composite à matrice céramique renforcé par des nanotubes de carbone (CNT). La comparaison montre que les écarts entre les résultats analytiques actuels et les données expérimentales sont d'environ 10% pour 4% en poids de CNT et d'environ 0,5% pour 8% en poids de CNT. Ainsi, les écarts obtenus sont substantiellement inférieurs aux écarts actuellement rapportés dans la littérature. Tran et al. [69] ont utilisé le modèle de Mori-Tanaka afin de prédire les propriétés effectives des composites à gradient de contrainte avec des inclusions sphériques. Ils ont conclu que le modèle de gradient de contrainte est adapté aux matériaux qui présentent des effets de taille adoucissants. Selon Tucker et al. [63], le modèle de Mori-Tanaka donne une meilleure prédiction pour le coefficient de Poisson transversal ( $\nu_{23}$ ) et des prédictions légèrement meilleures pour toutes les autres propriétés élastiques par rapport au modèle d'Halpin-Tsai. Cependant, ce modèle est valable pour des fractions volumiques d'inclusions inférieures à 25% [70].

### I.5.1.3 Tandon-Weng

Tandon et Weng [71] ont profité de l'approche de Mori-Tanaka pour déduire des formules explicites des constantes élastiques d'un matériau composite à fibres courtes. En utilisant le modèle de Tandon-Weng [72], ces propriétés élastiques peuvent être évaluées à travers les relations suivantes [73] :

$$E_{11} = \frac{E_m}{1 + v_f(A_1 + 2v_m A_2)/A} \quad (\text{I.11})$$

$$E_{22} = \frac{E_m}{1 + v_f[-2v_m A_3 + (1 - v_m)A_4 + (1 + v_m)A_5 A]/2A} \quad (\text{I.12})$$

$$G_{12} = \frac{G_m(1 + v_f)}{\frac{G_m}{G_f - G_m} + 2(1 - v_f)S_{1212}} \quad (\text{I.13})$$

$$G_{23} = \frac{G_m(1 + v_f)}{\frac{G_m}{G_f - G_m} + 2(1 - v_f)S_{2323}} \quad (\text{I.14})$$

$$\nu_{12} = \frac{\nu_m A - v_f(A_3 - \nu_m A_4)}{A + v_f(A_1 + 2v_m A_2)} \quad (\text{I.15})$$

$$\nu_{23} = \frac{E_{22}}{2G_{23}} - 1 \quad (\text{I.16})$$

Les constantes utilisées dans les équations (I.11-I.16) sont explicitées par Middleton [72]. Plusieurs auteurs ont appliqué le modèle de Tandon-Weng afin

d'estimer les propriétés élastiques des matériaux composites à fibres courtes [63, 64, 74]. Ces auteurs ont constaté que le modèle de Tandon-Weng fournit une prédiction des propriétés élastiques de même ordre que celle obtenue par le modèle de Mori-Tanaka. Dans le même contexte, Rauter et al. [75] ont montré que les estimations obtenues par le modèle de Tandon-Weng sont plus précises de 8% pour le module de Young longitudinal par rapport au modèle d'Halpin-Tsai. En outre, le modèle s'avère précis au niveau de la prédiction des propriétés élastiques. Ceci est également confirmé par Gusev et al [64]. Cependant, cette précision diminue à mesure que la fraction volumique et le rapport du module de Young de la fibre par rapport au module de Young de la matrice ( $E_f/E_m$ ) augmentent [76].

## I.5.2 Approches numériques

En raison de leur simplicité et de leur efficacité, les approches micromécaniques sont largement utilisées pour estimer le comportement macroscopique des matériaux. Cependant, leurs hypothèses fondamentales concernent généralement des morphologies microstructurales et des modèles de matériaux simplifiés. Afin de prendre en compte la microstructure des matériaux avec une meilleure précision, le Volume Élémentaire Représentative (VER) se présente comme une solution idéale (Figure I.17). Ce volume doit d'une part être suffisamment grand par

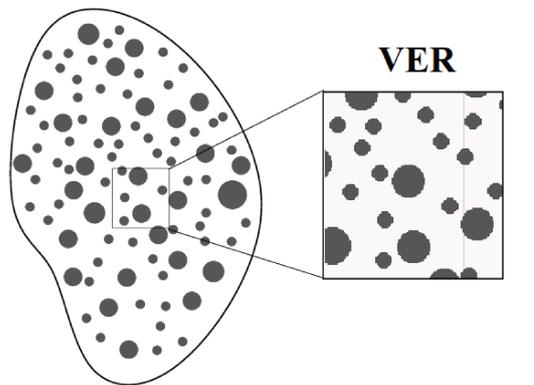


Figure I.17 – Exemple d'un VER d'un matériau composite à microstructure complexe [77]

rapport aux dimensions caractéristiques microstructurales afin de tenir compte d'un maximum d'informations liées à la microstructure [78, 79]. Ce volume doit d'autre part être assez petit par rapport aux dimensions macroscopiques du matériau sur lequel le calcul de structure est effectué [78]. Par conséquent, en combinant cette notion de VER à des outils de simulation numérique, tels que la Méthode des Éléments Finis (MEF), la Transformation de Fourier Rapide

(TFR) ainsi que la Méthode des Éléments Discrets (MED), il est possible de prédire le comportement macroscopique de matériaux composites présentant des microstructures complexes avec une plus grande précision et une meilleure efficacité.

### I.5.2.1 Méthode des Éléments Finis (MEF)

Plusieurs recherches ont appliqué la méthode des éléments finis (MEF) pour modéliser les composites renforcés de fibres courtes aléatoires et évaluer leurs propriétés élastiques macroscopiques [80, 81]. L'idée de la MEF est de discrétiser l'intégralité du milieu continu à étudier en sous domaines (Figure I.18). Parmi

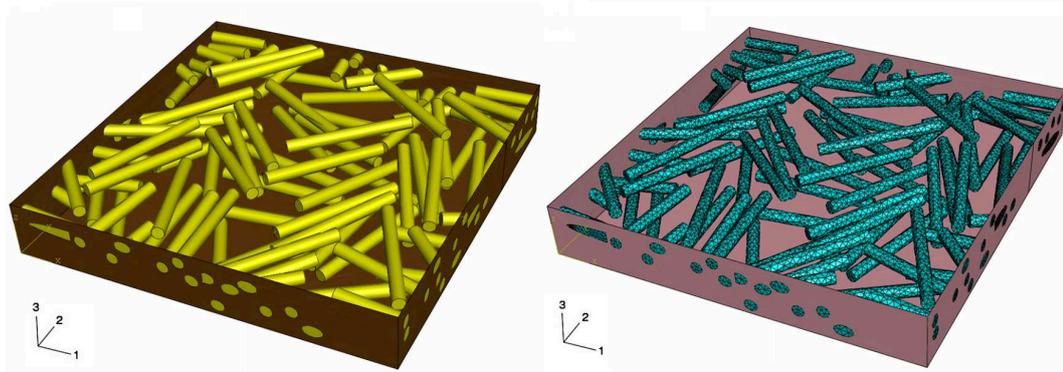


Figure I.18 – Modèle et maillage d'un VER d'un matériau composite de fraction volumique de 13.5% et de facteur de forme de 10 par la MEF [82]

un nombre conséquent de travaux réalisés dans ce domaine, Beicha et al. [83] ont exploité la MEF afin d'étudier l'influence de l'arrangement des fibres sur le comportement élastique transversal effectif de matériaux composites renforcés par des fibres unidirectionnelles. Kari et al. [84] ont utilisé la MEF pour étudier l'effet de la fraction volumique et du facteur de forme des fibres sur un composite à matrice métallique (CMM) renforcé par des fibres courtes et aléatoires de SiC. Dans le même contexte, Wang et al. [85] ont proposé un modèle EF pour examiner les effets du taux de fibres et de la longueur des fibres sur le module de Young de mousses de polypropylène renforcées par des fibres courtes. Böhm et al. [86] et Duschbauer et al. [87] ont étudié un CMM renforcé par des fibres courtes aléatoires quasi alignées. Les réponses macroscopiques élastiques, ainsi que la contrainte principale moyenne des fibres ont été rapportées. Modniks [88, 89] a évalué les propriétés mécaniques de composites renforcés par des fibres courtes en moyennant les propriétés des cellules unitaires obtenues par la MEF. Cependant, la modélisation de la géométrie des fibres pour des composites renforcés par des fibres courtes ayant des facteurs de forme très élevés peut être fastidieuse avec

la MEF, en particulier lorsqu'un grand nombre de fibres est présent. Dans ce cas, la Méthode des Éléments Finis Étendus (XFEM) est utilisée pour éliminer la nécessité de conformer la discrétisation aux fibres individuelles. En effet, la XFEM permet d'enrichir la base polynomiale d'approximation de façon à rendre possible la prise en compte d'une telle irrégularité au sein d'un élément. Radtke et al. [90, 91] ont été les premiers à modéliser par XFEM des fibres avec des facteurs de forme élevés et un comportement élastique dans le contexte de composites renforcés par des fibres courtes. Dans le même contexte, un modèle XFEM pour des fibres courtes rigides aléatoires a été proposé par Pike et Oskay [92]. En outre, Pike et Oskay ont également présenté une approche de modélisation basée sur la XFEM pour modéliser le comportement mécanique des composites tridimensionnels à fibres courtes [93] (Figure I.19).

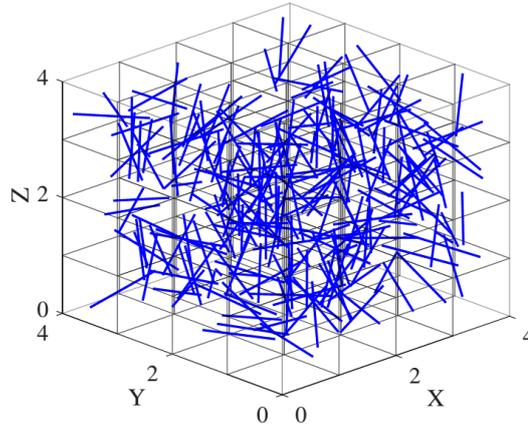


Figure I.19 – VER tridimensionnel de fibres denses aléatoires utilisé dans l'approche XFEM [93]

### I.5.2.2 Transformée de Fourier Rapide (TFR)

La méthode de Fourier a été proposée pour la première fois par Moulinec et Suquet afin de caractériser le comportement macroscopique d'un matériau composite à partir d'images complexes de sa microstructure [94]. Cette approche est basée sur la résolution de l'équation de Lippmann-Schwinger [95, 96] (Équation I.17) associée au problème mécanique étudié via un opérateur de Green exprimé dans l'espace de Fourier dans lequel l'opérateur de convolution devient un simple produit.

$$\begin{cases} \varepsilon(x) = \varepsilon(x)^0 + \int_{\Omega'} G^0(x - x') : \sigma(x) \partial\Omega' \\ \sigma(x) = (C(x) - C^0) : \varepsilon(x) \end{cases} \quad (\text{I.17})$$

Où  $\varepsilon(x)$ ,  $\sigma(x)$  et  $C(x)$  sont respectivement la déformation, la contrainte et le tenseur de rigidité du voxel de coordonnées  $x$ .  $\Omega$  est le volume du VER,  $0$  désigne le domaine de référence,  $C^0$  représente le tenseur de rigidité du matériau lié au matériau de référence et  $G^0$  est le noyau de Green explicité par Mura [97]. Il convient de préciser que l'espace de Fourier nécessite l'application de conditions aux limites périodiques. Dans cette approche, le VER est d'abord converti en un nombre donné de pixels (2D) ou de voxels (3D), puis des propriétés mécaniques différentes sont attribuées à chacun d'eux en fonction de la phase à laquelle ils appartiennent. Ainsi, comme aucun maillage n'est nécessaire et que l'assemblage et la résolution d'un système linéaire sont évités, le temps nécessaire à la résolution du problème est réduit par rapport la MEF. L'approche TFR a été comparée à divers modèles d'homogénéisation analytique (modèle de Mori-Tanaka (MT), modèle auto-cohérent et auto-cohérent généralisé) en faisant varier les propriétés des constituants d'un composite constitué d'une matrice et d'inclusions sphériques [98] et à des données expérimentales [99]. Müller et al. [100] ont

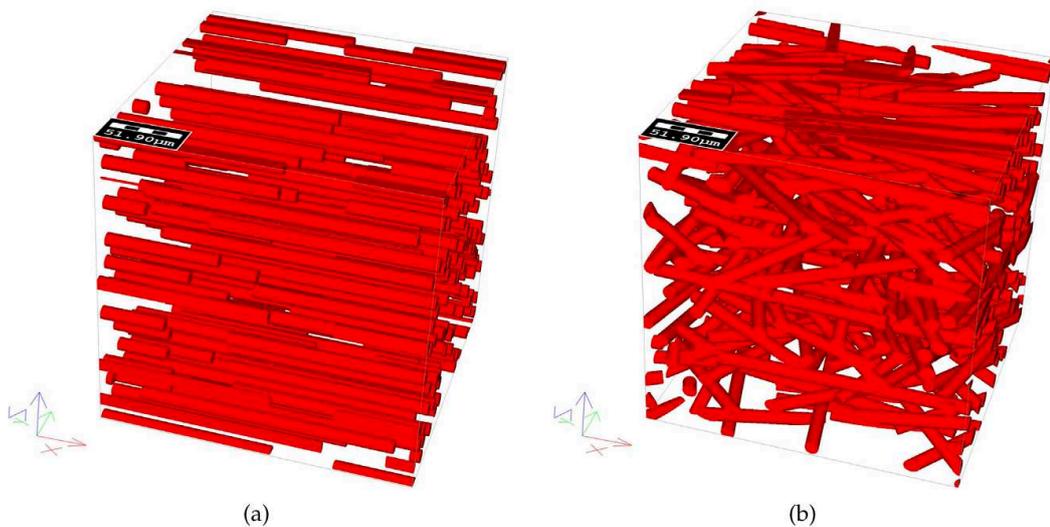


Figure I.20 – Exemple de modèles voxelisés de VER de résolution  $125 \times 250 \times 500$  pour (a) une microstructure unidirectionnelle et (b) une microstructure aléatoire [100]

comparé des modèles de champ moyen (modèle d'interaction directe dérivative et modèle auto-cohérent) aux résultats numériques donnés par la TFR pour différents composites à matrice polypropylène renforcés par des fibres de verre courtes (Figure I.20). Ils ont conclu que la TFR est capable de prendre en compte des caractéristiques géométriques plus complexes, comme le défaut d'alignement des fibres, que les approches de champ moyen discutées précédemment.

### I.5.2.3 Méthode des Éléments Discrets (MED)

La MED est une approche numérique qui a montré son potentiel à modéliser le comportement mécanique des matériaux hétérogènes [101, 102, 103]. Cette méthode a été originalement développée pour résoudre des problèmes liés aux milieux granulaires. La MED est ainsi apparue dans les années 70 [104] dans le domaine de la géomécanique afin de résoudre des phénomènes d'éboulement de roches. La principale différence entre ce type d'approche et d'autres plus classiques utilisant des modèles continus est l'échelle de la modélisation. Ainsi, les méthodes conventionnelles captent souvent des phénomènes à une plus grande échelle que les éléments microstructuraux, manquant ainsi des détails à une échelle microscopique. Dans ce cadre, le modèle décrit par Cundall et Strack [105] de type ressort/amortisseur constitue l'un des premiers pas établis afin de représenter l'hétérogénéité ainsi que le comportement mécanique des matériaux étudiés [106]. Contrairement au formalisme de la dynamique non régulière (Non Smooth Contact Dynamics (NSCD)) dans lesquelles aucune interpénétration entre particules n'est autorisée, le formalisme sur lequel s'appuie la Dynamique Moléculaire se présente comme une approche plus flexible. Connue sous le nom de Smooth Contact Dynamics (SCD) et introduite par Cundall et Strack [105], cette approche favorise la pénétration entre les particules en contact par le biais d'un contact élastique à l'échelle des particules. Ainsi, la MED facilite la compréhension des systèmes multiphysiques par une modélisation relativement simple. Cette méthode se caractérise par une modélisation du milieu étudié par un ensemble de particules en interaction via des lois de contact établies à l'échelle du contact inter-particulaire (Figure I.21).

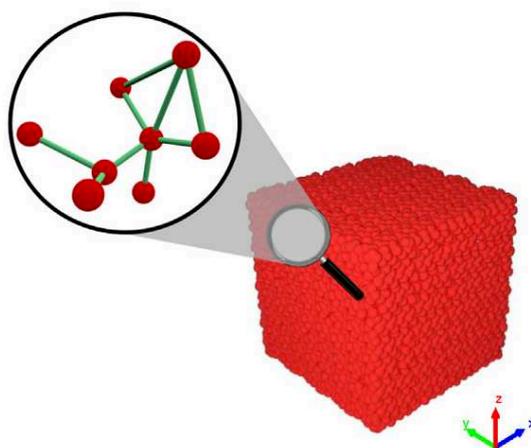


Figure I.21 – Exemple d'un VER cubique constitué de particules sphériques [107]

Dans ce contexte, Potyondy et Cundall [108] ont introduit le modèle de

particules liées (Bonded Particle Model (BPM)) pour étudier des problèmes en mécanique des roches par le biais d'un système particulaire dense composé de particules sphériques polydispersées. En effet, ces particules sont liées entre elles à leurs points de contact par des modèles élastiques classiques de type ressort/ amortisseur. Ainsi, ces modèles de contact sont contrôlés par une raideur normale  $k_n$  et une raideur tangentielle  $k_t$ . De plus, sur la base des travaux de Schlangen et al. [109], André et al. [110] ont développé un modèle hybride lattice-particulaire dans lequel un ensemble de particules sphériques sont liées par des éléments cohésifs de type poutre d'Euler-Bernoulli. Une telle approche a également été utilisée par Haddad et al. [111] pour un modèle bidimensionnel permettant de simuler les propriétés élastiques effectives d'un matériau composite de type BaTiO<sub>3</sub>/Epoxy. Leclerc [103] a ensuite introduit un modèle cohésif s'appuyant sur un élément poutre d'Euler Bernoulli qui se distingue par des termes de couplage entre les efforts tangentiels et les efforts de flexion au sein de la matrice de rigidité du lien cohésif. Via ce modèle 3D, Leclerc [103] a modélisé le comportement élastique d'un composite alumine/aluminium. De plus, Moukadiri et al. [112] ont exploité cette approche tridimensionnelle et ont introduit un concept appelé Halo afin de contrôler le niveau de dispersion des contraintes à l'échelle locale dans le contexte d'une résine époxy renforcée en fibres de lin (Figure I.22).

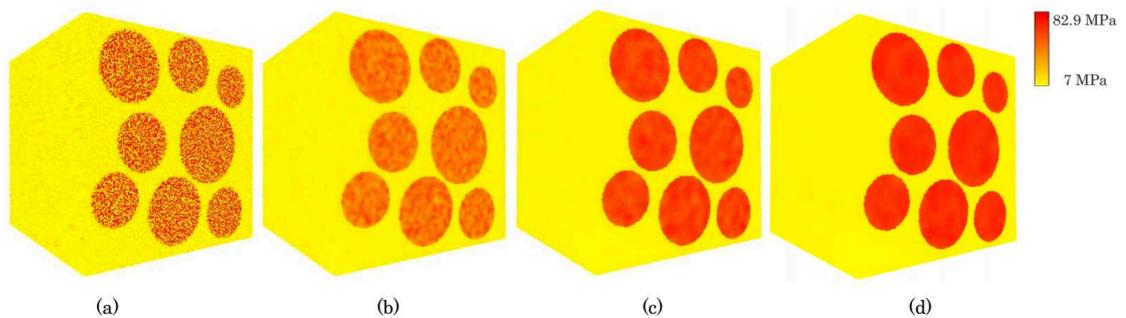


Figure I.22 – Évolution du champ de contrainte par la MED avec (a) 1, (b) 70, (c) 540, (d) 1720 ED par Halo [70]

Par ailleurs, Le et al. [113] ont considéré des volumes élémentaires statistiques afin de modéliser un matériau composite de type fibre de verre/époxy à une seule fibre et à fibres multiples alignées par la MED (Figure I.23).

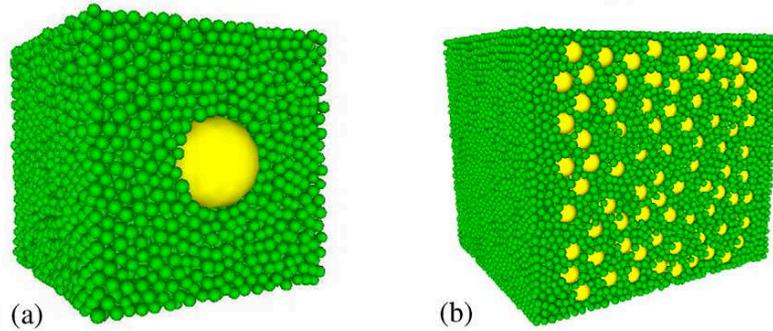


Figure I.23 – Exemple d’un VER d’un matériau composite par la MED à (a) une seule fibre (b) fibres multiples [113]

## I.6 Modélisation de l’endommagement interfacial des matériaux composites

L’endommagement d’origine interfaciale dans les matériaux composites s’avère très problématique à modéliser en raison des hétérogénéités et des interactions importantes entre les différents constituants. Une caractérisation multi-échelle est en effet nécessaire pour comprendre des phénomènes spécifiques tels que le comportement de la rupture interfaciale des matériaux composites à l’échelle locale. Le recours à des modèles micromécaniques et à des simulations numériques est donc nécessaire pour mieux comprendre ces mécanismes et leur influence à l’échelle macroscopique. Dans ce contexte, plusieurs approches ont été proposées. Ainsi, Notta-Cuvier et al. [114] ont développé une approche pour simuler la décohésion interfaciale progressive dans les matériaux composites à fibres courtes. Le critère de rupture proposé prend en compte la quantité critique de vides ainsi que l’influence des conditions environnementales à l’interface fibre/matrice. Une approche micromécanique, basée sur une méthode incrémentale généralisée de Mori-Tanaka, a été développée pour modéliser l’endommagement progressif à l’interface du PA66/GF30 [115]. De plus, un modèle hybride a été proposé par Laribi et al. [116] dans le contexte d’un pré-imprégné en feuille (Sheet Molding Compound (SMC) en anglais). Ces derniers ont combiné une approche micromécanique, basée sur le schéma Mori-Tanaka, avec un modèle phénoménologique afin d’étudier la décohésion de l’interface fibre/matrice sous un chargement cyclique. Néanmoins, les approches présentées dans [114] et [116] nécessitent une grande base de données expérimentales pour fournir des prédictions plus réalistes, ce qui représente le principal inconvénient de ces modèles. En outre, certaines limitations, telles que la préparation des échantillons, le protocole expérimental à suivre et la mesure à

l'échelle de la fibre, liées à l'utilisation de la méthode d'ingénierie inverse pour identifier les paramètres à l'interface fibre/matrice, réduisent le champ d'application du modèle présenté dans [115]. Par conséquent, les modèles micromécaniques actuels ne sont pas adaptés au traitement des phénomènes de décohésion complexes.

La littérature fournit un ensemble d'approches numériques pour simuler les fissures et traiter les problèmes de délamination ou de la décohésion. Parmi elles, la méthode connue sous le nom de "Virtual Crack Closure Technique" (VCCT) est l'une des approches les plus utilisées pour prédire l'évolution du phénomène de délamination [117]. Cette technique fournit des informations sur l'initiation et la propagation de la délamination dans les matériaux composites [118]. Cependant, cette approche nécessite une pré-fissure et n'est donc pas adaptée pour prédire l'initiation du phénomène de délamination. De plus, la propagation de la délamination ou de la décohésion à l'interface nécessite un maillage actualisé, ce qui réduit sa capacité à traiter des géométries complexes et certains cas de chargement [119]. Le Modèle de Zone Cohésive (MZC) est utilisé dans des études numériques comme un outil efficace pour modéliser la rupture des interfaces de bimatériaux, en particulier lorsque la Mécanique Élastique Linéaire de la Rupture (MELR) ne peut pas être utilisée. Contrairement à la méthode VCCT, le MZC est capable de prédire l'initiation et la propagation du phénomène de délamination à l'interface sans pré-fissure [120]. Ainsi, la propagation du phénomène de délamination a été étudiée dans des éprouvettes composites de type Double Cantilever Beam (DCB) [121, 122]. De plus, le MZC a été adapté pour prédire les dégradations dues au déchaussement à l'interface fibre/matrice sous un chargement transversal quasi-statique [123]. Parmi d'autres applications, un modèle de cellule unitaire prenant en compte la formulation MZC a été introduit par Tvergaard afin de simuler la décohésion à l'interface fibre/matrice dans un matériau composite renforcé avec des fibres SiC courtes alignées [124]. La décohésion à l'interface fibre/matrice dans les composites renforcés par des nanotubes de carbone a également été étudiée à l'aide du MZC par Matveeva et al. [125]. Cependant, les résultats obtenus sont dépendants du maillage selon Harper et Hallett [126]. En effet, cette méthode nécessite un maillage raffiné à l'interface pour fournir une meilleure précision du phénomène de délamination. En outre, la Méthode des Éléments Finis Étendue (XFEM) [127] a été développée pour étudier la défaillance des matériaux composites [128]. Cependant, la XFEM nécessite une fissure pré-existante, ce qui limite l'application de cette méthode. De plus, cette approche s'avère peu

adaptée à l'étude de fissures multiples auxquelles sont associées des phénomènes de coalescence et de bifurcation [102].

La MED est de plus en plus utilisée comme une approche alternative pour résoudre des problèmes mécaniques où plusieurs échelles et discontinuités sont impliquées. Ainsi, Maheo et al. [129] ont étudié les mécanismes d'endommagement au sein d'un matériau composite de type fibre de carbone/époxy. Récemment, Leclerc et al. [107] ont adapté l'approche Halo pour simuler le processus d'endommagement et les motifs de fissuration d'un matériau composite de type fibre de lin/époxy. Dans le contexte des problèmes de délamination, plusieurs études ont été réalisées via la MED pour simuler la progression du phénomène de délamination en mode I, II et en mode mixte. Dans le même contexte, la rupture en mode I a été étudiée dans [130, 131] à l'aide d'essais DCB. Les essais ELS (End Loaded Split) [130] et ENF (End Notched Flexural) [131] ont été utilisés pour reproduire la rupture en mode II. De même, les essais FRMM (Fixed-Ratio Mixed-Mode) [130] et MMB (Mixed Mode Bending) [131] ont été exploités pour simuler le mode mixte dans les matériaux composites stratifiés. Afin de modéliser l'endommagement interfacial avec la MED, des modèles de contact ont été proposés pour tenir compte du comportement interfacial complexe tout en considérant des lois constitutives [132]. Le modèle le plus connu, qui sera mis en œuvre au chapitre III de ce mémoire de thèse, est le modèle d'adoucissement par contact qui présente une élasticité bilinéaire. Ce modèle de contact illustré par la Figure I.24 est similaire au MZC dans le cadre de la mécanique des milieux continus [130]. En effet, ce modèle relie les efforts de traction ou bien de

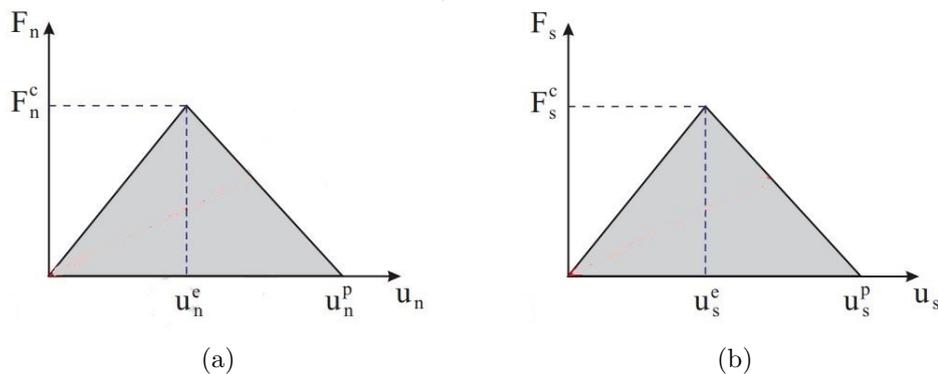


Figure I.24 – Loi constitutive du modèle d'adoucissement bilinéaire (a) contact normal (b) contact tangentiel [113]

cisaillement associés au contact inter-particulaire aux déplacements à l'interface,  $u_n^e$  ou  $u_s^e$  où la fissure peut apparaître. L'initiation de l'endommagement

interfacial est associée à la force interfaciale, c'est-à-dire à la force de traction maximale ( $F_n^c$ ) ou de cisaillement maximale ( $F_s^c$ ) de la relation force-déplacement. L'aire sous la courbe force-déplacement est égale au taux de restitution d'énergie critique,  $G_{Ic}$  en mode I ou  $G_{IIc}$  en mode II. Ce dernier est relatif à un déplacement maximal ( $u_n^p$  ou  $u_s^p$ ) au-delà duquel le lien cohésif est rompu, ce qui favorise ainsi la propagation de l'endommagement interfacial.

Via ce modèle, des tests de délamination ont été réalisés par Yang et al. [130] où des configurations hexagonales de sphères sont considérées. De même, Chen et al. [131] ont eu recours à des configurations régulières de sphères pour définir le milieu continu dans le cadre de la modélisation de problèmes de rupture fragile. Cependant, les directions privilégiées induites sont susceptibles de conduire à des effets indésirables liés à l'anisotropie géométrique. Le concept de MZC a été également exploité et adapté pour traiter la décohésion interfaciale fibre/matrice dans les matériaux composites. Dans ce contexte, la décohésion au sein de matériaux composites à une seule fibre et multifibres sous tension transversale a été étudiée dans [113] (Figure I.25). Dans cette étude, les principes de

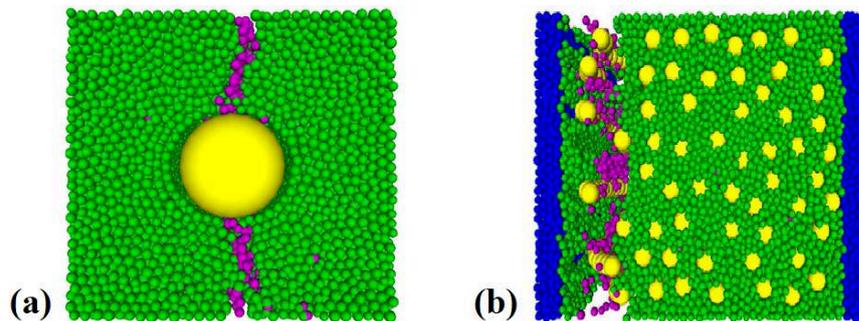


Figure I.25 – Décohésion interfaciale et fissuration matricielle au sein d'un composite à (a) une seule fibre (b) multi-fibres [113]

"Breakable Bond Failure" (BBF) et de "Removed Discrete Element Failure" (RDEF) ont été appliqués à un modèle 3D, à base d'époxy renforcé par des fibres de verres unidirectionnelles, pour simuler la dégradation de l'interface. Le processus BBF consiste à rompre le lien cohésif lorsqu'un critère de rupture donné est atteint [133]. L'approche RDEF est basée sur le retrait d'une particule du système lorsqu'un critère de rupture qui lui est associé est atteint [134]. De plus, Ismail et al. [101] ont examiné la décohésion progressive de l'interface d'un matériau composite de type fibre de carbone/époxy sous une charge transversale via une configuration hexagonale de particules en 2D. L'initiation et la propagation de la décohésion interfaciale ont été simulées par un test "microbond" dans lequel une gouttelette de matrice époxy a été modélisée via un

ensemble de particules de forme elliptique et la ligne centrale de la fibre de verre a été prise comme axe de symétrie [135]. Toujours dans le contexte de l'étude de l'initiation et la propagation de la décohésion interfaciale, ce processus a été simulé dans le cadre d'un matériau composite stratifié, composé d'une matrice en époxy renforcée par des fibres de verre de type E [136]. Néanmoins, les deux études ont utilisé un modèle Éléments Discrets (ED) bidimensionnel lequel pourrait limiter la description du processus après défaillance. Une étude est faite sur le développement d'un modèle ED tridimensionnel pour la modélisation des phénomènes d'endommagement interfacial dans un matériau composite renforcé par des fibres courtes dans le chapitre III de ce mémoire de thèse.

## I.7 Modélisation du vieillissement hygromécanique dans les matériaux composites

Au cours des dernières décennies, de nombreux travaux ont été consacrés à la modélisation du vieillissement humide des matériaux composites [137, 138]. Parmi un large éventail de modèles de diffusion, ceux de Fick [139, 140] et de Langmuir [137, 141] sont les plus exploités dans la littérature. Ainsi, la loi de diffusion basée sur le modèle de Fick [142, 143] la plus fréquemment utilisée permet de modéliser le processus de diffusion pour la plupart des matériaux composites. La diffusion Fickienne est basée sur l'hypothèse d'une pénétration de l'eau proportionnelle au gradient de concentration. Par ailleurs, la diffusion de type Langmuir est appliquée pour les matériaux ayant un comportement non-Fickien qui peut être caractérisé par une diffusion anormale de l'humidité. Ce dernier prend en compte la contribution de l'eau, sous forme libre et liée, dans le matériau [144]. L'une des principales conséquences de la diffusion de l'eau est le gonflement différentiel d'origine interfaciale qui entraîne des contraintes hygroscopiques internes dans les matériaux composites [39]. La modélisation du phénomène de gonflement est réalisée par analogie avec celui de la dilatation thermique. En effet, au lieu de se baser sur la variation de la température  $\Delta T$  et le coefficient de dilatation thermique  $\alpha$ , on s'intéresse à la variation de concentration en eau à l'échelle locale  $\Delta C$  et au coefficient de dilatation hygroscopique  $\beta$  pour déterminer la déformation locale du matériau composite [42]. Dans ce contexte, plusieurs travaux basés sur des approches micromécaniques ont été menés pour modéliser la diffusion et le comportement mécanique de matériaux composites immergés dans l'eau. Stalne et al. [145] ont présenté un modèle analytique tridimensionnel permettant de calculer la rigidité

et le gonflement hygroscopique de matériaux composites à base de fibres et de particules, en s'appuyant sur une méthode d'homogénéisation. Une autre étude présentant des concepts similaires [146] a proposé un modèle analytique micromécanique pour prédire l'initiation de fissures dans des composites bois-plastique dans des environnements humides. Parallèlement, Kristofer et al. [147] ont simulé le gonflement dans la direction radiale d'une fibre de bois entourée d'une matrice PLA par une approche micromécanique 2D en déformation plane. Ils ont suggéré que l'écart entre les résultats prédits et expérimentaux était dû à la non-prise en compte du gonflement hygroscopique des cavités remplies de résine. D'autres études basées sur des approches numériques par éléments finis ont été réalisées pour prédire le comportement mécanique des matériaux composites à l'issue d'un processus de vieillissement hygrothermique. L'approche la plus simple utilise une loi hygro-élastique, auquel cas la diffusion de l'eau est uniquement prise en compte et mène à une déformation hygroscopique [137]. Ainsi, une telle modélisation est basée sur une utilisation découplée des lois de Hooke et de Fick. Afin d'obtenir des prédictions plus réalistes du comportement des matériaux polymériques ou composites immergés, plusieurs études ont examiné le couplage (interaction) entre la diffusion et la mécanique [138, 139, 148, 149, 150]. Un état de l'art sur ces travaux révèle deux approches principales pour modéliser ce couplage : une approche basée sur la thermodynamique des processus irréversibles et une approche basée sur la théorie du volume libre. La première approche est utilisée pour les polymères afin de modéliser le couplage thermo-hygro-mécanique dans le cadre de la décompression explosive [138] ainsi que le couplage hygromécanique dans le contexte de l'absorption d'eau [148]. La cohérence de cette approche thermodynamique a également été mise en évidence par d'autres travaux. Parmi ces-derniers, nous pouvons citer les travaux de Roy [151] pour la modélisation de la diffusion non fickienne dans les polymères viscoélastiques et les matériaux composites. Dans le même contexte, Hassani et al. [152] ont proposé un modèle constitutif orthotrope 3D élasto-plastique, visco-élastique, mécano-sorptif pour le bois, avec des constantes matériau définies en fonction de la teneur en humidité. Cependant, les approches thermodynamiques impliquent généralement de nombreuses variables d'état internes qui sont parfois difficiles à caractériser expérimentalement. Une approche basée sur la théorie du volume libre [137, 149, 153] est également utilisée pour modéliser le couplage hygro-mécanique. Cette approche est inspirée des études réalisées sur les polymères [47, 154] où il est supposé que le fluide ne peut diffuser que dans un

volume donné de la structure appelé volume libre, c'est-à-dire qu'on néglige les interactions molécules d'eau-polymère. Ce volume libre correspond à la différence entre le volume du polymère et le volume réellement occupé par les molécules qui le constituent. Une extension de cette approche aux matériaux composites renforcés de fibres serait probablement possible en utilisant une modélisation multi-échelle, mais serait difficilement applicable à une modélisation macroscopique, à moins d'utiliser une méthode de transition d'échelle pour déterminer les propriétés homogénéisées du matériau composite [155]. En plus de ces deux approches, nous pouvons citer les travaux de Moleiro et al. [156, 157] basés sur le développement d'un modèle mixte par couche pour décrire le comportement thermo-hygro-mécanique de plaques composites multicouches. En ce qui concerne la modélisation par la MED et selon nos connaissances, aucune étude ne s'est intéressée à la modélisation numérique de la diffusivité de l'eau en tenant compte du gonflement induit dans les matériaux composites à l'issue d'un processus de vieillissement hygrothermique. Certains travaux ont été réalisés dans le domaine de la modélisation du gonflement et de la dissolution des comprimés pharmaceutiques par la MED [158]. Les même auteurs ont tiré profit de la MED pour étudier la diffusion de médicaments à partir de comprimés polymériques ayant une structure hétérogène après leur gonflement [159] (Figure I.26).

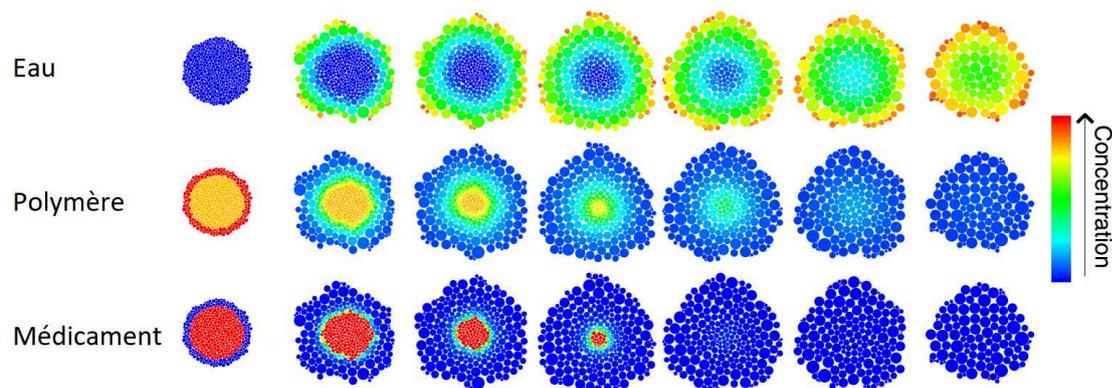


Figure I.26 – Évolution de la concentration d'une tablette au cours du temps pour un système à trois composants contenant 20% en poids de médicament, avec une fine couche de polymère autour de la tablette [159]

Dans un autre contexte, Peron et al. ont proposé un modèle ED dans lequel le rayon des particules dépend de la teneur en eau afin de reproduire le phénomène de retrait du sol lors d'un processus de séchage sans tenir compte des effets thermiques [160]. Dans le contexte du procédé de séchage, certains auteurs ont tiré bénéfice du couplage MED-SPH [161] et MED-dynamique des fluides [162]

pour modéliser respectivement le retrait dans des cellules végétales et le séchage de grains alimentaires. Par conséquent, l'absence d'études sur la modélisation par la MED du vieillissement hygromécanique dans des matériaux composites à fibres courtes a motivé la modélisation couplée hygro-thermo-mécanique présentée au chapitre IV de ce mémoire de thèse.

## I.8 Conclusion

Dans cette étude bibliographique, nous nous sommes intéressés dans un premier temps aux matériaux constitutifs et aux procédés de mise en forme des matériaux composites. Ainsi, dans ce chapitre, il a été montré que la qualité des matériaux composites obtenus par un procédé d'injection est affectée par plusieurs paramètres. En effet, le taux de fibre, l'orientation, la distribution, la longueur des fibres et l'adhésion fibre/matrice se présentent comme les principaux facteurs qui influent sur les propriétés mécaniques des matériaux composites fabriqués par injection. Une étude bibliographique a également été menée sur le vieillissement hygrothermique. Dans cette étude, l'accent a été mis sur l'effet du vieillissement hygrothermique sur la dégradation des propriétés mécaniques de matériaux composites. En ce qui concerne la modélisation des matériaux composites à fibres courtes, plusieurs travaux basés sur des approches micromécaniques et numériques ont été présentés. Par la suite, un état de l'art sur la modélisation de l'endommagement interfacial des matériaux composites a été abordé. Dans ce contexte, il a été mis en évidence que la MED offre la possibilité de résoudre des problèmes mécaniques où plusieurs échelles et discontinuités cohabitent au sein du matériau composite. En effet, la MED se présente comme un outil prometteur pour prédire l'initiation et la propagation de fissures et simuler des motifs de fissuration réalistes. Enfin, l'accent a été mis sur la modélisation du vieillissement hygromécanique et le gonflement induit dans les matériaux composites. Deux approches ont été discutées, celle basée sur la thermodynamique et celle basée sur la théorie du volume libre. Il convient, néanmoins, de préciser que la modélisation de l'endommagement d'un matériau composite suite à un processus de vieillissement hygromécanique par la MED n'a pas été traité à notre connaissance, d'où l'intérêt du chapitre IV. Dans cette contribution, une approche multi-échelles et multi-physiques via la MED, à caractère prédictif, est mise en place afin de simuler le plus fidèlement la cinétique d'absorption d'eau dans le PA6/GF30, l'endommagement interfacial induit par le différentiel de concentration et la concentration de contraintes au

niveau de l'interface fibre/matrice.

# Chapitre II

## Matériaux, procédé d'élaboration et caractérisation expérimentale du composite à fibres courtes PA6/GF30

### Sommaire

---

II.1	Introduction . . . . .	43
II.2	Matériaux . . . . .	43
II.2.1	Renforts : les fibres de verre courtes de type E . . . . .	43
II.2.2	Matrice : Polyamide 6 . . . . .	44
II.2.3	Polyamide 6 renforcé avec des fibres de verre courtes (PA6/GF30) . . . . .	45
II.3	Procédé de mise en forme et caractérisation morphologique du PA6/GF30 . . . . .	46
II.3.1	Procédé de mise en forme du PA6/GF30 . . . . .	46
II.3.2	Caractérisation morphologique du PA6/GF30 . . . . .	49
II.4	Caractérisation expérimentale du PA6/GF30 . . . . .	52
II.4.1	Facteur de dispersion . . . . .	52
II.4.2	Corrélation d'images . . . . .	53
II.4.3	Essais de traction de type charge/décharge . . . . .	55
II.4.4	Mécanisme d'endommagement . . . . .	56
II.4.5	Impact du vieillissement hygrothermique sur le comportement mécanique du PA6/GF30 . . . . .	58
II.5	Conclusion . . . . .	61

---

## II.1 Introduction

L'industrie automobile est constamment à la recherche de nouveaux matériaux pour répondre aux défis environnementaux et sociétaux actuels. Les matériaux composites sont apparus comme une solution répondant à cette problématique grâce à leur dualité résistance mécanique-légèreté. Parmi ces matériaux, le composite PA6/GF30 permet de remplacer plusieurs composants métalliques dans l'automobile aussi bien au niveau du compartiment moteur qu'au niveau de l'habitacle. Toutefois, certaines conditions environnementales affectent sévèrement le comportement mécanique et la durabilité du PA6/GF30. Dans ce chapitre, notre objectif est triple. Il s'agit tout d'abord de présenter les différents constituants du PA6/GF30 tout en mettant l'accent sur le procédé de mise en forme du matériau. Une caractérisation morphologique et mécanique du PA6/GF30 est abordée dans un second temps afin de décrire l'état d'orientation des fibres, la fraction volumique en fibres ainsi que la distribution des longueurs des fibres. Dans un troisième temps, nous nous intéressons à la caractérisation expérimentale des propriétés mécaniques du PA6/GF30 en termes de module de Young et de coefficient de Poisson ainsi qu'à leur variabilité. L'endommagement du PA6/GF30 est également caractérisé à l'échelle macroscopique et microscopique, respectivement à travers des essais cycliques de type charge/décharge et des observations MEB des faciès de rupture. L'impact du vieillissement hygrothermique sur le comportement mécanique du PA6/GF30 est finalement évalué en termes de coefficient de diffusion et de propriétés mécaniques sous différentes conditions environnementales. Les données recueillies permettent d'enrichir la base expérimentale sur les composites à fibres courtes d'une part et d'autre part de mieux comprendre le comportement mécanique du PA6/GF30 et son mode d'endommagement. À noter que tous les essais de caractérisation ont été effectués à l'Ecole Nationale d'Ingénieurs de Sfax au sein du Laboratoire de Génie des Matériaux et Environnement (ENIS-LGME) et à la Plateforme Microscopie Électronique (PME) de l'Université de Picardie Jules Verne (UPJV).

## II.2 Matériaux

### II.2.1 Renforts : les fibres de verre courtes de type E

Les fibres de verre sont les éléments de renforcement les plus utilisés pour les matériaux composites. Malgré la présence de fibres plus performantes et plus

coûteuses, telles que les fibres de carbone et d'aramide, l'utilisation des fibres de verre de type E offre un bon rapport qualité-prix avec des propriétés mécaniques intéressantes. Ce renfort présente des avantages en termes de résistance à la corrosion, de légèreté, de ténacité et d'isolation électrique. Le processus de fabrication de ce renfort commence par la fusion des oxydes à 1500°C suivie d'une étape d'étirage afin d'avoir des filaments de verre. Une troisième étape appelée ensimage consiste à traiter la surface des renforts en sortie de la filière. Cette procédure se traduit par la déposition d'un agent de liaison pour assurer l'adhérence entre la fibre et le polymère. Enfin les filaments sont coupés pour avoir des fibres courtes lesquelles sont ensuite séchées à des températures comprises entre 600 et 700°C. Les principales propriétés mécaniques et caractéristiques géométriques de la fibre de verre courte de type E fournie par CEPIC et utilisée dans ce travail sont présentées dans le tableau II.1.

Densité	2,6	
Diamètre du filament	10	$\mu\text{m}$
Longueur du filament	4,5	mm
Module de Young	72,5	GPa
Coefficient de Poisson	0,22	

Tableau II.1 – Propriétés mécaniques et caractéristiques géométriques de la fibre de verre courte de type E

## II.2.2 Matrice : Polyamide 6

Les polyamides sont des polymères thermoplastiques à longue chaîne qui contiennent des motifs amides ( $\text{N-H-C=O}$ ). Ces polymères s'obtiennent généralement par polycondensation d'un acide avec un amine ou par polymérisation d'un monomère cyclique. Par exemple, le polyamide 6 (PA6) s'obtient par hydrolyse grâce à l'ouverture de cycle de l' $\epsilon$ -caprolactome (monomère cyclique) présentant 6 atomes de carbone dans le motif (Figure II.1). Toutefois, la modification des structures chimiques (longueur des chaînes et organisation chimique) permet d'obtenir plusieurs autres familles de polyamide, parmi lesquelles, le PA6.6, le PA4.6, le PA11 et le PA12. Le(s) numéro(s) associé(s) à chaque polyamide fait (font) référence au nombre d'atomes de carbone dans le(s) monomère(s) correspondant. Le PA6 s'utilise couramment dans de nombreuses applications de par le bon compromis entre performance et coût qu'il propose, et ses propriétés de durabilité et de résistance élevées. Il

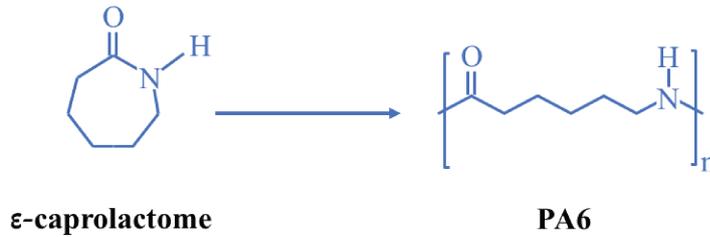


Figure II.1 – Schéma de synthèse du PA6

s'avère également un bon candidat pour résister aux chocs et aux contraintes élevées. De plus, il s'agit d'un choix idéal pour les applications dans le secteur de l'automobile, de l'industrie et du militaire. Parmi les applications courantes, nous trouvons les engrenages, les composants d'armes à feu et les compartiments de moteurs automobiles. Cependant, il est inapproprié pour les applications faisant intervenir un environnement humide et des conditions sévères de température en raison de sa forte capacité à absorber l'humidité et sa faible résistance à la chaleur. En effet, les molécules d'eau peuvent interagir avec les groupes polaires portés par le polyamide sous atmosphère humide. À cause du caractère hydrophile du groupement amide, le PA6 absorbe ainsi l'eau jusqu'au gonflement du matériau ce qui affecte énormément ses propriétés mécaniques [163]. De ce fait, le mécanisme d'absorption de l'eau doit être pris en considération lors de la caractérisation pour une meilleure compréhension des différents phénomènes que le PA6 subit lors de sa dégradation. Le Tableau II.2 présente certaines propriétés mécaniques du PA6 fourni par RADICCI et qui ont été utilisées dans le cadre de ce travail.

Densité	1,13	
Module de Young	2,03	GPa
Coefficient de Poisson	0,33	

Tableau II.2 – Propriétés mécaniques du PA6

### II.2.3 Polyamide 6 renforcé avec des fibres de verre courtes (PA6/GF30)

L'ajout de fibres de verre courtes au polyamide 6 améliore sensiblement sa résistance aux contraintes, sa rigidité, sa résistance à l'abrasion et sa stabilité dimensionnelle. Contrairement à d'autres polymères, l'utilisation du polyamide 6

permet d'améliorer la résistance à la flexion par choc avec une bonne résistance à la fatigue tout en mesurant l'énergie absorbée par une éprouvette entaillée Charpy à la rupture. Le polyamide 6 renforcé avec 30% en masse de fibres de verre courtes (PA6/GF30) présente aussi une bonne résistance au vieillissement à basse température. Son utilisation est possible pour de nombreux composants industriels, tels que les pièces automobiles "sous capot" et les équipements intérieurs des véhicules ou encore la plupart des composants des planches à voile. Cependant, ce composite perd en efficacité face à des conditions environnementales sévères (température et humidité relative) menant à la dégradation de ses propriétés mécaniques. Ainsi, la caractérisation, la compréhension et la modélisation du comportement du PA6/GF30 sont donc primordiales en vue de prévoir la durée de vie de ce matériau composite sous différents types de sollicitation. Le Tableau II.3 contient différentes propriétés mécaniques du PA6/GF30 élaboré par la société POLYMERES SA [164].

Densité	1,35	
Module de Young	[7,5-10]	GPa
Contrainte à la rupture	[130-190]	MPa
Déformation à la rupture	[8-12]	%
Température de fusion	220	°C

Tableau II.3 – Propriétés mécaniques du PA6/GF30

## II.3 Procédé de mise en forme et caractérisation morphologique du PA6/GF30

### II.3.1 Procédé de mise en forme du PA6/GF30

#### II.3.1.1 Procédé de mise en forme par extrusion et injection

Le moulage par injection est un procédé conventionnel de fabrication rapide des thermoplastiques. Actuellement, le moulage par injection est largement utilisé dans la production des composites thermoplastiques renforcés en fibres courtes. Ces matériaux sont régulièrement utilisés pour diverses applications car ils sont commercialement plus abordables que d'autres types de matériaux. Bien qu'ils n'aient pas un niveau de rigidité et de résistance aussi élevé que leurs homologues renforcés par des fibres continues, ils présentent des avantages en

termes de coût et qualité de surface. En outre, le procédé de moulage par injection permet de fabriquer en grandes séries et à court terme des pièces à géométrie complexe. Avant de procéder au moulage par injection, il faut préparer les constituants du composite. Notons que ce processus de fabrication repose sur une teneur ajustée de la matrice thermoplastique et des fibres courtes, ainsi que des additifs ou des adjuvants nécessaires à la fabrication. Le mélange du composite est généralement préparé dans une extrudeuse bi-vis pour obtenir un bon dosage entre tous les composants. Après le processus de pré-séchage, le composé est préparé en introduisant les constituants dans des dispositifs d'alimentation séparés. Les fibres sont normalement introduites dans l'extrudeuse au niveau de la trémie d'alimentation secondaire pour réduire l'abrasion dans le cylindre d'extrusion. Chaque dispositif d'alimentation a la capacité de fournir le constituant à un débit spécifique, de sorte que le poids final ou le rapport volumique du composé peut être ajusté avec précision. Lorsque les composants sont introduits dans le cylindre d'extrusion chauffé, les processus de plastification et de mélange sont lancés. Comme le composé fondu peut émettre des vapeurs ou des gaz, il est important de les dégazer par un canal de ventilation avant de terminer le processus d'extrusion afin d'éviter toute porosité dans le composé. Après avoir été extrudé, le composé est ensuite refroidi et coupé sous forme de billes ou de granulés. Le schéma du processus d'extrusion via une extrudeuse bi-vis est décrit à la Figure II.2. Les granulés

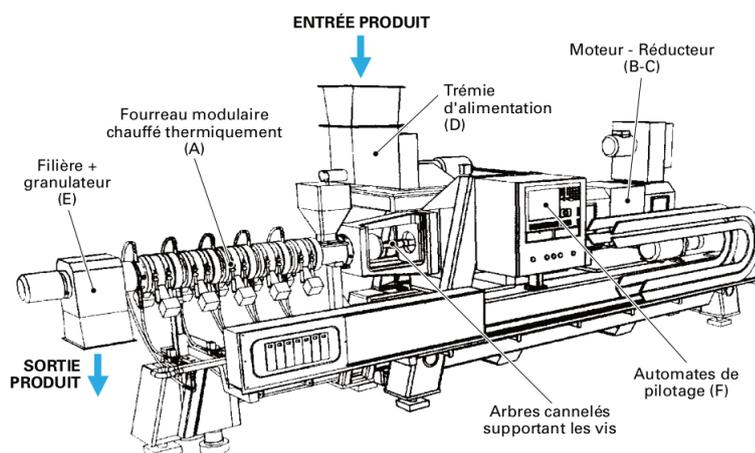


Figure II.2 – Schéma d'une extrudeuse bi-vis [165]

composites sont ensuite introduits dans une vis sans fin pour être chauffés par le biais de la trémie d'alimentation. Le processus de plastification commence lorsque les granulés sont chauffés jusqu'à une température supérieure à la température de fusion de la matrice thermoplastique. Le processus se poursuit

ensuite avec l'injection du composite fondu dans un moule fermé. Lorsque le moule est rempli, il continue à être alimenté pour maintenir la matière injectée à l'intérieur du moule sous pression pendant un temps déterminé, afin d'empêcher le reflux et de compenser la diminution de volume du composite fondu pendant le processus de solidification. L'étape suivante consiste à refroidir la pièce moulée en thermoplastique à l'intérieur du moule jusqu'à ce qu'elle soit suffisamment rigide et prête à être éjectée. L'illustration du cycle d'injection est décrit à la Figure II.3.

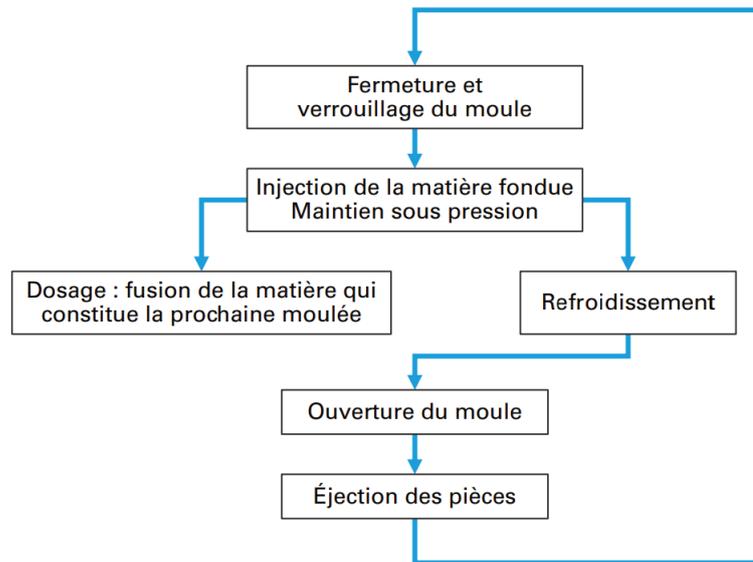


Figure II.3 – Diagramme décrivant le cycle d'injection [166]

### II.3.1.2 Élaboration du composite à fibres courtes PA6/GF30

Le PA6/GF30, commercialement connu sous le nom d'ALYAMID C2122GF30 NATURAL et fourni par la société POLYMERES SA, est le résultat de deux transformations qui sont respectivement l'extrusion et l'injection. La première transformation consiste à introduire le PA6 à partir de la première zone du fourreau d'une extrudeuse bi-vis tandis que l'alimentation en fibres de verre est effectuée à travers la troisième zone via un doseur gravimétrique. Un constituant sous forme de jonc composé de PA6 et de fibres de verre est obtenu à la sortie de la filière. Ce dernier est refroidi sous atmosphère humide puis coupé sous forme de granulés de longueur variant de 3 mm à 6 mm. À ce stade, la deuxième phase de transformation qui consiste à produire des éprouvettes en PA6/GF30 de type 1A est ainsi activée. Une étape de préparation de la machine d'injection est d'abord effectuée avant de commencer l'injection des pièces selon la procédure suivante :

1. Étuve de la matière pendant 4h à 100°C,
2. Mise en marche de la presse d'injection,
3. Ouverture des vannes d'huile et d'eau de refroidissement,
4. Ajustement de la température du moule : 90°C,
5. Ajustement des températures des quatre zones du fourreau :  $T_0=275^\circ\text{C}$ ,  
 $T_1=270^\circ\text{C}$ ,  $T_2=270^\circ\text{C}$ ,  $T_3=265^\circ\text{C}$ ,
6. Déclenchement de la chauffe,
7. Réglage du temps de refroidissement adéquat à  $t = 40\text{s}$ ,
8. Réglage de la pression à 1000 bars,
9. Purge du fourreau de la presse d'injection,
10. Purge du fourreau avec quelques doses de la matière à injecter.

Enfin l'injection des pièces est déclenchée pour avoir des éprouvettes haltères selon les dimensions présentées à la Figure II.4.

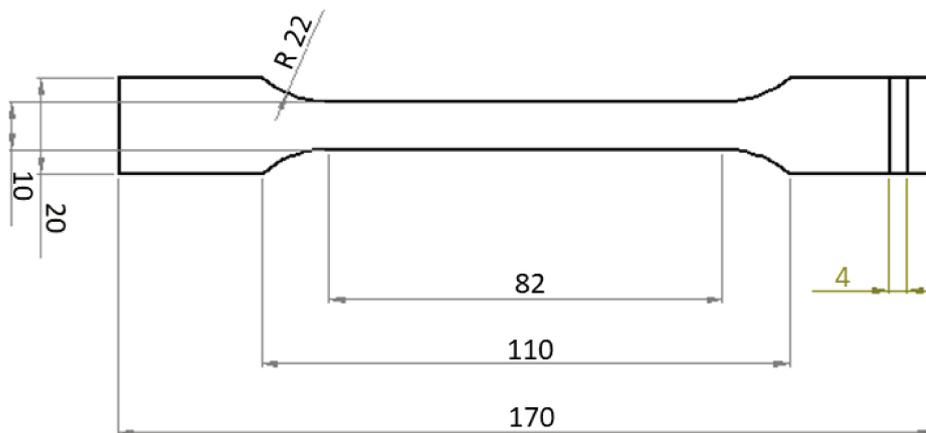


Figure II.4 – Dimensions d'une éprouvette haltère normalisée ISO 527-2 type 1A

## II.3.2 Caractérisation morphologique du PA6/GF30

### II.3.2.1 Description de l'état d'orientation de fibres

Après injection, les fibres adoptent une orientation perpendiculaire par rapport à la direction d'écoulement au voisinage de seuil d'injection. Ceci est dû au caractère élongationnel de type divergent de l'écoulement (Figure II.5). En s'éloignant du seuil d'injection, des forces de cisaillement apparaissent favorisant ainsi une orientation des fibres dans une direction privilégiée, parallèlement à la direction d'écoulement, jusqu'au remplissage total de l'empreinte [167]. Des

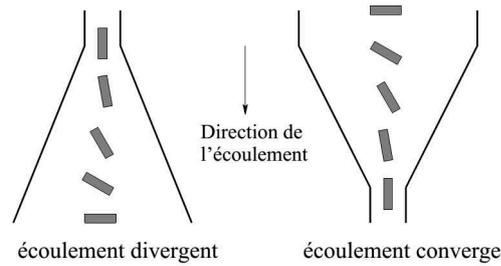


Figure II.5 – Mouvement d’une fibre dans un écoulement élongationnel [168]

observations au Microscope Électronique à Balayage (MEB) de type Environnemental Quanta 200 FEG, sur des sections découpées perpendiculairement au sens d’injection, montrent que la majorité des fibres présentent une forme quasi-circulaire, ce qui signifie que les fibres sont orientées de préférence dans le sens de l’injection (Figure II.6). En effet, l’orientation des

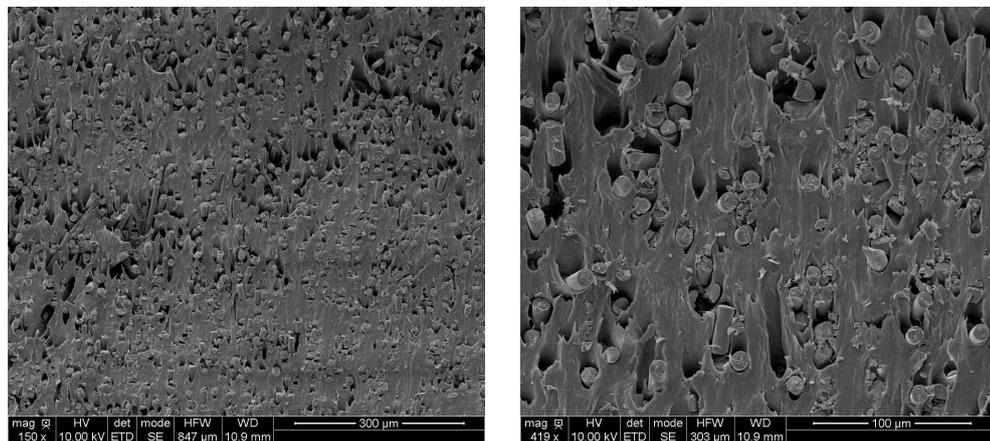


Figure II.6 – Observations MEB d’une section perpendiculaire dans le sens d’injection d’un échantillon de PA6/GF30

fibres courtes est difficile à quantifier et nécessite des techniques avancées pour la contrôler. Sur la base de cette hypothèse, nous considérons que toutes les fibres sont alignées.

### II.3.2.2 Fraction volumique des fibres

Afin de modéliser le matériau composite, nous devons connaître la fraction volumique des fibres au lieu de leur fraction massique. Il existe plusieurs façons de la déterminer, mais la pyrolyse [169] reste la méthode la plus pratique. Elle consiste à introduire le composite dans un four en absence d’oxygène avec une température supérieure à la température de fusion de la résine mais inférieure à celle des fibres. Dans notre cas, des échantillons de PA6/GF30 ont été prélevés sur des éprouvettes de traction injectées et placées ensuite dans un creuset en céramique. Des pesées

ont été effectuées avant et après la pyrolyse pour déterminer la masse des fibres. la procédure est ainsi réalisée pendant 45 minutes dans un four préchauffé à 600°C jusqu'à ce que le polymère entier disparaisse. Grâce à ce test, on peut facilement déduire la fraction massique des fibres en faisant le rapport entre la masse des fibres ( $M_f$ ) trouvée après la pyrolyse et la masse des échantillons composites ( $M_c$ ) avant la pyrolyse. Ici, trois échantillons ont été testés dont les résultats en terme de fraction massique ont donné, respectivement 29,57 %, 29,13 % et 29,35%. Ces résultats sont en adéquation avec la fiche technique (30%) du matériau composite. Il est à noter que la masse totale du composite est la somme des masses de ses deux constituants. En appliquant l'équation II.1, on peut conclure qu'un polyamide 6 renforcé à 30% en masse de fibres de verre E n'est qu'un polyamide 6 renforcé à 15,7% en volume de fibres de verre E.

$$V_f\% = \frac{M_f\%}{M_f\% + \frac{\rho_f}{\rho_m} \times (1 - M_f\%)} \quad (\text{II.1})$$

### II.3.2.3 Distribution de longueur des fibres

En utilisant les fibres extraites de la matrice par le test de pyrolyse, nous pouvons caractériser la longueur des fibres de verre. La méthodologie consiste à placer les fibres sur une lame de verre et à les observer à l'aide d'un microscope optique de type Keyence (Figure II.7). Ensuite, la longueur des fibres est établie

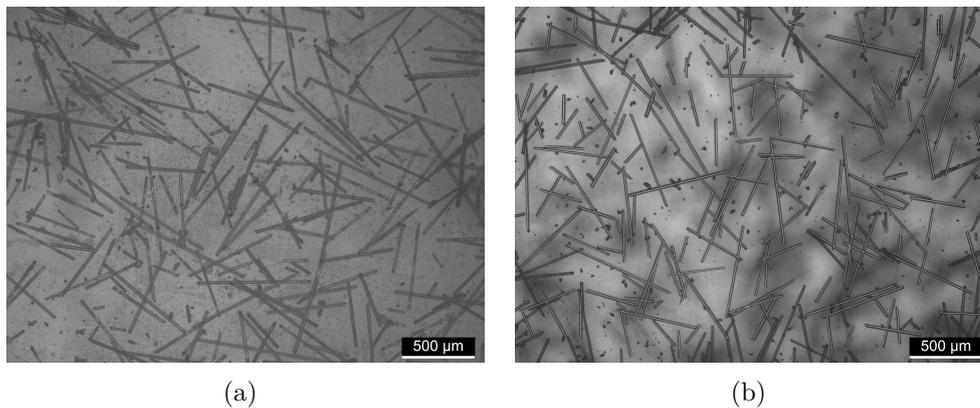


Figure II.7 – Observations optiques des fibres de verre (a) avant injection, (b) après injection

à l'aide d'un logiciel d'analyse d'images [170]. Certains auteurs ont suggéré que le nombre de fibres pour former l'histogramme de la distribution de la longueur des fibres doit être compris entre 200 et 1200 [171, 172]. Dans notre cas, 500 fibres ont été examinées afin d'obtenir un bon accord avec l'évaluation quantitative de la longueur des fibres. À partir de cette répartition, on détermine la moyenne en

nombre ( $L_n$ ) et en poids ( $L_w$ ) des fibres [173, 11] qui sont exprimées par :

$$L_n = \frac{\sum n_i \times l_i}{\sum n_i} \quad (\text{II.2})$$

$$L_w = \frac{\sum n_i \times l_i^2}{\sum n_i} \quad (\text{II.3})$$

où  $l_i$  est la longueur d'une fibre  $i$ ,  $n$  est le nombre total de fibres et  $n_i$  est le nombre de fibres de longueur  $l_i$ . La distribution de la longueur des fibres est présentée à la figure II.8. La distribution obtenue décrit une fonction de type Weibull avec une grande variation à la fois avant et après le processus de moulage par injection. En fait, après l'étape d'extrusion (Figure II.8(a)), les fréquences les plus élevées sont mesurées pour une longueur de fibre comprise entre 200 et 250  $\mu\text{m}$  où la fréquence atteint environ 20 % et les fibres les plus longues de cette population atteignent 700  $\mu\text{m}$ . Cependant, après injection (Figure II.8(b)), la fréquence la plus élevée de 22 % est atteinte pour les fibres entre 50 et 100  $\mu\text{m}$  et la gamme de longueur ne dépasse pas 550  $\mu\text{m}$ . Ainsi, les fibres subissent une réduction significative au cours des deux étapes du procédé. En effet, la longueur, qui est initialement d'environ 4,5 mm, devient respectivement de 260  $\mu\text{m}$  et 180  $\mu\text{m}$  avant et après injection. Par conséquent, la réduction en longueur est plus importante après le processus d'extrusion qu'après le moulage par injection. Cette caractérisation préliminaire a permis d'identifier le Facteur de Forme ( $FF$ ) sur la base de la longueur moyenne en nombre de fibres ( $L_n$ ). Le  $FF$  qui est le rapport entre la longueur de la fibre après injection ( $L_n$ ) et son diamètre ( $D$ ) s'exprime comme suit :

$$FF = \frac{L_n}{D} \quad (\text{II.4})$$

Les mesures expérimentales montrent que le  $FF$  est proche de 18 dans le cas présent.

## II.4 Caractérisation expérimentale du PA6/GF30

### II.4.1 Facteur de dispersion

L'évaluation de la dispersion des propriétés mécaniques d'un matériau composite constitue une étape primordiale étant donnée la variabilité observée du comportement mécanique à l'échelle macroscopique. Ce facteur de dispersion

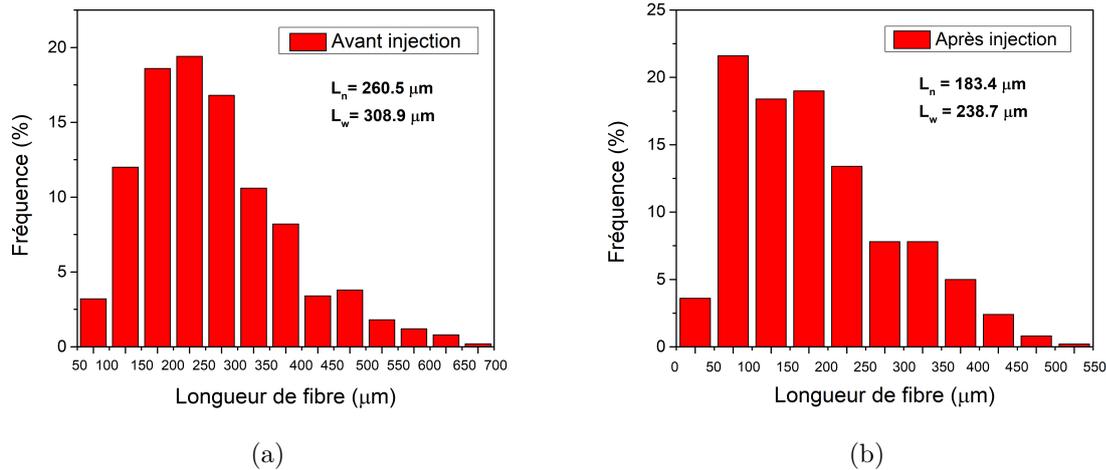
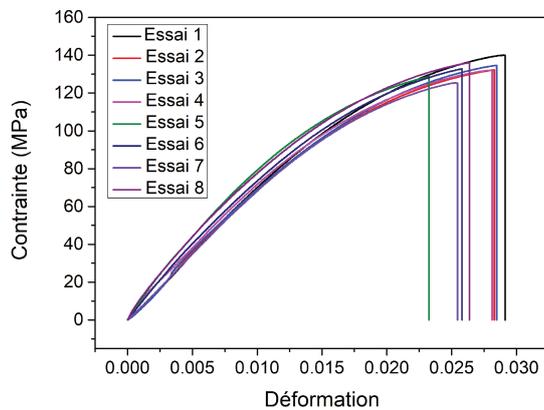


Figure II.8 – Histogramme de la distribution de la longueur des fibres de verre du PA6/GF30 (a) avant et (b) après le processus de moulage par injection

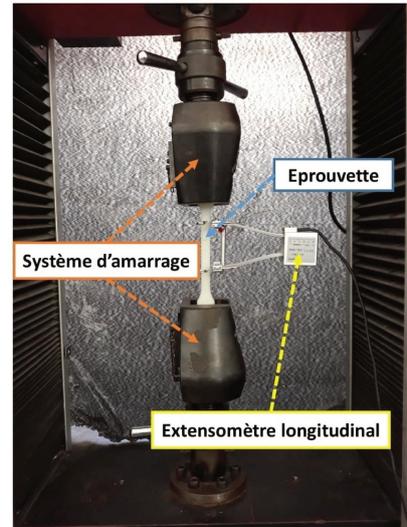
est défini par le rapport entre l'écart-type et la moyenne de la propriété mécanique calculée. Dans le but de déterminer cette variabilité expérimentale en termes de module de Young et de contrainte à la rupture, un échantillonnage constitué de 8 éprouvettes a été testé en traction simple avec une vitesse monotone de 5mm/min (Figure II.9(a)). Les essais de traction ont été menés sur une machine d'essai de type WDW-E d'une capacité de 10 kN équipée d'un système d'acquisition avec un extensomètre longitudinal (Figure II.9(b)). Le module de Young moyen mesuré sur l'ensemble de l'échantillonnage est de 7,363 GPa avec un écart-type de 0,284 GPa, ce qui correspond à un facteur de dispersion de 3,86%. En outre, la contrainte à la rupture a également été mesurée, celle-ci est en moyenne de 132,687 MPa avec un écart-type de 1,573 MPa, ce qui correspond à un facteur de dispersion de 1,19%. Ces résultats montrent la faible dispersité des propriétés mécaniques du composite étudié ainsi que la bonne reproductibilité des mesures expérimentales.

## II.4.2 Corrélation d'images

La Corrélation d'Images Digitales (CID) est une technique expérimentale qui permet de mesurer les déplacements observés entre deux images et en déduire les déformations correspondantes. La méthode utilise une comparaison des images numériques de diverses petites régions du matériau à travers des acquisitions prises avant et après déformation. L'analyse de ces changements permet de quantifier le déplacement et la déformation sur toute la surface bidimensionnelle de l'éprouvette. Afin de pouvoir effectuer un test CID, les échantillons sont

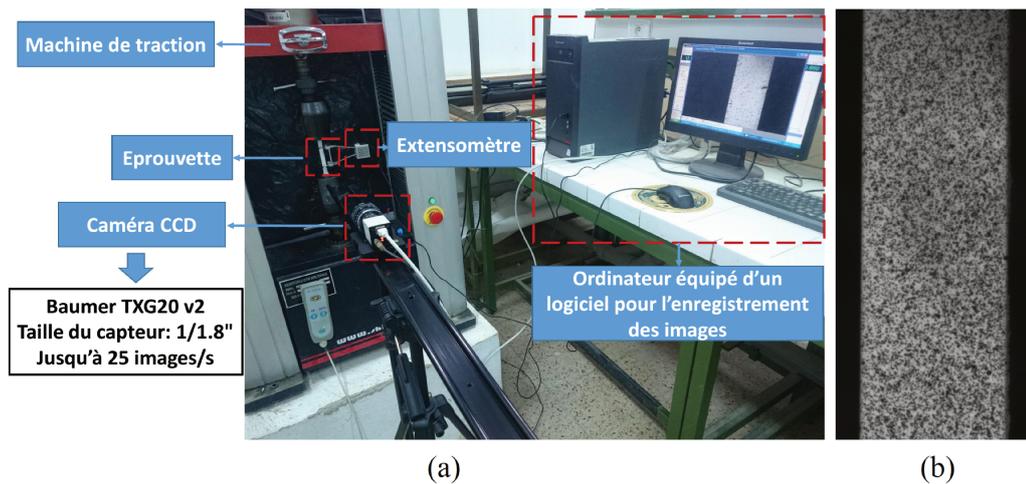


(a)



(b)

Figure II.9 – (a) Courbes contrainte/déformation résultantes des essais de traction sur le PA6/GF30, (b) Montage expérimental de l'essai de traction



(a)

(b)

Figure II.10 – (a) Schématisation d'un système CID, (b) Éprouvette avec mouchetis (agrandissement  $\times 5$ )

marqués en créant un mouchetis à l'aide d'une peinture aérosol (Figure II.10 (b)). Les essais de traction ont été effectués sur une machine d'essai universelle d'une capacité de 10 kN. Les échantillons ont été testés selon la procédure ISO 527 avec une vitesse constante de 5 mm/min. Afin de comparer les mesures de déformation par CID, un extensomètre avec une jauge de 50 mm a également été fixé à l'échantillon. Les données de l'extensomètre et de la charge de traction ont alors été enregistrées à l'aide d'un logiciel et d'un système de contrôle numérique. Pour information, toutes les images ont été acquises à l'aide d'une caméra Baumer TXG20 v2 de taille de capteur «1/1,8» et de

cadence 25 images par seconde (Figure II.10 (a)). Ce protocole nous a alors permis d'identifier l'évolution de la déformation à n'importe quel point de l'éprouvette ce qui n'aurait pas été possible avec un extensomètre car ce dernier ne peut visualiser que localement la déformation. La Figure II.11(a) montre que les courbes traduisant l'évolution de la contrainte en fonction de la déformation obtenue soit par corrélation d'images, soit à l'aide de la machine de traction sont presque confondues. Un léger décalage a cependant été détecté en début d'essai qui peut être interprété par un non-alignement entre les mors de la machine de traction lors de la phase de démarrage. Le coefficient de Poisson du matériau composite a également été obtenu à partir de l'essai de traction. La Figure II.11(b) montre la méthodologie d'identification du coefficient de Poisson. Dans notre cas, le coefficient de Poisson est de 0,352.

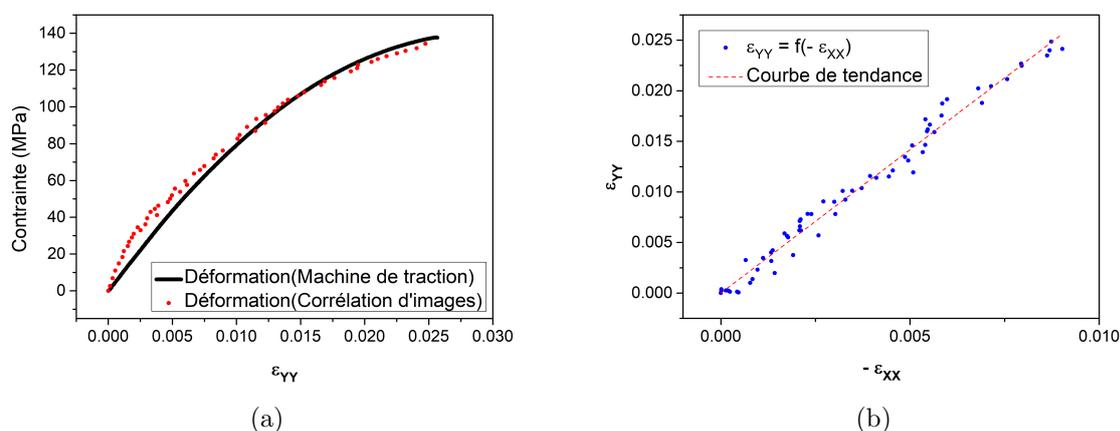


Figure II.11 – (a) Évolution de la contrainte en fonction de la déformation obtenue à l'aide de la corrélation d'images, (b) Détermination du coefficient de Poisson relatif au PA6/GF30

### II.4.3 Essais de traction de type charge/décharge

Les essais de traction de type charge/décharge permettent de déterminer l'évolution de l'endommagement ainsi que le niveau d'endommagement critique précédant la rupture. Les essais sont pilotés en déplacement imposé à une vitesse de 1 mm/min. Pour information, nous supposons que l'essai s'arrête à la rupture de l'éprouvette. La Figure II.12(a) montre la courbe contrainte-déformation du PA6/GF30 en traction longitudinale. La courbe met en évidence une hystérésis dont la taille augmente à chaque nouveau cycle de charge/décharge. Cette augmentation est principalement due à l'apparition d'une composante visqueuse du comportement. Celle-ci est favorisée par l'adoucissement du matériau

inhérent au cumul d'endommagement jusqu'à rupture. Ainsi, à chaque cycle appliqué, lors de la décharge on peut quantifier la perte de raideur via la détermination d'un module sécant. Il est alors possible de construire, pour chaque essai, une courbe d'endommagement en fonction de la déformation viscoplastique équivalente. La présente étude s'appuie sur 5 essais réalisés dans la direction longitudinale aux fibres. Une variable d'endommagement  $d^i$  a été

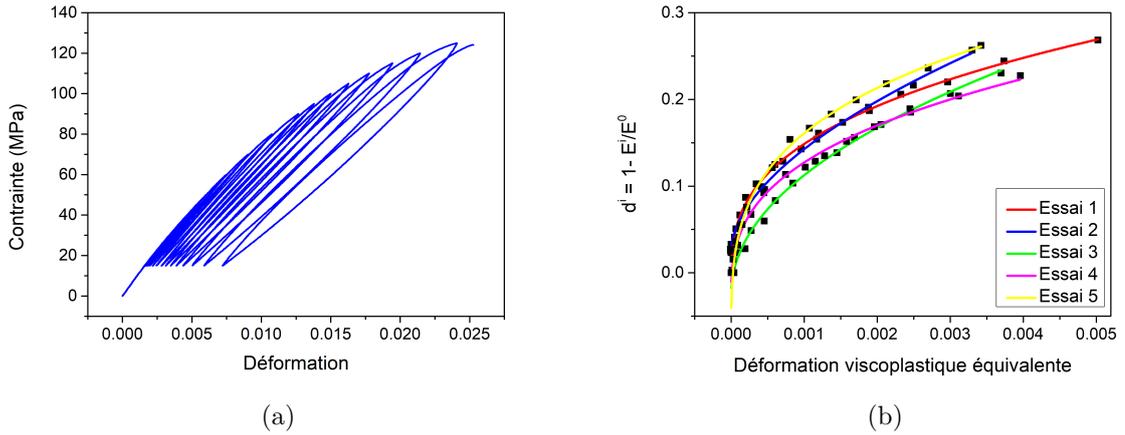


Figure II.12 – (a) Courbe contrainte déformation d'un essai de traction de type charge/décharge du PA6/GF30, (b) Courbes d'endommagement en fonction de la déformation viscoplastique équivalente du PA6/GF30

déterminée à chaque cycle (i) de charge/décharge, de la façon suivante :

$$d^i = 1 - \frac{E^i}{E^0} \quad (\text{II.5})$$

avec  $E^i$  le module endommagé calculé à chaque début de cycle de charge/décharge. La Figure II.12(b) illustre les courbes d'endommagement obtenues pour les 5 essais en fonction de la déformation viscoplastique équivalente. L'endommagement est toujours nul lors du premier cycle de charge/décharge. Il commence à augmenter progressivement à partir du deuxième cycle. Dans la direction longitudinale, l'endommagement précédant la rupture atteint une valeur moyenne  $d_L^M = 0,249$ . Notons qu'en raison de la dispersion du matériau, la variable d'endommagement atteint une valeur de 0,268 en maximum et de 0,227 en minimum.

#### II.4.4 Mécanisme d'endommagement

À l'échelle macroscopique, la propagation des fissures entraîne une diminution progressive de la rigidité, suivie par la ruine du matériau. Pour

mieux comprendre le mécanisme d'endommagement du PA6/GF30, des observations MEB ont été réalisées sur des échantillons soumis à un essai de flexion trois points. L'étendue des zones observées s'est limitée à une surface de  $4 \times 10 \text{ mm}^2$ . Il s'est avéré que malgré l'observation de la fissuration matricielle et de la rupture de certaines fibres (Figure II.13(a)), la décohésion interfaciale constitue le mécanisme dominant de défaillance du PA6/GF30. L'endommagement interfacial est amorcé par la création de vides au niveau des

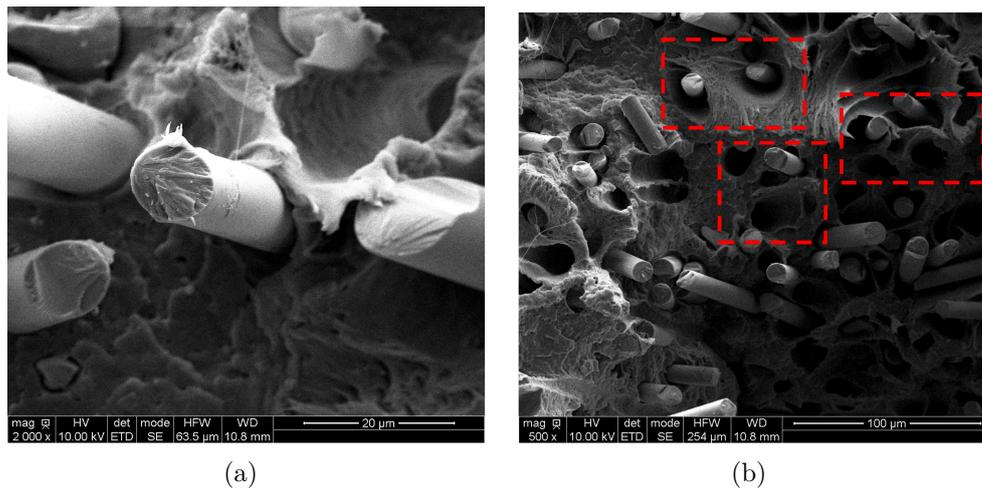


Figure II.13 – (a) Rupture des fibres (b) Présence de vides due à la décohésion à l'interface fibre/matrice

interfaces fibre/matrice (Figure II.13(b)). La plasticité locale se produisant autour de l'interface fibre/matrice mène au gonflement des cavités (Figure II.14(a)) jusqu'au déchaussement des fibres (Figure II.14(b)). Le

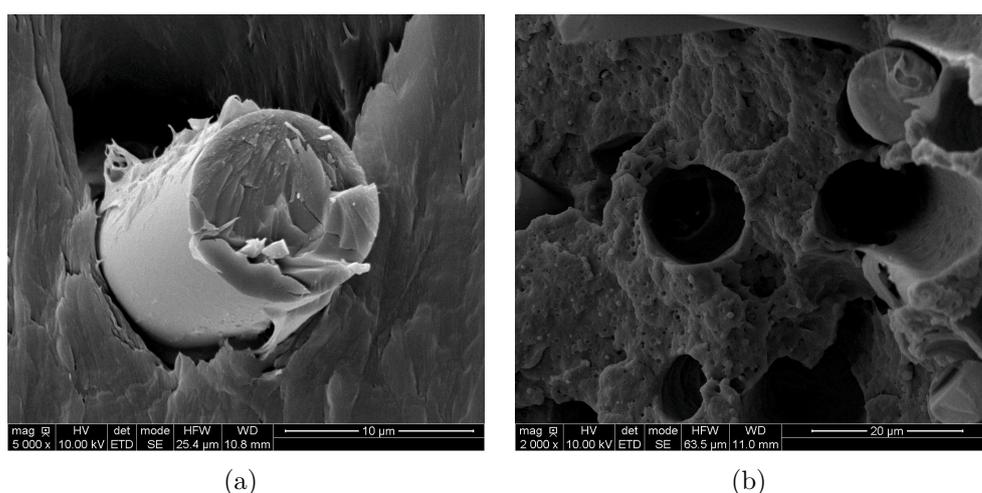


Figure II.14 – (a) Grossissement de cavité due à la plasticité locale autour de l'interface (b) déchaussement des fibres

phénomène de décohésion interfaciale continue à évoluer tout en réduisant les

efforts transmis aux fibres. Par conséquent, un phénomène de concentration de contraintes apparaît dans la matrice et des microfissures se développent. L'endommagement le long des interfaces est toujours prédominant, de telle sorte que la matrice ne peut plus résister aux contraintes transférées par la fibre endommagée. En conséquence, elle se rompt menant à la ruine du matériau à l'échelle macroscopique. Notons que la rupture des fibres est rarement observée pour ce matériau. Ce mode de défaillance, qui est principalement lié au procédé de fabrication, ainsi que la fissuration matricielle ne seront pas pris en compte dans le modèle numérique proposé au chapitre III. Par conséquent, seul l'endommagement interfacial fibre/matrice est pris en compte.

#### II.4.5 Impact du vieillissement hygrothermique sur le comportement mécanique du PA6/GF30

Afin de mieux comprendre l'effet du vieillissement hygrothermique sur le comportement mécanique du PA6/GF30, nous avons étudié le mécanisme d'absorption d'eau et les conséquences de cette absorption sur les propriétés mécaniques de ce matériau. Pour ce faire, nous avons utilisé la méthode d'analyse gravimétrique qui permet de suivre la cinétique d'absorption d'eau dans le PA6/GF30. Le protocole expérimental consiste à immerger les échantillons dans de l'eau distillée à deux températures différentes (70°C et 90°C) pour une Humidité Relative constante HR=100%. À des fins de reproductibilité, 5 échantillons ont été testés pour chaque condition de température. Des pesées régulières, réalisées à l'aide d'une balance digitale de précision  $10^{-3}$  g, ont été effectuées afin d'évaluer la prise de masse pour les différents échantillons. Le temps de la pesée est supposé court pour que l'évaporation d'eau soit négligeable. Avant chaque pesée, la couche superficielle d'eau sur l'échantillon est éliminée à l'aide d'un papier absorbant. Le pourcentage de la prise de masse au cours du temps  $t$  est calculé selon l'équation suivante :

$$M_t(\%) = \frac{m_t - m_0}{m_t} \times 100 \quad (\text{II.6})$$

où  $m_0$  et  $m_t$  sont respectivement la masse initiale (à l'état sec) et la masse de l'échantillon (à l'état vieilli) pour un temps  $t$  bien défini. La Figure II.15(a) illustre l'évolution de la prise de masse du PA6/GF30 vieilli dans l'eau distillée à 70 et 90°C pendant 50 jours. D'après cette courbe, on peut affirmer que le PA6/GF30 suit une diffusion Fickienne pour les deux températures de vieillissement. Ce comportement se traduit par une première phase où

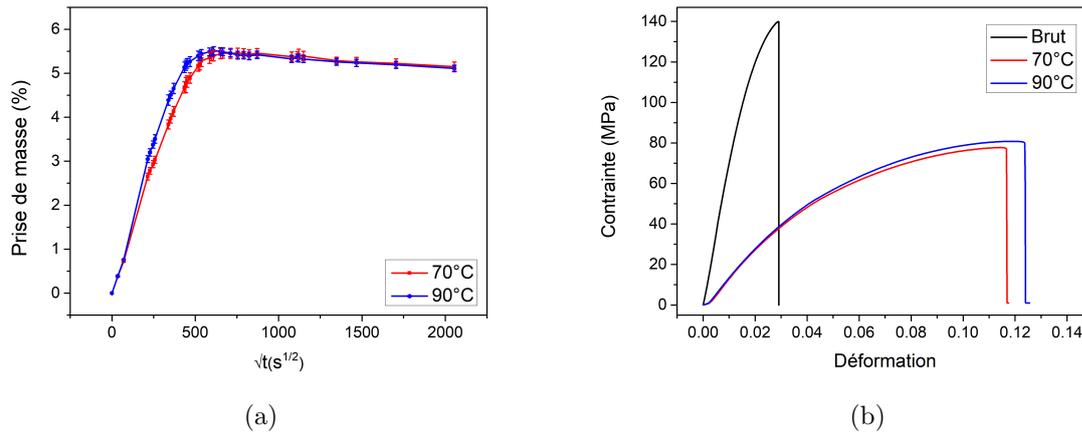


Figure II.15 – Superposition (a) des courbes de prise de masse et (b) des courbes de traction du PA6/GF30 immergé dans l'eau distillée pour différentes températures après 50 jours de vieillissement

l'absorption de l'eau évolue linéairement, puis une seconde phase de saturation où l'équilibre avec l'environnement est établi et l'absorption d'eau est maximale. Il est ainsi possible d'exploiter la partie linéaire de la courbe d'absorption afin de déterminer le coefficient de diffusion  $D_w$  du PA6/GF30 à partir de l'équation suivante :

$$D_w = \pi \left( \frac{\alpha e}{4} \right)^2 \quad (\text{II.7})$$

où  $\alpha$  est la pente de la courbe et  $e$  est l'épaisseur de l'échantillon [55].

Le Tableau II.4 présente les coefficients de diffusion du PA6/GF30 à 70 et 90°C. Ces résultats sont en adéquation avec ceux trouvés par Ksouri et al. [174] avec

Température (°C)	70	90
$D_w (\times 10^{-12} m^2/s)$	11,3	23,2
$D_w (\times 10^{-12} m^2/s)$ [174]	11,18	31,93

Tableau II.4 – Coefficients de diffusion du PA6/GF30 à 70 et 90°C

une erreur relative de l'ordre de 27% entre les résultats à 90°C. Ceci peut être expliqué par la sensibilité des mesures expérimentales. En ce qui concerne l'effet du milieu sur l'évolution du coefficient de diffusion du PA6/GF30, nous remarquons que la température agit comme un accélérateur du mécanisme de diffusion d'eau dans le PA6/GF30. En effet, l'élévation de la température provoque une augmentation du coefficient de diffusion ce qui rend l'absorption d'eau dans le PA6/GF30 plus rapide jusqu'à son altération. Afin d'évaluer l'effet du vieillissement hygrothermique sur les propriétés mécaniques du PA6/GF30,

nous avons effectué une série d'essais de traction sur 5 échantillons pour chaque température (Figure II.15(b)). Le Tableau II.5 résume l'évolution du module de

État de vieillissement	Brut	Vieilli à 70°C	Vieilli à 90°C
Module de Young (GPa)	7,363 <sup>±0,284</sup>	1,141 <sup>±0,037</sup>	1,225 <sup>±0,030</sup>
Contrainte à la rupture (MPa)	132,6 <sup>±1,5</sup>	57,1 <sup>±1,2</sup>	58,9 <sup>±0,7</sup>

Tableau II.5 – Évolution des propriétés mécaniques du PA6/GF30 sous différents états de vieillissement hygrothermique

Young ainsi que de la contrainte à la rupture pour différents états de vieillissement. Selon ces résultats, on peut déduire que le vieillissement hygrothermique affecte considérablement les propriétés mécaniques du PA6/GF30. En effet, le matériau perd environ 84% de sa rigidité après vieillissement à 70°C. De plus, à la même température, la contrainte à la rupture chute de 56% à la fin de la période d'immersion. Cette dégradation des propriétés mécaniques s'explique d'une part par la pénétration d'eau dans le polymère et à son gonflement lequel conduit à la rupture des liaisons entre les chaînes macromoléculaires. Ce phénomène mène à la plastification de la matrice qui se traduit par une augmentation de la mobilité macromoléculaire provoquant ainsi une baisse des caractéristiques mécaniques du PA6/GF30. D'autre part, cette dégradation est liée à la perte d'adhésion entre la fibre et la matrice due à l'immersion dans l'eau distillée. Des observations MEB réalisées par Ksouri et al. [174] sur différents faciès de rupture (Figure II.16) montrent l'absence de résidu polymérique sur la surface des fibres laquelle favorise un mécanisme de décohésion interfaciale. Lors des essais mécaniques, cet effet de décohésion réduit l'efficacité du transfert de charge de la matrice vers la fibre ce qui entraîne une diminution des propriétés mécaniques. Dans le chapitre IV, nous nous

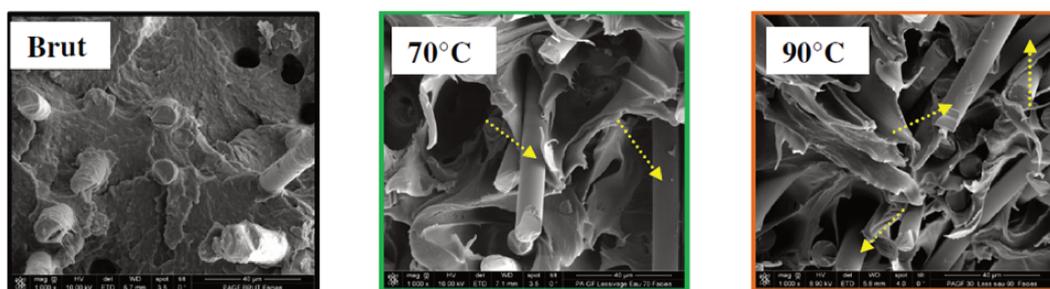


Figure II.16 – Observation au MEB du PA6/GF30 vieilli 50 jours dans l'eau distillée après des essais de traction [174]

intéresserons à la modélisation numérique des phénomènes de gonflement

hygroscopique et de décohésion interfaciale intervenant dans le vieillissement hygrothermique du PA6/GF30.

## II.5 Conclusion

À travers ce chapitre, des résultats de caractérisation expérimentale en termes de propriétés mécaniques et morphologiques, et de mode d'endommagement du PA6/GF30 ont été présentés. Des observations MEB d'une section perpendiculaire réalisées dans le sens d'injection d'un échantillon de PA6/GF30 ont montré que la majorité des fibres sont de forme quasi-circulaire, ce qui confirme que les fibres sont préférentiellement orientées dans le sens d'injection. D'autre part, la longueur des fibres après injection a été quantifiée par le biais d'observations optiques qui nous ont permis de déduire le facteur de forme des fibres, qui servira par la suite de paramètre d'entrée du modèle numérique décrit dans le chapitre III. La caractérisation expérimentale a permis d'identifier des propriétés mécaniques, à savoir, le module de Young longitudinal et le coefficient de Poisson, qui seront également utilisées comme données d'entrée du modèle numérique. Par ailleurs, l'endommagement du PA6/GF30 à l'échelle macroscopique a été étudié par le biais d'essais cycliques de type charge/décharge. À l'échelle microscopique, les observations MEB montrent que la décohésion interfaciale constitue le mécanisme d'endommagement dominant dans ce matériau. Enfin, dans le cadre d'une étude hygrothermique, nous avons montré que certains phénomènes à savoir la plastification de la matrice, le gonflement du matériau et la décohésion interfaciale constituent les facteurs majeurs responsables de la dégradation des propriétés mécaniques du PA6/GF30. Afin de prendre en compte l'effet de la décohésion interfaciale sur le comportement mécanique du PA6/GF30 avant et après vieillissement hygrothermique, une approche de modélisation numérique basée sur la méthode des éléments discrets sera abordée aux chapitres III et IV.

# Chapitre III

## Modélisation par la MED du comportement mécanique du PA6/GF30

### Sommaire

---

III.1 Introduction . . . . .	<b>63</b>
III.2 Modélisation discrète des milieux continus en élasticité . . . .	<b>64</b>
III.2.1 Milieu Continu Équivalent (MCE) . . . . .	64
III.2.2 Modèle cohésif de type poutre . . . . .	65
III.2.3 Propriétés élastiques macroscopiques . . . . .	68
III.2.4 Modèle ED du PA6/GF30 . . . . .	68
III.3 Modélisation par la MED de la décohésion interfaciale induite par effort mécanique . . . . .	<b>73</b>
III.3.1 Modélisation du phénomène de délaminage par la MED	73
III.3.2 Application de la décohésion interfaciale au PA6/GF30	82
III.4 Conclusion . . . . .	<b>87</b>

---

## III.1 Introduction

La décohésion de l'interface fibre/matrice est l'un des principaux mécanismes d'endommagement des composites. Les processus de nucléation et de croissance des fissures à l'interface ont ainsi fait l'objet d'une attention considérable depuis l'article de Williams [175], qui a traité pour la première fois ce type de problème. Ce dernier a notamment mis en exergue la présence des singularités complexes et des contraintes oscillant près de la pointe de fissure favorisant ainsi une propagation en mode mixte (traction et cisaillement). En raison du différentiel de propriétés élastiques à l'interface entre deux matériaux différents, le mode mixte couplant l'effort normal et tangentiel constitue le mode d'endommagement prédominant via lequel la décohésion s'initie et se propage potentiellement [176]. Pour ces raisons, la modélisation de ce phénomène nécessite une approche robuste et efficace. Comme il a été rappelé au chapitre I, diverses approches numériques issues de la mécanique des milieux continus ont été adaptées pour simuler la propagation de fissures interfaciales parmi lesquelles, la méthode des éléments finis étendus (XFEM) [128], la méthode Virtual Crack Closure Technique (VCCT) [117] et le modèle de zone cohésive (MZC) [120]. Cependant, la modélisation par VCCT ou XFEM nécessite la prise en compte d'une pré-fissure au niveau du modèle numérique ce qui rend ces 2 approches inadaptées pour la prédiction de l'initiation de fissures [119, 102]. En outre, la VCCT et la MZC dépendent également de la qualité de maillage et nécessite un niveau de discrétisation assez fin avec un remaillage à l'interface pour fournir une meilleure précision du phénomène de délamination, rendant ainsi ces 2 méthodes coûteuses en temps de calcul pour suivre la propagation de fissures [119, 126]. Compte tenu de ces problèmes, la MED couplée à un critère basé sur l'énergie est une solution potentielle pour décrire plus fidèlement le mécanisme de dégradation interfaciale. Une telle approche a en effet prouvé sa capacité à simuler le comportement mécanique de milieux continus présentant un caractère multi-échelles ainsi que leur endommagement [102]. De plus, la MED offre la possibilité de gérer les contacts entre les particules qui se produisent pendant le processus de décohésion interfaciale [177]. Néanmoins, afin de répondre à cet objectif, la MED doit être avant tout capable de reproduire le comportement mécanique effectif d'un milieu continu hétérogène. Pour cette raison, nous décrivons dans ce chapitre, dans un premier temps, le concept de Milieu Continu Équivalent (MCE) [103], permettant de modéliser un milieu continu par le biais d'un système particulière composé de sphères en contact ponctuel et d'éléments cohésifs de type poutre. Dans cette approche, un processus de calibration est

typiquement mis en place afin de relier les propriétés élastiques macroscopiques du matériau aux propriétés microscopiques associées aux éléments poutres. Une méthodologie est aussi proposée pour étudier le cas d'un matériau hétérogène tel que le PA6/GF30. Dans un second temps, la décohésion interfaciale est introduite par le biais d'un modèle de zone cohésive lequel est validé à travers des tests de délamination standards. Ainsi, les tests Double Cantilever Beam (DCB), End Loaded Split (ELS) et Mixed Mode Bending (MMB) sont reproduits numériquement par la MED afin d'évaluer la capacité du modèle de zone cohésive à reproduire le mécanisme de délamination, respectivement en mode I, mode II et mode mixte (I+II). Dans un dernier temps, le modèle étudié est appliqué au cas du PA6/GF30. Deux configurations sont étudiées, le cas d'un composite composé d'une seule fibre UniDirectionnelle (UD) et celui d'un composite multi-fibres. Dans chaque cas, des essais de flexion trois points sont simulés numériquement afin de simuler le processus de décohésion.

## III.2 Modélisation discrète des milieux continus en élasticité

### III.2.1 Milieu Continu Équivalent (MCE)

Le concept de MCE est basé sur la discrétisation d'un milieu continu par un système particulaire composé d'un ensemble de sphères en contact. Dans notre cas, les systèmes particuliers sont générés en utilisant le processus décrit par Leclerc [178] qui fait appel à une procédure spécifique "d'agrandissement déplacement". Il est à noter que la présente approche permet un contrôle précis des paramètres intrinsèques du système particulaire, en particulier la compacité définie comme la fraction volumique occupée par les sphères dans un domaine donné, le nombre de coordination qui caractérise le nombre moyen de liens par particule et la polydispersité éventuelle des sphères. En supposant que le système particulaire respecte les hypothèses du "Random Close Packing" (RCP) [179], nous considérons le MCE comme un système discret représentatif du milieu continu. Par défaut, la compacité du domaine est fixée à 64% et le nombre de coordination à 6,2 pour des sphères monodisperses. Cependant, comme suggéré par Leclerc [178], un paramètre de sensibilité  $\varepsilon$  est introduit pour augmenter la zone d'interaction entre les ED et atteindre un nombre de coordination de 8,2 (Figure III.1). Cette valeur a été choisie afin d'éviter une initiation prématurée de fissures liée à une faible coordination locale (inférieure à

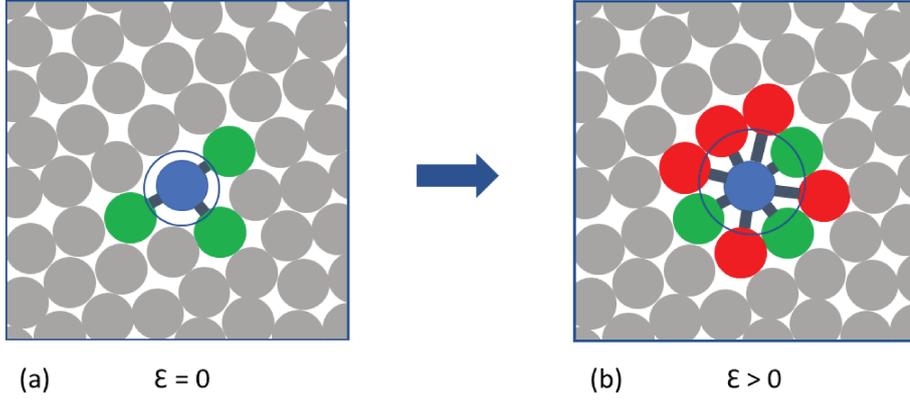


Figure III.1 – Effet du paramètre  $\varepsilon$  (a) cas  $\varepsilon = 0$  (b) cas  $\varepsilon > 0$

3). Ainsi, pour deux particules  $i$  et  $j$ , respectivement de rayons  $R_i$  et  $R_j$ , de distance inter-particulaire centre à centre  $L_{ij}$ , nous supposons que le contact se produit lorsque la relation suivante est vérifiée :

$$L_{ij} \leq (1 + \varepsilon)(R_i + R_j) \quad (\text{III.1})$$

En outre, dans le but d'éviter d'éventuels effets directionnels et assurer l'isotropie du système, une légère polydispersité basée sur un modèle gaussien avec un coefficient de variation de 0,3 est également introduite [178].

### III.2.2 Modèle cohésif de type poutre

La modélisation numérique par la MED est basée sur le modèle cohésif de type poutre introduit par André et al. [110]. Le lien cohésif entre deux particules est modélisé par un élément poutre de type Euler-Bernoulli [103] défini par un ensemble de paramètres intrinsèques, à savoir la longueur de la poutre  $L_\mu = (R_i + R_j)$ , le module de Young microscopique  $E_\mu$  et une section transversale circulaire de moment quadratique axial  $I_\mu$  et de rayon  $a_\mu$  (Figure III.2). Pour des raisons de simplification, un paramètre adimensionnel  $r_\mu$  est introduit en fonction des rayons  $R_i$  et  $R_j$  des particules  $i$  et  $j$  en contact de sorte que  $a_\mu$  et  $I_\mu$  dépendent de  $r_\mu$  tels que :

$$a_\mu = r_\mu \frac{R_i + R_j}{2} \quad (\text{III.2})$$

$$I_\mu = \pi \frac{a_\mu^4}{4} = \pi \frac{r_\mu^4}{64} (R_i + R_j)^4 \quad (\text{III.3})$$

Les forces de cohésion interne entre les particules  $i$ ,  $j$  sont les composantes du torseur de cohésion classique d'Euler-Bernoulli. D'un point de vue pratique, les

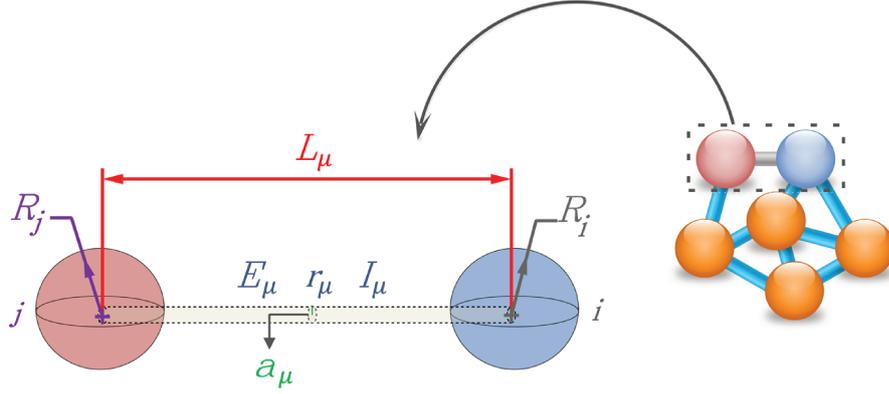


Figure III.2 – Modèle cohésif de type poutre

forces de cohésion sont contrôlées par un vecteur de force interne généralisé à 6 composantes. Celui-ci comprend d'une part des composantes normales et tangentielles pour s'opposer au déplacement relatif des particules et d'autre part des composantes de moments pour résister aux effets de flexion et de torsion. L'expression de chaque composante dérive du système matriciel suivant :

$$\begin{bmatrix} F_n^{j \rightarrow i} \\ F_t^{j \rightarrow i} \\ F_b^{j \rightarrow i} \\ M_n^{j \rightarrow i} \\ M_t^{j \rightarrow i} \\ M_b^{j \rightarrow i} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} K_n & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & K_t & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{K_t L_\mu}{2} & \frac{K_t L_\mu}{2} \\ 0 & 0 & K_t & 0 & -\frac{K_t L_\mu}{2} & -\frac{K_t L_\mu}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & S_n & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{K_t L_\mu}{2} & 0 & \frac{K_t L_\mu^2}{3} & \frac{K_t L_\mu^2}{6} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{K_t L_\mu}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{K_t L_\mu^2}{3} & \frac{K_t L_\mu^2}{6} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_n^i - u_n^j \\ u_t^i - u_t^j \\ u_b^i - u_b^j \\ \theta_n^i - \theta_n^j \\ \theta_t^i \\ \theta_t^j \\ \theta_b^i \\ \theta_b^j \end{bmatrix} \quad (\text{III.4})$$

où  $n$ ,  $t$  et  $b$  sont respectivement les directions principales du système de coordonnées cartésiennes locales liées à l'élément poutre entre les particules  $i$  et  $j$ .  $u_n^{i,j}$  et  $u_{t,b}^{i,j}$  sont respectivement les déplacements normaux et tangentiels.  $K_n$  et  $K_t$  sont les rigidités normale et tangentielle respectivement données par :

$$K_n = \frac{E_\mu A_\mu}{L_\mu}, \quad A_\mu = \pi \frac{r_\mu^2}{4} (R_i + R_j)^2 \quad (\text{III.5})$$

$$K_t = \frac{12 E_\mu I_\mu}{L_\mu^3}, \quad I_\mu = \pi \frac{r_\mu^4}{64} (R_i + R_j)^4 \quad (\text{III.6})$$

avec  $S_n$  un paramètre qui décrit la rigidité de torsion :

$$S_n = \frac{2G_\mu I_\mu}{L_\mu} \quad (\text{III.7})$$

Par ailleurs, la longueur de la poutre  $L_\mu$  n'affecte pas le comportement macroscopique à condition que le système particulaire soit suffisamment dense pour vérifier les hypothèses du RCP [103]. Finalement, la 2<sup>ème</sup> loi de Newton est appliquée à chaque particule en translation et en rotation à travers les équations III.8 et III.9 :

$$m_i \vec{u}_i = \vec{F}_i^{ext} + \sum_j \vec{F}^{j \rightarrow i} \quad (\text{III.8})$$

$$I_i \vec{\theta}_i = \vec{M}_i^{ext} + \sum_j \vec{M}^{j \rightarrow i} \quad (\text{III.9})$$

Le mouvement de la particule est alors déterminé à l'aide d'un schéma d'intégration explicite de type Verlet-vitesse selon le système d'équations suivant :

$$\begin{cases} \vec{q}(t + \Delta t) = \vec{q}(t) + \Delta t \vec{q}'(t) + \frac{\Delta t^2}{2} \vec{q}''(t) \\ \vec{q}'(t + \Delta t) = \vec{q}'(t) + \frac{\Delta t}{2} (\vec{q}''(t) + \vec{q}''(t + \Delta t)) \end{cases} \quad (\text{III.10})$$

où  $\vec{q}(t)$ ,  $\vec{q}'(t)$  et  $\vec{q}''(t)$  sont respectivement les vecteurs des positions, vitesses et accélérations généralisées correspondants au pas de temps précédent  $t$ . Ce choix est principalement motivé par la simplicité du schéma et son applicabilité pour des simulations discrètes à grande échelle. Par ailleurs, en vue d'assurer la convergence des résultats, les calculs ED sont effectués en utilisant un pas de temps ajustable qui est déterminé en fonction du pas de temps critique  $\Delta t_{crit}^c$  associé à chaque élément poutre comme suit :

$$\Delta t = C_t \min_{c \in \xi} (\Delta t_{crit}^c) \quad (\text{III.11})$$

où  $\xi$  désigne l'ensemble des contacts du système particulaire et  $C_t$  est un coefficient de sécurité variant dans l'intervalle  $[\frac{1}{2\pi}, 0.5]$  [103, 180]. Dans notre cas, sauf indication contraire,  $C_t$  est fixé à 0,3. En outre, un amortissement de type Rayleigh dépendant d'un coefficient  $\beta$  constant est introduit dans les simulations ED pour réduire les effets dynamiques et assurer la convergence des résultats

numériques [103]. Ainsi, le pas de temps est finalement exprimé comme suit :

$$\Delta t' = \begin{cases} \frac{\Delta t}{\beta} & \beta > 1 \\ \Delta t & \beta \leq 1 \end{cases} \quad (\text{III.12})$$

Néanmoins, il faut garder à l'esprit que l'introduction de l'amortissement impose l'utilisation d'un pas de temps assez faible dans les simulations discrètes. Il est primordial donc de trouver un compromis entre la précision des résultats et le temps de calcul pour réduire les effets dynamiques tout en évitant un coût de calcul prohibitif.

### III.2.3 Propriétés élastiques macroscopiques

Le module de Young microscopique  $E_\mu$  ne correspond a priori pas à son équivalent macroscopique  $E_M$  et le paramètre  $r_\mu$  associé au coefficient de Poisson  $\nu_M$  est lui aussi a priori inconnu. Par conséquent, un processus de calibration doit être mis en place afin d'identifier les paramètres locaux conduisant aux propriétés macroscopiques attendues  $E_M$  et  $\nu_M$ . A ces fins, des essais de traction spécifiques sont réalisés pour une large gamme de configurations comme décrit dans [103]. Des fonctions polynomiales sont ensuite établies à l'aide d'une analyse de régression pour corrélérer les paramètres microscopiques  $E_\mu$  et  $r_\mu$  à leurs propriétés macroscopiques correspondantes  $E_M$  et  $\nu_M$  comme suit :

$$r_\mu = P(\nu_M) \quad (\text{III.13})$$

$$E_\mu = Q(r_\mu)E_M \quad (\text{III.14})$$

Ainsi, connaissant  $\nu_M$  d'un matériau donné, on peut obtenir son  $r_\mu$  correspondant, et  $E_\mu$  peut alors être déduit de  $E_M$  et de  $r_\mu$ . Les propriétés macroscopiques du PA6 et du GF30 sont indiquées dans les tableau II.2 et II.3. Sur la base de ce processus de calibration (Annexe A), les paramètres microscopiques correspondants sont  $E_\mu^{PA6} = 1738$  GPa,  $r_\mu^{PA6} = 0,05$  pour le PA6 et  $E_\mu^{GF30} = 725$  GPa,  $r_\mu^{GF30} = 0,39$  pour le GF30.

### III.2.4 Modèle ED du PA6/GF30

Un modèle ED du PA6/GF30 est maintenant établi en utilisant une approche spécifique. Celle-ci est basée sur la génération de VER cubiques du matériau ciblé dont la définition dépend de certaines hypothèses de taille établies à partir de simulations réalisées par Transformée de Fourier Rapide

(TFR). L'utilisation de cette approche est justifiée par son efficacité à estimer les propriétés effectives de milieux hétérogènes et à fournir des informations sur les dimensions requises du VER. Dans ce travail, nous tirons bénéfice du schéma Eyre-Milton pour la résolution par TFR [49]. Il convient de noter que, conformément à la caractérisation expérimentale discutée dans le chapitre II, nous considérons des fibres alignées distribuées aléatoirement et décrites par des cylindres avec un facteur de forme  $FF=18$  et une fraction volumique  $V_f = 15,7\%$ . La procédure proposée est la suivante (Figure III.3). Dans une

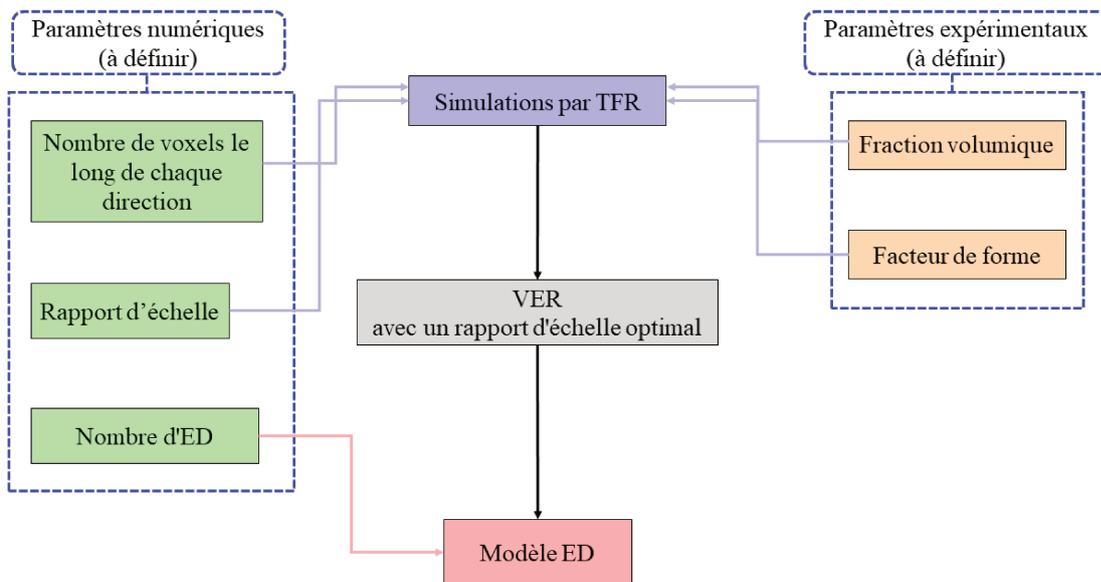


Figure III.3 – Méthodologie pour modéliser le PA6/GF30 en utilisant la MED et le concept de VER [177]

première étape, le nombre optimal de voxels à employer dans les simulations par TFR est étudié pour une large plage du Rapport d'Echelle (RE), lequel est défini comme étant le rapport de la longueur du VER sur celle de la fibre. Puis, nous étudions l'influence du nombre de voxels le long de chaque direction sur le module de Young longitudinal effectif en faisant varier le RE (Rapport d'Échelle) jusqu'à 8. A titre indicatif, le nombre de voxels étudié varie le long de chaque direction de 50 à 700 voxels et 3 volumes élémentaires différents sont étudiés pour chaque cas afin d'assurer la reproductibilité des résultats. D'après la Figure III.4(a), nous pouvons conclure qu'une résolution de  $500 \times 500 \times 500$  est suffisante pour assurer la convergence du module de Young longitudinal effectif. Dans un deuxième temps, nous cherchons à déterminer le RE optimal. Dans ce but, nous évaluons l'effet de ce paramètre sur le module de Young longitudinal effectif. Les simulations par TFR sont effectuées en utilisant une résolution de  $500 \times 500 \times 500$  comme indiqué précédemment, et pour plusieurs RE compris

entre 1,2 et 8. Les résultats sont illustrés sur la Figure III.4(b). D'un point de vue quantitatif, nous pouvons déduire qu'un RE optimal égal à 1,5 suffit à prédire de manière suffisamment précise le module de Young effectif du PA6/GF30. Dans une troisième et dernière étape, nous cherchons à estimer le

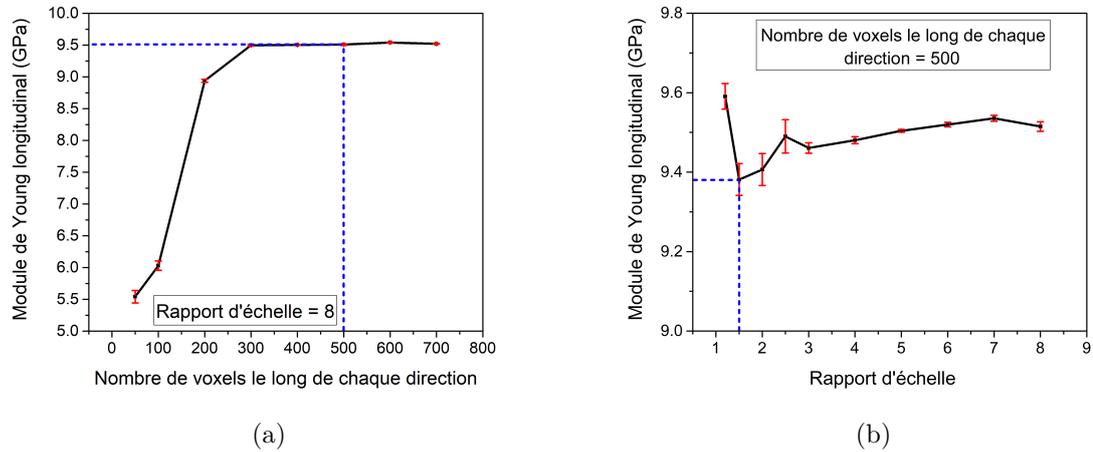


Figure III.4 – Effet du (a) nombre de voxels le long de chaque direction et (b) RE sur le module de Young longitudinal effectif

nombre adéquat de particules à utiliser dans les simulations discrètes. Dans cette optique, nous basons nos études sur un ensemble de 4 VER cubiques avec un RE fixé à 1,5. Pour chaque VER, la fraction volumique  $V_f$  est déterminée numériquement pour une large gamme du nombre d'ED dans l'intervalle  $[8 \cdot 10^5; 1,6 \cdot 10^7]$  (Figure III.5). Les résultats montrent une convergence en deux étapes. Pour un nombre de particules inférieur à  $8 \cdot 10^6$  ED, la fraction volumique  $V_f$  augmente progressivement. Cependant, pour un nombre de particules supérieur à  $8 \cdot 10^6$  ED, la valeur de  $V_f$  tend à se stabiliser autour de 15,7%. La

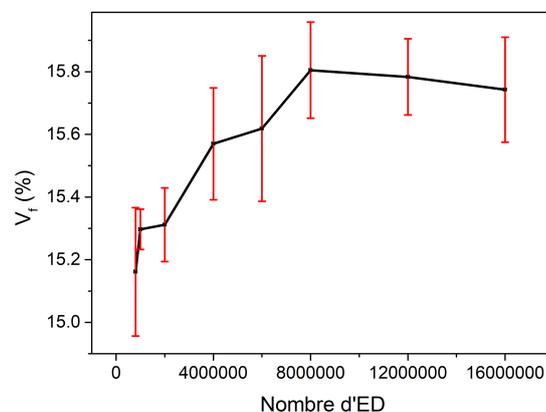


Figure III.5 – Influence du nombre d'ED sur la fraction volumique  $V_f$  de fibres

différence relative entre la fraction volumique expérimentale et numérique à convergence est inférieure à 1% ce qui témoigne d'une bonne représentativité du milieu continu hétérogène. Par conséquent, nous pouvons considérer qu'un nombre de  $8 \cdot 10^6$  ED suffit pour discrétiser un VER du matériau composite PA6/GF30. La Figure III.6 (a) représente un exemple de VER généré pour un RE de 1,5 et composé de 424 fibres alignées de FF=18 et  $V_f = 15,7\%$ . Etant donné que toutes les particules sont distribuées aléatoirement, chaque ED est associée à une phase donnée en fonction de sa distance "d" entre l'axe de la fibre et le centre de la particule (Figure III.6 (b)). Les paramètres microscopiques  $E_\mu$

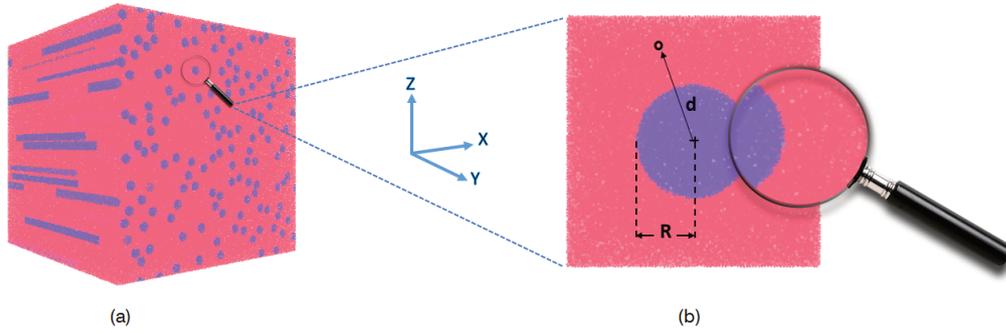


Figure III.6 – (a) VER du composite à fibres courtes PA6/GF30 (FF=18 et RE=1,5), (b) Vue agrandie mettant en évidence comment chaque ED est associé à une phase donnée : PA6 ou GF30

et  $r_\mu$  des matériaux PA6 et GF30 sont fournis dans la sous-section précédente. Les paramètres interfaciaux correspondant aux éléments poutre reliant chaque paire de particules à l'interface ( $E_\mu^{int}$  et  $r_\mu^{int}$ ) sont définis comme étant la moyenne arithmétique des paramètres  $E_\mu$  et  $r_\mu$  des matériaux constitutifs :

$$E_\mu^{int} = \frac{E_\mu^{PA6} + E_\mu^{GF30}}{2} \quad (III.15)$$

$$r_\mu^{int} = \frac{r_\mu^{PA6} + r_\mu^{GF30}}{2} \quad (III.16)$$

À des fins de validation, des simulations discrètes sont effectuées afin de prédire le module de Young longitudinal effectif du PA6/GF30 en utilisant un ensemble de 4 VER composés de 8 millions de particules. Les conditions aux limites sont définies comme suit : une face du motif cubique est encastrée par rapport à la direction longitudinale des fibres, alors qu'une vitesse constante  $V = 5$  mm/min est imposée sur la face opposée. Les simulations discrètes sont effectuées en utilisant un pas de temps de  $1,2 \cdot 10^{-5}$ s. Les résultats numériques sont confrontés aux valeurs expérimentales ainsi qu'aux prédictions fournies par les modèles

micromécaniques de Tandon Weng (TW) [181] et de Mori Tanaka (MT) [66]. Les résultats du tableau III.1 montrent que la prédiction donnée par la TFR est assez proche de celles estimées par les modèles de TW et MT, avec des différences relatives inférieures à 2% pour le module de Young, et 3% pour le coefficient de Poisson. Ceci met en évidence la pertinence de la définition proposée du VER pour le composite PA6/GF30. Toutefois, les différences relatives entre les résultats donnés par la MED et ceux obtenus par TFR sont estimées à 6,3% et 12,1%, respectivement pour le module de Young et le coefficient de Poisson. Par ailleurs, Leclerc [178] a montré que l'augmentation du nombre de coordination de 6,2 à 7,5, pour une compacité fixée à 64%, conduit à une diminution du coefficient de Poisson maximal admissible. Dans notre cas, un nombre de coordination de 8,2 a été utilisé, ce qui correspond à un coefficient de Poisson maximal de 0,28 qui est inférieur à la valeur ciblée du PA6/GF30. Cela pourrait, au-moins partiellement, expliquer la différence des coefficients de Poisson obtenus par la MED et la TFR. De plus, ces écarts dans les résultats pourraient également être liés à une sous-estimation du nombre de particules requis pour assurer la convergence des prédictions fournies par la MED vers celles données par la TFR. Par ailleurs, les différences relatives entre les résultats obtenus par la MED et les mesures expérimentales sont de 19,7% et 22%, respectivement pour le module de Young et le coefficient de Poisson. Les écarts observés peuvent être expliqués par le fait que le modèle numérique proposé ne prend pas en compte certains paramètres tels que les effets interfaciaux, la distribution de l'orientation des fibres ou même les défauts localisés. Cependant, les simulations discrètes montrent des résultats prometteurs en termes de propriétés élastiques en comparaison avec les mesures expérimentales, la TFR et les approches analytiques. Ainsi, nous pouvons conclure que le modèle ED proposé permet une modélisation appropriée du PA6/GF30 en termes de propriétés élastiques effectives.

Approches	MED	TFR	Experimentale	Tandon-Weng	Mori-Tanaka
Module de Young longitudinal (GPa)	8,819	9,381	$7,363^{\pm 0.284}$	9,360	9,233
Coefficient de Poisson	0,279	0,313	$0,358^{\pm 0.005}$	0,321	0,317

Tableau III.1 – Comparaison des propriétés élastiques effectives du PA6/GF30 obtenues par différentes approches numériques, expérimentales et théoriques

### III.3 Modélisation par la MED de la décohésion interfaciale induite par effort mécanique

Cette partie est dédiée à l'étude de la décohésion interfaciale par la MED. Ainsi, ce phénomène de décohésion est tout d'abord abordé par le biais de tests de délamination standard afin de valider le modèle discret proposé. Des essais de Double Cantilever Beam (DCB), End Loaded Split (ELS) et Mixed Mode Bending (MMB) sont réalisés pour évaluer la capacité du modèle interfacial d'Éléments Discrets (ED) à reproduire le processus de délamination en mode I, mode II et mode mixte (I+II), respectivement. Dans une seconde étape, le cas du matériau composite à fibres courtes PA6/GF30 est abordée. des simulations numériques sont effectuées pour déterminer le processus de la décohésion interfaciale, en mode mixte, induite par effort mécanique pour deux configurations données : le cas d'un composite avec une seule fibre UniDirectionnelle (UD) et celui d'un composite multi-fibres.

#### III.3.1 Modélisation du phénomène de délaminage par la MED

##### III.3.1.1 Mode I : Essai Double Cantilever Beam (DCB)

Dans un premier temps, nous considérons le test DCB standard pour reproduire le mode I de délamination d'une poutre stratifiée avec les dimensions suivantes [113] : une longueur  $l = 45$  mm, une largeur  $w = 6$  mm et une épaisseur  $2e = 3$  mm (Figure III.7(a)). Tous les liens entre les particules sont des

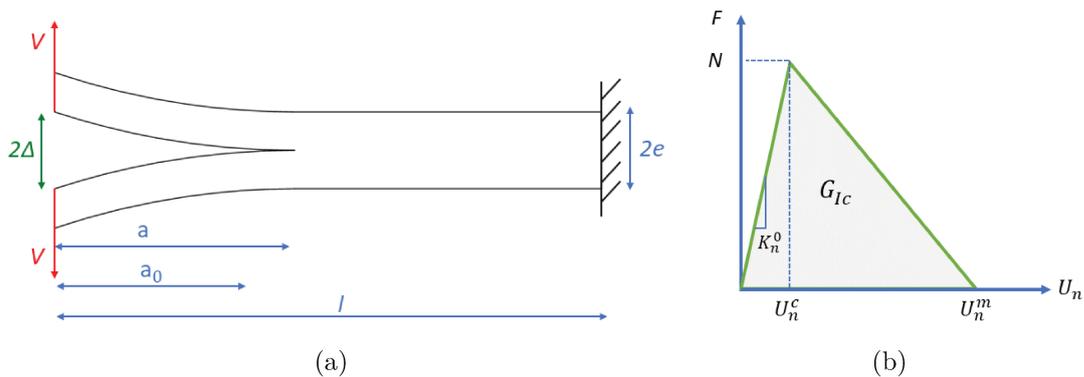


Figure III.7 – (a) Configuration du test DCB, (b) Loi d'adoucissement bilinéaire en mode I

poutres cohésives, sauf ceux de l'interface située à mi-épaisseur. Dans ce domaine spécifique, une pré-fissure de longueur  $a_0 = 13,5$  mm est définie en

supprimant les contacts interfaciaux reliant deux particules situées de part et d'autre de la pré-fissure. Les liens interfaciaux restants sont remplacés par des éléments de type ressort dont la rigidité normale est  $K_n$ . Ainsi, le pas de temps de l'essai DCB est fixé à  $2,4 \cdot 10^{-6}$ s avec  $\beta = 15$ . Afin d'assurer la propagation de la fissure en mode I, un modèle d'adoucissement bilinéaire est pris en compte au niveau des liens interfaciaux. Ce modèle présente trois phases (Figure III.7(b)). Une première phase de chargement correspond à une rigidité normale initiale constante  $K_n^0$  jusqu'à un déplacement normal critique  $U_n^c$  tel que :

$$U_n^c = \frac{N}{K_n^0} \quad (\text{III.17})$$

où  $N$  est la force normale critique. Par la suite, dans une seconde étape, l'interface commence à se dégrader jusqu'à ce que le déplacement normal  $U_n$  atteigne une valeur maximale  $U_n^m$  définie comme suit :

$$U_n^m = \frac{2AG_{Ic}}{N} \quad (\text{III.18})$$

où  $A$  est la section transversale moyenne des poutres cohésives associées aux liens interfaciaux, et  $G_{Ic}$  est le taux de restitution d'énergie critique en mode I du matériau. A la dernière étape on assiste à l'initiation de la fissure et à sa propagation le long de l'interface en mode I. L'endommagement est introduit au niveau de la rigidité normale associée aux liens interfaciaux via un paramètre d'endommagement  $D$  dont la valeur dépend de  $U_n$ . La rigidité normale est alors définie selon l'équation suivante :

$$K_n = (1 - D)K_n^0 \quad (\text{III.19})$$

Dans la première phase, le comportement interfacial est supposé être élastique sans endommagement avec  $D = 0$ . Dans la deuxième phase, dans laquelle  $U_n > U_n^c$ , un adoucissement linéaire est introduit via une dépendance de  $D$  à  $U_n$ . Lors de la troisième phase,  $D$  est égal à 1 ce qui signifie la rupture du lien cohésif. Les valeurs prises par le paramètre d'endommagement  $D$  en fonction de  $U_n$  sont données ci-dessous :

$$D = \begin{cases} 0 & U_n \leq U_n^c \\ \frac{U_n^m(U_n - U_n^c)}{U_n(U_n^m - U_n^c)} & U_n^c < U_n < U_n^m \\ 1 & U_n \geq U_n^m \end{cases} \quad (\text{III.20})$$

Les simulations ED sont effectuées en imposant une vitesse constante  $V=5$  mm/min de part et d'autre du bord gauche de l'échantillon. Les propriétés mécaniques utilisées pour cette étude sont : un module de Young  $E = 135$  GPa, un coefficient de Poisson  $\nu_{22} = 0,24$ ; un taux de restitution d'énergie critique  $G_{Ic} = 0,56$  N/mm et une contrainte interfaciale. À noter que la contrainte interfaciale, laquelle correspond au rapport  $N/A$ , est fixée à  $\sigma^{max} = 3.10^3$  MPa. Néanmoins, il convient de préciser que la force interfaciale est définie à l'échelle du contact et n'a pas de signification à l'échelle macroscopique. Le système particulière est composé de 400 000 ED ce qui correspond à un niveau de discrétisation avoisinant 22 ED le long de la plus petite dimension du domaine étudié. À des fins de validation, une comparaison est effectuée avec une solution analytique dérivée de la théorie des poutres [113]. Les figures III.8(a) et III.8(b) montrent que les réponses macroscopiques en termes de courbes force/déplacement et longueur de la fissure/déplacement sont proches des solutions analytiques. Dans un premier temps, le déplacement évolue linéairement sans aucun endommagement jusqu'à  $\Delta = 0,23$  mm. Puis, dans un deuxième temps, la fissure s'initie et se propage le long de l'interface entre les deux couches conduisant à une diminution de la force (Figure 13). Les fluctuations survenant pendant l'étape de rupture sont liées au schéma de résolution de type dynamique explicite. L'utilisation d'un coefficient d'amortissement plus élevé devrait atténuer ces fluctuations, mais cela ne sera pas sans conséquence sur le temps de calcul. Un compromis entre coefficient d'amortissement et pas de temps doit donc être trouvé afin d'éviter des coûts de calcul prohibitifs.

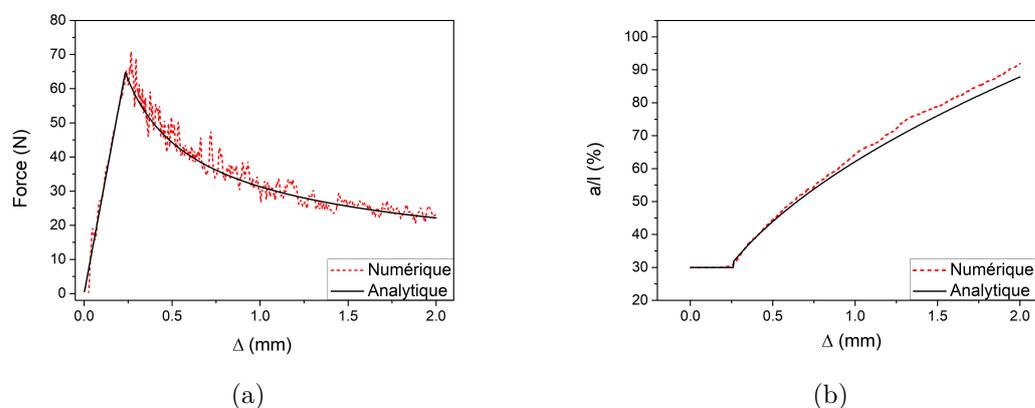


Figure III.8 – (a) Courbes force/déplacement, (b) Courbes longueur de la fissure/déplacement associées à l'essai DCB

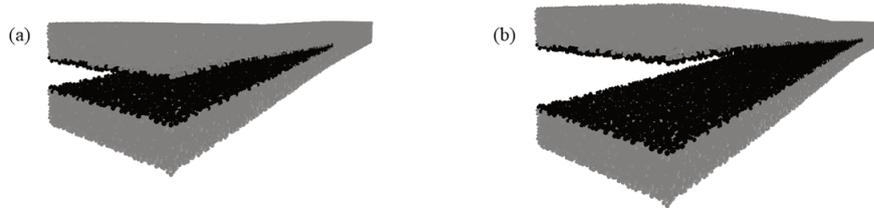


Figure III.9 – Propagation de la fissure à (a)  $\Delta = 0,5$  mm et (b)  $\Delta = 1,04$  mm

### III.3.1.2 Mode II : Essai End Loaded Split (ELS)

L'essai de type ELS est utilisé afin de caractériser le mode II de délamination (Figure III.10(a)). Durant cette étude, ce test est réalisé avec une vitesse constante imposée au bord gauche de l'échantillon  $V = 5$  mm/min, avec un  $\beta = 10$  et un pas de temps de  $6,6 \cdot 10^{-5}$  s. Le modèle discret associé est composé de 198 000 particules ce qui correspond à un niveau de discrétisation de 10 ED le long de l'épaisseur de l'échantillon. Notons que ce niveau de discrétisation est différent de celui considéré dans l'essai DCB car il permet d'avoir un bon compromis entre la précision des résultats numériques et le coût de calcul. La configuration étudiée est caractérisée par les dimensions suivantes [182] : une longueur  $l = 105$  mm, une largeur  $w = 20$  mm, une épaisseur  $2e = 3,6$  mm et une pré-fissure  $a_0 = 60$  mm. Les propriétés mécaniques sont : un module de Young  $E = 150$  GPa, un module de cisaillement  $G_{12} = 6$  GPa, une contrainte interfaciale  $\tau^{max} = 2,5 \cdot 10^3$  MPa et un taux de restitution d'énergie critique en mode II  $G_{IIc} = 1,5$  N/mm. Tous les ED sont

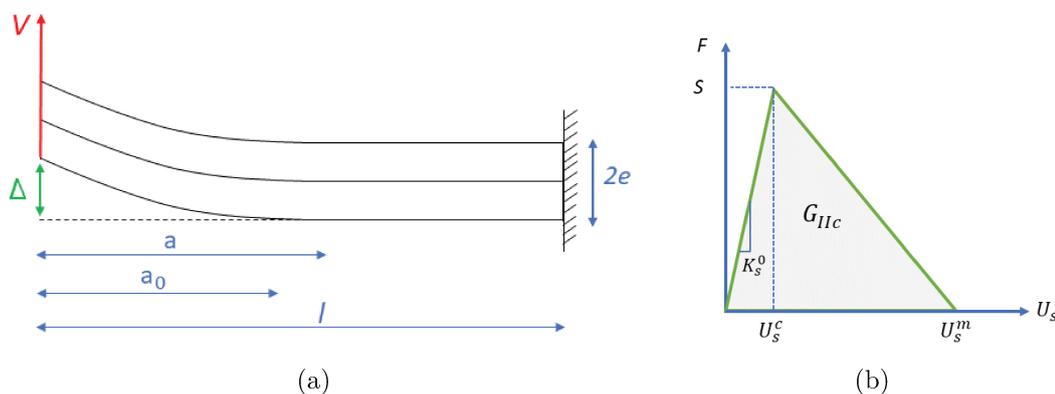


Figure III.10 – (a) Configuration du test ELS, (b) Loi d'adoucissement bilinéaire en mode II

connectés à l'aide d'éléments cohésifs hormis ceux situés à l'interface. Dans cette zone spécifique, des éléments de type ressort avec une rigidité tangentielle  $K_s$  sont introduits à l'exception d'une zone de pré-fissure. Les éléments de type ressort sont régis par une courbe cisaillement/déplacement selon un modèle d'adoucissement bilinéaire (Figure III.10(b)) qui est, comme pour l'essai DCB, caractérisée par

trois phases. Ainsi, dans une première étape, le comportement de l'interface est supposé élastique jusqu'à un déplacement critique  $U_s^c$  donné par :

$$U_s^c = \frac{S}{K_s^0} \quad (\text{III.21})$$

où  $S$  est la force critique tangentielle et  $K_s^0$  est la rigidité tangentielle initiale. Puis, dans un deuxième temps, la dégradation de l'interface au niveau de l'élément cohésif se produit jusqu'à ce que le déplacement tangentiel  $U_s$  atteigne le déplacement maximal  $U_s^m$  donné par :

$$U_s^m = \frac{2AG_{IIc}}{S} \quad (\text{III.22})$$

Enfin, dans une dernière phase, les liens interfaciaux sont supposés être rompus de sorte qu'une fissure s'initie et se propage le long de l'interface. Un paramètre d'endommagement  $D$  est alors introduit en fonction de  $U_s$  tel que :

$$D = \begin{cases} 0 & U_s \leq U_s^c \\ \frac{U_s^m(U_s - U_s^c)}{U_s(U_s^m - U_s^c)} & U_s^c < U_s < U_s^m \\ 1 & U_s \geq U_s^m \end{cases} \quad (\text{III.23})$$

La rigidité tangentielle  $K_s$  est alors calculée selon l'expression suivante :

$$K_s = (1 - D)K_s^0 \quad (\text{III.24})$$

Afin de vérifier la validité de cette étude, les simulations ED sont comparées à une solution analytique donnée dans [183]. La force et la longueur de la fissure sont tracées en fonction du déplacement sur les figures III.11(a) et III.11(b) respectivement. Les résultats montrent que l'évolution de la force en fonction du déplacement s'effectue en deux étapes. La première phase est caractérisée par une augmentation linéaire de la force sans endommagement jusqu'à un pic obtenu pour  $\Delta = 13,2$  mm. Dans la seconde phase, la force diminue progressivement en raison de la délamination en mode II. La fissure se propage alors entre les deux couches le long de l'interface jusqu'à la rupture du matériau (Figure III.12). Il convient de noter la présence de légères différences entre la solution analytique et les résultats de l'approche discrète, particulièrement au cours du processus d'endommagement (Figure III.11(a)). Comme nous l'avons vu précédemment, cela s'explique par le choix d'un schéma de résolution de type explicite. Concernant l'évolution de la taille de la fissure, un décalage entre les

deux courbes analytique et numérique peut être observé pendant la phase de rupture (Figure III.11(b)). Nous supposons que cette différence pourrait être partiellement expliquée par la taille de la pré-fissure qui est assez importante par rapport à la longueur du modèle considéré [184]. De plus, le coefficient d'amortissement de Rayleigh utilisé lors des simulations ED pourrait également affecter l'initiation et la propagation de la fissure. Enfin, il faut noter que l'essai ELS est réalisé avec un plus faible niveau de discrétisation par rapport à l'essai DCB afin de réduire le coût de calcul, ce qui pourrait également affecter la précision des résultats numériques.

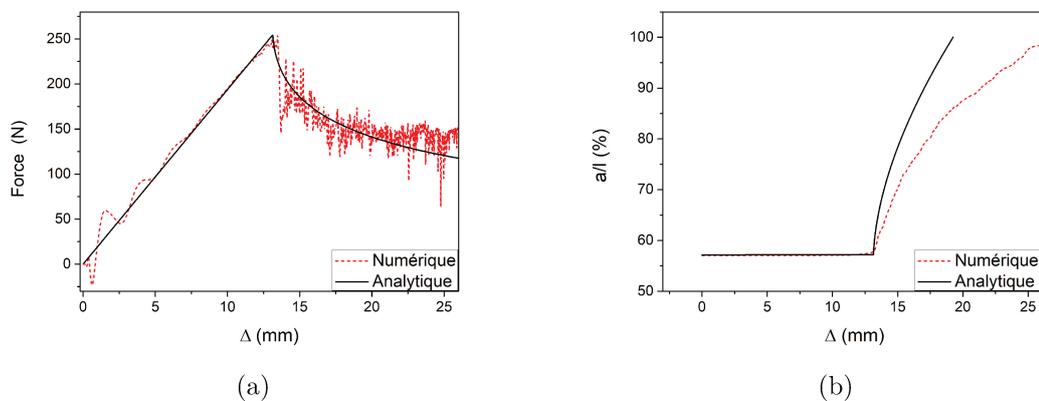


Figure III.11 – (a) Courbes force/déplacement, (b) Courbes longueur de la fissure/déplacement associées à l'essai ELS

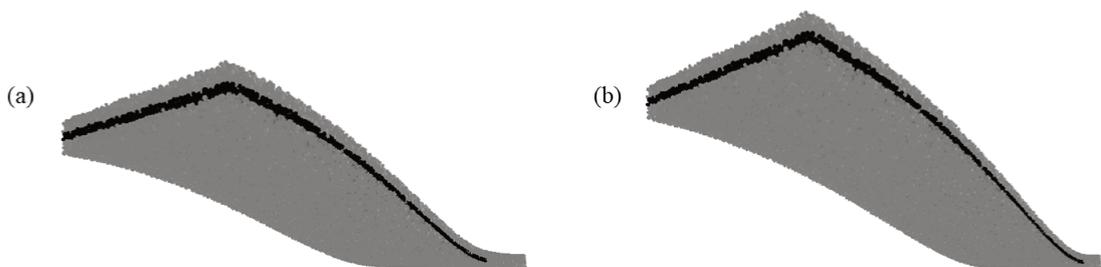


Figure III.12 – Propagation de la fissure à (a)  $\Delta = 13,5$  mm et (b)  $\Delta = 17$  mm

### III.3.1.3 Mode mixte : Essai Mixed Mode Bending (MMB)

Nous considérons maintenant l'essai de rupture en mode mixte via le test MMB dont la configuration est décrite à la Figure III.13(a) [185]. Les dimensions et propriétés mécaniques considérés lors de l'essai sont les suivants : une longueur  $l=50$  mm, une largeur  $w=10$  mm, une épaisseur  $2e=3$  mm, un paramètre d'ajustement du rapport entre les deux forces appliquées ( $F_1$  et  $F_2$ )

$c=50$  mm, une longueur de pré-fissure  $a_0 = 30$  mm, un module de Young  $E=135$  GPa, un coefficient de Poisson  $\nu = 0,24$ , et des taux de restitution d'énergie critique en mode I et II  $G_{Ic} = G_{IIc} = 4$  N/mm. L'essai pourrait être réalisé en appliquant une force  $F$  par un levier de chargement rigide avec un bras ajustable. Nous dérivons les expressions des charges résultantes  $F_1$  et  $F_2$  à partir de l'équilibre statique des efforts et moments comme suit :

$$F_1 = F \frac{c}{l} \quad (\text{III.25})$$

$$F_2 = F \frac{c+l}{l} \quad (\text{III.26})$$

Pour effectuer l'étude par la MED, nous considérons un échantillon composé de 237 000 ED pour un niveau de discrétisation approximativement de 12. Nous utilisons la géométrie et les conditions aux limites présentées à la Figure III.13(a) dans laquelle le contrôle du déplacement est utilisé pour les simulations ED. Afin de respecter le rapport entre les forces  $\frac{F_2}{F_1} = \frac{c+l}{l}$ , le contrôle de la vitesse est défini comme suit  $\frac{V_2}{V_1} = 0,027$  où  $V_1 = 5$  mm/min. Nous avons également fixé le pas de temps des simulations ED à  $9,1 \cdot 10^{-6}$  s avec  $\beta = 15$ . Des

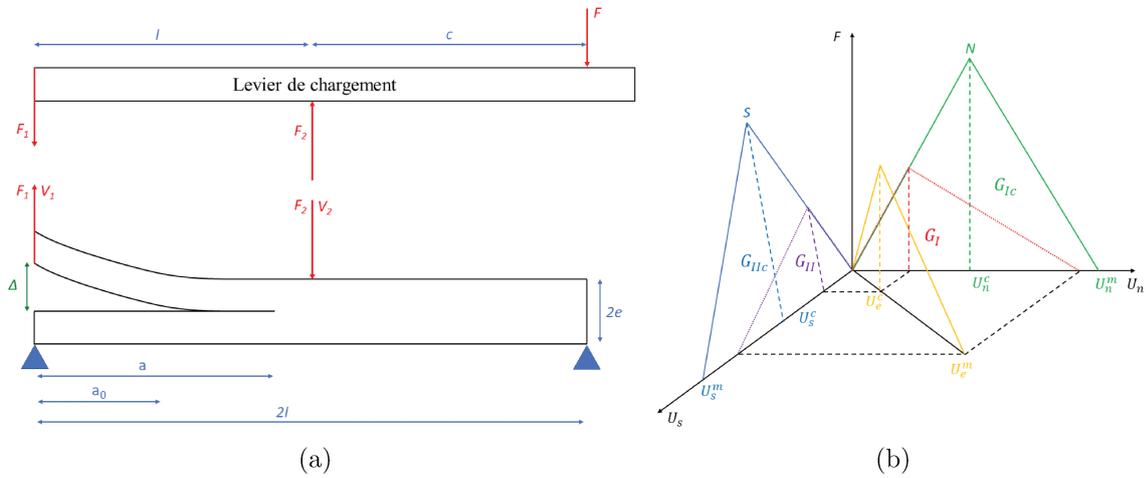


Figure III.13 – (a) Configuration du test MMB, (b) Loi d'adoucissement bilinéaire en mode mixte

éléments de type ressort avec une composante normale et tangentielle sont insérés dans la zone interfaciale, à l'exception de la pré-fissure, afin de simuler le phénomène de délamination. Nous considérons un modèle d'endommagement basé sur une loi d'adoucissement bilinéaire prenant en compte le mode mixte combinant des sollicitations de cisaillement et de traction/compression [126]. Ce dernier est étudié en fonction d'un ensemble de paramètres physiques tels que

$G_{Ic}$  et  $G_{IIc}$ , et des limites de traction  $N$  et de cisaillement  $S$  associées au lien cohésif (Figure III.13(b)). Dans ce modèle, les déplacements normaux ( $U_n$ ) et tangentiels ( $U_s$ ) sont des paramètres d'entrée obtenus numériquement au pas de temps précédent. Les modèles bilinéaires en modes I et II dépendent des déplacements critiques, respectivement  $U_n^c$  et  $U_s^c$ , qui sont exprimés par les équations III.17 et III.21. Les deux modèles bilinéaires dépendent également des déplacements limites, respectivement  $U_n^m$  et  $U_s^m$  en modes I et II, comme mentionné dans les équations III.18 et III.22. Soit le déplacement effectif total  $U_e$ , défini en fonction de  $U_n$  et  $U_s$  comme suit :

$$U_e = \sqrt{U_n^2 + U_s^2} \quad (\text{III.27})$$

Le déplacement effectif critique  $U_e^c$  est la valeur seuil au-delà de laquelle le lien cohésif est rompu. Afin de définir un paramètre en fonction de  $U_n^c$  et de  $U_s^c$ , on introduit le coefficient  $\eta$  tel que :

$$\eta = \begin{cases} \frac{U_s}{U_n} & U_n > 0 \\ 0 & U_n \leq 0 \end{cases} \quad (\text{III.28})$$

On suppose également la relation suivante entre les déplacements critiques  $U_n^c$  et  $U_s^c$ , et les déplacements  $U_n$  et  $U_s$  :

$$\left(\frac{U_n}{U_n^c}\right)^2 + \left(\frac{U_s}{U_s^c}\right)^2 = 1 \quad (\text{III.29})$$

En combinant les équations III.29 et III.27 et en prenant en compte le paramètre de couplage  $\eta$  défini en III.28, on obtient l'expression suivante de  $U_e^c$  :

$$U_e^c = \begin{cases} U_n^c U_s^c \sqrt{\frac{1+\eta^2}{(U_s^c)^2 + (\eta U_n^c)^2}} & U_n > 0 \\ U_s^c & U_n \leq 0 \end{cases} \quad (\text{III.30})$$

Afin de définir un déplacement effectif maximal  $U_e^m$ , les taux de restitution d'énergie de déformation en mode I ( $G_I$ ) et en mode II ( $G_{II}$ ) sont introduits selon les expressions suivantes :

$$\begin{cases} G_I = \frac{K_n^0 U_e^m U_e^c}{2A(1+\eta^2)} \\ G_{II} = \frac{K_s^0 \eta^2 U_e^m U_e^c}{2A(1+\eta^2)} \end{cases} \quad (\text{III.31})$$

La loi la plus courante pour décrire le phénomène de délamination en mode mixte est la loi de puissance [126], qui relie  $G_I$  et  $G_{II}$  à  $G_{Ic}$  et  $G_{IIc}$  :

$$\left(\frac{G_I}{G_{Ic}}\right)^\alpha + \left(\frac{G_{II}}{G_{IIc}}\right)^\alpha = 1 \quad (\text{III.32})$$

Le critère énergétique peut suivre une dépendance linéaire ( $\alpha=1$ ) ou quadratique ( $\alpha=2$ ). A titre indicatif, dans le présent travail,  $\alpha$  est fixé à 1 comme cela est généralement utilisé dans la littérature [182, 186, 187]. En injectant l'équation III.32 dans l'équation III.31, on obtient alors l'expression de  $U_e^m$  en fonction de  $U_n^m$ ,  $U_s^m$ ,  $U_e^c$ ,  $K_n^0$ ,  $K_s^0$ ,  $G_{Ic}$ ,  $G_{IIc}$ ,  $\eta$  et  $\alpha$  :

$$U_e^m = \begin{cases} \frac{2A(1+\eta^2)}{U_e^c} \left( \left(\frac{K_n^0}{G_{Ic}}\right)^\alpha + \left(\frac{\eta^2 K_s^0}{G_{IIc}}\right)^\alpha \right)^{-\frac{1}{\alpha}} & U_n > 0 \\ U_s^m & U_n \leq 0 \end{cases} \quad (\text{III.33})$$

En outre, les équations constitutives de la rupture en mode mixte dépendent d'un paramètre d'endommagement  $D$  qui prend l'une des trois valeurs suivantes en fonction du niveau d'endommagement du lien cohésif :

$$D = \begin{cases} 0 & U_e \leq U_e^c \\ \frac{U_e^m(U_e - U_e^c)}{U_e(U_e^m - U_e^c)} & U_e^c < U_e < U_e^m \\ 1 & U_e \geq U_e^m \end{cases} \quad (\text{III.34})$$

Les expressions de  $K_n$  et  $K_s$  en fonction de  $D$ ,  $K_n^0$  et  $K_s^0$  sont données respectivement par les équations III.20 et III.24. Pour les simulations ED, en se basant sur des études préliminaires, les contraintes interfaciales de traction  $\sigma^{max}$  et de cisaillement  $\tau^{max}$  sont respectivement fixées à  $1,4 \cdot 10^4$  MPa et  $3,5 \cdot 10^3$  MPa. La Figure III.14 montre les prédictions obtenues par la MED en termes de courbes force/déplacement et longueur de fissure/déplacement par rapport à une solution analytique de référence fournie par Mi et al. [188]. À partir de la Figure III.14(a), on peut observer que les approches discrète et analytique conduisent à des courbes force/déplacement très proches, à l'exception de quelques fluctuations dans les simulations ED liées aux effets dynamiques. On peut voir sur la Figure III.14(b) que, par rapport à la solution analytique, les liens interfaciaux commencent à se rompre pour un déplacement légèrement inférieur. Quant aux dégradations, elles se propagent un peu plus rapidement jusqu'à la phase finale de l'essai mais les résultats sont globalement

en bon accord. Cela met en évidence la capacité de la MED à prédire le processus de délamination en mode mixte (Figure 19).

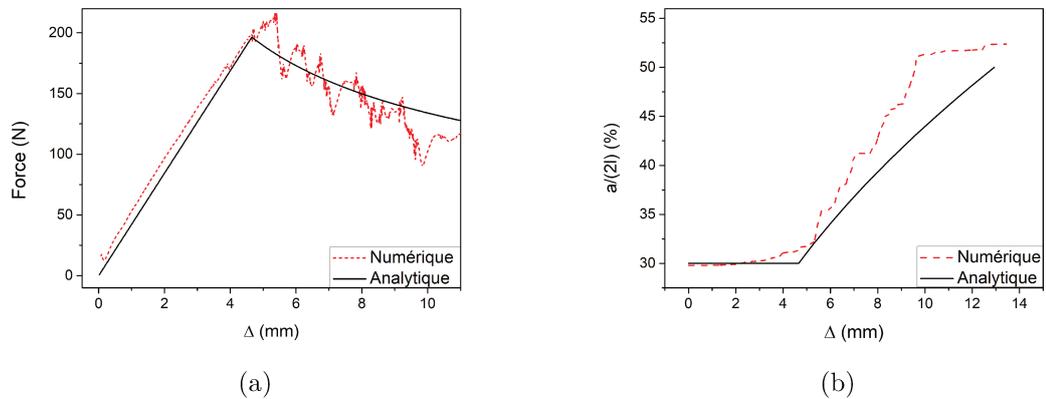


Figure III.14 – (a) Courbes force/déplacement, (b) Courbes longueur de la fissure/déplacement associées à l’essai MMB

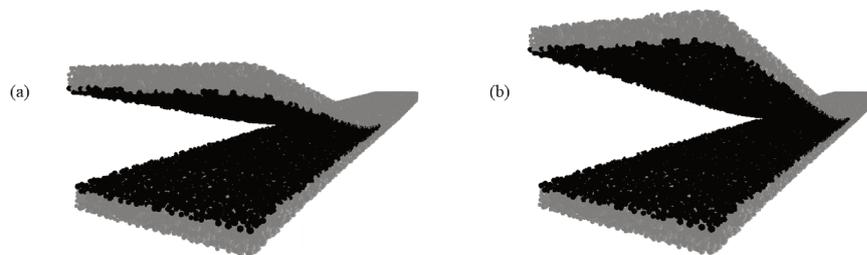


Figure III.15 – Propagation de la fissure à (a)  $\Delta = 5$  mm et (b)  $\Delta = 7$  mm

### III.3.2 Application de la décohésion interfaciale au PA6/GF30

#### III.3.2.1 Modèle de VER mono-fibre du PA6/GF30

Après avoir modélisé le processus de délamination en mode I, mode II et mode mixte (I+II) dans le cadre des essais normalisés (DCB, ELS et MMB), notre objectif dans cette partie est de mettre en œuvre le modèle par éléments discrets afin de traiter le problème de la décohésion interfaciale du composite PA6/GF30. Ainsi et dans un premier temps, nous modélisons le PA6/GF30 par une seule fibre de verre UD noyée dans une matrice de PA6. La géométrie du VER et la configuration de chargement sont illustrées sur la figure III.16(a). L’échantillon est une poutre de section carrée  $1\text{mm} \times 1\text{mm}$  et de longueur  $l = 5$  mm composée de 200 000 particules (Figure III.16(b)). Dans le but de respecter une fraction volumique de fibres dans le composite de 15,7%, le

diamètre de la fibre de verre unique est fixé à  $d = l/11$ . En outre, nous

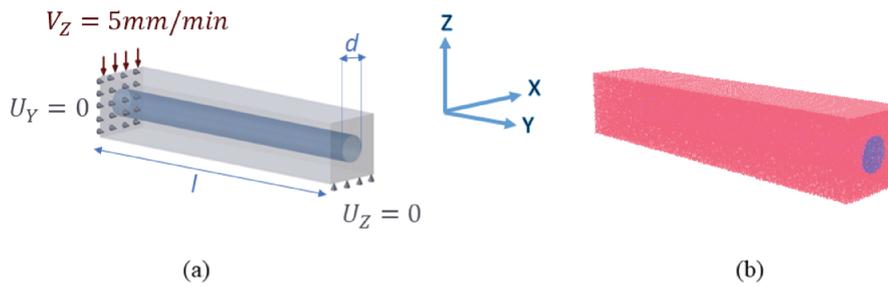


Figure III.16 – (a) Configuration et conditions aux limites appliquées au VER du composite mono-fibre, (b) Modèle ED correspondant

considérons les paramètres microscopiques  $E_\mu$  et  $r_\mu$  définis à la sous-section III.2.3 pour les matériaux PA6 et GF30. Le modèle de zone cohésive en mode mixte présenté à la sous-section III.3.1.3 est utilisé dans le milieu hétérogène entre la matrice et la fibre afin de simuler la décohésion interfaciale pendant un essai de flexion 3 points. À noter que dans notre cas, aucune préfissure n'est considérée ; de surcroît, la rupture n'est restreinte qu'à l'interface fibre-matrice. L'essai de flexion est effectué à l'aide d'une configuration symétrique où seule une moitié de la poutre est modélisée, comme le montre la Figure III.16(a). Les conditions aux limites sont les suivantes : l'échantillon est en appui simple au niveau du bord inférieur droit et une vitesse constante égale à 5mm/min est imposée le long de la direction  $Z$  sur le bord supérieur. D'après des études préliminaires [177], les contraintes interfaciales sont fixées à  $\tau^{max} = 2,496 \cdot 10^4$  MPa et  $\sigma^{max} = 6,24 \cdot 10^3$  MPa. En raison d'un manque de données expérimentales, les valeurs de  $G_{Ic}$  et  $G_{IIc}$  sont celles d'un composite époxy renforcé par des fibres de verre tels que :  $G_{Ic} = G_{IIc} = 0,5$  N/mm [113]. La Figure III.17(a) représente l'évolution de la force en fonction du déplacement dans la direction  $Z$ . Les résultats montrent que la force évolue de manière linéaire reflétant le comportement élastique du matériau jusqu'à atteindre une valeur de 7,684 N pour un déplacement correspondant de 0,238 mm. À partir de cette valeur, un adoucissement du comportement apparaît, indiquant le début du processus d'endommagement. Cette étape est caractérisée par l'apparition de la décohésion en haut et en bas de la fibre sur le bord droit de l'échantillon. Ensuite, la décohésion interfaciale évolue longitudinalement le long de la zone de contact entre la fibre et la matrice. À partir de ce stade, on observe un changement de pente pour une force de 8 N correspondant à un déplacement de 0,419 mm. La transmission de la force de la matrice à la fibre est alors limitée à une zone plus petite régie par des liens interfaciaux non-endommagés qui

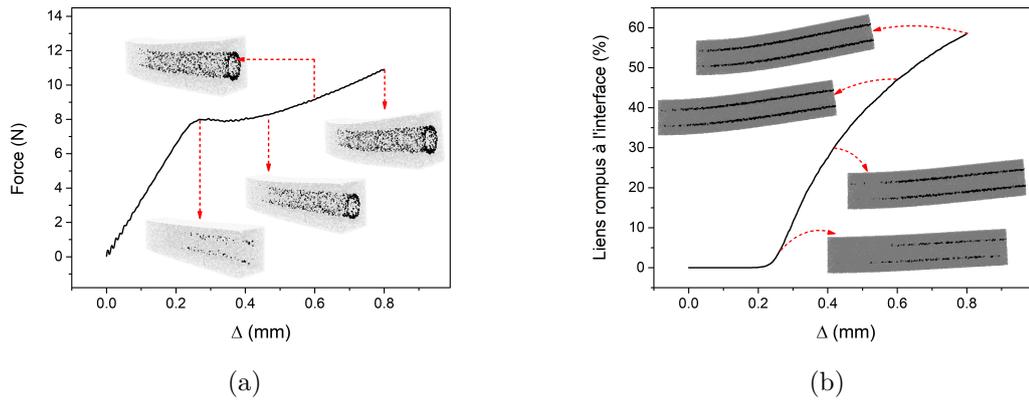


Figure III.17 – (a) Courbe force/déplacement et motifs de décohésion du composite mono-fibre, (b) Courbe longueur de fissure/déplacement et zone de décohésion du composite mono-fibre.

nécessitent plus d'énergie avant de se rompre. Ainsi, la force augmente à nouveau jusqu'à une valeur de 10,910 N pour laquelle le processus de décohésion des fibres atteint presque l'extrémité gauche de l'échantillon. Ce comportement a été observé par Garcia et al. [189] dans le cas de la décohésion fibre/matrice d'un alliage d'aluminium 2124 renforcé par des whiskers de SiC sous traction transversale. Les auteurs ont relié la non-linéarité post-pic à l'évolution de la décohésion à l'interface. Ils ont également mentionné que le rayon des fibres ainsi que leur fraction volumique affectent la réponse non linéaire force/déplacement. La Figure III.17(b) illustre l'évolution du taux de liens rompus à l'interface en fonction du déplacement dans la direction Z ainsi que la surface de décohésion pour un plan de coupe à  $X = 0,5$  mm. Les résultats montrent que l'endommagement apparaît pour un déplacement égal à 0,201 mm qui est assez proche de la valeur associée au pic de la force locale à la fin de la phase élastique. Par conséquent, plus le déplacement est important, plus le nombre de liens rompus à l'interface est élevé. Ainsi, le processus de rupture évolue jusqu'à ce que 58,482% des liens interfaciaux soient rompus, ce qui correspond à un déplacement de 0,800 mm. Les simulations ED sont limitées à 80% du déplacement par rapport à la longueur du système étudié. Le choix de ce critère est principalement justifié par la nécessité de rester dans une échelle réelle de déplacement.

### III.3.2.2 Modèle de VER multi-fibres du PA6/GF30

Afin d'améliorer la représentativité du modèle numérique du matériau composite PA6/GF30, nous considérons le cas d'un composite renforcé par des

fibres courtes alignées. Comme le montre la Figure III.18 et sur la base des hypothèses discutées à la sous-section III.2.4, un VER cubique ( $1\text{mm}\times 1\text{mm}\times 1\text{mm}$ ) est généré à partir duquel un sous-volume élémentaire parallélépipédique ( $0.1\text{mm}\times 1\text{mm}\times 0.1\text{mm}$ ) est extrait. Il faut toutefois préciser que le RE lié au modèle ED a évolué de 1,5 à 3 pour augmenter le nombre de fibres, selon leur axe longitudinal dans le sous-volume élémentaire, et répondre aux hypothèses de représentativité. Un essai de flexion trois points est effectué le

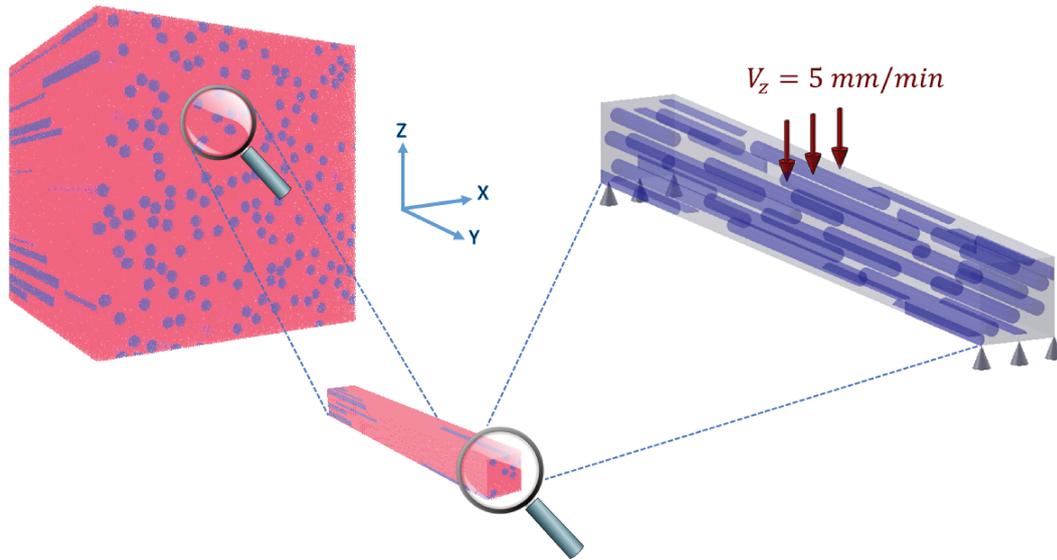


Figure III.18 – Configuration et conditions aux limites associées au composite multi-fibres

long de la direction Z en utilisant un échantillon composé de 400 000 ED et les conditions aux limites décrites sur la Figure III.18. À titre indicatif, le nombre d'ED est volontairement fixé à 400 000 particules afin d'assurer un bon compromis entre la précision des résultats numériques et le temps de calcul. Les simulations ED sont effectuées en utilisant les mêmes propriétés matérielles que celles définies précédemment dans le cas du modèle à une seule fibre, sauf que  $\tau^{max}$  et  $\sigma^{max}$  sont augmentés à  $4,992.10^4$  MPa et  $1,248.10^4$  MPa respectivement pour détecter les différents stades de dégradation. La Figure III.19(a) illustre l'évolution de la force en fonction du déplacement dans la direction Z. Les résultats numériques révèlent que, comme observé dans le cas du modèle à une seule fibre, la force se développe linéairement avec quelques effets de décohesion prématurée sur les bords de l'échantillon jusqu'à ce qu'elle atteigne 0,502 N pour un déplacement correspondant de 0,045 mm. A ce stade, le taux de liens rompus à l'interface commence à augmenter (Figure III.19(b)) et plus le déplacement est important, plus le taux de liens rompus à l'interface est élevé. La décohesion interfaciale évolue progressivement depuis les deux extrémités de l'échantillon

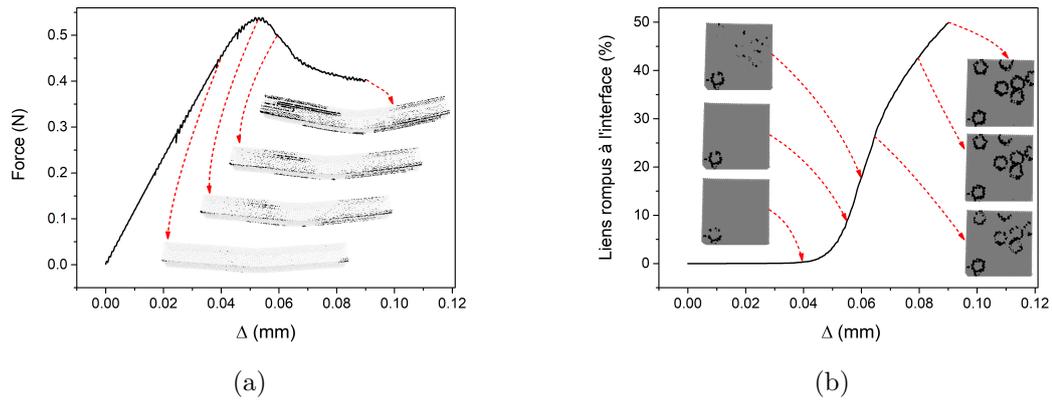


Figure III.19 – (a) Courbe force/déplacement et motifs de décohésion du composite multi-fibres, (b) Courbe longueur de fissure/déplacement et zone de décohésion (plan de coupe  $Y = 1$  mm) du composite multi-fibres.

jusqu'à ce qu'elle atteigne son plan médian pour 49,89% des liens rompus à l'interface. À un déplacement de 0,055 mm qui correspond à une force de 0,528 N, un stade de saturation apparaît où la matrice n'est plus capable de transmettre les efforts au renfort. Ce phénomène est dû à l'endommagement induit par la multiplication du nombre de fibres totalement ou partiellement détachées de la matrice. Ainsi, contrairement au cas mono-fibre, la force décroît de façon continue jusqu'à la rupture du matériau. De plus, on peut remarquer que le niveau de la force détecté dans le cas mono-fibre est différent de celui que l'on obtient dans le cas multi-fibres. Nous supposons que cette différence est probablement liée à la variation des configurations étudiées ainsi qu'aux dimensions des échantillons utilisés dans chaque test. De plus, cette différence peut être expliquée par l'influence des mécanismes d'adhésion à l'interface fibre/matrice. Dans le cas d'un composite à une seule fibre, l'interface fibre/matrice est initialement répartie sur toute la longueur de l'échantillon. Cela engendre une résistance potentiellement plus élevée durant le processus de décohésion interfaciale. Ainsi, les zones saines de l'interface continuent à transmettre la force de la matrice vers le renfort durant la décohésion. Cela peut justifier la reprise de charge observée dans le cas d'un composite à une seule fibre. D'autre part, les zones interfaciales dans le cas du composite multi-fibres sont liées à la longueur finie des fibres courtes, c'est-à-dire qu'elles sont limitées en taille par rapport à la longueur de l'échantillon. Cela réduit la capacité des liens interfaciaux non-endommagés pendant le processus de décohésion à assurer le transfert de la force entre la matrice et les fibres. Sur la base de ces résultats, nous pouvons conclure que le modèle ED développé est approprié pour simuler

le processus de décohésion à l'interface fibre/matrice du PA6/GF30 lors d'un essai de flexion 3 points.

### III.4 Conclusion

Dans ce chapitre, une approche discrète basée sur un modèle cohésif de type poutre est introduite dans le contexte des fibres de verre courtes. L'approche mise en place a été appliquée au cas du PA6/GF30 pour la prédiction de son comportement mécanique et endommagement interfacial. Les résultats numériques, en termes de propriétés élastiques effectives, sont en bon accord avec les modèles micromécaniques et les données expérimentales. Ainsi, nous pouvons conclure que le modèle proposé est tout à fait approprié pour modéliser les SFRC et pour simuler leur comportement élastique, ce qui constitue l'une des originalités de ce travail. Ensuite, un modèle de zone cohésive discret a été discuté et validé dans le cas d'essais de délamination en mode I, mode II et mode mixte (I+II) en prévision de la prise en compte du processus de décohésion interfacial dans le PA6/GF30. Des résultats en adéquation avec une solution analytique ont été obtenus dans chaque cas. Ainsi, le modèle discret s'avère pertinent pour simuler des problèmes mécaniques où interviennent des effets de décohésion. De plus, les résultats montrent que, contrairement aux approches analytiques qui sont trop parfaites, la MED est capable de modéliser certains effets liés à l'instabilité de la délamination à l'échelle de l'interface. Enfin, le processus de décohésion au sein du PA6/GF30 sous chargement de flexion 3 points a été étudié à travers deux configurations : une fibre de verre UD unique noyée dans la matrice de PA6 et un modèle de fibres courtes alignées. Certaines différences en terme de courbe force/déplacement ont été mises en évidence et discutées entre les deux configurations. En effet un phénomène de reprise d'effort a été détecté seulement dans le cas de modèle de VER mono-fibre du PA6/GF30. Ce dernier serait potentiellement lié aux mécanismes d'adhésion fibre/matrice. Toutefois, des recherches approfondies doivent être envisagées pour une meilleure compréhension de ce phénomène.

Etant donné que le PA6/GF60 présente une matrice à caractère hydrophile, le PA6, le matériau va absorber de l'humidité du fait de la présence de fonctions polaires tout en affectant les liaisons chimiques du polyamide. Ainsi, l'eau absorbée va s'accumuler à l'interface fibre/matrice et conduire à une diminution significative des propriétés mécaniques. Pour ces raisons, notre objectif dans le prochain chapitre est d'intégrer des paramètres hygrothermiques dans le modèle

interfacial développé afin de simuler le comportement et l'endommagement du matériau composite PA6/GF30 sous des conditions environnementales hygrothermiques.

# Chapitre IV

## Modélisation par la MED du couplage hygro-thermo-mécanique dans le composite PA6/GF30

### Sommaire

---

IV.1 Introduction . . . . .	90
IV.2 Modélisation du transfert hygrothermique dans un matériau homogène . . . . .	90
IV.2.1 Modélisation du transfert thermique . . . . .	90
IV.2.2 Modélisation du transfert hydrique . . . . .	92
IV.2.3 Modèle de couplage hygrothermique . . . . .	93
IV.2.4 Étude du séchage d'aluminate de magnésium . . . . .	95
IV.3 Simulation par la MED des transferts hygrothermiques sous conditions environnementales par laMED dans un matériau hétérogène : le PA6/GF30 . . . . .	104
IV.4 Modélisation du gonflement hygroscopique et validation dans le cadre d'un matériau homogène PA6 . . . . .	113
IV.4.1 Modèle de gonflement hygroscopique . . . . .	113
IV.4.2 Validation dans le cadre d'un matériau homogène PA6	114
IV.5 Modélisation du gonflement hygroscopique et de l'endommagement induit dans un matériau hétérogène . . . . .	116
IV.5.1 Champs de contrainte et de déplacement dans le cadre du PA6/GF30 . . . . .	116
IV.5.2 Décohésion interfaciale induite par gonflement hygroscopique : Application au PA6/GF30 . . . . .	120
IV.6 Conclusion . . . . .	123

---

## IV.1 Introduction

L'établissement de modèles numériques permettant de prévoir le comportement et l'endommagement à long terme des matériaux composites à matrice thermoplastiques avec des renforts et/ou charges minérales est un enjeu important pour les concepteurs et les utilisateurs. L'optimisation des performances des structures nécessite des modèles de plus en plus fiables, prenant en compte l'ensemble des sollicitations subies et des dégradations induites avec leur mode de propagation en service. Dans cette optique, une approche basée sur la MED est développée pour modéliser le couplage hygro-thermo-mécanique dans un matériau composite à fibres courtes PA6/GF30. Tout d'abord, la modélisation du transfert hygrothermique dans un matériau homogène est discutée. L'étude est focalisée sur un essai de séchage d'aluminate de magnésium. Des comparaisons avec la MEF en termes d'évolution de la masse d'eau, de concentration et de gradient de concentration sont présentées. Ensuite, le modèle proposé est appliqué dans le contexte d'un processus d'absorption d'eau dans un matériau hétérogène PA6/GF30. Une comparaison avec la MEF est également effectuée afin de mettre en évidence la capacité du modèle ED à modéliser les phénomènes hygrothermiques dans le PA6/GF30. En outre, un modèle de gonflement hygroscopique est introduit puis validé par des comparaisons EF-ED dans le cadre d'un matériau homogène PA6 et hétérogène PA6/GF30. Enfin, l'endommagement d'origine interfaciale dans le PA6/GF30 induit par gonflement hygroscopique est pris en compte. Dans ce contexte, les champs de contrainte et de déplacement ainsi que les motifs de décohésion sont présentés.

## IV.2 Modélisation du transfert hygrothermique dans un matériau homogène

### IV.2.1 Modélisation du transfert thermique

Le phénomène de transfert de chaleur par conduction, induit par une différence de température entre deux zones d'un même milieu isotrope, est modélisé classiquement par la loi de Fourier [190] :

$$\frac{dT}{dt} = D_t \nabla^2 T \quad (\text{IV.1})$$

où  $T$  (K) est la température absolue,  $t$  (s) est le temps et  $D_t$  ( $m^2.s^{-1}$ ) est la diffusivité thermique du matériau.

L'approche discrète mise en œuvre pour modéliser le transfert thermique dans un matériau homogène utilise le concept d'Élément Représentatif (ER) associé à chaque particule du système particulaire. Il est ainsi nécessaire de définir les caractéristiques effectives de chaque ER telles que son volume et sa surface de transmission de chaleur. À noter que dans notre cas, nous ne nous intéressons pas à la forme de cet ER. Cependant, le volume de chaque ER est défini afin de vérifier la conservation de masse de telle sorte que la somme des volumes de tous les ER soit égale au volume du matériau homogène étudié. Pour satisfaire cette condition, la masse volumique de chaque Élément Discret (ED) est ajustée à la masse volumique de l'ER correspondant au moyen de la fraction volumique  $\phi$  du système particulaire comme suit :

$$\mu_d = \frac{\mu_c}{\phi} \quad (\text{IV.2})$$

où  $\mu_d$  ( $Kg.m^{-3}$ ) et  $\mu_c$  ( $Kg.m^{-3}$ ) sont respectivement les masses volumiques du système particulaire et du matériau homogène.

Le flux de chaleur  $Q_{m,n}$  transmis par la surface de transmission  $S_{m,n}^t$  entre deux ER (Figure IV.1) associés respectivement aux particules  $m$  et  $n$  en contact, est donné par :

$$Q_{m,n} = H_c^{m,n}(T_n - T_m) \quad (\text{IV.3})$$

où  $T_m$ ,  $T_n$  sont respectivement les températures des ED  $m$ ,  $n$  et  $H_c^{m,n}$  est le coefficient de conductivité thermique :

$$H_c^{m,n} = \frac{\lambda S_{m,n}^t}{d_{m,n}} \quad (\text{IV.4})$$

avec  $\lambda$  la conductivité thermique du matériau et  $d_{m,n}$  la distance centre à centre des ED  $m$  et  $n$ . Ainsi, l'équation de transfert de chaleur pour chaque ED est donnée par :

$$C_m^d \frac{dT_m}{dt} = Q_m + \sum_{n=1}^{n_m} Q_{m,n} \quad (\text{IV.5})$$

avec

$$C_m^d = \mu_c C_p V_m / \phi \quad (\text{IV.6})$$

où  $Q_m$  représente le flux thermique externe imposé à la particule  $m$ ,  $n_m$  est le nombre de particules en contact avec la particule  $m$ ,  $V_m$  est le volume de la particule  $m$  et  $C_p$  représente la chaleur spécifique du matériau représentatif. La

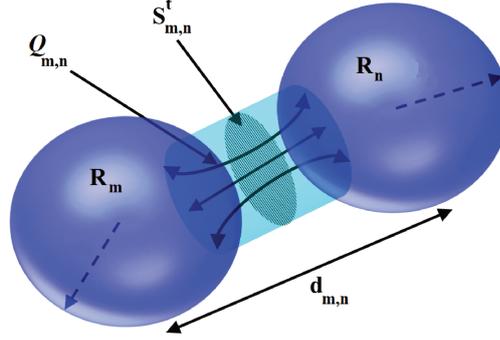


Figure IV.1 – Modèle de transfert thermique par conduction à l'échelle du contact particulaire

discrétisation temporelle de l'équation IV.5 grâce à un schéma d'intégration explicite est donnée par l'équation suivante :

$$T_m^{t+\Delta t} = T_m^t + \frac{\phi \Delta t}{\mu_c C_p V_m} \underbrace{\left[ Q_m + \sum_{n=1}^{n_m} \frac{\lambda S_{m,n}^t}{d_{m,n}} (T_n^t - T_m^t) \right]}_{Q_m^{tot}} \quad (\text{IV.7})$$

où  $\Delta t$  est le pas de temps.

Afin de vérifier le critère de stabilité numérique lors de la résolution du problème thermique, un pas de temps critique a été déterminé selon l'équation suivante [191] :

$$\Delta t_{crit}^{thermique} = \frac{2(d_{m,n}^{min})^2}{3D_t n_m C_t} \quad (\text{IV.8})$$

avec

$$D_t = \frac{\phi \lambda}{\mu_c C_p} \quad (\text{IV.9})$$

où  $d_{m,n}$  est la distance minimale centre à centre des ED  $m$  et  $n$  et  $C_t$  est un coefficient adimensionnel permettant d'ajuster la surface de transmission entre les deux ER en contact [191].

## IV.2.2 Modélisation du transfert hydrique

Le transfert de l'eau sous forme liquide dans un matériau donné se produit par un mécanisme de diffusion en raison de la différence entre l'humidité relative du matériau et celle du milieu environnant. En effet, l'eau migre de la surface de l'échantillon vers son centre lors d'un processus d'absorption d'eau et de manière inverse lors d'une opération de séchage. Dans les deux cas, le transport d'eau interne en milieu poreux est décrit par la loi de Fick [192], dans laquelle le flux

d'eau est proportionnel au gradient de concentration d'eau :

$$\frac{dC}{dt} = D_w \nabla^2 C \quad (\text{IV.10})$$

où  $C$  ( $\text{mol.m}^{-3}$ ) est la concentration de l'eau et  $D_w$  ( $\text{m}^2.\text{s}^{-1}$ ) est le coefficient de diffusion massique. Par analogie au schéma d'intégration utilisé pour le transfert thermique, la discrétisation temporelle dans le cas du transfert hydrique est la suivante :

$$C_m^{t+\Delta t} = C_m^t + \frac{\phi \Delta t}{V_m} \underbrace{\left[ Q_C + \sum_{n=1}^{n_m} \frac{S_{m,n}^t D_w}{d_{m,n}} (C_n^t - C_m^t) \right]}_{Q_C^{tot}} \quad (\text{IV.11})$$

où  $\Delta t$  est le pas de temps,  $C_m^t$  et  $C_m^{t+\Delta t}$  sont respectivement les concentrations associées à la particule  $m$  aux instants  $t$  et  $t + \Delta t$ ,  $\phi$  est la fraction volumique du système particulaire,  $V_m$  est le volume de la particule  $m$ ,  $Q_C$  décrit le flux de masse externe appliqué à  $m$ . Ce schéma explicite est contrôlé par un pas de temps critique (Équation IV.12) afin d'assurer la stabilité de la résolution par la MED.

$$\Delta t_{crit}^{massique} = \frac{2(d_{m,n}^{min})^2}{3\phi D_w n_m C_t} \quad (\text{IV.12})$$

### IV.2.3 Modèle de couplage hygrothermique

Le vieillissement hygrothermique nécessite un transfert couplé de matière (vapeur d'eau) et de chaleur afin de favoriser le mécanisme d'absorption d'eau nécessaire au sein du matériau. Ce couplage assure l'évolution de la pression partielle de vapeur d'eau à la surface d'échange du matériau avec la température. En effet, les échanges entre la surface du matériau et l'air s'effectuent par diffusion, à travers la couche limite laminaire équivalente dans l'air située à la surface du matériau (Figure IV.2). Ces échanges par diffusion sont pris en compte via deux coefficients de transferts convectifs  $h$  ( $\text{W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$ ) pour la chaleur, et  $k$  ( $\text{m.s}^{-1}$ ) pour la matière. Le débit de transfert de chaleur vers la surface dépend de la différence de température, de la surface d'échange et du coefficient de convection généralement forcée (dépend principalement de la vitesse d'air). Suite à un contact de la surface du matériau avec l'air, une couche limite se forme, laquelle est d'autant plus mince que la vitesse du flux d'air est importante. Dans cette couche on a deux flux simultanés de chaleur et de matière, d'une part le flux thermique de surface  $Q_T$  ( $\text{W.m}^{-2}$ ) qui s'exprime comme suit :

$$Q_T = h(T_{ext} - T_s) + D_w M_w L_w \nabla C \quad (\text{IV.13})$$

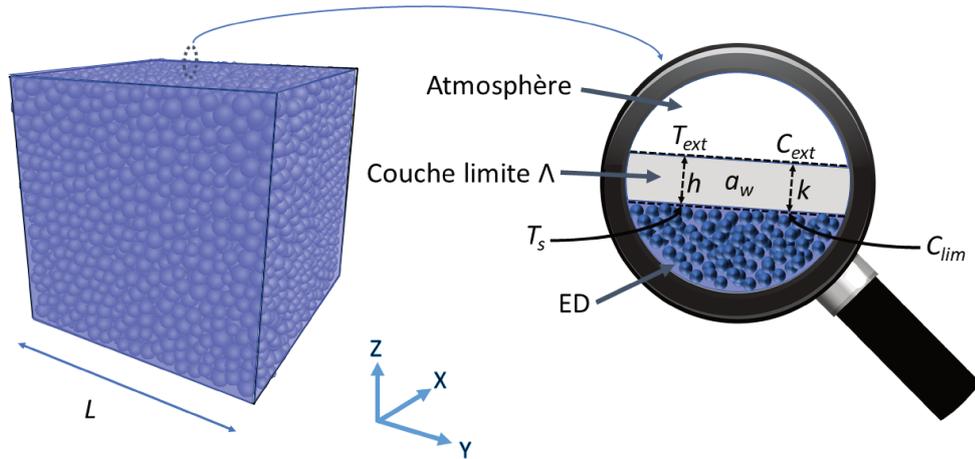


Figure IV.2 – Échange hygrothermique du matériau avec l’atmosphère à travers la couche limite

où  $M_w$  ( $kg.mol^{-1}$ ) est la masse molaire de l’eau et  $L_w$  ( $J.kg^{-1}$ ) est la chaleur latente de vaporisation d’eau, et d’autre part le flux de transfert hydrique  $Q_C$  ( $mol.s^{-1}.m^{-2}$ ) dont l’expression est la suivante :

$$Q_C = k(C_{ext} - C_{lim}) \quad (IV.14)$$

où  $C_{ext}$  ( $mol.m^{-3}$ ) et  $C_{lim}$  ( $mol.m^{-3}$ ) sont respectivement la concentration d’eau dans l’air et dans la couche limite. Ces dernières sont déterminées à l’aide de la loi des gaz parfaits :

$$C_{lim} = a_w \frac{P_0(T_s)}{RT_s} \quad (IV.15)$$

$$C_{ext} = H_R \frac{P_0(T_{ext})}{RT_{ext}} \quad (IV.16)$$

où  $P_0$  ( $Pa$ ) est la pression de vapeur d’eau de saturation des molécules d’eau totalement libres à la température de la surface de l’échantillon  $T_s$  estimée par la formule de Rankine,  $R$  est la constante des gaz parfaits et  $H_R$  est l’humidité relative du milieu.  $a_w$  est l’activité de l’eau laquelle se définit au niveau de la couche limite  $\Lambda$  comme l’humidité relative au sein du matériau.

$$a_w = \frac{P_\Lambda}{P_0} \quad (IV.17)$$

avec  $P_\Lambda$  ( $Pa$ ) la pression de vapeur d’eau dans la couche limite  $\Lambda$  en équilibre avec la surface du matériau humide. Concernant l’activité de l’eau  $a_w$ , il est

possible de la déterminer expérimentalement par la méthode de Sorption Dynamique de Vapeur (DVS) [193]. Une étude menée dans [194, 195] a montré que l'activité de l'eau peut être reliée à la teneur en eau  $X$  à travers les isothermes de sorption. L'identification des paramètres de transfert d'eau est toutefois difficile à réaliser lorsque les deux procédés de transfert de chaleur et de masse doivent simultanément être pris en compte. Afin de relier les paramètres  $k$  et  $h$ , on introduit un terme de couplage entre les coefficients des transferts de masse et de chaleur, appelé le nombre de Lewis ( $Le_f$ ) dont l'expression est la suivante :

$$Le_f = \frac{h}{kC_{pa}\mu_a} \quad (\text{IV.18})$$

où  $C_{pa}$  ( $J.kg^{-1}.K^{-1}$ ) est la capacité thermique de l'air et  $\mu_a$  ( $kg.m^{-3}$ ) est sa masse volumique. Un nombre de Lewis égal à 1 indique que la couche limite thermique et le transfert de masse par diffusion se développent d'une façon similaire et que les couches limites de température et de concentration se confondent presque.

## IV.2.4 Étude du séchage d'aluminate de magnésium

### IV.2.4.1 Mise en place du modèle

Dans la partie précédente, nous avons présenté une démarche permettant la résolution dans le domaine transitoire d'un problème hygrothermique pour un matériau homogène soumis à des gradients thermique et hydrique. Comme cadre applicatif, nous considérons maintenant les travaux expérimentaux réalisés sur une brique de spinelle d'aluminate de magnésium par Lallement et al. [194]. Le problème proposé est celui du séchage convectif d'un échantillon composé de  $10^5$  ED ayant une forme cubique de côté  $L = 23,45$  mm. L'échantillon est déposé dans un four à un taux d'humidité de 75% où toutes les faces sont exposées au séchage (Figure IV.3). À l'état initial, l'échantillon présente une concentration en eau de  $14200 \text{ mol}.m^{-3}$ . La température initiale de l'échantillon et du four est fixée à  $20^\circ\text{C}$ . Une élévation de température du four est ensuite appliquée de  $20$  à  $80^\circ\text{C}$  selon une rampe linéaire de  $10^\circ\text{C}/\text{h}$ , puis maintenue constante à  $80^\circ\text{C}$  pour le reste de l'essai (Figure IV.3). Il faut noter que le milieu à modéliser est un milieu poreux comportant les trois états de la matière (solide, liquide et gazeux). Il faut donc tenir compte de ces trois états à l'échelle du volume représentatif  $\Gamma_m$  de l'ER associé à chaque ED  $m$ . Par conséquent, un travail d'identification des paramètres, basé sur un certain nombre d'hypothèses, a été préalablement établi

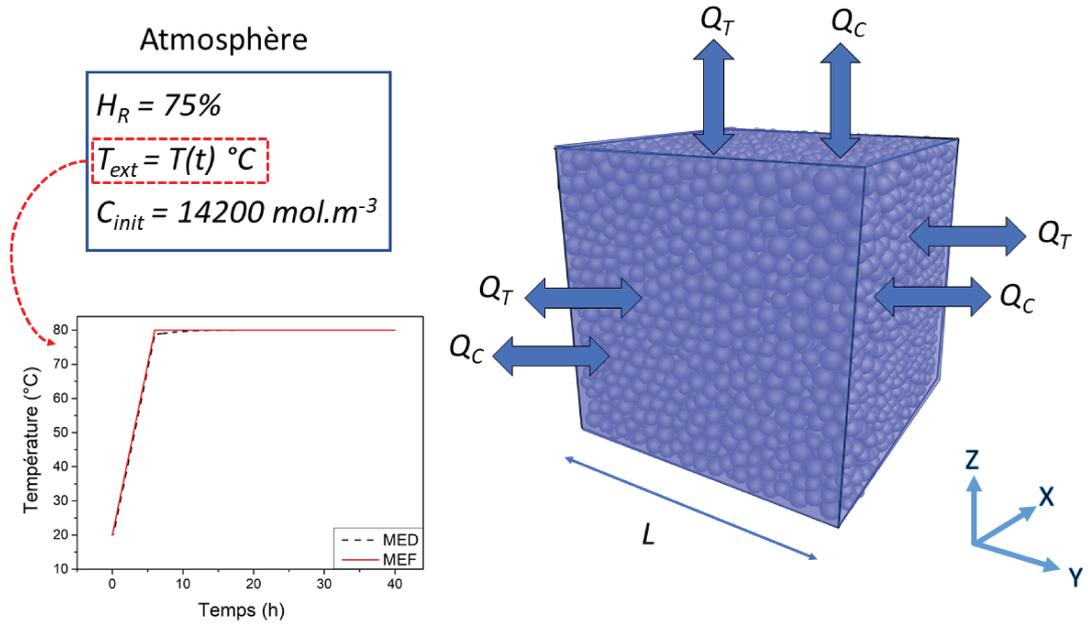


Figure IV.3 – Conditions hygrothermiques appliquées à l'échantillon cubique durant le processus de séchage

par Alhadj Hassan [196] afin de déterminer les propriétés de chaque ER et de son volume  $\Gamma_m$ . Selon cette étude, la masse volumique  $\mu_m^t$  d'un ED  $m$  à un instant  $t$  est donnée par l'expression suivante :

$$\mu_m^t \approx \mu_s(1 - p) + C_m^t M_w \quad (\text{IV.19})$$

où  $\mu_s$  est la masse volumique de la phase solide,  $p$  est la porosité et  $C_m^t$  est la concentration d'eau associée à chaque ED  $m$  à un instant  $t$ . D'autre part, la conductivité thermique effective  $\lambda_m^t$  est exprimée par :

$$\lambda_m^t \approx \lambda_s(1 - p) \quad (\text{IV.20})$$

où  $\lambda_s$  est la conductivité thermique de la phase solide de l'échantillon. Concernant la capacité thermique  $C_{pm}^t$  de l'ED  $m$ , elle est définie par :

$$C_{pm}^t \approx C_{ps} \frac{\mu_s(1 - p)}{\mu_m^t} + C_{pw} \frac{C_m^t M_w}{\mu_m^t} \quad (\text{IV.21})$$

où  $C_{ps}$  et  $C_{pw}$  sont respectivement les capacités thermiques des phases solide et liquide. Enfin, la teneur en eau à un instant  $t$ , définie comme étant la quantité d'eau liquide contenue dans un échantillon de matière, est quantifiée comme suit :

$$X(t) = \frac{m_{tot}(t) - m_{sec}}{m_{sec}} \quad (\text{IV.22})$$

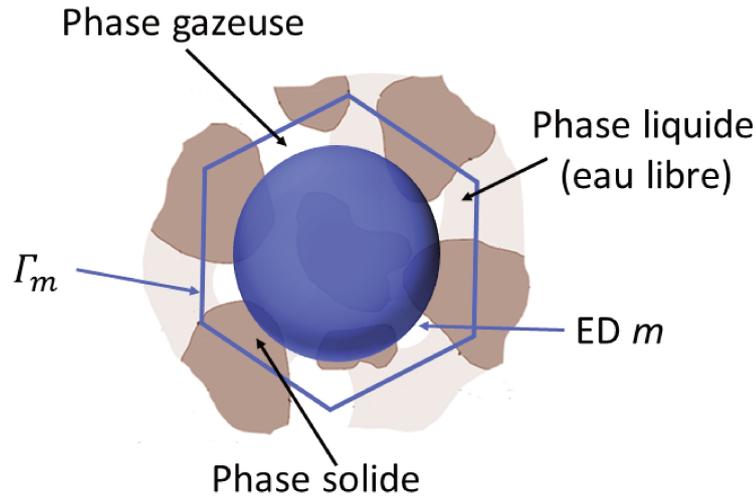


Figure IV.4 – Représentation schématique des trois phases constitutives du milieu modélisé

où  $m_{tot}(t)$  désigne la masse totale de l'échantillon à l'instant  $t$  et  $m_{sec}$  représente la masse de l'échantillon sec. À l'échelle de l'ED, cette quantité est obtenue par la formule suivante :

$$X_m^t = \frac{C_m^t M_w}{(1-p)\mu_s} \quad (IV.23)$$

Compte tenu de l'activité de l'eau  $a_w$ , nous avons choisi d'utiliser la formule simplifiée d'Oswin [197].

$$a_w = \left[ 1 + \left( \frac{A}{X} \right)^B \right]^{-1} \quad (IV.24)$$

où  $A$  et  $B$  sont deux paramètres d'ajustement dont leurs valeurs doivent être identifiées expérimentalement. Dans les travaux de Lallement [194],  $A$  et  $B$  sont respectivement fixés à 0,008 et 0,48 pour l'échantillon d'aluminate de magnésium. Le reste des valeurs des paramètres utilisés pour les simulations sont données dans le Tableau IV.1.

#### IV.2.4.2 Méthodologie de calibration de la surface de transmission

Afin d'assurer la continuité du milieu à l'échelle microscopique, les propriétés et les paramètres locaux dans le cas d'une approche discrète doivent être corrélés aux propriétés macroscopiques. Pour satisfaire cette condition, l'estimation de la surface de transmission de la chaleur entre deux particules en contact est obtenue par calibration. Ce choix est moins coûteux comparé aux approches basées sur la génération d'ER à partir d'une décomposition Voronoï du domaine [198]. Ce processus de calibration assure également la conservation de la masse contrairement à l'approche utilisant les solides platoniques [199]. Dans

Paramètre	Symbole	Valeur
Capacité thermique de l'eau ( $J.Kg^{-1}.K^{-1}$ )	$C_{pw}$	4 180
Capacité thermique de l'aire ( $J.Kg^{-1}.K^{-1}$ )	$C_{pa}$	710
Capacité thermique du solide ( $J.Kg^{-1}.K^{-1}$ )	$C_{ps}$	830
Conductivité thermique du solide ( $W.m^{-1}.K^{-1}$ )	$\lambda_s$	7
Masse volumique de l'air ( $kg.m^{-3}$ )	$\mu_a$	1,2
Masse volumique du solide ( $kg.m^{-3}$ )	$\mu_s$	3 580
Masse molaire de l'eau ( $Kg.mol^{-1}$ )	$M_w$	$18.10^3$
Chaleur latente ( $J.kg^{-1}$ )	$L_w$	$2,3.10^6$
Coefficient de diffusion massique ( $m^2.s^{-1}$ )	$D_w$	$10^{-6}$
Coefficient de transfert thermique ( $W.m^{-2}.K^{-1}$ )	$h$	40
Porosité (%)	$p$	60

Tableau IV.1 – Paramètres utilisés dans la simulation numérique du séchage d'aluminate de magnésium

notre cas, la conductivité thermique du milieu équivalent dépend de la surface de transmission  $S_{m,n}^t$  entre deux ER. Nous avons choisi de corréliser  $S_{m,n}^t$  à un coefficient  $C_t$ , sans aucun effet dimensionnel, et une surface  $S_{m,n} = \pi R_{moy}^2$ , où  $R_{moy}$  est le rayon moyen des particules en contact, de sorte que l'expression de  $S_{m,n}^t$  soit :

$$S_{m,n}^t = C_t S_{m,n} \quad (IV.25)$$

Le coefficient  $C_t$  doit être calibré afin d'obtenir une égalité entre la conductivité thermique du matériau (macroscopique) et celle considérée à l'échelle du contact (microscopique). À cet effet, une densité de flux de chaleur  $\varphi$  ( $10^{-2}W.m^{-2}$ ) est appliquée à la surface droite d'un échantillon cubique de côté  $L$ , dans la direction  $Y$  tandis qu'une température constante  $T_0$  est appliquée à la surface gauche (Figure IV.5). Pour des raisons de simplicité, un coefficient  $C_t$  arbitraire  $C_t^{arb}$  fixé à 1 est initialement considéré dans nos calculs. À l'état stationnaire, une différence de température  $\Delta T$  est déterminée à la surface droite de l'échantillon et la Conductivité Thermique Effective (CTE) du matériau  $\lambda^e$  est donc déduite de l'équation suivante :

$$\lambda^e = \frac{\varphi L}{\Delta T} \quad (IV.26)$$

Enfin, le coefficient  $C_t$  est déterminé à partir de l'égalité suivante :

$$\frac{C_t}{C_t^{arb}} = \frac{\lambda}{\lambda^e} \quad (IV.27)$$

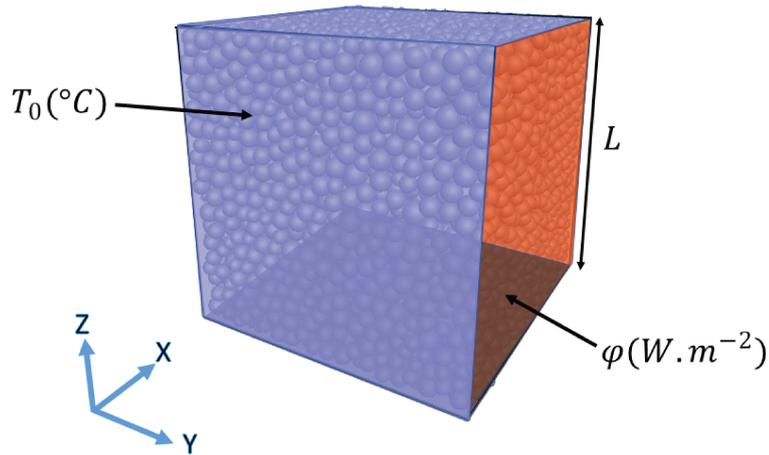


Figure IV.5 – Identification de la Conductivité Thermique Effective (CTE) par la MED

Ce processus de calibration est effectué pour une large gamme de densité allant de  $10^4$  à  $3.10^6$  ED et pour un nombre de coordination  $Z$  fixé à 8,2. La Figure IV.6 montre que le coefficient  $C_t$  augmente proportionnellement par rapport aux nombres d'ED et passe de 0,701 à 0,758 dans l'intervalle de densité étudié. Si on reproduit le même processus de calibration mais cette fois en

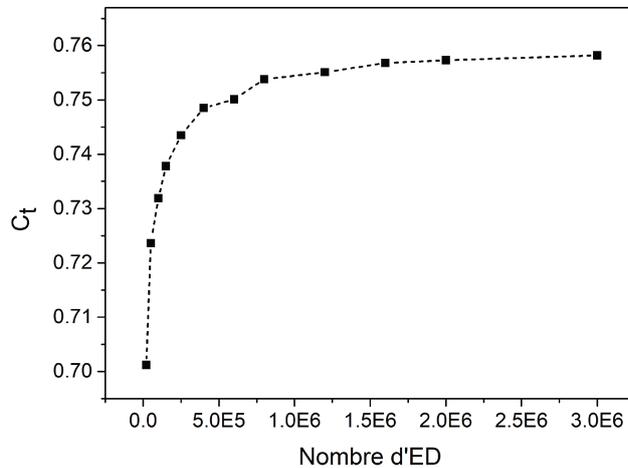


Figure IV.6 – Variation du coefficient  $C_t$  en fonction du nombre d'ED

appliquant un gradient de concentration en eau, on obtient alors la même courbe que celle obtenue pour un gradient de température (Figure IV.6). Ce résultat est attendu puisque le phénomène de transfert massique décrit par la loi de Fick (Équation IV.10) est analogue à celui de transfert thermique décrit par la loi de Fourier (Équation IV.1). Dans le modèle proposé, nous ne considérons pas d'évaporation d'eau à l'intérieur de l'échantillon. Autrement dit, le liquide migre

vers les parois de l'échantillon pour s'évaporer.

#### IV.2.4.3 Évaluation des propriétés physiques d'aluminate de magnésium à l'issue de processus de séchage

À travers cette étude nous avons évalué dans un premier temps la masse d'eau par la MED dans l'échantillon à un instant  $t$  donné par le biais de l'expression suivante :

$$m_w(t) = M_w \sum_{m=1}^{n_m} C_m^t \Gamma_m \quad (\text{IV.28})$$

où  $n_m$  est le nombre total de particules,  $C_m^t$  décrit la concentration d'eau associée à la particule  $m$  à l'instant  $t$  et  $\Gamma_m$  représente le volume associé à la particule  $m$ . À des fins de validation, une comparaison est effectuée avec des résultats obtenus par la MEF et les données expérimentales issues de l'étude réalisée par Lallement et al. [194]. À titre indicatif, les simulations EF ont été réalisées à l'aide d'un maillage

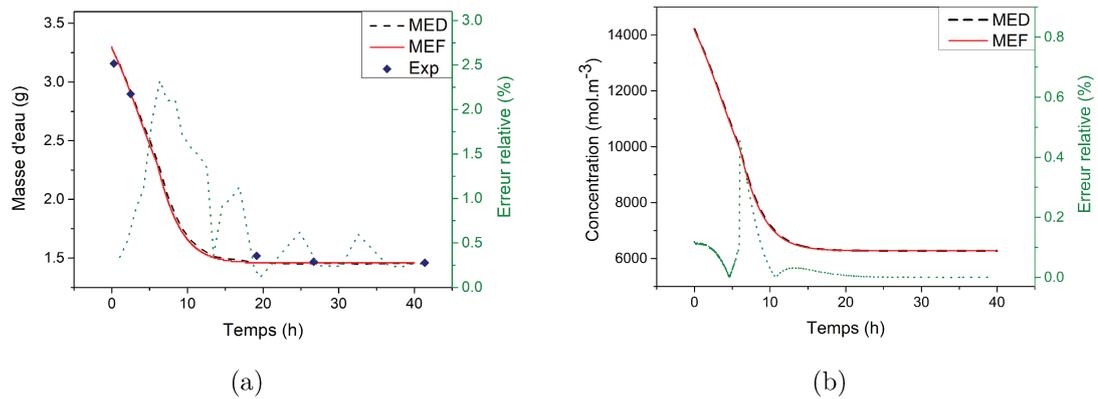


Figure IV.7 – Variation de (a) la masse d'eau dans l'échantillon et (b) la concentration d'eau au centre de l'échantillon en fonction du temps de séchage

structuré constitué de 32593 éléments tétraédrique. La Figure IV.7(a) montre que la masse d'eau diminue dans les 10 premières heures puis se stabilise à 1.46g pour le reste de l'essai. Les prédictions données par la MED sont très proches de celles obtenues par la MEF avec des erreurs relatives inférieures à 2,5%, ce qui prouve que le modèle par éléments discrets mis au point est capable de décrire le transfert de masse dans un milieu continu tout aussi bien qu'une modélisation éléments finis classique. Ces résultats montrent aussi une bonne concordance entre les prédictions données par la MED et les résultats expérimentaux, ce qui valide le modèle discret de couplage. De plus, la Figure IV.7(b) illustre l'évolution de la concentration d'eau au centre de l'échantillon par la MED et la MEF. Nous constatons une bonne concordance entre les deux méthodes numériques avec des erreurs relatives inférieures à 0,5%. En effet, la concentration d'eau obtenue avec

les deux approches diminue significativement en passant du  $14200 \text{ mol.m}^{-3}$  à  $6277 \text{ mol.m}^{-3}$  ce qui confirme le mécanisme de diffusion de l'eau à l'extérieur de l'échantillon lors d'un processus de séchage. La Figure IV.8 illustre les champs de concentration d'eau obtenus par la MED et la MEF à des instants différents (3h, 6h et 9h). À noter que les résultats présentés dans cette section sont pris dans le plan de coupe YZ avec  $X= 0,5L$ . Ces résultats obtenus par la MED sont en bon accord avec ceux donnés par la MEF ce qui confirme le potentiel de la MED à estimer le champ de concentration dans un milieu homogène continu. Dans un second temps,

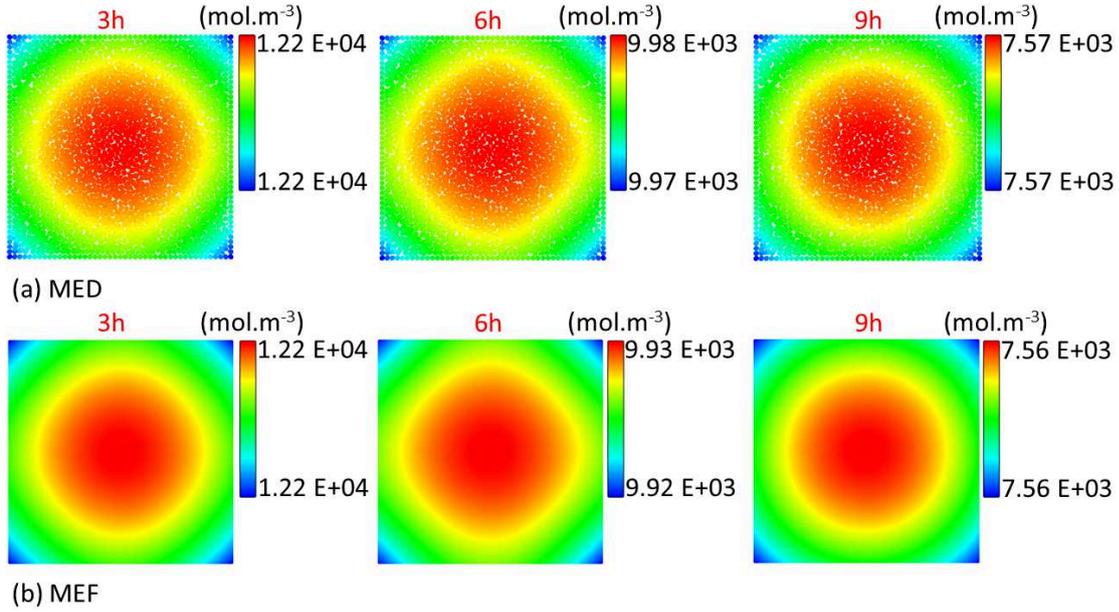


Figure IV.8 – Champs de concentration dans l'échantillon à différents instants par (a) la MED et (b) la MEF

nous sommes intéressés à l'étude de l'évolution du gradient de concentration d'eau au sein de l'échantillon au cours du temps. Ce paramètre permet de mieux localiser les endroits les plus sollicités sous l'effet des concentrations de contraintes. Il est par conséquent primordial d'éviter ces gradients afin de réduire les risques d'endommagement du matériau. L'évaluation de ces gradients s'effectue à l'échelle de la particule dans la direction  $i$  via l'expression suivante :

$$\nabla C_m^i = \frac{\phi}{2V_m} \sum_{n \in Z_m} \underbrace{\left[ \frac{C_n - C_m}{d_{m,n}} \right]}_{\nabla C_{m,n}} S_{m,n}^t d_{m,n} e_{m,n}^i \quad (\text{IV.29})$$

où  $V_m$  est le volume de la particule  $m$ ,  $Z_m$  est l'ensemble des particules liées à la particule  $m$  et  $e_{m,n}^i$  est la composante du vecteur normal inter-particulaire correspondant à la direction  $i$ . La modélisation par la MED induit une certaine dispersité du gradient de concentration d'eau due au caractère aléatoire des

contacts inter-particulaires associés à chaque ED. Comme solution, nous avons opté pour une méthode, nommée Halo, récemment développée par Moukadiri et al. [112] pour contrôler ces fluctuations locales. Dans cette approche, une échelle mésoscopique est introduite de sorte qu'un Halo de forme sphérique soit associé à chaque ED avec un rayon  $R_H$  de taille contrôlée et un centre identique à celui de l'ED considéré (Figure IV.9). Par conséquent, le gradient de concentration

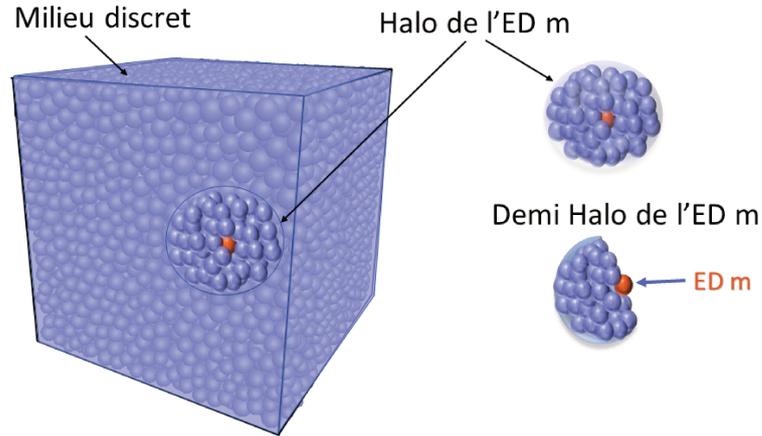


Figure IV.9 – Modèle de Halo introduit à l'échelle mésoscopique

d'eau d'une particule  $m$  est évalué à l'échelle du volume du Halo  $\Gamma_H$  en tenant compte des contributions des particules au voisinage de  $m$ . L'expression du gradient de concentration d'eau appliqué à  $m$  est alors donnée par :

$$\nabla C_m^i = \frac{1}{\Gamma_H} \sum_{r \in \Gamma_H} V_r \nabla C_r \quad (\text{IV.30})$$

où  $r$  représente l'ensemble des particules au voisinage de  $m$  et  $V_r$  représente le volume de chaque ED au voisinage de  $m$ . Une étude de sensibilité par rapport à la taille optimale du Halo en fonction de la densité de particules est présentée dans les travaux de thèse d'Alhajj Hassan [196]. Pour information, la taille du Halo, décrite par le rapport  $R_H/R_{ED}$  avec  $R_{ED}$  le rayon de la particule auquel le Halo est associé, est fixée à 10 dans nos simulations par la MED. La Figure IV.10 illustre l'évolution de la contribution en moyenne du gradient de concentration d'eau dans les 8 extrémités de l'échantillon cubique par la MED et la MEF. Qualitativement, le profil de gradient présente un saut remarquable après 6h de séchage avant de diminuer jusqu'à zéro à la fin du séchage. Quantitativement, nous constatons que le gradient de concentration tend vers  $2000 \text{ mol.m}^{-4}$  dans les premières heures du séchage aux 8 extrémités ce qui justifie la migration de l'eau vers les extrémités de l'échantillon lors d'un processus de séchage. Nous remarquons aussi une bonne concordance entre les résultats MED et MEF. Les

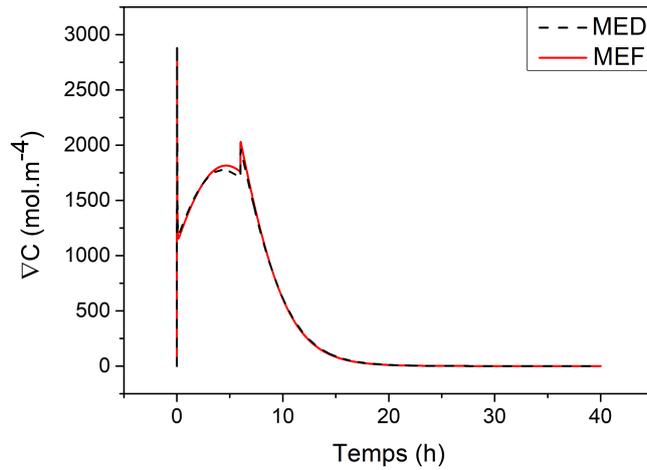


Figure IV.10 – Évolution du gradient de concentration d'eau en moyenne dans les 8 extrémités de l'échantillon cubique en fonction du temps de séchage

champs de gradient de concentration sont représentés sur la Figure IV.11 aux mêmes instants que pour les champs de concentration (3h, 6h et 9h) dans le plan de coupe YZ avec  $X=0,5L$ . Qualitativement, il y a une bonne concordance entre les résultats donnés par la MED et ceux obtenus avec la MEF avec l'apparition de gradients importants aux extrémités de l'échantillon. Quantitativement, les

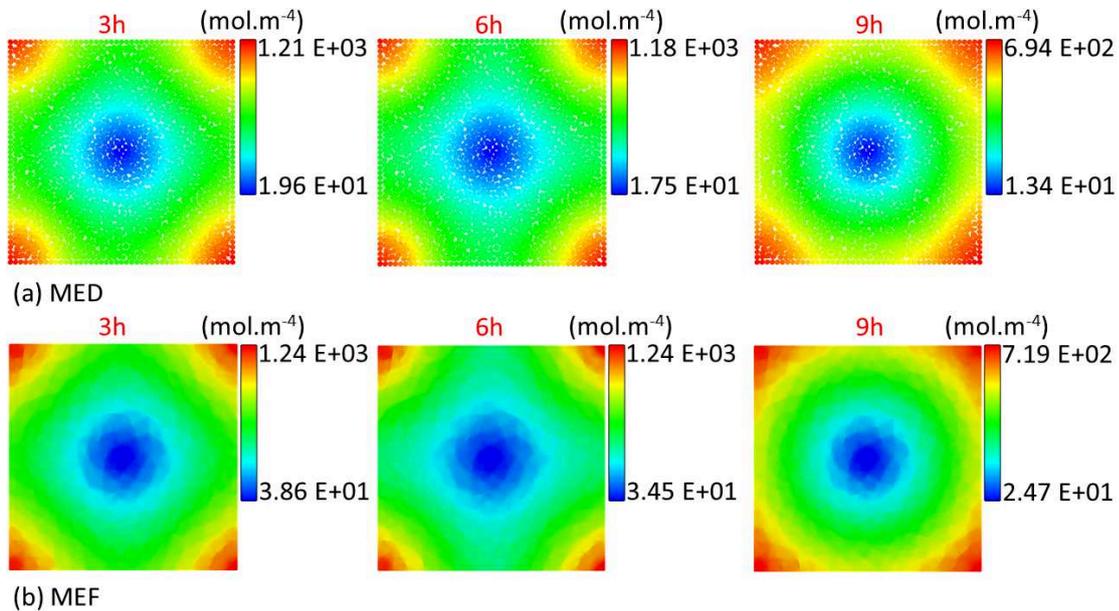


Figure IV.11 – Champs de gradient de concentration d'eau dans l'échantillon à différents instants par (a) la MED et (b) la MEF

résultats montrent que l'intensité du gradient de concentration d'eau diminue au cours du temps, ce qui confirme la cinétique de séchage et par conséquent la diffusion de l'eau de l'intérieur de l'échantillon vers l'extérieur.

### IV.3 Simulation par la MED des transferts hygrothermiques sous conditions environnementales par la MED dans un matériau hétérogène : le PA6/GF30

Après avoir mis en place une approche numérique de simulation du transfert hygrothermique dans un milieu homogène, nous allons maintenant adapter ce modèle au cas d'un milieu hétérogène et d'un processus d'absorption d'eau. Pour cela, nous considérons un échantillon cubique en PA6/GF30 à une seule fibre de côté  $L = 5$  mm et composé de 250 000 ED (Figure IV.12(a)). Le composite contient une fibre de forme cylindrique à caractère hydrophobe avec un rayon  $R$  égal à 1,1 mm de sorte que la fraction volumique de fibres de 15,7% soit respectée (Figure IV.12(b)). Cette fibre est noyée dans une matrice en PA6 hydrophile. L'échantillon, initialement sec ( $C_{init} = 0 \text{ mol.m}^{-3}$ ), est placé dans un four à température constante de  $70^\circ\text{C}$  et une humidité relative  $H_R$  de 99% (Figure IV.12). Le transfert de masse avec l'extérieur se fait sur toutes les faces de l'échantillon

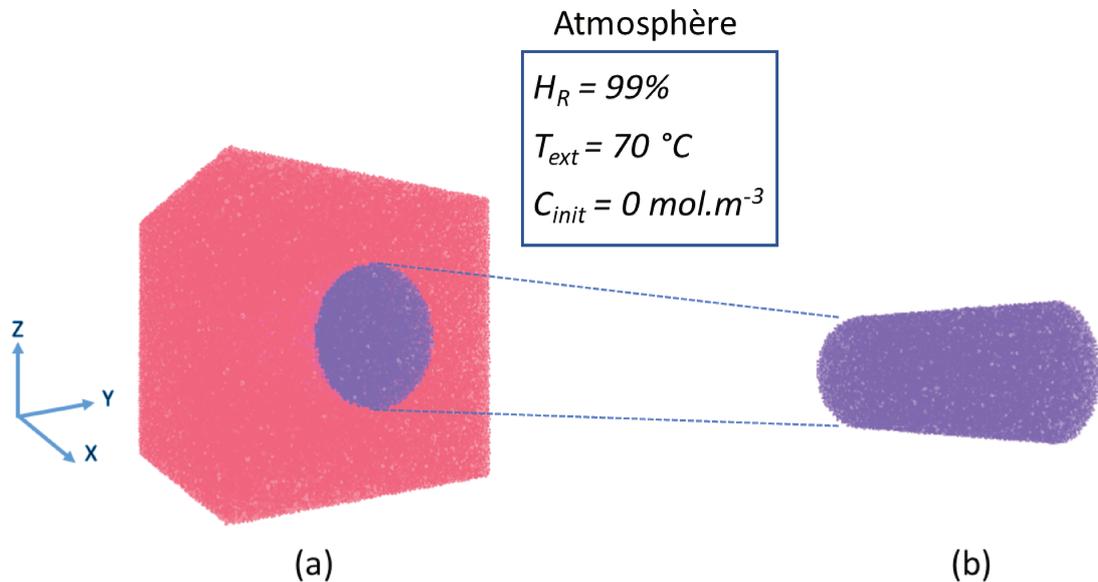


Figure IV.12 – (a) VER du composite à une seule fibre en PA6/GF30 , (b) fibre en GF30 de forme cylindrique

à l'exception de sa face inférieure comme illustré à la Figure IV.13. L'ensemble des paramètres nécessaires pour la simulation numérique sont indiqués dans le Tableau IV.2. L'activité de l'eau est définie au niveau de la surface extérieure de l'échantillon (surface de la matrice en PA6) par une équation obtenue par régression quadratique de la courbe présentée à la Figure IV.14. Cette équation

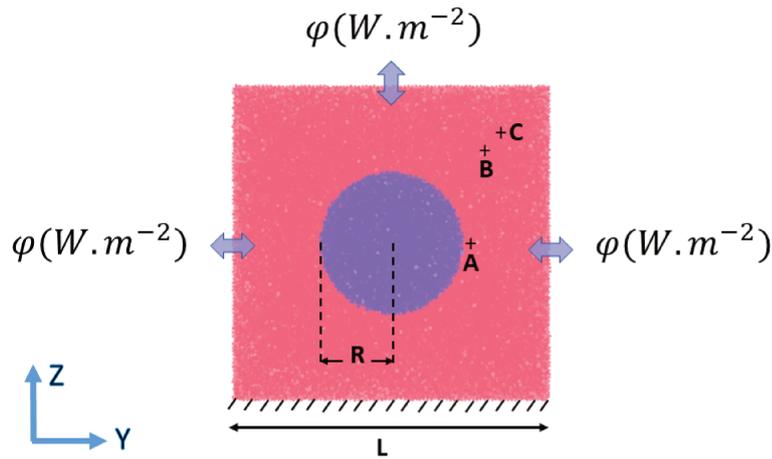


Figure IV.13 – Conditions aux limites appliquées à l'échantillon cubique en PA6/GF30 durant le processus d'absorption d'eau

Paramètre	Symbole	Valeur
Capacité thermique de l'eau ( $J.Kg^{-1}.K^{-1}$ )	$C_{pw}$	4 180
Capacité thermique de l'air ( $J.Kg^{-1}.K^{-1}$ )	$C_{pa}$	710
Masse volumique de l'air ( $Kg.m^{-3}$ )	$\mu_a$	1,2
Masse molaire de l'eau ( $g.mol^{-1}$ )	$M_w$	18
Chaleur latente ( $J.Kg^{-1}$ )	$L_w$	$2,3.10^6$
Coefficient de diffusion massique du PA6 ( $m^2.s^{-1}$ )	$D_w(PA6)$	$13,34.10^{-12}$
Coefficient de diffusion massique du GF30 ( $m^2.s^{-1}$ )	$D_w(GF30)$	0
Coefficient de transfert thermique ( $W.m^{-2}.K^{-1}$ )	$h$	40
Densité de PA6 ( $Kg.m^{-3}$ )	$\mu_{PA6}$	1130
Densité de GF30 ( $Kg.m^{-3}$ )	$\mu_{GF30}$	2600
Capacité thermique de PA6 ( $J.Kg^{-1}.K^{-1}$ )	$C_p(PA6)$	1700
Capacité thermique de GF30 ( $J.Kg^{-1}.K^{-1}$ )	$C_p(GF30)$	830

Tableau IV.2 – Paramètres des constituants du composite PA6/GF30

est de la forme :  $a_w = aX^2 + bX + c$  avec  $a = -71,247$ ,  $b = 16,653$  et  $c = 0,0189$ . Le caractère hydrophobe de la fibre est pris en compte lors de la modélisation par la MED par une porosité et un coefficient de diffusion massique nuls. En outre, la porosité au niveau de la matrice hydrophile est calculée selon l'équation suivante :

$$(\%)p = \frac{V_w}{V_{tot}} \times 100 = \frac{X\mu_s}{\mu_w + X\mu_s} \times 100 \quad (IV.31)$$

où  $V_w$  et  $V_{tot}$  sont respectivement le volume de l'eau et le volume total de l'échantillon.  $\mu_s$  et  $\mu_w$  sont respectivement la masse volumique du solide plein et la masse volumique de l'eau. D'après la formule IV.31, la porosité du PA6 est égale à 10,15% pour une teneur en eau correspondant à l'état saturé du PA6 d'après la Figure IV.14. Dans cette étude, nous avons utilisé la MEF en

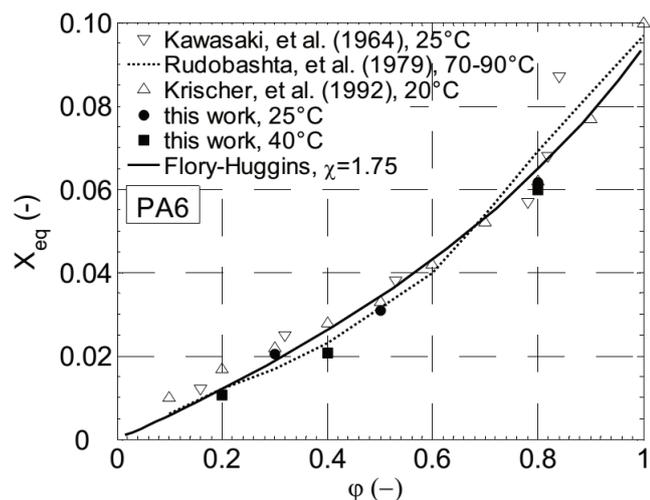


Figure IV.14 – Activité de l'eau du PA6 à 70°C [200]

référence pour valider les résultats obtenus par la MED. Dans une première étape, nous avons évalué la quantité en masse d'eau absorbée par les deux méthodes. Nous avons remarqué que la masse d'eau absorbée évolue d'une manière significative pendant les 40 premières heures avant de se stabiliser à 0.012g avec une erreur relative de 0.17% entre les deux approches (Figure IV.15). Dans une deuxième étape, afin de mieux comprendre localement

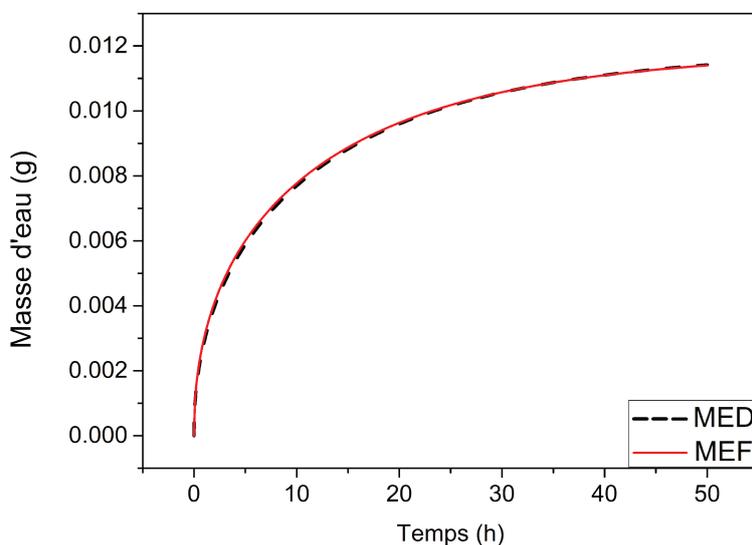


Figure IV.15 – Variation de la masse d'eau dans le PA6/GF30 en fonction du temps durant le processus d'absorption d'eau

la cinétique de transfert hygrothermique dans le composite, nous avons choisi d'évaluer la concentration d'eau en trois points, respectivement A(0,5L;0,75L;0,5L), B(0,5L;0,8L;0,8L) et C(0,5L;0,85L;0,85L) (Figure IV.13). D'un point de vue quantitatif, nous remarquons une bonne concordance entre les

simulations EF et ED (Figure IV.16). En analysant les courbes obtenues en

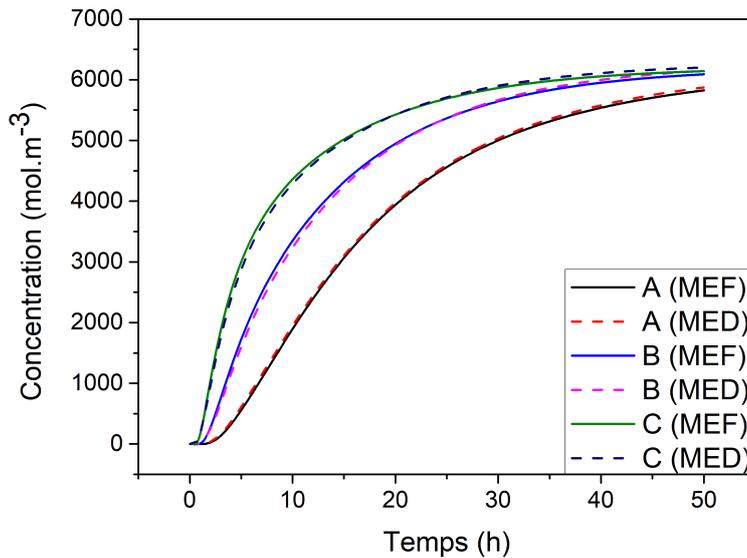


Figure IV.16 – Variation de la concentration d'eau dans le PA6/GF30 en fonction du temps durant le processus d'absorption d'eau

concentration, nous constatons une augmentation des valeurs de concentration d'eau au début du processus d'absorption ce qui reflète la pénétration d'eau dans la matrice poreuse. À partir de 40h, nous constatons une quasi-saturation de la matrice, laquelle se stabilise pour une concentration en eau de  $6200 \text{ mol.m}^{-3}$ . En outre, nous avons présenté dans les Figures IV.18 et IV.19 les champs de concentration d'eau obtenus par la MED et la MEF à des instants différents (3h, 7h, 22h et 45h). À noter que les résultats présentés dans cette section sont pris dans le plan de coupe YZ avec  $X=0,5L$  et le plan de coupe XY avec  $Z=0,5L$ . Ces figures illustrent bien le mécanisme de diffusion de l'eau de l'extérieur à l'intérieur du matériau au cours du temps. De plus, nous remarquons que la fibre présente toujours une concentration nulle du fait qu'elle soit hydrophobe. À partir de ces résultats, nous pouvons conclure que la MED est capable de prédire fidèlement le champ de concentration en eau dans un milieu continu hétérogène durant un processus d'absorption d'eau. Dans une troisième étape, le gradient de concentration est évalué avec les deux approches (MEF et MED) aux positions définies précédemment (Figure IV.17). Nous remarquons une assez bonne adéquation entre les prédictions EF et ED avec des erreurs relatives inférieures à 6%. En analysant les courbes obtenues, on remarque une augmentation des valeurs du gradient de concentration au début du processus. Ce résultat confirme que l'eau est absorbée jusqu'à atteindre la saturation, au-delà de laquelle les gradients de concentration diminuent

progressivement pour se stabiliser à zéro à l'exception du point A. Ceci peut être expliqué par la présence de l'interface fibre/matrice laquelle implique un temps de stabilisation plus long. Ce phénomène est absent aux points B et C car ces derniers sont situés loin de l'interface avec un taux de saturation à l'équilibre et un gradient de concentration proche de zéro après 50h. Les champs de gradient

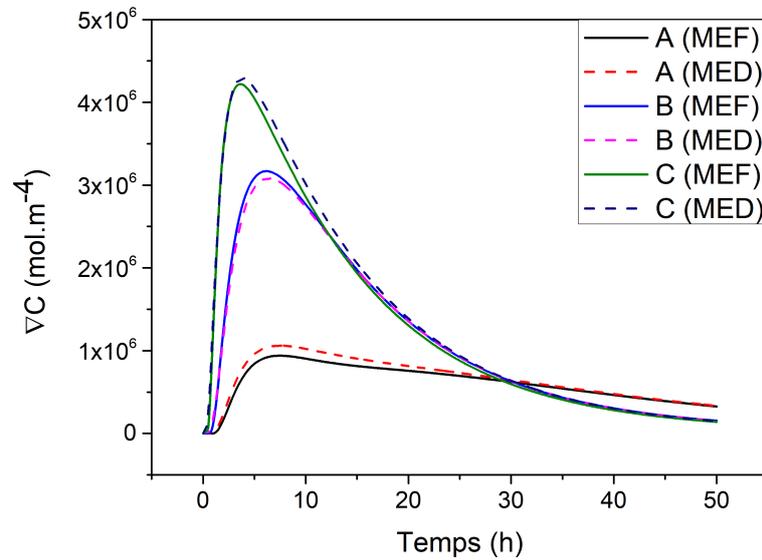
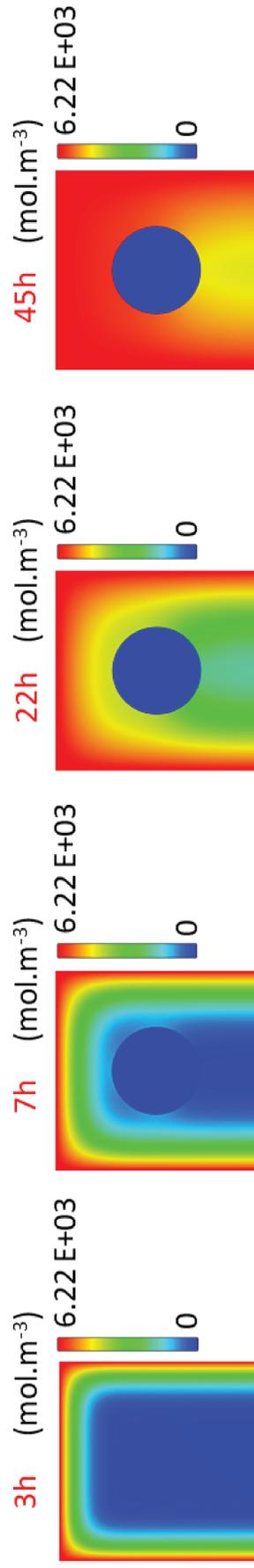


Figure IV.17 – Évolution du gradient de concentration d'eau dans le PA6/GF30 en fonction du temps durant le processus d'absorption d'eau

de concentration d'eau obtenus par la MED et la MEF à des instants différents (3h, 7h, 22h et 45h) sont représentés sur les Figures IV.20 et IV.21. À noter que les résultats présentés dans cette section sont pris dans les plans de coupe YZ avec  $X=0,5L$  et XY avec  $Z=0,5L$ . Nous pouvons remarquer que les prédictions obtenues par la MED sont en bon accord avec celles données par la MEF. En outre, nous constatons qu'au début du processus d'absorption en eau, les gradients de concentration d'eau se localisent aux bords de l'échantillon. Suite à la propagation de l'eau au sein de l'échantillon au cours du temps, les gradients de concentration d'eau évoluent ensuite vers la zone interfaciale fibre/matrice. Au bout de 50h, un gradient de concentration d'eau est finalement observé au niveau des bords inférieurs de l'échantillon dû à l'effet de l'encastrement appliqué à la face inférieure de l'échantillon. De ce fait, nous pouvons supposer qu'un mécanisme d'endommagement est plus susceptible de se produire au niveau de la zone interfaciale fibre/matrice.



(a) MED



(b) MEF

FIGURE IV.18 – Champs de concentration dans l'échantillon à différents instants par (a) la MED et (b) la MEF dans le plan de coupe YZ avec  $Z=0,5L$

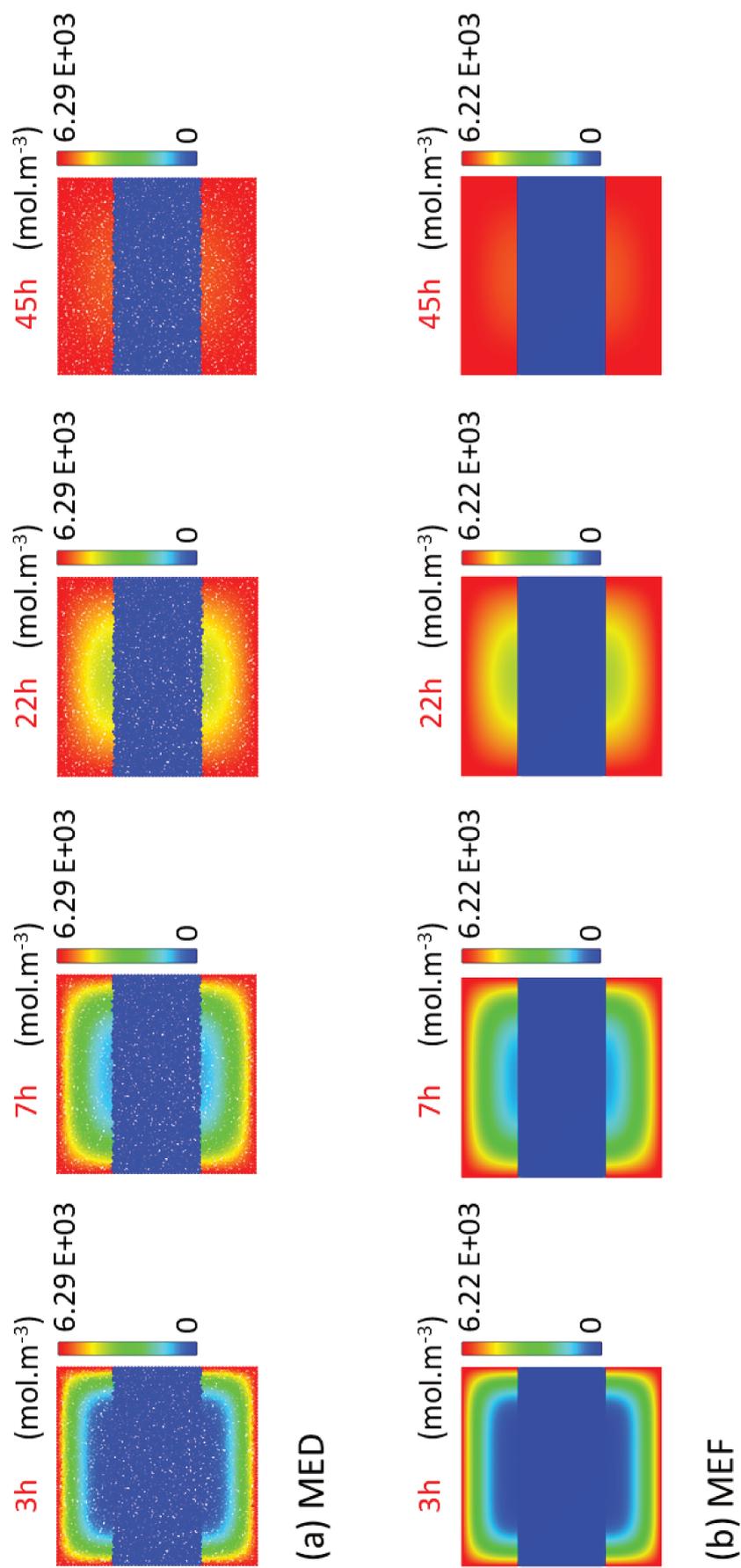


Figure IV.19 – Champs de concentration dans l'échantillon à différents instants par (a) la MED et (b) la MEF dans le plan de coupe XY avec  $Z=0,5L$

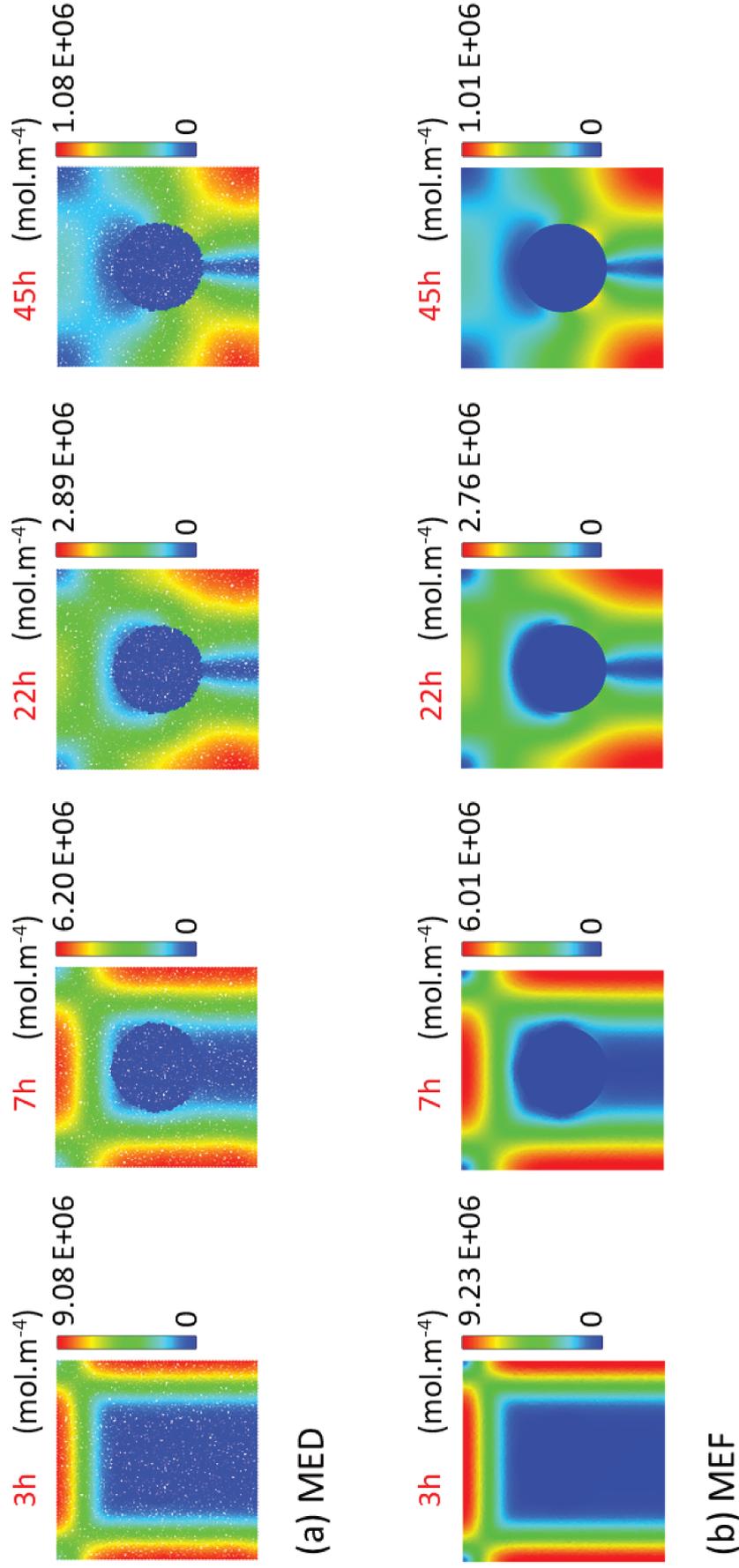


Figure IV.20 – Champs du gradient de concentration dans l'échantillon à différents instants par (a) la MED et (b) la MEF dans le plan de coupe YZ avec  $Z=0,5L$

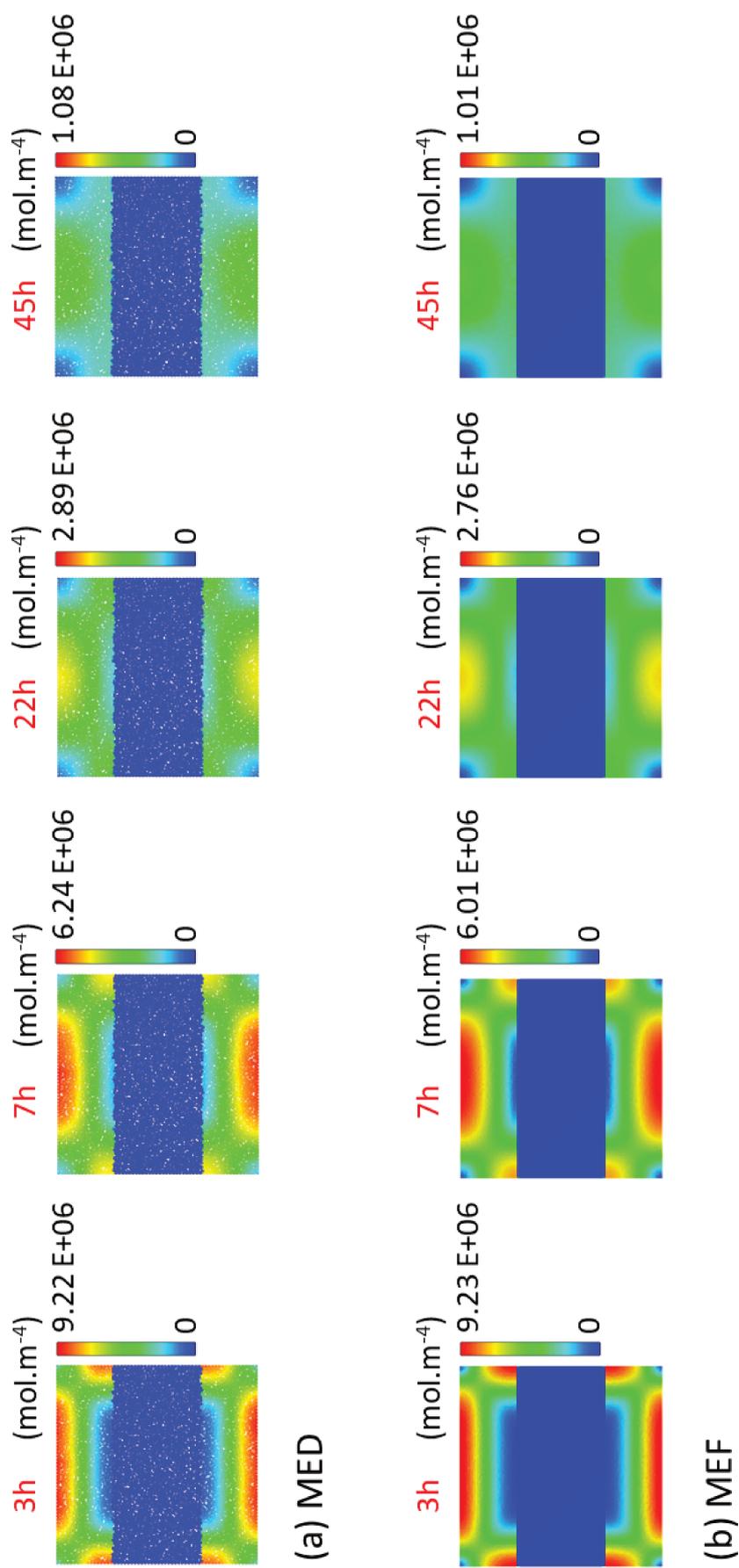


Figure IV.21 – Champs du gradient de concentration dans l'échantillon à différents instants par (a) la MED et (b) la MEF dans le plan de coupe XY avec  $Z=0,5L$

## IV.4 Modélisation du gonflement hygroscopique et validation dans le cadre d'un matériau homogène PA6

### IV.4.1 Modèle de gonflement hygroscopique

Nous cherchons à modéliser le comportement hygromécanique d'un matériau homogène. Dans ce but, nous considérons un modèle de gonflement hygroscopique linéaire, analogue au modèle de dilatation thermique proposé par Alhajj Hassan et al. [201]. Le gonflement hygroscopique est ainsi pris en compte à l'échelle du lien cohésif en ajustant sa longueur en fonction de la concentration, comme ci-dessous :

$$l(C) = l_0(1 + M\beta_\mu \Delta C) \quad (\text{IV.32})$$

avec

- $l_0$  la longueur de la poutre cohésive à la concentration initiale  $C_0$
- $l(C)$  la longueur de la poutre cohésive à la concentration  $C$
- $\Delta C = C - C_0$  la variation de concentration
- $\beta_\mu$  le coefficient de gonflement hygroscopique associé au lien cohésif
- $M$  la masse molaire de l'eau

L'idée principale est que le lien cohésif se dilate dans le cadre d'un processus d'absorption d'eau, lorsque la concentration augmente, (Figure IV.22) et se contracte dans le cas d'un processus de séchage caractérisé par une diminution de la concentration.

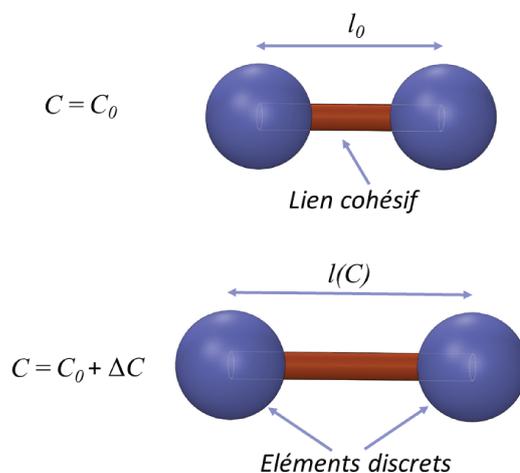


Figure IV.22 – Modèle de gonflement hygroscopique (cas  $\Delta C > 0$ )

## IV.4.2 Validation dans le cadre d'un matériau homogène PA6

Dans cette étude, nous prenons comme exemple le matériau polymérique PA6 afin de valider le modèle proposé. Un échantillon cubique composé de 250 000 ED a été généré avec un module de Young  $E_M=2,03$  GPa, un coefficient de Poisson  $\nu_M=0,33$  et un coefficient de gonflement hygroscopique microscopique  $\beta_\mu=2,65 \cdot 10^{-4} \text{ m}^3 \text{ Kg}^{-1}$  [202, 203]. L'échantillon cubique d'arête  $L = 5$  mm est supposé libre c'est à dire qu'aucune condition aux limites n'est imposée (Figure IV.23).

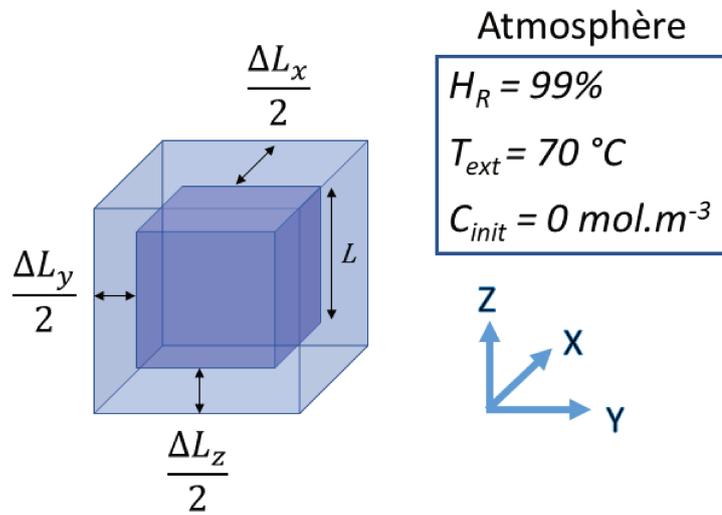


Figure IV.23 – Configuration cubique d'études avant et après gonflement hygroscopique

Afin de réduire les effets dynamiques et assurer la convergence des résultats numériques, un coefficient d'amortissement de type Rayleigh égal à 10 est introduit dans les simulations ED. Ainsi, une variation de concentration en eau s'établit grâce aux phénomènes de transfert hygrothermique comme déjà expliqué à la section IV.3. Les déplacements macroscopiques,  $\Delta L_x$ ,  $\Delta L_y$  et  $\Delta L_z$ , dans les trois directions  $X, Y$  et  $Z$  sont calculés à partir des déplacements des faces libres de l'échantillon. Notons que le déplacement d'une face donnée est estimé par la moyenne des contributions en déplacement des particules appartenant à cette face. La Figure IV.24(a) illustre l'évolution des déplacements macroscopiques en fonction du temps. Nous constatons que les trois courbes sont confondues ce qui confirme l'isotropie du milieu homogène étudié. Par ailleurs, les coefficients de gonflement hygroscopique à l'échelle macroscopique du cube  $\beta_{M,x}$ ,  $\beta_{M,y}$  et  $\beta_{M,z}$  sont estimés suivant les trois

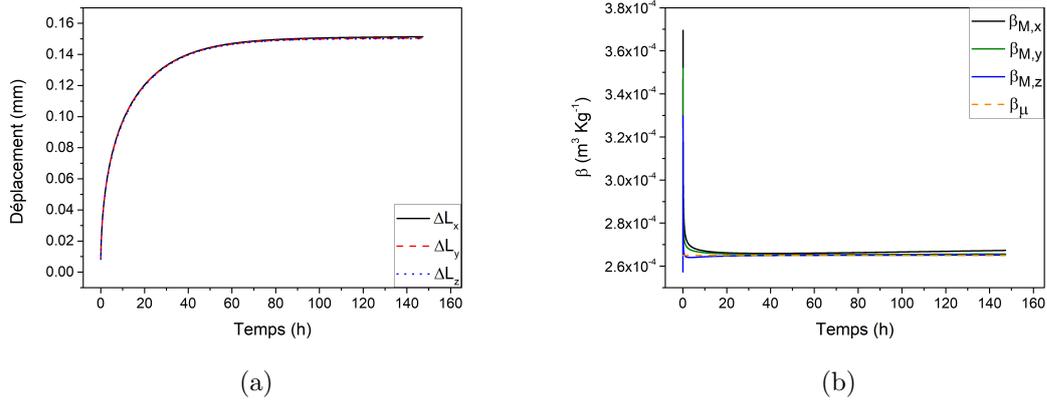


Figure IV.24 – Variation (a) des déplacements macroscopiques et (b) des coefficients de gonflement hygroscopique en fonction du temps

directions  $X$ ,  $Y$  et  $Z$  grâce aux déplacements macroscopiques déterminés précédemment, à travers les équations suivantes :

$$\beta_{M,x} = \frac{\Delta L_x}{LM\Delta C} \quad (\text{IV.33})$$

$$\beta_{M,y} = \frac{\Delta L_y}{LM\Delta C} \quad (\text{IV.34})$$

$$\beta_{M,z} = \frac{\Delta L_z}{LM\Delta C} \quad (\text{IV.35})$$

La Figure IV.24(b) décrit l'évolution des coefficients de gonflement hygroscopique en fonction du temps. Nous remarquons que les trois courbes sont semblables et que les coefficients de gonflement hygroscopique à l'échelle macroscopique convergent vers la même valeur, à savoir celle du lien cohésif. Par conséquent, un processus de calibration est inutile pour estimer  $\beta_\mu$  à partir de la valeur macroscopique ciblée. Nous avons par ailleurs évalué la variation du volume de PA6 ( $V_M$ ) au cours du temps, en supposant que l'échantillon garde toujours une forme cubique :

$$V_M = L(1 + \epsilon_x) \times L(1 + \epsilon_y) \times L(1 + \epsilon_z) \quad (\text{IV.36})$$

avec  $\epsilon_x = \frac{\Delta L_x}{L}$ ,  $\epsilon_y = \frac{\Delta L_y}{L}$  et  $\epsilon_z = \frac{\Delta L_z}{L}$  où  $\epsilon_x$ ,  $\epsilon_y$  et  $\epsilon_z$  sont les déformations macroscopiques selon les trois directions  $X$ ,  $Y$  et  $Z$ . La Figure IV.25 traduit la cinétique du gonflement du PA6 au cours du temps. Nous constatons que le volume augmente jusqu'à atteindre un palier correspondant au moment où l'échantillon est saturée en eau. Par ailleurs, le volume de l'échantillon converge

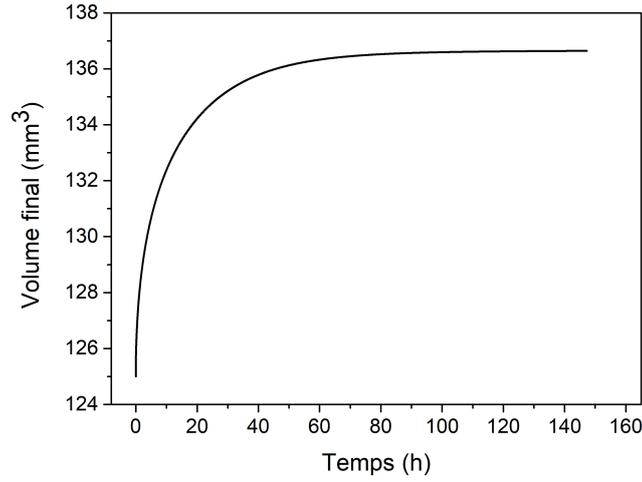


Figure IV.25 – Variation du volume de l'échantillon en PA6 par gonflement hygroscopique

vers la valeur du volume final théorique avec une erreur relative de l'ordre de 0,02%. Par conséquent, nous pouvons conclure que le modèle ED décrit fidèlement le gonflement hygroscopique au sein d'un matériau homogène.

## IV.5 Modélisation du gonflement hygroscopique et de l'endommagement induit dans un matériau hétérogène

### IV.5.1 Champs de contrainte et de déplacement dans le cadre du PA6/GF30

Dans cette section, nous proposons d'étudier le comportement mécanique d'un matériau composite hétérogène PA6/GF30 lors d'un processus d'absorption d'eau. Un couplage hygromécanique est modélisé par la MED afin d'évaluer les champs de contrainte et de déplacement suite à un gonflement hygroscopique du matériau composite. Nous considérons la même configuration ED que celle étudiée dans la section IV.3 (Figure IV.12). D'un point de vue numérique, nous choisissons d'étudier les contraintes équivalentes de Von Mises ainsi que les déplacements résultants. L'évaluation des contraintes s'effectue à l'échelle de la particule  $m$  via la formule donnée par Zhou [204] :

$$\overline{\overline{\sigma^m}} = \frac{1}{2V_m} \left( \frac{1}{2} \sum_{n \in Z_m} d_{mn} \otimes f_{mn} + f_{mn} \otimes d_{mn} \right) \quad (\text{IV.37})$$

avec  $\overline{\overline{\sigma^m}}$  le tenseur de contrainte associé à la particule  $m$ ,  $V_m$  le volume représentatif associé à  $m$ ,  $f_{mn}$  la force inter-particulaire appliquée par  $n$  sur  $m$ ,  $d_{mn}$  la distance relative entre  $m$  et  $n$  et  $Z_m$  l'ensemble des particules en contact avec la particule  $m$ . À noter que, dans l'approche proposée, la méthodologie de calibration de la surface de transmission entre deux ER, déjà décrite dans la section IV.2.4.2, est toujours valable. D'une manière analogue de ce qui a été fait pour les gradients de concentration (section IV.2.4.3), l'approche Halo est introduite pour contrôler le niveau de dispersion du champ de contrainte. Par conséquent, la contrainte d'une particule  $m$ , à l'échelle du volume du Halo  $\Gamma_H$  afin de tenir compte des contributions des particules au voisinage de  $m$ , est donnée par la formule suivante :

$$\overline{\overline{\sigma_m^h}} = \frac{1}{\Gamma_H} \sum_{r \subset \Gamma_H} V_r \overline{\overline{\sigma_r}} \quad (\text{IV.38})$$

où  $r$  représente l'ensemble des particules au voisinage de  $m$  et  $V_r$  représente le volume de chaque ED au voisinage de  $m$ . Pour information, la taille du Halo est fixée à 5 dans nos simulations par la MED afin d'avoir des résultats comparables à ceux obtenus par la MEF et pour éviter de lisser exagérément le champ de contrainte à l'échelle de la particule considérée [107]. Enfin la contrainte équivalente de Von mises ( $\overline{\sigma}$ ) est calculée à partir de l'équation suivante [205] :

$$\overline{\sigma} = \sqrt{\frac{1}{2}[(\sigma_I - \sigma_{II})^2 + (\sigma_{II} - \sigma_{III})^2 + (\sigma_{III} - \sigma_I)^2]} \quad (\text{IV.39})$$

où  $\sigma_I$ ,  $\sigma_{II}$  et  $\sigma_{III}$  sont les contraintes principales. Le déplacement résultant ( $\Delta L_{res}$ ) est exprimé par la norme euclidienne :

$$\Delta L_{res} = \sqrt{\Delta L_x^2 + \Delta L_y^2 + \Delta L_z^2} \quad (\text{IV.40})$$

À des fins de comparaison, des simulations numériques sont effectuées avec la MEF en considérant un maillage composé d'environ 99403 éléments tétraédriques à 4 nœuds. À l'état stationnaire, les champs de contrainte équivalente de Von Mises et de déplacement résultant sont représentés dans les plans YZ avec  $X = 0,5L$  et XY avec  $Z = 0,5L$  comme illustré aux figures IV.26 et IV.27. D'un point de vue qualitatif, les résultats présentent une bonne concordance entre les approches MED et MEF. À partir des champs de contrainte équivalente de Von Mises (Figure IV.26), nous constatons l'existence d'une concentration de contrainte autour de la fibre dans le plan YZ. De plus, des concentrations de contrainte sont observées dans la zone interfaciale entre la

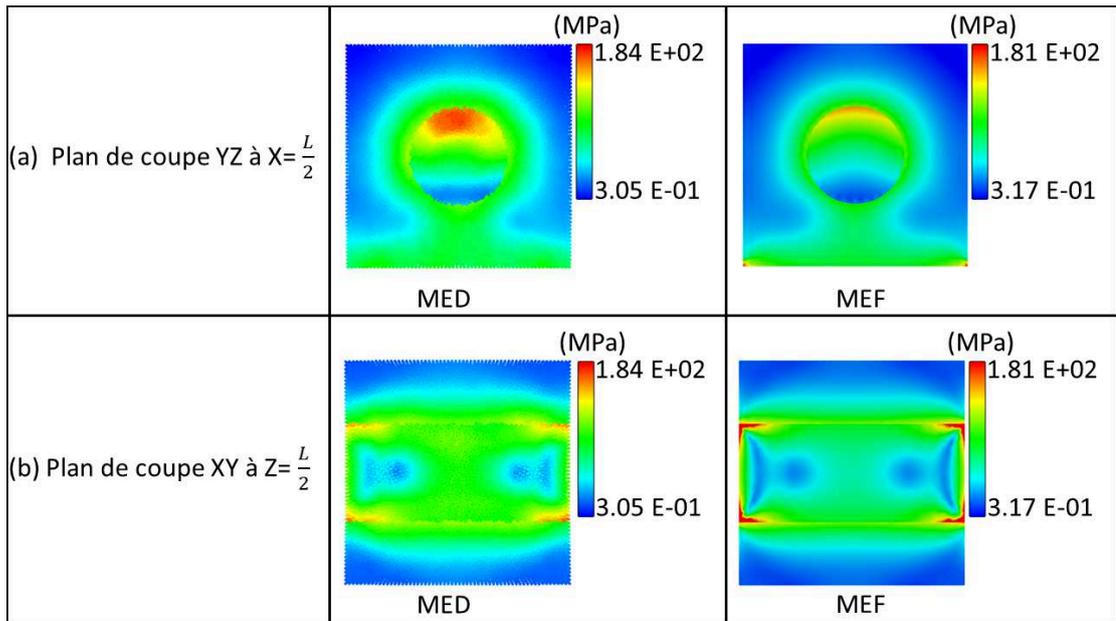


Figure IV.26 – Champs de contrainte équivalente de Von mises dans l'échantillon par la MED et la MEF

fibres et la matrice dans le plan XY. Par conséquent, nous pouvons déduire que la zone interfaciale est la zone la plus sollicitée lors d'un processus d'absorption d'eau. De plus, nous avons montré dans la section IV.3, qu'au niveau de la zone interfaciale un gradient de concentration dû à la variation de la concentration s'établit à l'interface fibre/matrice. De ce fait, ces deux résultats favorisent un mécanisme de décohésion interfaciale dans cette zone. D'un point de vue

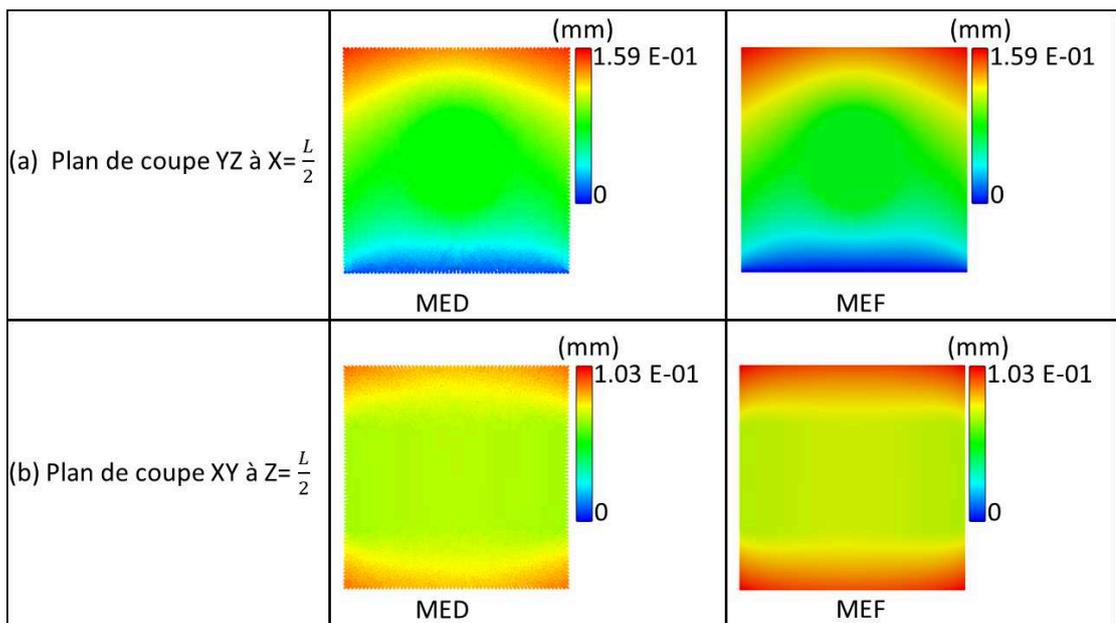


Figure IV.27 – Champs de déplacement résultant dans l'échantillon par la MED et la MEF

quantitatif, les résultats aux points  $A(0,5L;0,75L;0,5L)$ ,  $D(0,5L;0,5L;0,15L)$  et  $E(0,5L;0;L)$  (Figure IV.28) en termes de contrainte de Von Mises et de déplacement résultant sont présentés aux figures IV.29(a) et IV.29(b). Ainsi, les

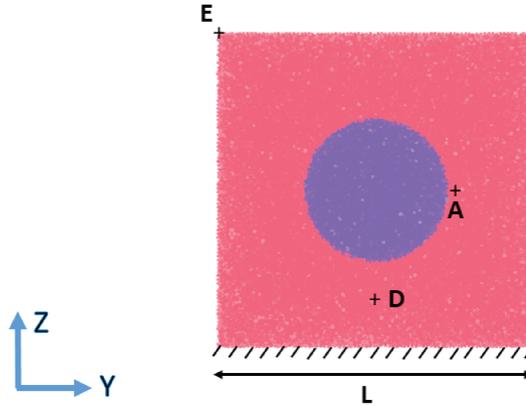


Figure IV.28 – Positions des points pour suivre l'évolution de la contrainte de Von Mises et du déplacement résultant

erreurs relatives par rapport à la solution obtenue par la MEF sont inférieures à 5,5% et à 5,3% respectivement pour la contrainte équivalente de Von Mises et le déplacement résultant. En analysant les résultats en contrainte, nous remarquons des anomalies au début du processus d'absorption d'eau dues potentiellement à des perturbations dynamiques et à la présence de l'encastrement au niveau de la face inférieure de l'échantillon. Les contraintes se stabilisent, au delà de 30h du processus d'absorption, au niveau des points D et E, elles continuent par contre à augmenter au niveau du point A, au voisinage de l'interface. Nous pouvons ainsi prédire que l'endommagement est d'origine interfaciale comme cela est suggéré dans la littérature [170]. Concernant les déplacements résultants, nous remarquons une augmentation au cours du temps des déplacements qui se justifie par le gonflement hygroscopique du matériau composite. Nous remarquons par ailleurs que le déplacement augmente de manière significative lorsque l'on s'éloigne de la face encastree. L'ensemble des études réalisées dans cette section mettent en exergue le bon accord entre les résultats MED et MEF et permettent de valider le modèle proposé. En outre, la MED est capable de fournir certains indicateurs en contrainte permettant de justifier la dégradation interfaciale dans le PA6/GF30 lors d'un processus de vieillissement hygrothermique. Ceci met en évidence le potentiel de la MED à modéliser le comportement thermo-hydro-mécanique du matériau composite PA6/GF30.

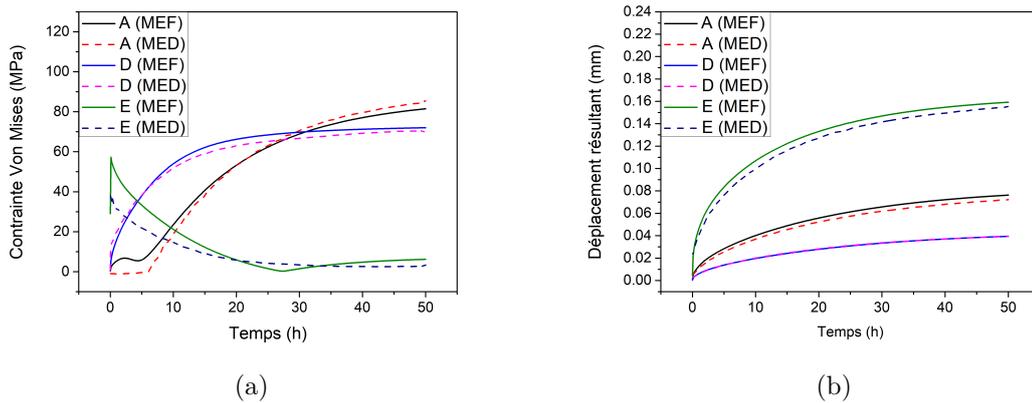


Figure IV.29 – Variation (a) de la contrainte équivalente de Von Mises et (b) du déplacement résultant en fonction du temps

### IV.5.2 Décohésion interfaciale induite par gonflement hygroscopique : Application au PA6/GF30

Dans cette partie, notre objectif est de traiter le problème de décohésion interfaciale du PA6/GF30 consécutif à un processus de vieillissement hygroscopique. Dans ce but, le modèle discret de zone cohésive est à nouveau utilisé mais cette fois-ci appliqué au cadre du couplage hygromécanique proposé dans la section IV.5.1 (Figure IV.30). Nous considérons la même configuration

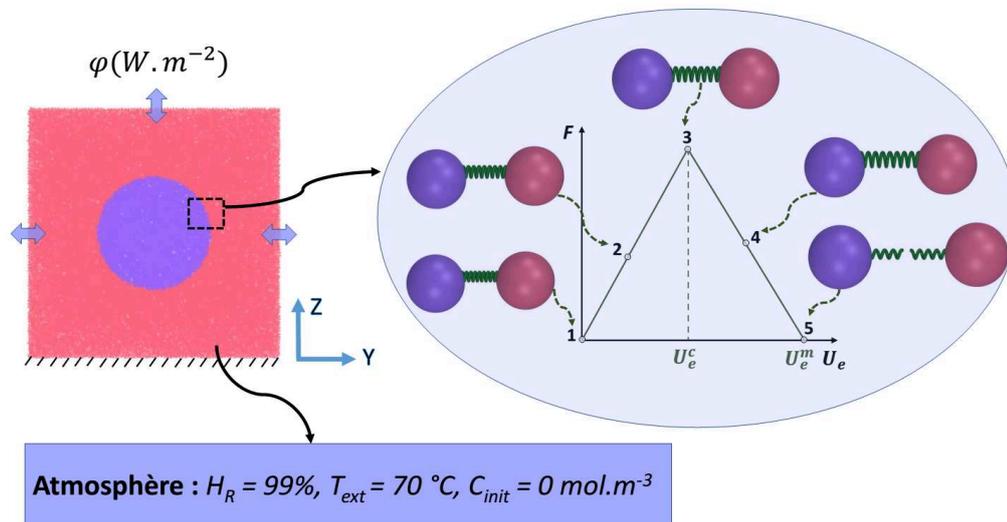


Figure IV.30 – Schématisation du problème à étudier par le biais du modèle discret de zone cohésive

ED que celle étudiée dans la section IV.3 avec une discrétisation de 50 000 ED. À titre d'information, la densité en particules est fixée intentionnellement à un nombre inférieur à celui utilisé précédemment afin d'assurer un compromis

raisonnable entre le temps de calcul et la précision des résultats numériques. D'après des études préliminaires, les contraintes interfaciales et les taux de restitution d'énergie sont fixées comme suit :  $\tau^{max} = 1,6.10^4$  MPa,  $\sigma^{max} = 4.10^3$  MPa et  $G_{Ic}=G_{IIc}=0,1$  N/mm. Pour les paramètres microscopiques  $E_\mu$  et  $r_\mu$ , nous avons considéré les valeurs suivantes :  $E_\mu^{PA6} = 1738$  GPa,  $r_\mu^{PA6} = 0,048$  pour le PA6 et  $E_\mu^{GF30} = 725$  GPa,  $r_\mu^{GF30} = 0,385$  pour le GF30. En ce qui concerne les paramètres hygrothermiques, nous considérons les valeurs proposées dans le Tableau IV.2. L'échantillon est supposé immergé dans l'eau ( $H_R=99\%$ ) et contrôlé sous une température fixe de  $70^\circ\text{C}$ . Par ailleurs, nous considérons une configuration libre sans aucune condition aux limites à l'exception de la face inférieure qui est encastrée. La Figure IV.31 montre l'évolution de la force de réaction de la face encastrée de l'échantillon et du taux de liens rompus en fonction du temps.

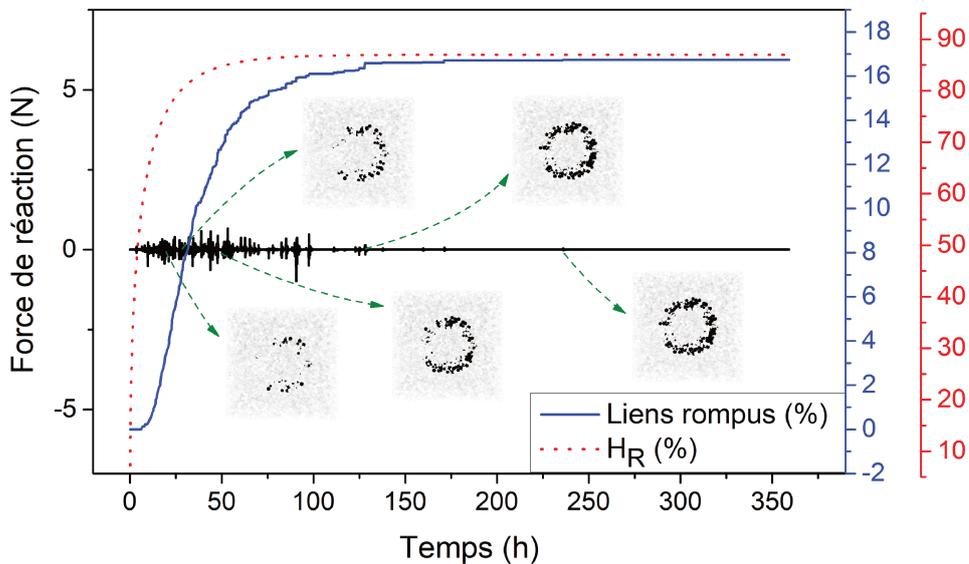


Figure IV.31 – Évolution de la force de réaction et du taux de liens rompus à l'interface fibre/matrice au cours du temps et motifs de décohéation correspondants (plan de coupe  $X=0,25$  mm)

Les résultats révèlent que le phénomène de décohéation interfaciale s'initie à  $t=9$ h suite à la rupture de quelques liens interfaciaux comme le montre le premier motif de décohéation. Les fluctuations de la force de réaction qui apparaissent au même instant confirment cette initiation de la décohéation fibre/matrice. Au fur et à mesure que le taux de liens rompus augmente, les oscillations de la force de réaction continuent à persister et le phénomène de décohéation se propage le long de l'interface fibre/matrice. À  $t=132$ h, nous remarquons que le taux de liens rompus commence à se stabiliser vers  $16,57\%$  avec la disparition des fluctuations au niveau de la force de réaction. Ceci peut être expliqué par le régime de

saturation en eau qui commence alors à s'établir. Enfin, la décohésion interfaciale reprend légèrement de nouveau jusqu'à atteindre un taux de 16,73% de liens rompus pour une humidité relative de 87%. Par ailleurs, nous avons également étudié l'évolution de l'énergie potentielle élastique au cours du temps. Cette énergie correspond à l'énergie emmagasinée par le système qui lui est nécessaire pour retourner à son état initial en fin de chargement. Les résultats présentés dans la Figure IV.32 montre que l'allure de la courbe de l'énergie potentielle élastique suit bien celle du taux de liens rompus à l'interface. En effet, suite à l'apparition de concentrations de contrainte à l'interface fibre/matrice lors de l'absorption d'eau du PA6/GF30, le phénomène de décohésion s'initie provoquant ainsi des perturbations mécaniques dans le système. Le système emmagasine alors de l'énergie sous forme d'énergie potentielle élastique qui va être ensuite transformée en énergie cinétique pour compenser ces perturbations. À partir de  $t=132\text{h}$ , l'établissement d'un palier de décohésion visible au niveau du taux de liens rompus conduit à une stabilisation de l'énergie potentielle élastique à 0,08 Joule. Par conséquent, nous pouvons conclure que le système est de nouveau dans un état stable et que le régime de saturation est établi dans l'échantillon dans lequel la fibre de verre se trouve partiellement désolidarisée de la matrice PA6.

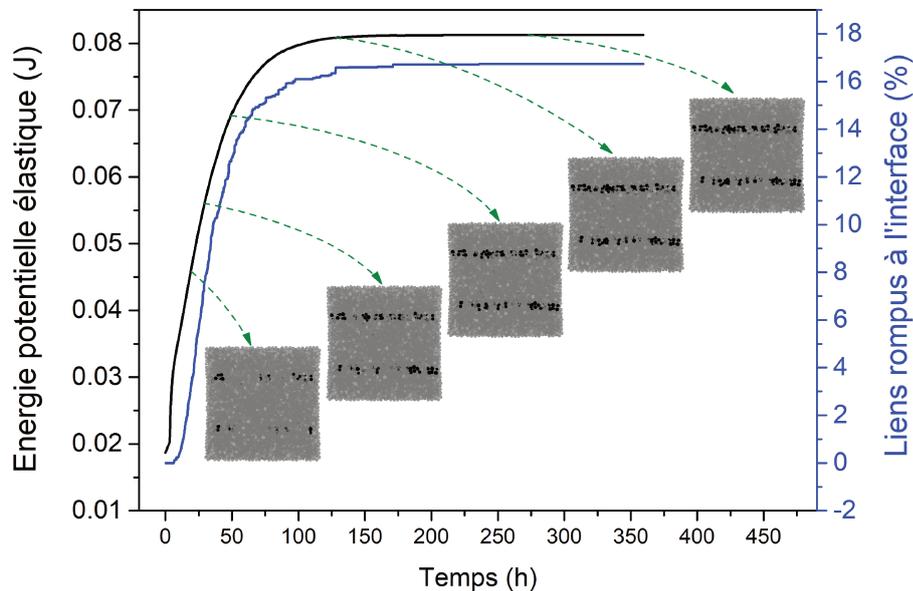


Figure IV.32 – Évolution de l'énergie potentielle élastique et du taux de liens rompus à l'interface fibre/matrice au cours du temps et motifs de décohésion correspondants (plan de coupe  $Z = 0,25\text{ mm}$ )

À partir de ces résultats, nous pouvons conclure que le modèle ED développé est capable de décrire le processus de décohésion interfaciale du PA6/GF30 suite à

un essai de vieillissement hygroscopique aussi bien à l'échelle microscopique (taux de liens rompus à l'interface) qu'à l'échelle macroscopique (force de réaction et énergie potentielle élastique). De plus, les motifs de décohésion dans les plans de coupe  $X=0,25$  et  $Z=0,25$  mm, décrits respectivement par les Figures IV.31 et IV.32, confirment le potentiel de la MED à suivre l'évolution du processus de décohésion interfaciale du PA6/GF30 au cours du temps.

## IV.6 Conclusion

Dans ce chapitre, la MED a montré son potentiel à simuler les transferts hygro-thermo-mécaniques se produisant dans le PA6/GF30. Tout d'abord, la modélisation des transferts hygrothermiques ayant lieu dans un matériau homogène a été traitée dans le cadre du processus de séchage d'une brique de spinelle d'aluminate de magnésium par deux approches numériques : la MED et la MEF. Les résultats des deux approches, en bon accord, ont ainsi permis de valider le modèle discret proposé. Dans un second temps, ce dernier a été appliqué au cadre de l'absorption d'eau dans un matériau composite : le PA6/GF30. Des comparaisons ont également été effectuées avec la MEF. Les résultats obtenus par cette approche se sont avérés en adéquation avec ceux obtenus par la MED montrant ainsi la capacité de la MED à modéliser les transferts hygrothermiques se produisant au sein de matériaux hétérogènes. Afin de modéliser l'endommagement d'origine interfaciale induit par vieillissement hygroscopique dans le PA6/GF30, un modèle de gonflement hygroscopique a été par la suite introduit puis validé dans le contexte d'un matériau homogène : le PA6. Ce modèle a enfin été étendu au cas d'un matériau hétérogène : le PA6/GF30. Les résultats ont montré que, dû au gonflement hygroscopique, une concentration de contraintes apparaît autour de la fibre favorisant ainsi la décohésion interfaciale fibre/matrice. Par ailleurs, la force de réaction au niveau de la face encastrée de l'échantillon, l'énergie potentielle élastique et le taux de liens rompus à l'interface ont été évalués. Les résultats obtenus montrent la capacité de la MED à prédire l'initiation et la propagation de la décohésion interfaciale du PA6/GF30. Par conséquent la MED se présente comme une approche pertinente pour traiter des problèmes couplés hygro-thermo-mécanique.



# Conclusions générales et perspectives

Le travail réalisé durant cette thèse a conduit au développement d'un outil numérique capable de prédire le comportement et l'endommagement d'un matériau composite à fibres courtes de type PA6/GF30 sous conditions environnementales. La caractérisation, la compréhension et la modélisation du comportement de ce matériau sont primordiales afin de prévoir sa durée de vie en conditions de chargement de différentes natures. Dans ce contexte, une étude expérimentale permettant d'évaluer le comportement élastique du PA6/GF30 a été mise en place en tenant compte de l'influence de plusieurs paramètres géométriques tels que la dispersion des fibres et le facteur de forme. L'accent a été mis sur des essais de traction afin d'identifier le module de Young longitudinal de ce matériau. Nous avons également exploité la technique de corrélation d'images comme moyen de mesure du champ de déplacement et du coefficient de Poisson. D'autres essais de traction de type charge/décharge ont été mis en place pour déterminer l'évolution de l'endommagement à l'échelle macroscopique ainsi que le niveau d'endommagement critique précédant la rupture du matériau. Par ailleurs, les mécanismes d'endommagement microscopiques ont été mis en évidence par des observations au microscope électronique à balayage (MEB) des faciès de rupture issus des essais de flexion trois points. Ces observations au MEB ont notamment révélé que la décohésion interfaciale constitue le mécanisme d'endommagement principal du PA6/GF30. Enfin, suite à une étude hygrothermique, nous avons montré que la plastification de la matrice, le gonflement du matériau et la décohésion interfaciale sont les principaux facteurs menant à la dégradation des propriétés mécaniques du PA6/GF30.

D'un point de vue numérique, notre premier objectif a été d'étudier la tenue mécanique du PA6/GF30 par le biais de la Méthode des Éléments Discrets (MED) en s'appuyant sur un modèle cohésif de type poutre. Ce dernier a déjà

montré sa pertinence à modéliser des milieux continus (homogènes et hétérogènes) ainsi que son potentiel à traiter des problèmes à la fois multi-échelles et multi-physiques. D'un point de vue mécanique, afin de modéliser le comportement du PA6/GF30 au moyen de la MED, un modèle ED a été introduit dans le contexte des fibres de verre courtes. Les résultats numériques, en termes de propriétés élastiques effectives, se sont avérés en bon accord avec les modèles micromécaniques (Mori-Tanaka et Tandon Weng) ainsi que des données expérimentales. Ces résultats ont montré la capacité de la formulation discrète développée à modéliser les matériaux composites à fibres courtes et simuler leur comportement élastique. Ensuite, un modèle de zone cohésive 3D a été discuté et validé dans le cas d'essais de délamination des matériaux composites en mode I, mode II et mode mixte. Des résultats adéquats ont été obtenus par comparaison avec des solutions analytiques. Ainsi, nous avons pu vérifier que le modèle ED est capable de simuler des problèmes de délamination et par conséquent le mécanisme d'endommagement par décohésion interfaciale. De plus, les résultats ont montré que contrairement aux approches analytiques qui mènent à des résultats trop parfaits, la MED est capable de décrire le caractère instable de la propagation du phénomène de délamination à l'échelle de l'interface. Par la suite, le processus de décohésion interfaciale du PA6/GF30 soumis à un essai de flexion, a été étudié à travers deux configurations : un modèle constitué d'une seule fibre de verre UD noyée dans la matrice PA6 et un modèle de fibres courtes alignées. Certaines différences en termes de courbe force/déplacement entre les deux configurations ont été mises en évidence et interprétées. Des motifs de décohésion ont été présentés montrant ainsi la capacité de la MED à simuler l'endommagement interfacial induit par un chargement mécanique.

Finalement, le modèle de composite par éléments discrets proposé a été mis en œuvre pour simuler le comportement et l'endommagement du PA6/GF30 sous conditions environnementales. L'approche a été tout d'abord développée et validée dans le cadre d'une étude hygrothermique dédiée au séchage d'un bloc d'aluminate de magnésium à travers une comparaison avec la MEF et des résultats expérimentaux issus de la littérature. Ensuite, le modèle a été appliqué à l'étude des transferts hygrothermiques se produisant durant un processus d'absorption d'eau au sein du PA6/GF30. Les variations en masse, concentration et gradient de concentration ont été évaluées et comparées aux résultats des simulations numériques obtenus par la MEF. De plus, les champs de concentration et de gradient de concentration ont été déterminés par les deux

méthodes. Ainsi, la modélisation discrète appliquée au composite PA6/GF30 a montré son potentiel à traiter des problèmes de type hygrothermique. Enfin, la capacité de la MED à modéliser la décohésion interfaciale au sein du PA6/GF30 induite par gonflement hygroscopique lors d'un processus d'absorption d'eau a également été démontrée. Un modèle local de gonflement hygroscopique a été introduit dans le cas d'un matériau homogène PA6 et étendu par la suite à l'étude du gonflement hygroscopique du composite PA6/GF30. Les champs de contrainte de Von Mises et de déplacement résultant ont été déterminés et comparés aux résultats obtenus par des simulations EF. Ces résultats ont montré la capacité de la MED à prédire les zones susceptibles d'être le siège d'une dégradation du matériau, notamment l'endommagement interfacial dans le PA6/GF30 au cours d'un processus de vieillissement hygroscopique.

Plusieurs perspectives s'inscrivent dans la continuité de ce travail de thèse, entre autres :

- La prise en compte dans l'approche numérique proposée au chapitre III de l'anisotropie des fibres de verre et du comportement non-linéaire de la matrice Polyamide 6 peut être envisagée afin de modéliser le comportement et l'endommagement du composite PA6/GF30 le plus fidèlement possible.
- Le critère de rupture énergétique en mode mixte discuté au chapitre III, utilisant un modèle d'adoucissement bilinéaire pourra être remplacé par un modèle de type exponentiel afin de réduire le nombre de paramètres à calibrer. Lors d'une délamination en mode I par exemple, la rigidité normale à travers l'interface  $\Gamma$  ( $K_n^\Gamma$ ) nécessite la calibration de trois paramètres, à savoir la rigidité linéaire initiale ( $K_n^0$ ), la contrainte limite à l'interface ( $\sigma_{lim}^\Gamma$ ) et le taux de restitution d'énergie critique en mode I ( $G_{Ic}$ ). D'un point de vue pratique, l'utilisation d'un modèle d'adoucissement exponentiel réduit à deux le nombre de paramètres à identifier, respectivement  $G_{Ic}$  et  $\sigma_{lim}^\Gamma$ .
- L'approche proposée au chapitre IV pourra être étendue à la prise en compte de la première phase d'absorption d'eau dans le PA6/GF30, au niveau des pores ouverts, sans gonflement hygroscopique afin d'aboutir à un modèle complet permettant une modélisation rigoureuse des phénomènes hygrothermo-mécaniques.
- La simulation multi-physiques des phénomènes hygro-thermo-mécaniques, présentée au chapitre IV, avec plusieurs degrés de liberté et de nombreux

paramètres à implémenter nécessite des ressources numériques considérables, tant en mémoire qu'en temps de calcul. Le recours à des techniques de réduction de modèles via des hypothèses simplificatrices est envisageable afin de garantir un bon compromis entre le coût de calcul et la précision des résultats numériques.

## Développement de code

Une partie de mes activités de thèse a été dédiée à un travail de développement numérique en langage de programmation C++. L'approche numérique que j'ai mise en place a nécessité la prise en main d'un code de calcul par éléments discrets. Je suis donc tourné vers le code C++ MULTICOR3D++ développé au sein de l'équipe MIM du Laboratoire des Technologies Innovantes, permettant de traiter un large champ d'application dans le domaine des matériaux et des procédés. Depuis 2017, plusieurs contributions ont été intégrées au code MULTICOR3D++ dans l'objectif de le faire évoluer vers un outil numérique à la fois flexible et efficace pour traiter des problèmes multi-physiques et multi-échelles (Figure IV.33). Ainsi, le code a été parallélisé par l'interface de

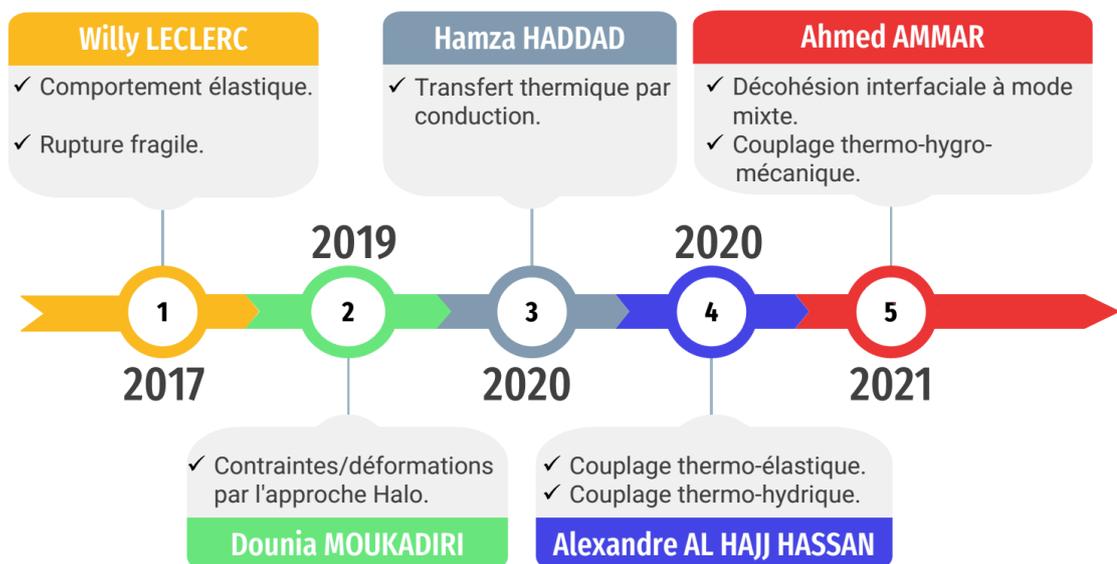


Figure IV.33 – Chronologie du développement du code MULTICOR3D++

programmation (API) Open MP afin de diminuer le temps d'exécution. Des outils de post-traitements ont également été mis en place afin de permettre l'étude des contraintes ou des déformations traduisant l'état mécanique du matériau étudié, ou encore la température et le flux de

chaleur liés à la modélisation des transferts thermiques. Le code est également muni à cet effet d'une interface graphique implémentée à l'aide de la librairie OpenGL. Ma première contribution a consisté à développer un modèle de décohésion interfaciale à mode mixte destiné à des matériaux composites à fibres courtes : le PA6/GF30. Sur la base des travaux d'Hamza Haddad [198, 191] et Alexandre Alhajj Hassan [196] sur le transfert thermique par conduction et le couplage thermo-hydrrique, j'ai développé, comme deuxième contribution, un modèle de couplage thermo-hygro-mécanique dans le contexte d'une étude de vieillissement hygrothermique du PA6/GF30.

Plusieurs perspectives de développement sont envisagées dans MULTICOR3D++. Il s'agit tout d'abord d'implémenter le couplage MED/MEF en 3D, celui-ci n'étant présent à l'heure actuelle que dans la version 2D du code. Il s'agit par ailleurs d'introduire le comportement ductile des matériaux et leur éventuelle anisotropie afin d'élargir le champ d'application du code MULTICOR3D++. Des perspectives dans les domaines électrique, piézoélectrique et fabrication additive sont également envisagées.



# Annexe A

Dans l'optique de modéliser le matériau composite PA6/GF30 via la MED, nous avons préalablement besoin d'identifier les paramètres microscopiques associés à chaque constituant, à savoir la fibre et la matrice. L'idée est qu'à chaque paire de paramètres microscopiques  $E_\mu$  et  $r_\mu$  est associée une paire de paramètres macroscopiques  $E_M$  et  $\nu_M$ , où  $E_M$  est a priori différent de  $E_\mu$ . Il faut cependant préciser que le matériau étant ici constitué de deux phases, à savoir la matrice et les fibres, il est donc en réalité nécessaire de déterminer un couple de propriétés microscopiques à chaque constituant. Rappelons que les propriétés élastiques macroscopiques visées du PA6 et de la fibre de verre de type E sont fournies dans le chapitre II de la manuscrit. Le principe de la calibration consiste à relier les propriétés microscopiques aux propriétés macroscopiques à l'aide d'abaques obtenues sur une large gamme de propriétés microscopiques ( $r_\mu \in [0.05, 0.9]$  et  $E_\mu \in [2 \text{ GPa}, 1000 \text{ GPa}]$ , voir Figure IV.34).

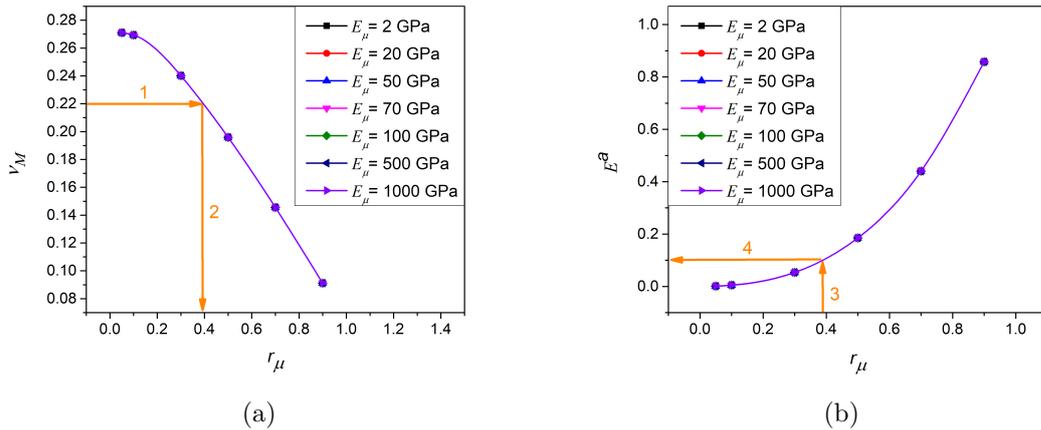


Figure IV.34 – Effet du paramètre  $r_\mu$  sur (a) le coefficient de Poisson  $\nu_M$  et (b) le module de Young adimensionné  $E^a$

Connaissant  $\nu_M$ , nous pouvons déterminer  $r_\mu$  à partir de la Figure IV.34(a). Ensuite, en utilisant la valeur de  $r_\mu$ , le paramètre  $E^a$  correspondant est déterminé à partir de la Figure IV.34(b). Enfin  $E_\mu$  est estimé via la relation reliant le module de Young macroscopique  $E_M$  au module de Young

adimensionné  $E^a = \frac{E_M}{E_\mu}$ .

# Bibliographie

- [1] <https://unfccc.int/cop25>.
- [2] <https://weitechplastic.en.made-in-china.com/product/vBbncNVJfwpl/China-Plastic-Injection-Tool-for-Auto-Part-PA6-GF30-Bracket.html>.
- [3] A. Berthereau and E. Dallies. Fibres de verre de renforcement. *Editions TI/Techniques de l'Ingénieur*, 2008.
- [4] M. Parit and Z. Jiang. Towards lignin derived thermoplastic polymers. *International Journal of Biological Macromolecules*, 165 :3180–3197, 2020.
- [5] A. Afio, K. Komi, and A. Dibatoko. Study of PMMA Transition Interphase by Ring-Shear Method. *Materials Today : Proceedings*, 22 :2132–2139, 2020.
- [6] M. Reyne. *Solutions composites : Thermodurcissables et thermoplastiques*. JEC publ, 2006.
- [7] J.L. Halary and F. Lauprêtre. *Mécanique des matériaux polymères*. Belin Éducation, 2015.
- [8] C. Oudet. Polymères. *Structure et Propriétés*. Masson : Paris, 1994.
- [9] P. Combette. Physique des polymères. vol. 1, structure, fabrication et emploi. 2005.
- [10] M. Marzano and P. Celle. les matériaux composites. *Rapport technique, Association Nationale pour la Formation Automobile*, 2014.
- [11] Y. Yoo, M.W. Spencer, and D.R. Paul. Morphology and mechanical properties of glass fiber reinforced nylon 6 nanocomposites. *Polymer*, 52(1) :180–190, 2011.
- [12] J.W. Cho and D.R. Paul. Nylon 6 nanocomposites by melt compounding. *Polymer*, 42(3) :1083–1094, 2001.
- [13] S.H. Wu, F.Y. Wang, C.C.M. Ma, W.C. Chang, C.T. Kuo, H.C. Kuan, and W.J. Chen. Mechanical, thermal and morphological properties of glass fiber and carbon fiber reinforced polyamide-6 and polyamide-6/clay nanocomposites. *Materials Letters*, 49(6) :327–333, 2001.

- [14] A. Güllü, A. Özdemir, and E. Özdemir. Experimental investigation of the effect of glass fibres on the mechanical properties of polypropylene (PP) and polyamide 6 (PA6) plastics. *Materials & Design*, 27(4) :316–323, 2006.
- [15] B. Mouhmid, A. Imad, N. Benseddiq, S. Benmedakhène, and A. Maazouz. A study of the mechanical behaviour of a glass fibre reinforced polyamide 6, 6 : Experimental investigation. *Polymer Testing*, 25(4) :544–552, 2006.
- [16] H. Nouri. *Modélisation et identification de lois de comportement avec endommagement en fatigue polycyclique de matériaux composite a matrice thermoplastique*. PhD thesis, Arts et Métiers ParisTech, 2009.
- [17] G.M. Velez-Garcia. *Experimental evaluation and simulations of fiber orientation in injection molding of polymers containing short glass fibers*. PhD thesis, Virginia Tech, 2012.
- [18] M. Gupta and K.K. Wang. Fiber orientation and mechanical properties of short-fiber-reinforced injection-molded composites : Simulated and experimental results. *Polymer Composites*, 14(5) :367–382, 1993.
- [19] A. Dupuis, J.J. Pesce, P. Ferreira, and G. Régnier. Fiber Orientation and Concentration in an Injection-Molded Ethylene-Propylene Copolymer Reinforced by Hemp. *Polymers*, 12(12) :2771, 2020.
- [20] L. Avérous, J.C. Quantin, and Al. Crespy. Determination of the microtexture of reinforced thermoplastics by image analysis. *Composites Science and Technology*, 58(3-4) :377–387, 1998.
- [21] J. Wang, P. Cook, A. Bakharev, F. Costa, and D. Astbury. Prediction of fiber orientation in injection-molded parts using three-dimensional simulations. In *AIP conference proceedings*, volume 1713, page 040007. AIP Publishing LLC, 2016.
- [22] H.C. Tseng, R.Y. Chang, and C.H. Hsu. Predictions of fiber concentration in injection molding simulation of fiber-reinforced composites. *Journal of Thermoplastic Composite Materials*, 31(11) :1529–1544, 2018.
- [23] H. Rolland, N. Saintier, N. Lenoir, A. King, and G. Robert. Fatigue mechanisms description in short glass fibre reinforced thermoplastic by microtomographic observations. *Procedia Structural Integrity*, 2 :301–308, 2016.
- [24] Z. Tadmor. Molecular orientation in injection molding. *Journal of Applied Polymer Science*, 18(6) :1753–1772, 1974.

- [25] D. Masato, J. Rathore, M. Sorgato, S. Carmignato, and G. Lucchetta. Analysis of the shrinkage of injection-molded fiber-reinforced thin-wall parts. *Materials & Design*, 132 :496–504, 2017.
- [26] M. Nciri, D. Notta-Cuvier, F. Lauro, F. Chaari, Y. Maalej, and B. Zouari. Modelling and characterisation of dynamic behaviour of short-fibre-reinforced composites. *Composite Structures*, 160 :516–528, 2017.
- [27] J.L. Thomason. The influence of fibre length, diameter and concentration on the impact performance of long glass-fibre reinforced polyamide 6, 6. *Composites Part A : Applied Science and Manufacturing*, 40(2) :114–124, 2009.
- [28] J.L. Thomason. The influence of fibre length, diameter and concentration on the strength and strain to failure of glass fibre-reinforced polyamide 6, 6. *Composites Part A : Applied Science and Manufacturing*, 39(10) :1618–1624, 2008.
- [29] J.L. Thomason. Micromechanical parameters from macromechanical measurements on glass reinforced polypropylene. *Composites Science and Technology*, 62(10-11) :1455–1468, 2002.
- [30] A. Bernasconi, P. Davoli, A. Basile, and A. Filippi. Effect of fibre orientation on the fatigue behaviour of a short glass fibre reinforced polyamide-6. *International Journal of Fatigue*, 29(2) :199–208, 2007.
- [31] S. Erden and K. Ho. Fiber reinforced composites. In *Fiber Technology for Fiber-Reinforced Composites*, pages 51–79. Elsevier, 2017.
- [32] D.M. Laura, H. Keskkula, J.W. Barlow, and D.R. Paul. Effect of glass fiber surface chemistry on the mechanical properties of glass fiber reinforced, rubber-toughened nylon 6. *Polymer*, 43(17) :4673–4687, 2002.
- [33] U. Göschel, W. Lutz, and N.C. Davidson. The influence of a polymeric nucleating additive on the crystallisation in glass fibre reinforced polyamide 6 composites. *Composites Science and Technology*, 67(11-12) :2606–2615, 2007.
- [34] E.K. Gamstedt, L. A Berglund, and T. Peijs. Fatigue mechanisms in unidirectional glass-fibre-reinforced polypropylene. *Composites Science and Technology*, 59(5) :759–768, 1999.
- [35] Z.N. Azwa, B.F. Yousif, A.C. Manalo, and W. Karunasena. A review on the degradability of polymeric composites based on natural fibres. *Materials & Design*, 47 :424–442, 2013.

- [36] J. Jedidi, F. Jacquemin, and A. Vautrin. Accelerated hygrothermal cyclical tests for carbon/epoxy laminates. *Composites Part A : Applied Science and Manufacturing*, 37(4) :636–645, 2006.
- [37] S. Roy, W.X. Xu, S.J. Park, and K.M. Liechti. Anomalous moisture diffusion in viscoelastic polymers : modeling and testing. *Journal of Applied Mechanics*, 67(2) :391–396, 2000.
- [38] S. Popineau, C. Rondeau-Mouro, C. Sulpice-Gaillet, and M.E.R. Shanahan. Free/bound water absorption in an epoxy adhesive. *Polymer*, 46(24) :10733–10740, 2005.
- [39] B.E. Sar, S. Fréour, P. Davies, and F. Jacquemin. Accounting for differential swelling in the multi-physics modelling of the diffusive behaviour of polymers. *Journal of Applied Mathematics and Mechanics*, 94(6) :452–460, 2014.
- [40] A. Bergeret, I. Pires, M.P. Foulc, B. Abadie, L. Ferry, and A. Crespy. The hygrothermal behaviour of glass-fibre-reinforced thermoplastic composites : a prediction of the composite lifetime. *Polymer Testing*, 20(7) :753–763, 2001.
- [41] Y.J. Phua, W.S. Chow, and Z.A.M. Ishak. The hydrolytic effect of moisture and hygrothermal aging on poly (butylene succinate)/organo-montmorillonite nanocomposites. *Polymer Degradation and Stability*, 96(7) :1194–1203, 2011.
- [42] A. Regazzi. *Contribution à l'étude du vieillissement couplé thermo-hydro-mécanique de biocomposite PLA/lin*. PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2013.
- [43] B. Fayolle and J. Verdu. *Vieillissement physique des matériaux polymères*, Techniques de l'Ingénieur, 2005.
- [44] K. Te Nijenhuis and D.W. Van Krevelen. *Properties of polymers*, 2009.
- [45] P. Castaing. *Vieillissement des matériaux composites verre-polyester en milieu marin : délamination d'origine osmotique*. PhD thesis, Institut national polytechnique de Toulouse, 1992.
- [46] G.A. Testoni. *In situ long-term durability analysis of biocomposites in the marine environment*. PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2015.
- [47] M.J. Adamson. Thermal expansion and swelling of cured epoxy resin used in graphite/epoxy composite materials. *Journal of Materials Science*, 15(7) :1736–1745, 1980.

- [48] J. Verdu. *Action de l'eau sur les plastiques*. Ed. Techniques Ingénieur, 2000.
- [49] H.P. Abeysinghe, W. Edwards, G. Pritchard, and G.J. Swampillai. Degradation of crosslinked resins in water and electrolyte solutions. *Polymer*, 23(12) :1785–1790, 1982.
- [50] A. Salem, W. Bensalah, and S. Mezlini. Effect of hygrothermal aging on the tribological behavior of hdpe composites for bio-implant application. *Polymer Testing*, 94 :107050, 2021.
- [51] B.C. Ray. Temperature effect during humid ageing on interfaces of glass and carbon fibers reinforced epoxy composites. *Journal of Colloid and Interface Science*, 298(1) :111–117, 2006.
- [52] D. Ferreno, I. Carrascal, E. Ruiz, and J.A. Casado. Characterisation by means of a finite element model of the influence of moisture content on the mechanical and fracture properties of the polyamide 6 reinforced with short glass fibre. *Polymer Testing*, 30(4) :420–428, 2011.
- [53] M. Assarar, D. Scida, A. El Mahi, C. Poilâne, and R. Ayad. Influence of water ageing on mechanical properties and damage events of two reinforced composite materials : Flax–fibres and glass–fibres. *Materials & Design*, 32(2) :788–795, 2011.
- [54] V. Miri, O. Persyn, J.M. Lefebvre, and R. Seguela. Effect of water absorption on the plastic deformation behavior of nylon 6. *European Polymer Journal*, 45(3) :757–762, 2009.
- [55] I. Ksouri, O. De Almeida, and N. Haddar. Long term ageing of polyamide 6 and polyamide 6 reinforced with 30% of glass fibers : physicochemical, mechanical and morphological characterization. *Journal of Polymer Research*, 24(8) :1–12, 2017.
- [56] J.C. Halpin and J.L. Kardos. The halpin-tsai equations : a review. *Polymer Engineering & Science*, 16(5) :344–352, 1976.
- [57] R. Hill. Theory of mechanical properties of fibre-strengthened materials : I. elastic behaviour. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 12(4) :199–212, 1964.
- [58] J.J. Hermans. The elastic properties of fiber reinforced materials when fibers are aligned. *Koninklijke Nederlandse Akademie Van Wetenschappen-Proceedings Series B-Physical Sciences*, 70(1) :1–9, 1967.
- [59] R.L. Hewitt and M.C. De Malherbe. An approximation for the longitudinal shear modulus of continuous fibre composites. *Journal of Composite Materials*, 4(2) :280–282, 1970.

- [60] A. Kulkarni, N. Aswini, C.R. Dandekar, and S. Makhe. Modeling of short fiber reinforced injection moulded composite. *IOP Conference Series : Materials Science and Engineering*, 40(1) :012025, 2012.
- [61] C.C. Roach. Effect of Interlayers on Mechanical Properties and Interfacial Stress Transfer of 2D Layered Graphene-Polymer Nanocomposites. *Theses and Dissertations–Mechanical Engineering*, 2017.
- [62] D.K. Bagal, M. Ray, and S. Bhoi. Mechanical Characterization of GPL/Polymer Nanocomposite Structure using Finite Element Analysis and SCILAB. *International Journal of Applied Engineering Research*, 14(1) :69–78, 2019.
- [63] C.L. Tucker III and E. Liang. Stiffness predictions for unidirectional short-fiber composites : review and evaluation. *Composites Science and Technology*, 59(5) :655–671, 1999.
- [64] A.A. Gusev, P.J. Hine, and I.M. Ward. Fiber packing and elastic properties of a transversely random unidirectional glass/epoxy composite. *Composites Science and Technology*, 60(4) :535–541, 2000.
- [65] J.D. Eshelby. The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems. *Proceedings of the royal society of London. Series A. Mathematical and physical sciences*, 241(1226) :376–396, 1957.
- [66] T. Mori and K. Tanaka. Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions. *Acta metallurgica*, 21(5) :571–574, 1973.
- [67] A. Al-Maghribi. *Comportement des matériaux composites à fibres courtes : applications à l'impact basse vitesse*. PhD thesis, Université de Toulouse, Université Toulouse III-Paul Sabatier, 2008.
- [68] L. Poh, C. Della, S. Ying, C. Goh, and Y. Li. Micromechanics model for predicting effective elastic moduli of porous ceramic matrices with randomly oriented carbon nanotube reinforcements. *AIP Advances*, 5(9) :097153, 2015.
- [69] V.P. Tran, S. Brisard, J. Guilleminot, and K. Sab. Mori–Tanaka estimates of the effective elastic properties of stress-gradient composites. *International Journal of Solids and Structures*, 146 :55–68, 2018.
- [70] D. Moukadiri. Développement d’une approche numérique par la med pour la prédiction des propriétés mécaniques des matériaux hétérogènes avec prise en compte de leur variabilité : Application aux matériaux composites biosourcés. 2019.

- [71] G.P. Tandon and G.J. Weng. Average stress in the matrix and effective moduli of randomly oriented composites. *Composites Science and Technology*, 27(2) :111–132, 1986.
- [72] J.E. Middleton. *Elastic property prediction of long fiber composites using a uniform mesh finite element method*. University of Missouri-Columbia, 2008.
- [73] A. Mahmum and S. Kirtania. Evaluation of elastic properties of graphene nanoplatelet/epoxy nanocomposites. *Materials Today : Proceedings*, 44 :1531–1535, 2021.
- [74] H.R. Lusti, P.J. Hine, and A.A. Gusev. Direct numerical predictions for the elastic and thermoelastic properties of short fibre composites. *Composites Science and Technology*, 62(15) :1927–1934, 2002.
- [75] N. Rauter and R. Lammering. Correlation structure in the elasticity tensor for short fiber-reinforced composites. *Probabilistic Engineering Mechanics*, 62 :103100, 2020.
- [76] A. Gusev, H.R. Lusti, and P.J. Hine. Stiffness and thermal expansion of short fiber composites with fully aligned fibers. *Advanced Engineering Materials*, 4(12) :927–931, 2002.
- [77] V.P. Nguyen, M. Stroeve, and L.J. Sluys. Multiscale continuous and discontinuous modeling of heterogeneous materials : a review on recent developments. *Journal of Multiscale Modelling*, 3(04) :229–270, 2011.
- [78] M. Ostoja-Starzewski. Random field models of heterogeneous materials. *International Journal of Solids and Structures*, 35(19) :2429–2455, 1998.
- [79] K. Sab. On the homogenization and the simulation of random materials. *European Journal of Mechanics. A. Solids*, 11(5) :585–607, 1992.
- [80] A.A. Gusev. Numerical identification of the potential of whisker-and platelet-filled polymers. *Macromolecules*, 34(9) :3081–3093, 2001.
- [81] S.T. Tu, W.Z. Cai, Y. Yin, and X. Ling. Numerical simulation of saturation behavior of physical properties in composites with randomly distributed second-phase. *Journal of Composite Materials*, 39(7) :617–631, 2005.
- [82] Y. Pan, L. Iorga, and A.A. Pelegri. Analysis of 3D random chopped fiber reinforced composites using FEM and random sequential adsorption. *Computational Materials Science*, 43(3) :450–461, 2008.
- [83] D. Beicha, T. Kanit, Y. Brunet, A. Imad, A. El Moumen, and Y. Khelifaoui. Effective transverse elastic properties of unidirectional fiber reinforced composites. *Mechanics of Materials*, 102 :47–53, 2016.

- [84] S. Kari, H. Berger, and U. Gabbert. Numerical evaluation of effective material properties of randomly distributed short cylindrical fibre composites. *Computational Materials Science*, 39(1) :198–204, 2007.
- [85] B. Wang, R.X. Wang, and Y. Wu. The Young’s moduli prediction of random distributed short-fiber-reinforced polypropylene foams using finite element method. *Science in China Series E : Technological Sciences*, 52(1) :72–78, 2009.
- [86] H.J. Böhm, A. Eckschlager, and W. Han. Multi-inclusion unit cell models for metal matrix composites with randomly oriented discontinuous reinforcements. *Computational Materials Science*, 25(1-2) :42–53, 2002.
- [87] D. Duschlbauer, H.J. Böhm, and H.E. Pettermann. Computational simulation of composites reinforced by planar random fibers : homogenization and localization by unit cell and mean field approaches. *Journal of Composite Materials*, 40(24) :2217–2234, 2006.
- [88] J. Modniks, R. Joffe, and J. Andersons. Model of the mechanical response of short flax fiber reinforced polymer matrix composites. *Procedia Engineering*, 10 :2016–2021, 2011.
- [89] J. Modniks and J. Andersons. Modeling elastic properties of short flax fiber-reinforced composites by orientation averaging. *Computational Materials Science*, 50(2) :595–599, 2010.
- [90] F.K.F. Radtke, A. Simone, and L.J. Sluys. A partition of unity finite element method for obtaining elastic properties of continua with embedded thin fibres. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 84(6) :708–732, 2010.
- [91] F.K.F. Radtke, A. Simone, and L.J. Sluys. A partition of unity finite element method for simulating non-linear debonding and matrix failure in thin fibre composites. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 86(4-5) :453–476, 2011.
- [92] N. Challamel, Z. Zhang, and C.M. Wang. Nonlocal equivalent continua for buckling and vibration analyses of microstructured beams. *Journal of Nanomechanics and Micromechanics*, 5(1) :A4014004, 2015.
- [93] M.G. Pike and C. Oskay. Three-dimensional modeling of short fiber-reinforced composites with extended finite-element method. *Journal of Engineering Mechanics*, 142(11) :04016087, 2016.
- [94] H. Moulinec and P. Suquet. A fast numerical method for computing the linear and nonlinear mechanical properties of composites. *Comptes*

*rendus de l'Académie des sciences. Série II. Mécanique, physique, chimie, astronomie.*, 1994.

- [95] R. Zeller and P.H. Dederichs. Elastic constants of polycrystals. *Physica Status Solidi (b)*, 55(2) :831–842, 1973.
- [96] E. Kröner. Bounds for effective elastic moduli of disordered materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 25(2) :137–155, 1977.
- [97] T. Mura. *Micromechanics of Defects in Solids*, Kluwer Academic Publishers. Dordrecht, The Netherlands, 1987.
- [98] E. Ghossein and M. Lévesque. A fully automated numerical tool for a comprehensive validation of homogenization models and its application to spherical particles reinforced composites. *International Journal of Solids and Structures*, 49(11-12) :1387–1398, 2012.
- [99] J. Spahn, H. Andrae, M. Kabel, R. Müller, and C. Linder. Multiscale modeling of progressive damage in elasto-plastic composite materials. In *Proceedings of the 11th World Congress on Computational Mechanics*, 2014.
- [100] V. Müller, M. Kabel, H. Andrä, and T. Böhlke. Homogenization of linear elastic properties of short-fiber reinforced composites—a comparison of mean field and voxel-based methods. *International Journal of Solids and Structures*, 67 :56–70, 2015.
- [101] Y. Ismail, Y. Sheng, D. Yang, and J. Ye. Discrete element modelling of unidirectional fibre-reinforced polymers under transverse tension. *Composites Part B : Engineering*, 73 :118–125, 2015.
- [102] W. Leclerc, H. Haddad, and M. Guessasma. On the suitability of a Discrete Element Method to simulate cracks initiation and propagation in heterogeneous media. *International Journal of Solids and Structures*, 108 :98–114, 2017.
- [103] W. Leclerc. Discrete element method to simulate the elastic behavior of 3D heterogeneous continuous media. *International Journal of Solids and Structures*, 121 :86–102, 2017.
- [104] F. Nonato and K.L. Cavalca. An approach for including the stiffness and damping of elastohydrodynamic point contacts in deep groove ball bearing equilibrium models. *Journal of Sound and Vibration*, 333(25) :6960–6978, 2014.
- [105] P.A. Cundall and O.D.L. Strack. A discrete numerical model for granular assemblies. *Geotechnique*, 29(1) :47–65, 1979.

- [106] N.H.T. Nguyen, H.H. Bui, G.D. Nguyen, and J. Kodikara. A cohesive damage-plasticity model for dem and its application for numerical investigation of soft rock fracture properties. *International Journal of Plasticity*, 98 :175–196, 2017.
- [107] W. Leclerc, A. Ammar, D. Moukadiri, T. Dridi, and M. Guessasma. Halo approach to model cracks initiation and propagation in 3D Discrete Element Method simulation of homogeneous and heterogeneous materials. *Composite Structures*, page 113222, 2020.
- [108] D.O. Potyondy and P.A. Cundall. A bonded-particle model for rock. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, 41(8) :1329–1364, 2004.
- [109] E. Schlangen and E.J. Garboczi. Fracture simulations of concrete using lattice models : computational aspects. *Engineering fracture mechanics*, 57(2-3) :319–332, 1997.
- [110] D. André, I. Iordanoff, J.L. Charles, and J. Néauport. Discrete element method to simulate continuous material by using the cohesive beam model. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 213 :113–125, 2012.
- [111] H. Haddad, W. Leclerc, M. Guessasma, C. Pélegris, N. Ferguen, and E. Bellenger. Application of DEM to predict the elastic behavior of particulate composite materials. *Granular Matter*, 17(4) :459–473, 2015.
- [112] D. Moukadiri, W. Leclerc, K. Khellil, Z. Aboura, M. Guessasma, E. Bellenger, and F. Druésne. Halo approach to evaluate the stress distribution in 3D discrete element method simulation : Validation and application to flax/bio based epoxy composite. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 27(6) :065005, 2019.
- [113] B.D. Le, F. Dau, J.L. Charles, and I. Iordanoff. Modeling damages and cracks growth in composite with a 3D discrete element method. *Composites Part B : Engineering*, 91 :615–630, 2016.
- [114] D. Notta-Cuvier, F. Lauro, and B. Bennani. Modelling of progressive fibre/matrix debonding in short-fibre reinforced composites up to failure. *International Journal of Solids and Structures*, 66 :140–150, 2015.
- [115] N. Despringre, Y. Chemisky, K. Bonnay, and F. Meraghni. Micromechanical modeling of damage and load transfer in particulate composites with partially debonded interface. *Composite Structures*, 155 :77–88, 2016.

- [116] M.A. Laribi, R. TieBi, S. Tamboura, M. Shirinbayan, A. Tcharkhtchi, H.B. Dali, and J. Fitoussi. Sheet Molding Compound Automotive Component Reliability Using a Micromechanical Damage Approach. *Applied Composite Materials*, 27(5) :693–715, 2020.
- [117] R. Krueger. The virtual crack closure technique for modeling interlaminar failure and delamination in advanced composite materials. In *Numerical modelling of failure in advanced composite materials*, pages 3–53. Elsevier, 2015.
- [118] M.A. Jimenez and A. Miravete. Application of the finite-element method to predict the onset of delamination growth. *Journal of Composite Materials*, 38(15) :1309–1335, 2004.
- [119] M. Heidari-Rarani and M. Sayedain. Finite element modeling strategies for 2D and 3D delamination propagation in composite DCB specimens using VCCT, CZM and XFEM approaches. *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*, 103 :102246, 2019.
- [120] N. Garg, B.G. Prusty, E.T. Ooi, C. Song, G. Pearce, and A.W. Phillips. Application of scaled boundary finite element method for delamination analysis of composite laminates using cohesive zone modelling. *Composite Structures*, 253 :112773, 2020.
- [121] M. Heidari-Rarani, M.M. Shokrieh, and P.P. Camanho. Finite element modeling of mode I delamination growth in laminated DCB specimens with R-curve effects. *Composites Part B : Engineering*, 45(1) :897–903, 2013.
- [122] C. Fan, P.Y.B. Jar, and J.J.R. Cheng. Cohesive zone with continuum damage properties for simulation of delamination development in fibre composites and failure of adhesive joints. *Engineering Fracture Mechanics*, 75(13) :3866–3880, 2008.
- [123] N. Hu, Y. Zemba, H. Fukunaga, H.H. Wang, and A.M. Elmarakbi. Stable numerical simulations of propagations of complex damages in composite structures under transverse loads. *Composites Science and Technology*, 67(3-4) :752–765, 2007.
- [124] V. Tvergaard. Debonding of short fibres among particulates in a metal matrix composite. *International Journal of Solids and Structures*, 40(25) :6957–6967, 2003.
- [125] A.Y. Matveeva, S.V. Lomov, and L. Gorbatikh. Debonding at the fiber/matrix interface in carbon nanotube reinforced composites : Modelling investigation. *Computational Materials Science*, 159 :412–419, 2019.

- [126] P.W. Harper and S.R. Hallett. Cohesive zone length in numerical simulations of composite delamination. *Engineering Fracture Mechanics*, 75(16) :4774–4792, 2008.
- [127] N. Moës, J. Dolbow, and T. Belytschko. A finite element method for crack growth without remeshing. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 46(1) :131–150, 1999.
- [128] D. Motamedi, A.S. Milani, et al. 3D nonlinear XFEM simulation of delamination in unidirectional composite laminates : a sensitivity analysis of modeling parameters. *Open Journal of Composite Materials*, 3(04) :113, 2013.
- [129] L. Maheo, F. Dau, D. Andre, J.L. Charles, and I. Iordanoff. A promising way to model cracks in composite using discrete element method. *Composites Part B : Engineering*, 71 :193–202, 2015.
- [130] D. Yang, J. Ye, Y. Tan, and Y. Sheng. Modeling progressive delamination of laminated composites by discrete element method. *Computational Materials Science*, 50(3) :858–864, 2011.
- [131] H. Chen, Y. Zhang, L. Zhu, F. Xiong, J. Liu, and W. Gao. A Particle-Based Cohesive Crack Model for Brittle Fracture Problems. *Materials*, 13(16) :3573, 2020.
- [132] X. Liu, R. Duddu, and H. Waisman. Discrete damage zone model for fracture initiation and propagation. *Engineering Fracture Mechanics*, 92 :1–18, 2012.
- [133] H.A. Carmona, F.K. Wittel, F. Kun, and H.J. Herrmann. Fragmentation processes in impact of spheres. *Physical Review E*, 77(5) :051302, 2008.
- [134] D. André, M. Jebahi, I. Iordanoff, J.L. Charles, and J. Néauport. Using the discrete element method to simulate brittle fracture in the indentation of a silica glass with a blunt indenter. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 265 :136–147, 2013.
- [135] D. Yang, Y. Sheng, J. Ye, and Y. Tan. Discrete element modeling of the microbond test of fiber reinforced composite. *Computational materials science*, 49(2) :253–259, 2010.
- [136] Y. Ismail, D. Yang, and J. Ye. A DEM model for visualising damage evolution and predicting failure envelope of composite laminae under biaxial loads. *Composites Part B : Engineering*, 102 :9–28, 2016.
- [137] T. Peret, A. Clément, S. Fréour, and F. Jacquemin. Numerical transient hygro-elastic analyses of reinforced fickian and non-fickian polymers. *Composite Structures*, 116 :395–403, 2014.

- [138] G. Rambert and J.C. Grandidier. An approach to the coupled behaviour of polymers subjected to a thermo-mechanical loading in a gaseous environment. *European Journal of Mechanics-A/Solids*, 24(1) :151–168, 2005.
- [139] J. Mercier, A. Bunsell, P. Castaing, and J. Renard. Characterisation and modelling of aging of composites. *Composites Part A : Applied Science and Manufacturing*, 39(2) :428–438, 2008.
- [140] X. Jiang, H. Kolstein, and F.S.K. Bijlaard. Moisture diffusion in glass–fiber-reinforced polymer composite bridge under hot/wet environment. *Composites Part B : Engineering*, 45(1) :407–416, 2013.
- [141] A. Regazzi, R. Léger, S. Corn, and P. Ienny. Modeling of hydrothermal aging of short flax fiber reinforced composites. *Composites Part A : Applied Science and Manufacturing*, 90 :559–566, 2016.
- [142] J. Crank. *The mathematics of diffusion*. Oxford university press, 1979.
- [143] A. Fick. Ueber diffusion. *Annalen der Physik*, 170(1) :59–86, 1855.
- [144] H.G. Carter and K.G. Kibler. Langmuir-type model for anomalous moisture diffusion in composite resins. *Journal of Composite Materials*, 12(2) :118–131, 1978.
- [145] K. Stålne and P. Gustafsson. Three-dimensional model for analysis of stiffness and hygroexpansion properties of fiber composite materials. *Journal of Engineering Mechanics*, 128(6) :654–662, 2002.
- [146] W.V. Srubar III and S.L. Billington. A micromechanical model for moisture-induced deterioration in fully biorenewable wood–plastic composites. *Composites Part A : Applied Science and Manufacturing*, 50 :81–92, 2013.
- [147] T. Joffre, E.L.G. Wernersson, A. Miettinen, C.L.L Hendriks, and E.K. Gamstedt. Swelling of cellulose fibres in composite materials : constraint effects of the surrounding matrix. *Composites Science and Technology*, 74 :52–59, 2013.
- [148] B.E. Sar, S. Fréour, P. Davies, and F. Jacquemin. Coupling moisture diffusion and internal mechanical states in polymers–A thermodynamical approach. *European Journal of Mechanics-A/Solids*, 36 :38–43, 2012.
- [149] G. Youssef, S. Fréour, and F. Jacquemin. Effects of moisture-dependent properties of constituents on the hygroscopic stresses in composite structures. *Mechanics of Composite Materials*, 45(4) :369, 2009.

- [150] F. Jacquemin and S. Fréour. Water–Mechanical Property Coupling. In *Durability of Composites in a Marine Environment*, pages 115–128. Springer, 2014.
- [151] S. Roy. Hygrothermal modeling of polymers and polymer matrix composites. In *Time dependent and nonlinear effects in polymers and composites*. ASTM International, 2000.
- [152] M.M. Hassani, F.K. Wittel, S. Hering, and H.J. Herrmann. Rheological model for wood. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 283 :1032–1060, 2015.
- [153] A. Clément, S. Fréour, and F. Jacquemin. Multiphysics modeling of the hygro-mechanical behavior of heterogeneous materials. In *Durability of Composites in a Marine Environment 2*, pages 91–112. Springer, 2018.
- [154] E.L. McKague Jr, J.D. Reynolds, and J.E. Halkias. Swelling and glass transition relations for epoxy matrix material in humid environments. *Journal of Applied Polymer Science*, 22(6) :1643–1654, 1978.
- [155] G. Youssef, S. Fréour, and F. Jacquemin. Stress-dependent moisture diffusion in composite materials. *Journal of Composite Materials*, 43(15) :1621–1637, 2009.
- [156] F. Moleiro, E. Carrera, G. Li, M. Cinefra, and J.N. Reddy. Hygro-thermo-mechanical modelling of multilayered plates : Hybrid composite laminates, fibre metal laminates and sandwich plates. *Composites Part B : Engineering*, 177 :107388, 2019.
- [157] F. Moleiro, E. Carrera, A.J.M. Ferreira, and J.N. Reddy. Hygro-thermo-mechanical modelling and analysis of multilayered plates with embedded functionally graded material layers. *Composite Structures*, 233 :111442, 2020.
- [158] J.A. Kimber, S.G. Kazarian, and F. Štěpánek. Modelling of pharmaceutical tablet swelling and dissolution using discrete element method. *Chemical Engineering Science*, 69(1) :394–403, 2012.
- [159] J.A. Kimber, S.G. Kazarian, and F. Štěpánek. DEM simulation of drug release from structurally heterogeneous swelling tablets. *Powder Technology*, 248 :68–76, 2013.
- [160] H. Péron, J.Y. Delenne, L. Laloui, and M.S. El Youssoufi. Discrete element modelling of drying shrinkage and cracking of soils. *Computers and Geotechnics*, 36(1-2) :61–69, 2009.

- [161] H.C.P. Karunasena, W. Senadeera, R.J. Brown, and Y.T. Gu. Simulation of plant cell shrinkage during drying—A SPH–DEM approach. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 44 :1–18, 2014.
- [162] J. Azmir, Q. Hou, and A. Yu. Discrete particle simulation of food grain drying in a fluidised bed. *Powder Technology*, 323 :238–249, 2018.
- [163] M.F. Arif. *Damage mechanisms in short glass fiber reinforced polyamide-66 under monotonic and fatigue loading : Effect of relative humidity and injection molding induced microstructure*. PhD thesis, Arts&Métiers ParisTech Metz, 2014.
- [164] <https://www.polymeres.com.tn>.
- [165] B. Vergnes and M. Chapet. Extrusion : Procédés d’extrusion bivis. *Techniques de l’ingénieur. Plastiques et composites*, (AM3653) :AM3653–1, 2001.
- [166] T. Munch. Moules pour l’injection des thermoplastiques-généralités et périphériques. *Editions TI/ Techniques de l’Ingénieur*, 2010.
- [167] A. Redjeb. *Simulation numérique de l’orientation de fibres en injection de thermoplastique renforcé*. PhD thesis, École Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2007.
- [168] M. Vincent, Y. Germain, and J.F. Agassant. Numerical and experimental study of the fiber motion in reinforced thermoplastic flows. In *Progress and Trends in Rheology II*, pages 144–146. Springer, 1988.
- [169] M.A. Mbacke. *Caractérisation et modélisation du comportement mécanique des composites tressés 3D : Application à la conception de réservoirs GNV*. PhD thesis, Paris, ENMP, 2013.
- [170] I. Ksouri, N. Guermazi, N. Haddar, and H.F Ayedi. Effects of processing steps and hygrothermal ageing on mechanical performance of PA6GF30 composite : Interfacial shear strength. *Polymer Composites*, 39(2) :504–512, 2018.
- [171] J.L. Thomason. Structure–property relationships in glass-reinforced polyamide, part 1 : The effects of fiber content. *Polymer Composites*, 27(5) :552–562, 2006.
- [172] J.P. Tancrez, F. Rietsch, and J. Pabiot. Caractérisation des longueurs de fibres dans différents types de composites polypropylène-fibres de verre courtes—1. Methodologie, étude des matériaux avant injection. *European Polymer Journal*, 30(7) :803–808, 1994.

- [173] A. Bernasconi, P. Davoli, and C. Armani. Fatigue strength of a clutch pedal made of reprocessed short glass fibre reinforced polyamide. *International Journal of Fatigue*, 32(1) :100–107, 2010.
- [174] I. Ksouri and N. Haddar. Long term ageing of polyamide 6 and polyamide 6 reinforced with 30% of glass fibers : temperature effect. *Journal of Polymer Research*, 25(7) :1–12, 2018.
- [175] M.L. Williams. The stresses around a fault or crack in dissimilar media. *Bulletin of the seismological society of America*, 49(2) :199–204, 1959.
- [176] A. Agrawal and A.M. Karlsson. Obtaining mode mixity for a bimaterial interface crack using the virtual crack closure technique. *International Journal of Fracture*, 141(1-2) :75–98, 2006.
- [177] A. Ammar, W. Leclerc, M. Guessasma, and N. Haddar. Discrete element approach to simulate debonding process in 3d short glass fibre composite materials : Application to pa6/gf30. *Composite Structures*, 270 :114035, 2021.
- [178] W. Leclerc. Effect of packing characteristics on the simulation of elasticity and brittle fracture by the Cohesive Discrete Element Method. *Granular Matter*, 21(2) :17, 2019.
- [179] A. Donev, I. Cisse, D. Sachs, E.A. Variano, F.H. Stillinger, R. Connelly, S. Torquato, and P.M. Chaikin. Improving the density of jammed disordered packings using ellipsoids. *Science*, 303(5660) :990–993, 2004.
- [180] B. Cambou. Micromechanical approach in granular materials. In *Behaviour of granular materials*, pages 171–216. Springer, 1998.
- [181] G.P. Tandon and G.J. Weng. The effect of aspect ratio of inclusions on the elastic properties of unidirectionally aligned composites. *Polymer Composites*, 5(4) :327–333, 1984.
- [182] M.F.S.F. De Moura and A.B. De Morais. Equivalent crack based analyses of ENF and ELS tests. *Engineering Fracture Mechanics*, 75(9) :2584–2596, 2008.
- [183] M. Ilyas. *Damage modeling of carbon epoxy laminated composites submitted to impact loading*. PhD thesis, Université de Toulouse, Institut Clément Ader, 2010.
- [184] B.R.K. Blackman, A.J. Brunner, and J.G. Williams. Mode II fracture testing of composites : a new look at an old problem. *Engineering Fracture Mechanics*, 73(16) :2443–2455, 2006.

- [185] D. Xie and A.M. Waas. Discrete cohesive zone model for mixed-mode fracture using finite element analysis. *Engineering Fracture Mechanics*, 73(13) :1783–1796, 2006.
- [186] L. De Lorenzis, D. Fernando, and J.G. Teng. Coupled mixed-mode cohesive zone modeling of interfacial debonding in simply supported plated beams. *International Journal of Solids and Structures*, 50(14-15) :2477–2494, 2013.
- [187] F.J.P. Chaves, L.F.M. Da Silva, M.F.S.F. De Moura, D.A. Dillard, and V.H.C. Esteves. Fracture mechanics tests in adhesively bonded joints : a literature review. *The Journal of Adhesion*, 90(12) :955–992, 2014.
- [188] Y. Mi, M.A. Crisfield, G.A.O. Davies, and H.B. Hellweg. Progressive delamination using interface elements. *Journal of Composite Materials*, 32(14) :1246–1272, 1998.
- [189] I.G. García, M. Paggi, and V. Mantič. Fiber-size effects on the onset of fiber–matrix debonding under transverse tension :A comparison between cohesive zone and finite fracture mechanics models. *Engineering Fracture Mechanics*, 115 :96–110, 2014.
- [190] M.A. Haro Rodriguez. *Modélisation des phénomènes thermiques dans les procédés de fabrication par addition de matière de type SLM*. PhD thesis, Université de Liège, Liège, Belgique, 2016.
- [191] H. Haddad, W. Leclerc, G.A. Hassan, A. Ammar, C. Pélegris, M. Guessasma, and E. Bellenger. Numerical investigation of heat conduction in heterogeneous media with a discrete element method approach. *International Journal of Thermal Sciences*, 164 :106799, 2021.
- [192] T. Kermezli. *Etude et modélisation de la diffusivité massique dans un milieu anisotrope*. PhD thesis, Université Des Sciences Et De La Technologie Houari-boumedièn - Alger, 2010.
- [193] L. Malm, A.S.K. Danielsson, A. Sand, J. Rosenkranz, and I. Ymén. Application of dynamic vapor sorption for evaluation of hydrophobicity in industrial-scale froth flotation. *Minerals Engineering*, 127 :305–311, 2018.
- [194] L. Lallemand, J. Petit, S. Lalanne, S. Landais, S. Trombert, L. Vernhet, and R. Viroulaud. Modeling of the green body drying step to obtain large size transparent magnesium-aluminate spinel samples. *Journal of the European Ceramic Society*, 34(3) :791–799, 2014.
- [195] B. Nait-Ali, S. Oummadi, E. Portuguez, A. Alzina, and D.S. Smith. Thermal conductivity of ceramic green bodies during drying. *Journal of the European Ceramic Society*, 37(4) :1839–1846, 2017.

- [196] A. Alhajj Hassan. *Modélisation par la MED des couplages thermo-élastique et thermo-hydrrique, et de l'endommagement induit par effet thermique dans les milieux continus*. PhD thesis, Amiens, 2020.
- [197] C.R. Oswin. The kinetics of package life. III. the isotherm. *Journal of the Society of Chemical Industry*, 65(12) :419–421, 1946.
- [198] H. Haddad, W. Leclerc, and M. Guessasma. Application of the discrete element method to study heat transfer by conduction in particulate composite materials. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 26(8) :085010, 2018.
- [199] I. Terreros, I. Iordanoff, and J.L. Charles. Simulation of continuum heat conduction using dem domains. *Computational Materials Science*, 69 :46–52, 2013.
- [200] S. Suherman, M. Peglow, and E. Tsotsas. Measurement and modelling of sorption equilibrium curve of water on PA6, PP, HDPE and PVC by using flory-huggins model. *Reaktor*, 13(2) :89–94, 2010.
- [201] G. Alhajj Hassan, W. Leclerc, C. Pélegris, M. Guessasma, and E. Bellenger. On the suitability of a 3D discrete element method to model the composite damage induced by thermal expansion mismatch. *Computational Particle Mechanics*, 7 :679–698, 2020.
- [202] H. Obeid, A. Clément, S. Fréour, F. Jacquemin, and P. Casari. On the identification of the coefficient of moisture expansion of polyamide-6 : Accounting differential swelling strains and plasticization. *Mechanics of Materials*, 118 :1–10, 2018.
- [203] Y. He. Moisture absorption and hygroscopic swelling behavior of an underfill material. *Thermochimica Acta*, 546 :143–152, 2012.
- [204] M. Zhou. A new look at the atomic level virial stress : on continuum-molecular system equivalence. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 459(2037) :2347–2392, 2003.
- [205] Y.Z. Wang, G.Q. Li, Y.B. Wang, and Y.F. Lyu. Simplified method to identify full von Mises stress-strain curve of structural metals. *Journal of Constructional Steel Research*, 181 :106624, 2021.



# Production scientifique

## Article dans une revue internationale à comité de lecture

- **A. Ammar**, W. Leclerc, M. Guessasma, N. Haddar.  
*Discrete element approach to simulate debonding process in 3D short glass fibre composite materials : application to PA6/GF30. Composite Structures, 270(2021) : 114035.*
- W. Leclerc, **A. Ammar**, M. Guessasma, D. Moukadiri, T. Dridi, M. Guessasma.  
*Halo approach to model cracks initiation and propagation in 3D Discrete Element Method simulation of homogeneous and heterogeneous materials. Composite Structures, 259 : 113222, 2021.*
- H. Haddad, W. Leclerc, G. Alhajj Hassan , **A. Ammar**, C. Pélegris, M. Guessasma, E. Bellenger  
*Numerical investigation of heat conduction in heterogeneous media with a discrete element method approach. International Journal of Thermal Sciences , 164, 106799, 2021.*

## Articles dans des congrès internationaux à comité de lecture

- **A. Ahmed**, W. Leclerc, M. Guessasma, N. Haddar.  
*Numerical simulation and experimental study of mechanical behaviour and damage mechanisms of PA6/GF30 composite. The 8<sup>th</sup> International Congress Design and Modelling of Mechanical Systems CMSM'2019 ,18-20 Mars 2019, Hammamet. Tunisie.*
- W. Leclerc, **A. Ammar**, D. Moukadiri, M. Guessasma.  
*Halo approach to better simulate cracks initiation and propagation in*

*homogeneous and heterogeneous materials using DEM. 23<sup>rd</sup> International Conference on Composite Structures & 6<sup>th</sup> International Conference on Mechanics of Composites, 1-4 Septembre 2020, Porto. Portugal.*

- **A. Ahmed**, W. Leclerc, M. Guessasma, N. Haddar.  
*Discrete element approach for modelling mechanical behaviour and damage of PA6/GF30. FiBreMoD Conference, 11-12 Décembre 2019, Leuven. Blegique.*
- **A. Ahmed**, W. Leclerc, M. Guessasma, N. Haddar.  
*A promising way to predict the mechanical behaviour and the damage of a short glass fiber reinforced composite using DEM. 14<sup>th</sup> World Congress in Computational Mechanics and ECCOMAS Congress, 11-15 Janvier 2021, Congrès virtuel.*
- **A. Ahmed**, W. Leclerc, M. Guessasma, N. Haddar.  
*Discrete Element approach to simulate debonding process in 3D short glass fibre composite materials. ICCS24 -24<sup>th</sup> International Conference on Composite Structures, 14-18 Juin 2021, Congrès virtuel.*

## Articles dans des congrès nationaux à comité de lecture

- **A. Ahmed**, W. Leclerc, M. Guessasma, N. Haddar.  
*Sur la caractérisation mécanique de matériaux composites fibreux par la méthode des Éléments Discrets : Application au PA6/GF30. Colloque National en Calcul des Structures, 13-17 Mai 2019, Presqu'île de Giens (Var). France.*
- **A. Ahmed**, W. Leclerc, M. Guessasma, N. Haddar.  
*Application de la Méthode des Éléments Discrets à la simulation du comportement mécanique et de l'endommagement d'un matériau composite fibreux : PA6/GF30. Congrès Français de Mécanique, 26-30 Août 2019, Brest. France.*



# Encadrement de stages de fin d'études

- DRIDI Takwa (*Développement de la Méthode des Éléments Discrets pour la Prise en Compte de la Variabilité dans la Simulation 3D des Composites à Fibre Naturelle*)

*Projet de fin d'étude pour l'obtention du Diplôme National d'Ingénieur de l'École Polytechnique de Tunis.*

**Projet de 6 mois avec un taux d'encadrement de 33% au sein du Laboratoire des Technologies Innovantes.**

*Financement : Projet structurant VARIATION et fonds FEDER.*

- JBELI Amira (*Développement d'un modèle de couplage thermo-hydro-mécanique basé sur la MED pour la prédiction de l'endommagement de matériaux hétérogènes sous conditions hygrométriques sévères*)

*Projet de fin d'étude pour l'obtention du Diplôme National d'Ingénieur en Génie des Matériaux de l'École Nationale d'Ingénieurs de Sfax.*

**Projet de 6 mois avec un taux d'encadrement de 50% au sein du Laboratoire des Technologies Innovantes.**

*Financement : Projet Européen CUBISM dans le cadre du programme INTERREG V.*

- CHETOUANI Abdelilah (*Développement d'un modèle de couplage thermo-hydro-mécanique basé sur la MED pour la prédiction de l'endommagement du PA6/GF30 sous conditions hygrométriques*)

*Projet de fin d'étude pour l'obtention du Diplôme master recherche 2 génie des matériaux parcours physique et ingénierie des nanomatériaux, Université de Picardie Jules Verne.*

**Projet de 5 mois avec un taux d'encadrement de 50% au sein du Laboratoire des Technologies Innovantes.**

*Financement : Laboratoire LTI.*

# Résumé

Les travaux menés dans le cadre de cette thèse ont pour objectif le développement d'une approche numérique performante, basée sur la Méthode des Éléments Discrets (MED) pour simuler le comportement hygro-thermo-mécanique d'un matériau composite à fibres de verre courtes. La modélisation discrète proposée est mise en œuvre dans le cas d'un matériau composite Polyamide 6 renforcé avec 30% de fibres de verre (PA6/GF30). Tout d'abord, les propriétés mécaniques ainsi que les mécanismes d'endommagement du PA6/GF30 sont évalués expérimentalement. Ensuite, un modèle 3D par Éléments Discrets (ED), en s'appuyant sur une méthodologie originale, est développé et validé par comparaison avec des approches micromécaniques et des résultats expérimentaux, en termes de propriétés élastiques. Par ailleurs, le modèle discret mis au point est exploité afin de simuler le processus de délamination en mode I, II et mixte en utilisant un modèle de zone cohésive 3D défini selon une loi de traction-séparation bilinéaire. La décohésion interfaciale fibre/matrice sous sollicitations mécaniques, respectivement dans le cas d'un composite mono-fibre et multifibre est également étudiée. Compte tenu du caractère hydrophile du PA6, l'introduction du modèle de décohésion trouve son intérêt dans la prise en compte de l'endommagement interfacial dû à l'absorption d'eau à l'interface fibre/matrice en présence d'humidité. Par conséquent, des paramètres hygro-thermo-mécaniques sont intégrés au modèle ED afin de tenir compte du gonflement hygroscopique et de l'endommagement du PA6/GF30 dans une large gamme de conditions environnementales. Des comparaisons avec la Méthode des Éléments Finis (MEF) ont été établies afin de vérifier la validité du modèle ED proposé.

**Mots clés :** Matériau composite à fibres de verre courtes, PA6/GF30, mécanismes d'endommagement, délamination, décohésion interfaciale, gonflement hygroscopique, méthode des éléments discrets.

# Abstract

This thesis work aims at developing a powerful numerical tool based on the Discrete Element Method (DEM) to simulate the hygro-thermo-mechanical behaviour of a short glass fibre composite material. The proposed discrete modelling is performed in the case of a Polyamide 6 composite material reinforced with 30% of glass fibres (PA6/GF30). First of all, mechanical properties as well as damage mechanisms of PA6/GF30 are evaluated using experimental campaign. Then, a 3D Discrete Element (DE) model based on an original methodology is developed and validated by comparison with micromechanical approaches and experimental results in terms of elastic behaviour of PA6/GF30. Furthermore, the developed discrete model is exploited to simulate delamination process on mode I, II and mixed mode using a 3D cohesive zone model with a bilinear traction-separation law. The fibre/matrix interfacial decohesion under mechanical stress, respectively in the case of a single fibre and multi-fibre composite is also studied. Given the hydrophilic nature of PA6, the introduction of the decohesion model is interesting in order to take into account the interfacial damage due to water absorption at the fibre/matrix interface in the presence of moisture. Therefore, hygro-thermo-mechanical parameters are integrated into the discrete model in order to take into account the hygroscopic swelling and the damage of PA6/GF30 material under a wide range of environmental conditions. Comparisons with the Finite Element Method (FEM) have been established to check out the validity of the proposed DE model.

**Keywords :** Short glass fibre composite, PA6/GF30, damage mechanisms, delamination, interfacial debonding, hygroscopic swelling, discrete element method.