

Etude numérique et expérimentale du comportement des polymères chocs par une approche d'homogénéisation

Naïma Belayachi, Noureddine Benseddiq, Moussa Naït Abdelaziz

Laboratoire de mécanique de Lille (UMR CNRS 8107), USTL
Polytech'lille, Bd Paul Langevin- Cité scientifique
59655 Villeneuve d'Ascq cedex
Naima.Belayachi@polytech-lille.fr

Résumé :

Une méthode d'homogénéisation numérique par élément finis a été utilisée pour étudier le comportement mécanique des polymères renforcés par des particules d'élastomères. Le modèle axisymétrique de la cellule unique a été considéré. Le comportement de l'élastomère est décrit par un modèle Néo-Hookeen, alors que le matériau de la matrice est modélisé par le modèle elasto-viscoplastique de Perzyna. Les simulations numériques ont été réalisées pour différentes vitesses de déformation à plusieurs températures pour étudier le comportement des composites polymères. Les résultats sont en bon accord avec les mesures expérimentales sous les conditions de chargement d'une compression uniaxiale. Ce type de modélisation peut donner une meilleure connaissance des mécanismes de déformation pour le développement de ces matériaux composites d'ingénierie de pointe.

Abstract :

Finite element homogenisation analysis is employed to investigate the mechanical behaviour of rubber toughened polymers. Axisymmetric cell model is considered. The behaviour of the rubber is described by a Neo-Hookean model, while the matrix material is modelled within the framework of Perzyna elastic-viscoplasticity with a rate dependent yield stress. The simulations are carried out over a wide range of strain rates for various temperatures to study the behaviour of polymer composite materials. The results fit quite well the experimental measurements under compression loading condition. This type of modelling can provide a better understanding of deformation mechanisms for development of this important engineering material.

Mots clefs :

Homogénéisation ; Viscoplastique ; Polymère ; Éléments finis

1 INTRODUCTION

La prédiction des propriétés mécaniques, des composites a fait l'objet de nombreuses études, basées sur des approches issues de la mécanique des milieux continus (micromécanique) ou des approches de la dynamique macromoléculaires. La dépendance de leur comportement mécanique à la forme, aux propriétés des différents matériaux élémentaires, et des interfaces constitue encore un riche domaine de recherche.

Dans ce but, il est essentiel d'avoir la meilleure connaissance possible de ces matériaux, en terme de microstructure et de propriétés mécaniques de manière à pouvoir suivre ces propriétés sous sollicitations afin d'identifier les mécanismes de déformation mis en jeu, leur initiation et leur développement. Il est primordial dans ce genre de problème, d'appréhender le comportement à l'échelle microscopique pour pouvoir prévoir le comportement mécanique à l'échelle macroscopique, ce qui justifie l'importance d'une théorie telle que l'homogénéisation *Van der Sluis et al.* (2001) et *Steenbrink et al.* (1999)

L'objectif de cette étude est la prédiction du comportement macroscopique d'un matériau hétérogène à matrice polymère et renforts caoutchoutiques à partir des propriétés mécaniques des différentes phases constitutives et de leur répartition spatiale (fraction volumique, forme et taille du renfort). Pour cela, une approche micromécanique issue de la mécanique des milieux continus et basée sur une branche particulière de la théorie de l'homogénéisation qui est l'homogénéisation périodique a été adoptée. La

méthodologie utilisée consiste à résoudre le problème sur une cellule de base, représentative des hétérogénéités du milieu périodique *Van der Sluis et al.* (2001) et à exprimer les résultats par l'intermédiaire de relations de moyennes en termes de contraintes et de déformations macroscopiques. Le composite étudié de matrice de polyméthacrylate de méthyle (PMMA) fragile renforcé au choc par des particules d'élastomère de polybutadiène et un matériau modèle pour les objectifs de notre travail. Nous avons choisi un modèle viscoplastique (Perzyna) pour rendre compte du comportement de la matrice amorphe que nous couplons à un modèle hyperélastique pour décrire le comportement de l'élastomère *Benseddiq et al.* (2006). Nous présentons alors dans cette partie la description phénoménologique adoptée pour rendre de la nature élastoviscoplastique de la matrice vitreuse et hyperélastique du renfort en grandes déformations.

Les résultats numériques seront comparés aux données expérimentales d'essais de compression uniaxiale du PMMA renforcé à différentes fractions volumiques de particules.

2 EXPERIMENTAL

Nous avons mené des essais de compression à différentes vitesses de déformations et différentes températures pour le PMMA et pour le polymère modifié (RT-PMMA). Le chargement en compression, contrairement à la traction, permet d'éviter (ou de retarder au maximum) les mécanismes d'endommagement. Cet essai permet donc de valider le modèle et la méthode d'homogénéisation numérique choisis.

Des éprouvettes cylindriques de 8 mm de hauteur, et un diamètre de 6 mm ont été usinés à partir de barreaux d'une section ($8 \times 8 \text{ mm}^2$) de PMMA. Ces barreaux ont été découpés sur des plaques moulées en compression à température à partir du matériau sous forme de granulés. Le refroidissement des plaques est fait à l'eau jusqu'à la température ambiante. Dans le but de réduire au maximum les effets de frottement, pour mener au mieux les essais de compression, les dimensions de nos échantillons ont été choisies en accord avec le rapport Hauteur/diamètre préconisé par *G'sell* (1982), avec des facettes lisses et parallèles. Afin d'étudier l'effet de la fraction volumique de renfort et de valider la méthode d'homogénéisation, des éprouvettes de RT-PMMA de même géométrie ont été usinées à partir de plaques de quatre matériaux différents en modifiant le taux de charge volumique (5% , 15% , 20% , 45%).

Les essais de compression uniaxiale sont réalisés finalement sur une machine de traction/compression Instron 5867 jusqu'à 40% de déformation. Les échantillons sont sollicités entre deux plateaux de compression parallèles. Le PMMA est testé à des vitesses de déformation allant de 10^{-5} s^{-1} jusqu'à 10^{-2} s^{-1} à température ambiante d'abord puis à des températures plus élevées (60°C, 80°C).

3 SIMULATION

3.1 Modèle Hyperélastique-élastoviscoplastique

Pour rendre compte des grandes déformations, du temps et de l'histoire du matériau, une description hyperélastique-élastoviscoplastique a été adoptée. Le comportement de l'élastomère est décrit par un modèle énergétique, tandis que la partie viscoplastique caractérisant le comportement de la matrice est décrite par le modèle de *Perzyna* (1985).

En supposant l'existence d'une densité d'énergie de déformation, $W(\mathbf{E})$, on peut écrire :

$$\mathbf{S} = \frac{\partial W(\mathbf{E})}{\partial \mathbf{E}} \quad \text{ou} \quad \mathbf{S} = \mathbf{J}\mathbf{F}^{-1} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{F}^{-T} \quad (1)$$

$$\mathbf{J} = \det(\mathbf{F}), \quad \mathbf{E} = \frac{1}{2}(\mathbf{C} - \mathbf{I})$$

Avec

\mathbf{F} le tenseur gradient de déformation, $\boldsymbol{\sigma}$ le tenseur de contrainte de Cauchy,

$\mathbf{C} = \mathbf{F}^T \cdot \mathbf{F}$ le tenseur de dilatation de Cauchy Green, et \mathbf{I} le tenseur identité.

La fonction d'énergie de déformation Néo-Hookéenne choisie est sous la forme suivante :

$$\mathbf{W} = \frac{\mu}{2}(\mathbf{I}_1 - 3) + \frac{1}{d}(\mathbf{J} - 1)^2 \quad (2)$$

Où

μ : module de cisaillement de l'élastomère

d : paramètre d'incompressibilité du matériau définie par le module de compressibilité du matériau

$$d = \frac{2}{K}$$

\mathbf{I}_1 : Invariant du tenseur des dilatations défini en fonction des élongations principales λ_i :

$$\mathbf{I}_1 = \lambda_1^2 + \lambda_2^2 + \lambda_3^2 .$$

Nous avons choisi de modéliser le comportement en grandes déformations des polymères vitreux par les équations introduites par *Perzyna* (1985).

Ce modèle considère la relation hypoélastique, et la décomposition additive du tenseur des vitesses de déformation pour écrire :

$$\dot{\boldsymbol{\sigma}} = {}^4\mathbf{H} : (\mathbf{D} - \mathbf{D}^{vp}) \quad (3)$$

Où \mathbf{H} est le tenseur de Hooke (tenseur d'élasticité) donné par :

$$\mathbf{H} = \frac{E}{2(1+\nu)} \left[(\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) + \frac{2\nu}{1-2\nu} \delta_{ij} \delta_{kl} \right] \quad (4)$$

Où E et ν représentent respectivement le module de Young et le coefficient de Poisson et δ le symbole de Kronecker.

La vitesse de déformation viscoplastique est donnée par la règle de normalité comme:

$$\mathbf{D}^{vp} = \gamma \left(\frac{\boldsymbol{\sigma}}{\boldsymbol{\sigma}_0} - 1 \right)^{\frac{1}{m}} \quad (5)$$

m, γ : sont respectivement le paramètre de durcissement et la viscosité (paramètres de sensibilité à la vitesse de déformation). $\boldsymbol{\sigma}$ est la contrainte d'écoulement et $\boldsymbol{\sigma}_0$ est la limite élastique dite statique (pour une vitesse qui ne dépasse pas 10^{-4} s^{-1} dans notre cas).

Le modèle de *Perzyna* décrit seulement la sensibilité à la vitesse de déformation de la contrainte d'écoulement, il faut donc introduire l'adoucissement et le durcissement post écoulement.

Le programme éléments finis que nous utilisons nous permet de prendre en compte ce comportement post-écoulement par un combinaison du modèle avec l'Ecrouissage Multilinéaire Isotrope.

3.2 Homogénéisation du comportement du composite

Le matériau est considéré comme un empilement de cellules élémentaires cylindriques à base hexagonale. Le centre de chaque cellule élémentaire est occupé par le renfort. La cellule élémentaire cylindrique à base hexagonale est assimilée à un cylindre à base circulaire. C'est cette approximation qui permet finalement de remplacer le calcul tridimensionnel par un calcul axisymétrique bidimensionnel *Benseddiq et al.* (2006).

Le comportement mécanique macroscopique de ces systèmes biphasés morphologiquement complexes est fondé sur l'introduction d'un élément représentatif dans l'espace périodique, on suppose que chaque *VER* se déforme d'une manière répétitive, identique à ses voisins.

Les conditions aux limites périodiques *Benseddiq et al.* (2006) de la cellule sont imposée afin d'assurer la compatibilité des champs de déformations. Les conditions de symétrie sont utilisées pour limiter le *VER* au ¼ de la cellule axisymétrique (Fig. 1 (a)).

La géométrie de la cellule est entièrement définie à travers 3 paramètres ; R , H et r qui sont respectivement le rayon, la hauteur initiale de la cellule et le rayon de la particule. Le choix commun le plus répandu pour ces paramètres est $2R=2H=1$ *Socrate et al.* (2000), alors que r est déterminé par la fraction volumique des vides ou des particules f_0 par la relation $r = (3/2f_0)^{1/3}$.

Les conditions aux limites sont choisies pour imposer que les bords latéral et supérieur restent droits alors que les deux autres bords sont maintenus :
$$\begin{cases} \text{sur } y=0 & U_y = 0 \\ \text{sur } x=0 & U_x = 0, \text{ sur } x=R & U_x = cste. \end{cases}$$

Le chargement extérieur correspond à un déplacement imposé sur le bord supérieur $U_y = -d$ pour simuler l'essai de compression.

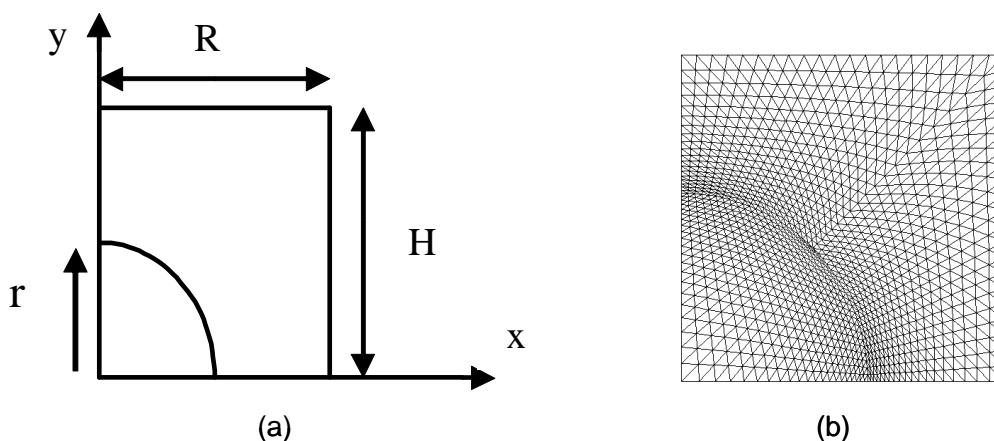


FIG. 1– (a) Cellule axisymétrique et paramètres géométriques (b) Maillage en élément finis de la cellule de base.

Comme on vient de voir dans cette partie, le processus d'homogénéisation passe par quatre étapes différentes. Une fois la définition du *VER* choisie, vient la seconde étape qui est l'application des conditions aux limites et du chargement. Ensuite le regard est porté sur l'analyse du comportement mécanique de chaque phase du *VER* à l'aide de la description hyperélastique-élastoviscoplastique. Enfin les propriétés macroscopiques obtenues de la simulation numérique, sont calculées comme la moyenne *Socrate et al.* (2000) sur la réponse du *VER* des quantités locales calculées par éléments finis :

$$\langle \sigma(x, y) \rangle = \frac{1}{V} \int_V \sigma(x, y) dV \quad \text{et} \quad \langle \varepsilon(x, y) \rangle = \frac{1}{V} \int_V \varepsilon(x, y) dV \quad (6)$$

4 RESULTATS ET DISCUSSIONS

Les simulations présentés dans ce qui suit ont été réalisées à l'aide d'un code de calcul d'éléments finis. Un exemple de discrétisation en élément finis est illustré dans la Fig. 1 (b) pour le cas d'une fraction volumique de particules de 20%. L'identification des paramètres viscoplastique pour le

PMMA passe par le processus classique en utilisant la droite des moindres carrés à partir des courbes de compression pour le PMMA à différentes vitesses de déformation.

Le jeu de paramètres obtenus pour chaque température est donné dans le tableau I. Les paramètres du modèle hyperélastique ont été obtenue à partir des résultats relevés de la littérature *Fond et al.* (1996) sur un polybutadiène similaire a celui utilisé en tant que particules renforçantes dans notre composite. Le module de cisaillement ainsi que le module de compressibilité de l'élastomère sont respectivement 0.333 MPa, et 2000 MPa.

		T=25°C	T=60°C	T=80°C
Paramètres élastiques	E (MPa)	2565	1084	833
	ν	0.32	0.33	0.33
Paramètres viscoplastiques	m	0.346	0.294	0.295
	γ	0.027	0.0137	0.0298
	σ_0 (MPa)	89	40	29

Tableau : Récapitulatif des paramètres du modèle élastoviscoplastique pour le PMMA.

La Fig. 2 compare le comportement simulé et mesuré du PMMA modifié pour différentes fractions volumique à température ambiante et à chaque vitesse de déformation.

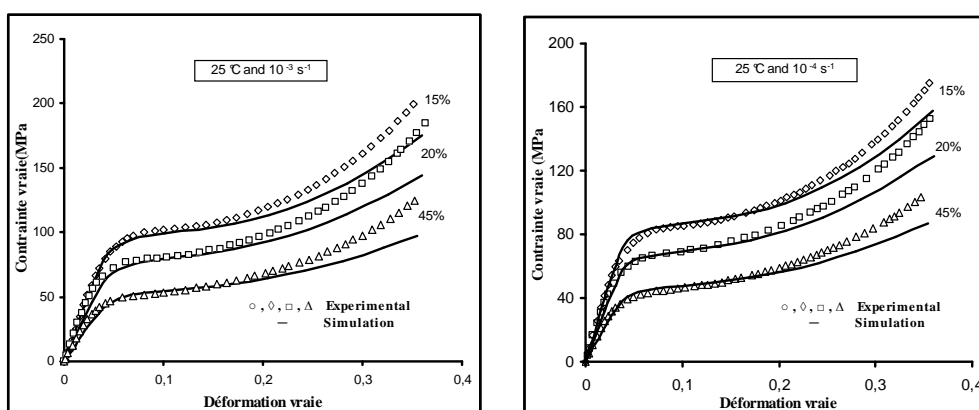


FIG. 2– Contrainte de compression en fonction de la déformation des différents RT-PMMA : comparaison entre simulations et mesures.

La réponse macroscopique montre que l'augmentation de la fraction volumique des particules conduit à une chute de la limite d'élasticité d'une part, et de l'amplitude de l'adoucissement d'autre part. Les courbes contraintes déformations expérimentales et numériques sont en général en bon accord, sauf aux fortes déformations de plus de 20%. On observe aussi que les paramètres obtenus semblent reproduire le comportement du RT-PMMA aux faibles vitesses pour toutes les fractions volumiques.

Les courbes résultantes des simulations et des essais expérimentaux pour les différents mélanges de PMMA et des particules d'élastomère à une vitesse de déformation de 10^{-3} s^{-1} et aux températures plus élevées 60°C et 80°C sont représentées respectivement sur la Fig. 3. On observe une tendance semblable des courbes pour les températures plus élevées avec un adoucissement plus prononcé pour la température de 80 °C. Une bonne concordance de la réponse expérimentale et simulée est obtenue excepté pour les faibles fractions volumiques de particules.

Les deux figures représentant l'effet de la fraction volumique de particules sur le comportement macroscopique du composite montrent comment le modèle hyperélastoviscoplastique est capable de mettre en évidence la sensibilité du comportement des polymères à l'ajout de particules d'élastomères.

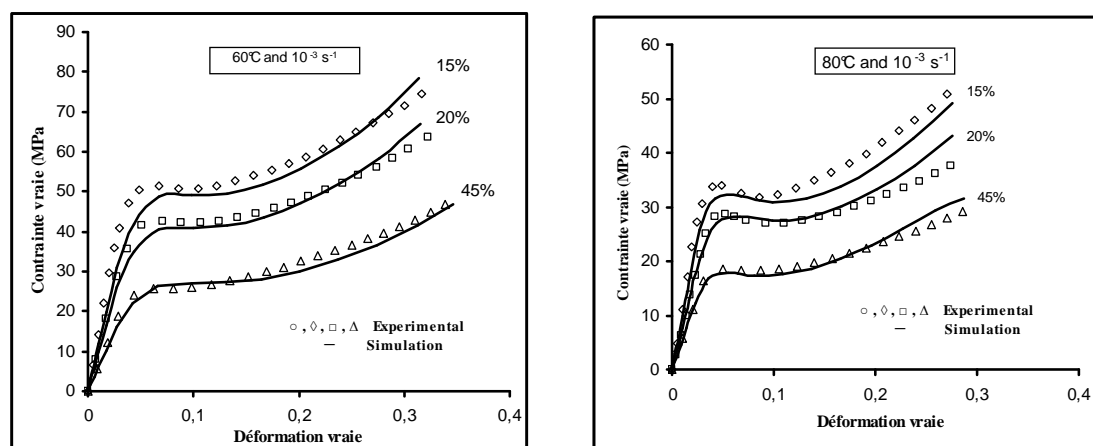


FIG. 3– Réponse expérimentale et simulée d'un essai de compression à une température de 60 et 80 °C à une vitesse de déformation de 10^{-3} /s pour les différents RT-PMMA.

5 CONCLUSION

Le comportement mécanique en grandes déformations du PMMA et du PMMA choc est analysé au moyen d'essais de compression uniaxiale pour éviter tout type d'endommagement. L'objectif est d'identifier les paramètres intervenant dans la description hyperélastoviscoplastique adopté ici. A partir de cette identification, nous pouvons prédire le comportement fortement non linéaire du polymère et du composite.

Le modèle hyperélastique-élastoviscoplastique proposé dans cette étude a été donc validé expérimentalement sur un matériau modèle, le RT-PMMA. La technique d'homogénéisation utilisée, par calcul de moyenne sur un VER des contraintes et déformations microscopiques, permet de mettre en évidence l'influence de certains paramètres et en particulier la fraction volumique des particules et la vitesse de déformation sur le comportement macroscopique du composite ainsi que, de montrer la pertinence de l'approche d'homogénéisation périodique numérique.

6 REFERENCES

- Van Der Sluis O. Schreurs P. J. Meijer H. E. H. 2001 Homogenisation of structured elastoviscoplastic solids at finite strains. *Mech. Mat* 33, 499-522
- Steenbrink A. C. Van Der Giessen E. 1999 On cavitation, post-cavitation and yeild in amorphous polymer-rubber blends. *J. Mech. Phys. Solids* 47, 843-876.
- Benseddiq N. Belayachi N. Nait Abdelaziz M. 2006 Multiscale approach to the behaviour and damage of the heterogeneous elastic-viscoplastic materials, *Theo. Applied Fract. Mech.* 46, 15-25
- G'sell C. 1982 Mechanical testing techniques of the plastic behaviour of amorphous and semi crystalline materials. In: *Plastic deformation of amorphous and semi-crystalline materials*. Édition de physique. France 13-25.
- Perzyna P. 1985 On constitutive modelling of dissipative solids for plastic flow, instability and fracture. In: A. Sawczuk (Eds), *plasticity today-modelling, methods and applications* 657-679.
- Socrate S , Boyce M. C. 2000 Micromechanics of toughened polycarbonate. *J. Mech. Phys. Solids.* 48, 233-273.
- Fond C., Lobbrecht A., Shirrer R. 1996 Polymers toughened with rubber microspheres, an analytical solution for stresses and strains in the rubber particles at equilibrium and rupture. *Int. J. Fract.* 77, 141-159.