

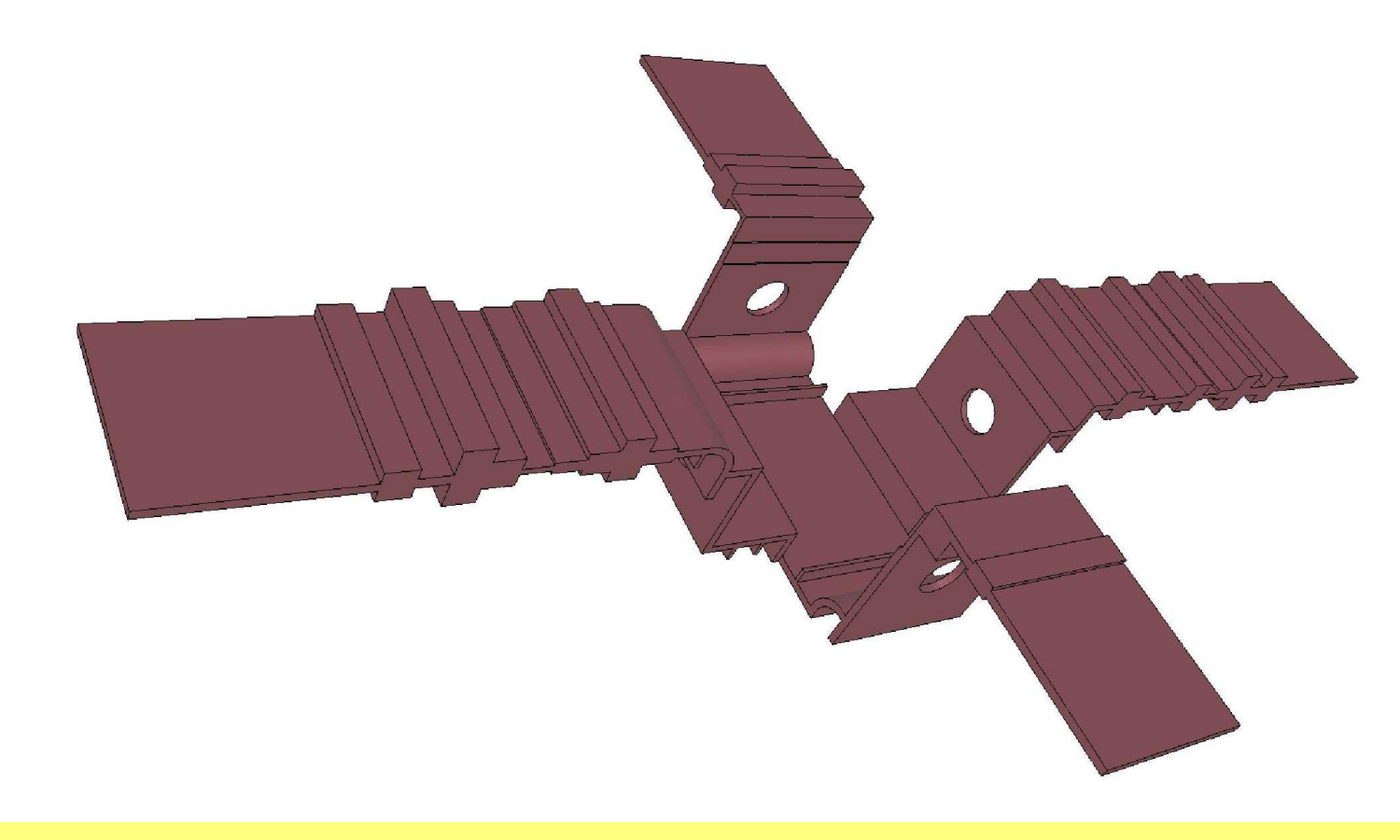
# SIMULATIONS NUMERIQUES DIRECTES A L'ECHELLE MICROSCOPIQUE :



UN NOUVEL OUTIL DE RHEOLOGIE  
G.BEAUME<sup>1, 2</sup>  
P. LAURE<sup>1, 3</sup> & T.COUCPEZ<sup>1</sup>



<sup>1</sup>Centre de Mise en Forme des Matériaux, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris UMR 7635 CNRS 06904 Sophia Antipolis, France  
<sup>2</sup>Schneider Electric-Technopôle 38 TEC, Grenoble  
<sup>3</sup>Institut Non-Linéaire de Nice-UMR 6618 CNRS Université de Nice Sophia Antipolis C 06560 Valbonne, France



## Contexte industriel

- Injection de "Bulk Molding Compound"
- Résine fortement chargée en particules solides
- Forme et taille des charges variables (fibres de renforts, charges minérales...)
- Géométrie complexe des moules à injecter

## Objectifs

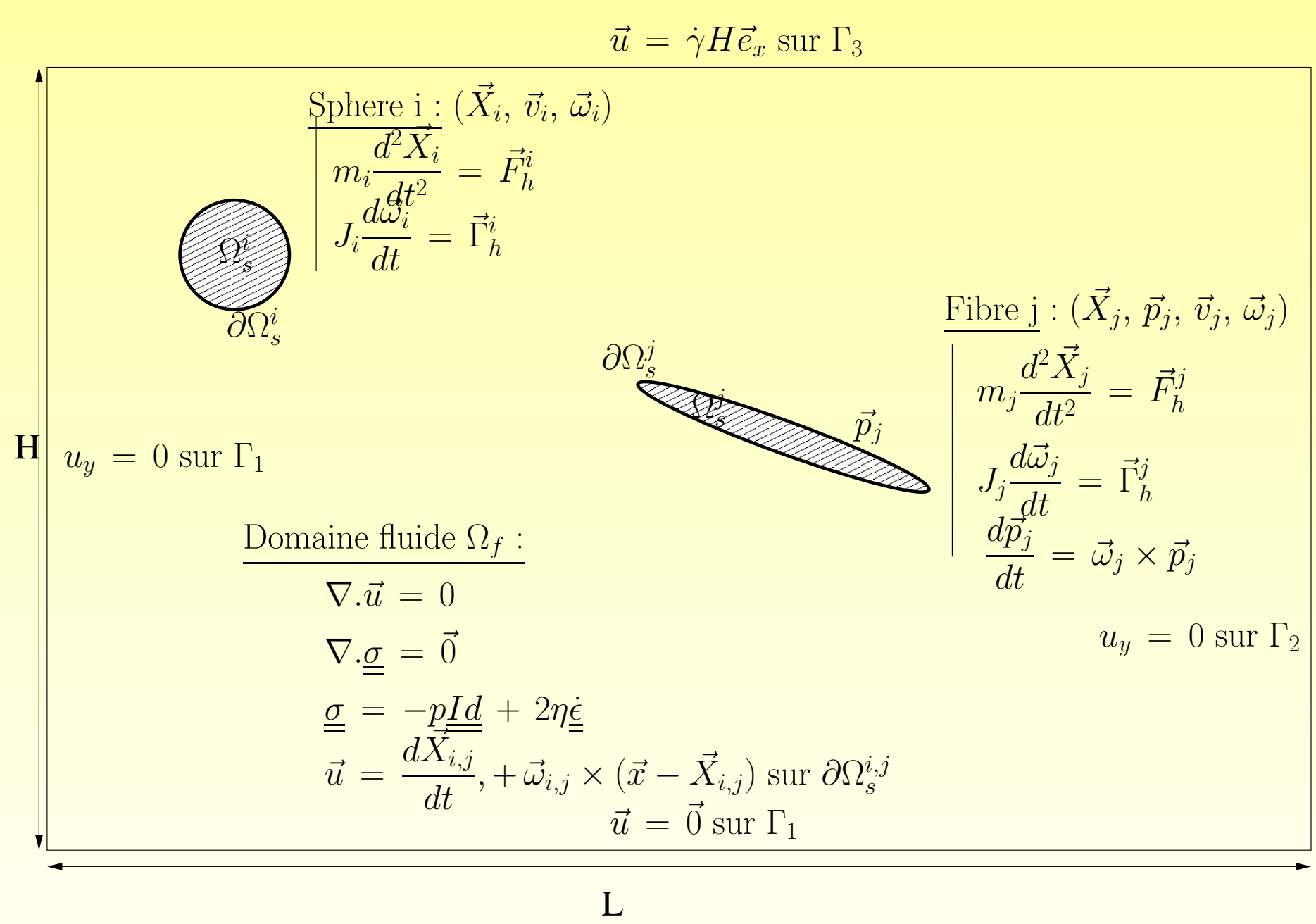
- Simulation numérique directe de l'écoulement fluide/particules
- 1<sup>ère</sup> Application : **écoulement mésoscopique** (dimensions moule  $\approx$  longueur des fibres)
- 2<sup>ème</sup> Application : **homogénéisation numérique** : obtention directe de loi de comportement macroscopique

## I. Simulation numérique directe

### 1. Problème étudié

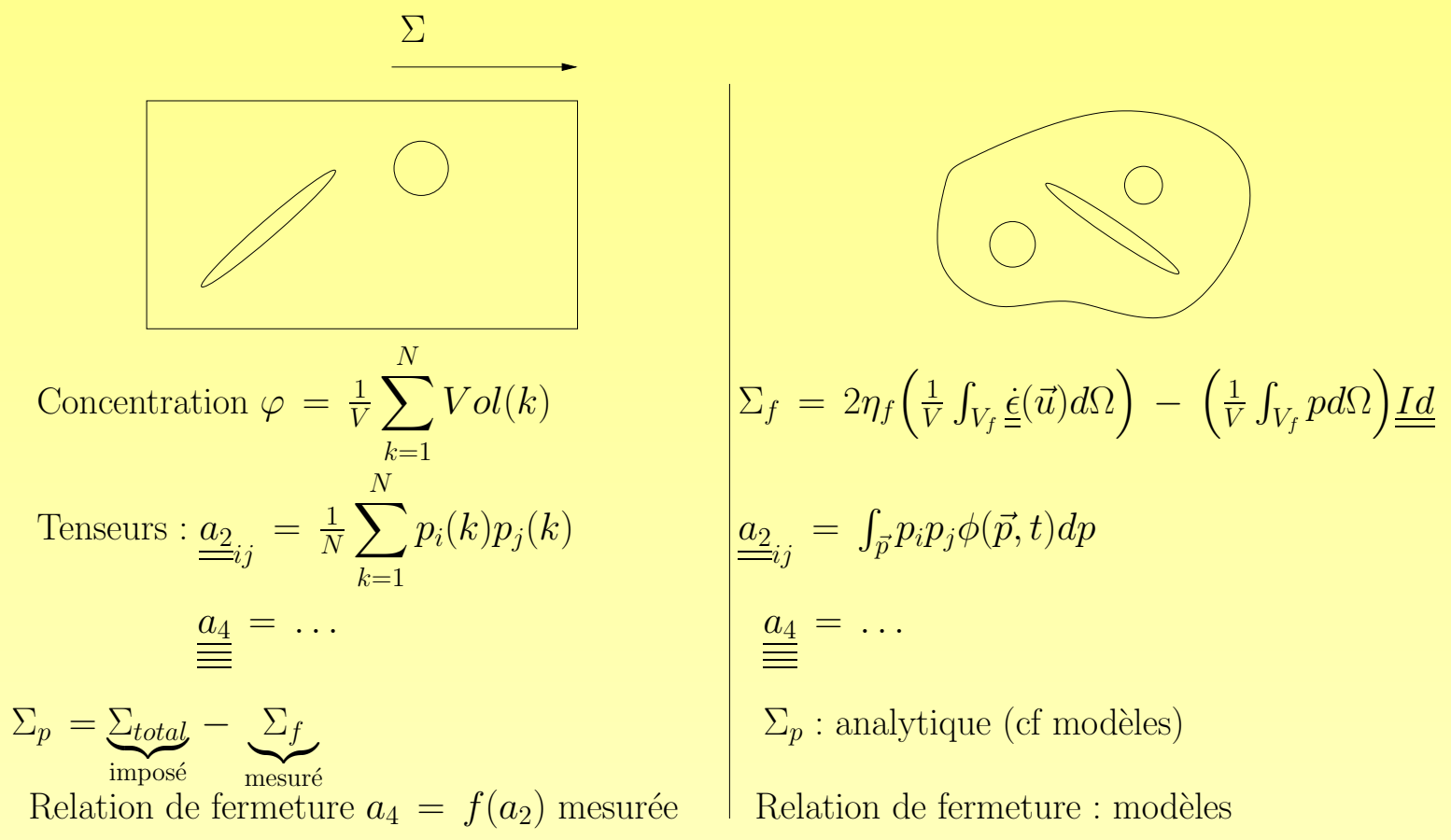
- écoulement de Couette (cisaillement plan) d'un fluide newtonien chargé de particules

- relocalisation des particules dans la boîte de calcul (conditions limites "périodiques" sur  $\Gamma_2/\Gamma_4$ )



## II Homogénéisation numérique

### 1. Comparaison Numérique/Théorique :



### 2. Particules sphériques :

- Modèle analytique :  $\underline{\underline{\Sigma}} = -p \underline{\underline{Id}} + 2 \eta_{eff} (1 + 2N_s) \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}$  ■ Viscosité effective :

$$\eta_{eff} = \eta_f \left( 1 + \frac{\varphi}{\varphi_m} \right)^{2.5 \varphi_m}$$

### 3. Fibres :

- Evolution de l'orientation :

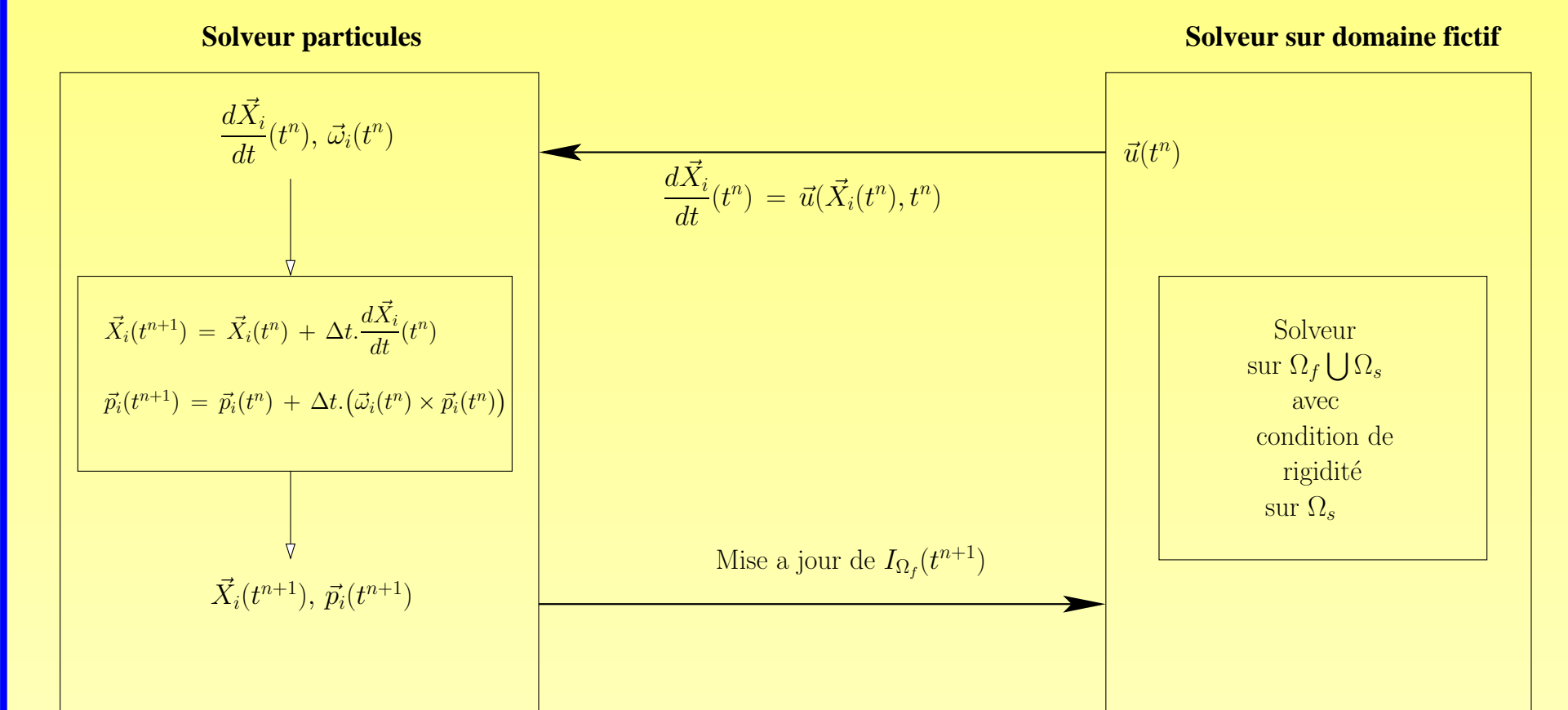
$$\frac{D\underline{\underline{a}}_2}{Dt} = -(\underline{\underline{\Omega}} \underline{\underline{a}}_2 - \underline{\underline{a}}_2 \underline{\underline{\Omega}}) + \lambda (\underline{\underline{\dot{\epsilon}}} \underline{\underline{a}}_2 + \underline{\underline{a}}_2 \underline{\underline{\dot{\epsilon}}} - 2\underline{\underline{a}}_1 : \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}) + C_f \frac{\dot{\gamma}}{\dot{\gamma}_c} (\underline{\underline{Id}} - 3\underline{\underline{a}}_2)$$

perturbation

- Loi de comportement :

$$\underline{\underline{\Sigma}} = -p \underline{\underline{Id}} + 2\eta_f \left( \underline{\underline{\dot{\epsilon}}} + N_s (\underline{\underline{\dot{\epsilon}}} \underline{\underline{a}}_2 + \underline{\underline{a}}_2 \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}) + N_p \underline{\underline{a}}_1 : \underline{\underline{\dot{\epsilon}}} \right)$$

## III Stratégie numérique



### 1. Calcul du champ de vitesse

- Méthode sans remaillage : Domaines fictifs
- Contrainte de rigidité du champ de vitesse sur  $\Omega_s$
- Suivi des particules à l'aide des fonctions caractéristiques  $\mathbb{I}_{\Omega_s}$  et  $\mathbb{I}_{\Omega_f}$

### 2. Déplacement des particules

- Méthode particulaire : déplacement des particules à partir du champ de vitesse interpolé

- Ajout de forces à courte portée entre particules à grandes concentration (problème de chevauchement)

## IV Calcul du champ de vitesse

### 1. Contrainte de rigidité

- Pénalisation du lagrangien
- Expression de la contrainte :  $\forall \vec{x} \in \Omega_s(t) \quad \begin{cases} \nabla \cdot \vec{u}(\vec{x}, t) = 0 \\ \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{u}) = \underline{\underline{0}} \end{cases}$

### 2. Problème variationnel

Trouver  $(\vec{u}(t^n), p(t^n))$  tel que  $\forall (\vec{v}, q) \in \mathcal{H}^1(\Omega) \times \mathcal{L}_0^2(\Omega)$  :

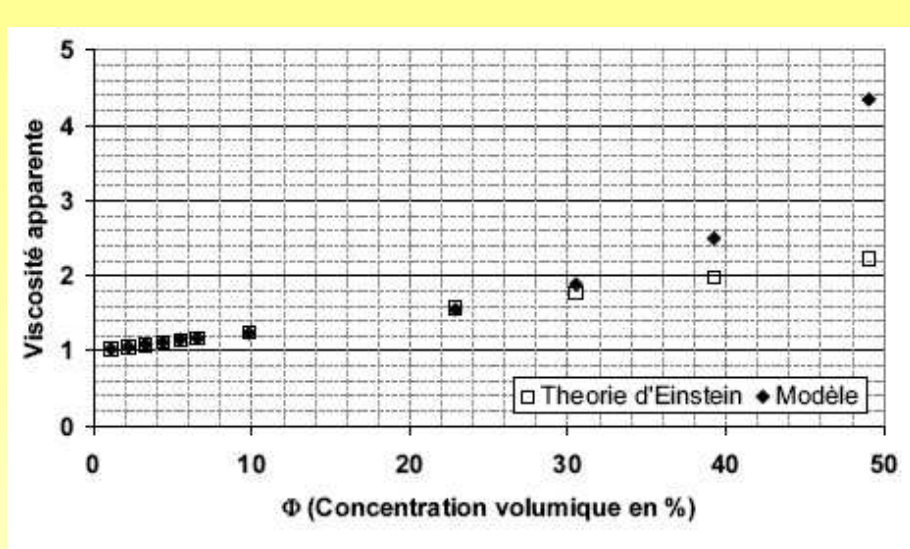
$$\begin{cases} 0 = 2\eta_f \int_{\Omega} \mathbb{I}_{\Omega_f}(t^n) \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{u}(t^n)) : \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{v}) d\Omega - \int_{\Omega} p(t^n) \nabla \cdot \vec{v} d\Omega + \int_{\Gamma} (\underline{\underline{\sigma}} \cdot \vec{n}_{ext}) \cdot \vec{v} d\Gamma \\ + 2\alpha \int_{\Omega} \mathbb{I}_{\Omega_s}(t^n) \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{u}(t^n)) : \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{v}) d\Omega \\ \text{contrainte } \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{u}) = \underline{\underline{0}} \\ 0 = \int_{\Omega} q \nabla \cdot \vec{u}(t^n) d\Omega \end{cases}$$

### 3. Interprétation

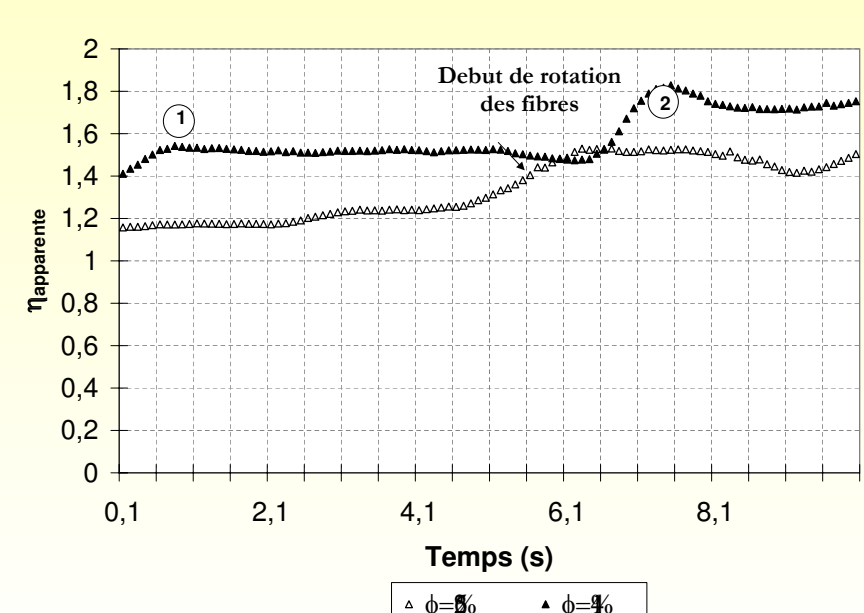
Problème de Stokes multi-domaines  $\eta = \mathbb{I}_{\Omega_f} \eta_f + \mathbb{I}_{\Omega_s} \alpha$

## VI Cas simples [A. Megally]

### 1. Particules sphériques ( faible concentration)



### 2. Fibres (faible concentration)



## V Evolution de la phase solide

### 1. Déplacement des particules

- déplacement standard des particules :

$$\begin{cases} \vec{X}_i(t^{n+\frac{1}{2}}) = \vec{X}_i(t^n) + \Delta t \cdot \vec{u}(\vec{X}_i(t^n), t^n) \\ \vec{p}_i(t^{n+\frac{1}{2}}) = \frac{X_i^1 X_i^2(t^{n+\frac{1}{2}})}{\|X_i^1 X_i^2(t^{n+\frac{1}{2}})\|} \end{cases}$$

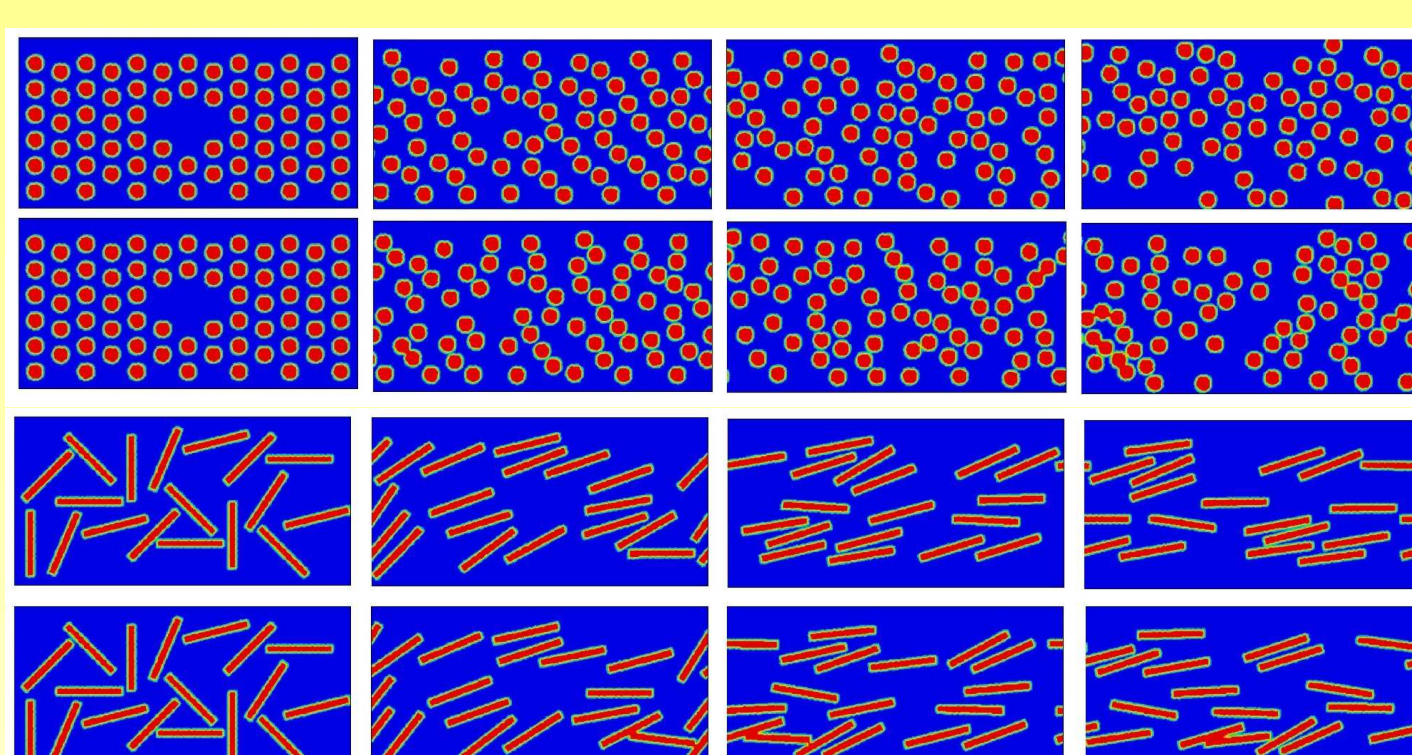
### 2. Correction dues aux force de courte portée

- calcul des forces d'interactions :  $\vec{F}_{j \rightarrow i}$
- correction du déplacement des particules :

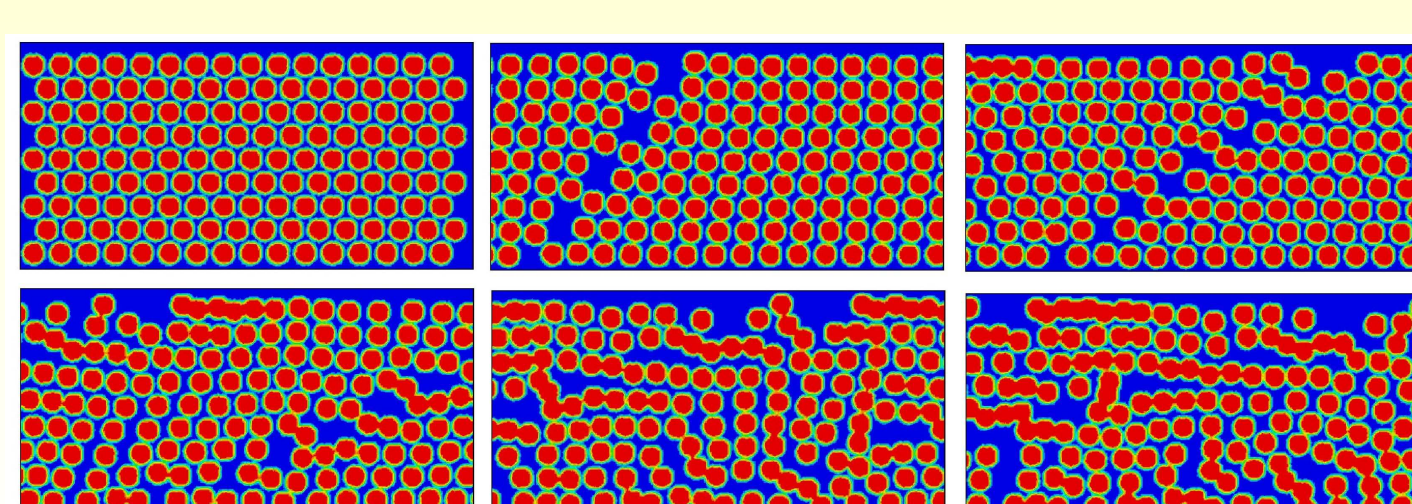
$$\begin{cases} \vec{X}_i(t^{n+1}) = \vec{X}_i(t^{n+\frac{1}{2}}) + \delta \vec{X}_i(t^{n+\frac{1}{2}}) \\ \delta \vec{X}_i(t^{n+\frac{1}{2}}) = \left( \sum_{j \neq i} \vec{F}_{j \rightarrow i} \right) \cdot \frac{\Delta t^2}{m_i} \\ \vec{p}_i(t^{n+1}) = \vec{p}_i(t^{n+\frac{1}{2}}) + \delta \vec{p}_i(t^{n+\frac{1}{2}}) \\ \delta \vec{p}_i(t^{n+\frac{1}{2}}) = \left( \sum_{j \neq i} l_{ij} [\vec{F}_{j \rightarrow i} - \frac{(\vec{F}_{j \rightarrow i} \cdot \vec{p}_i(t^{n+\frac{1}{2}}))}{\|\vec{p}_i(t^{n+\frac{1}{2}})\|^2} \vec{p}_i(t^{n+\frac{1}{2}})] \right) \frac{\Delta t^2}{J_i} \end{cases}$$

## VII Cas complexes - 2D

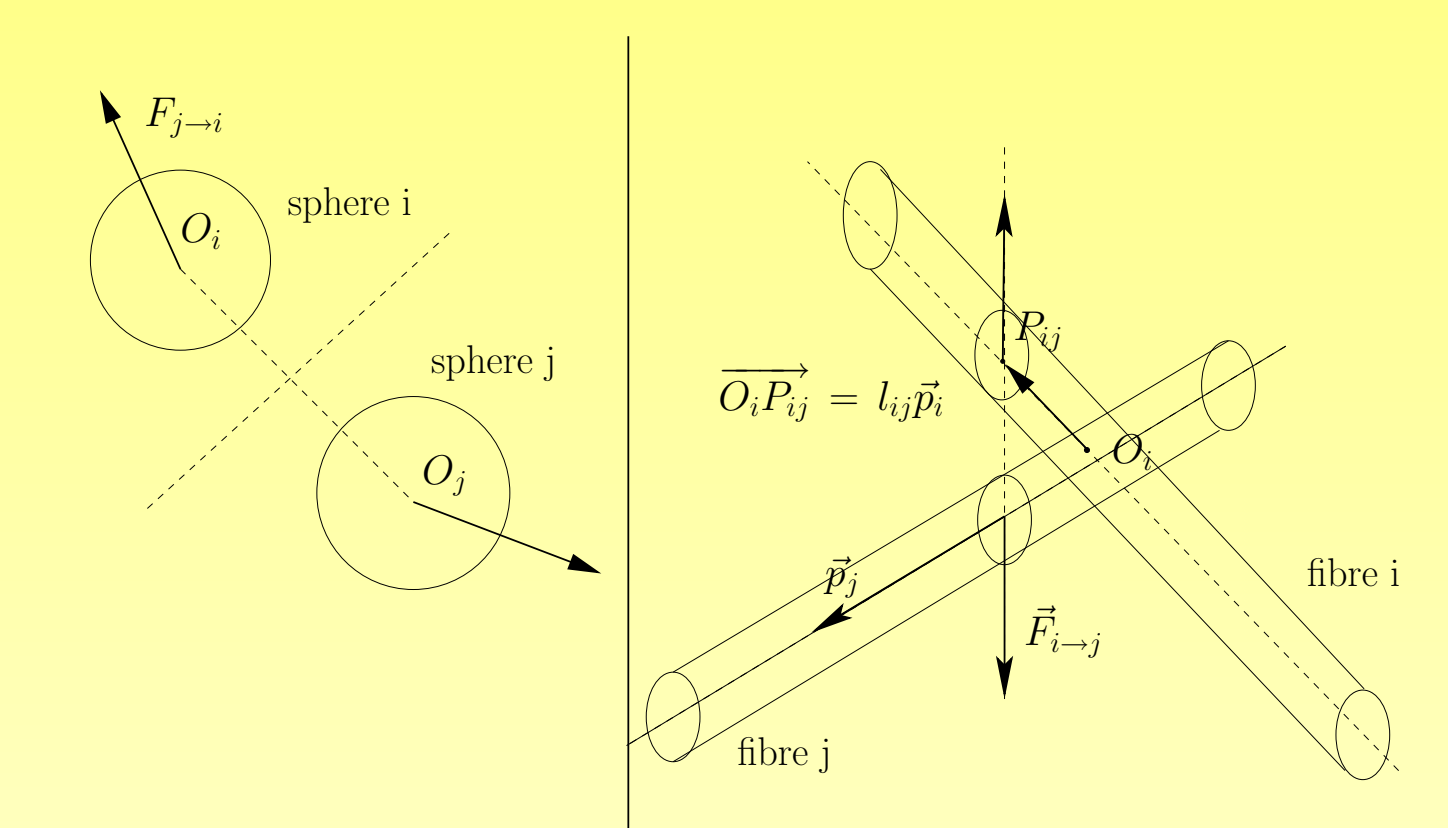
### 1. Prise en compte d'interactions à courte portée



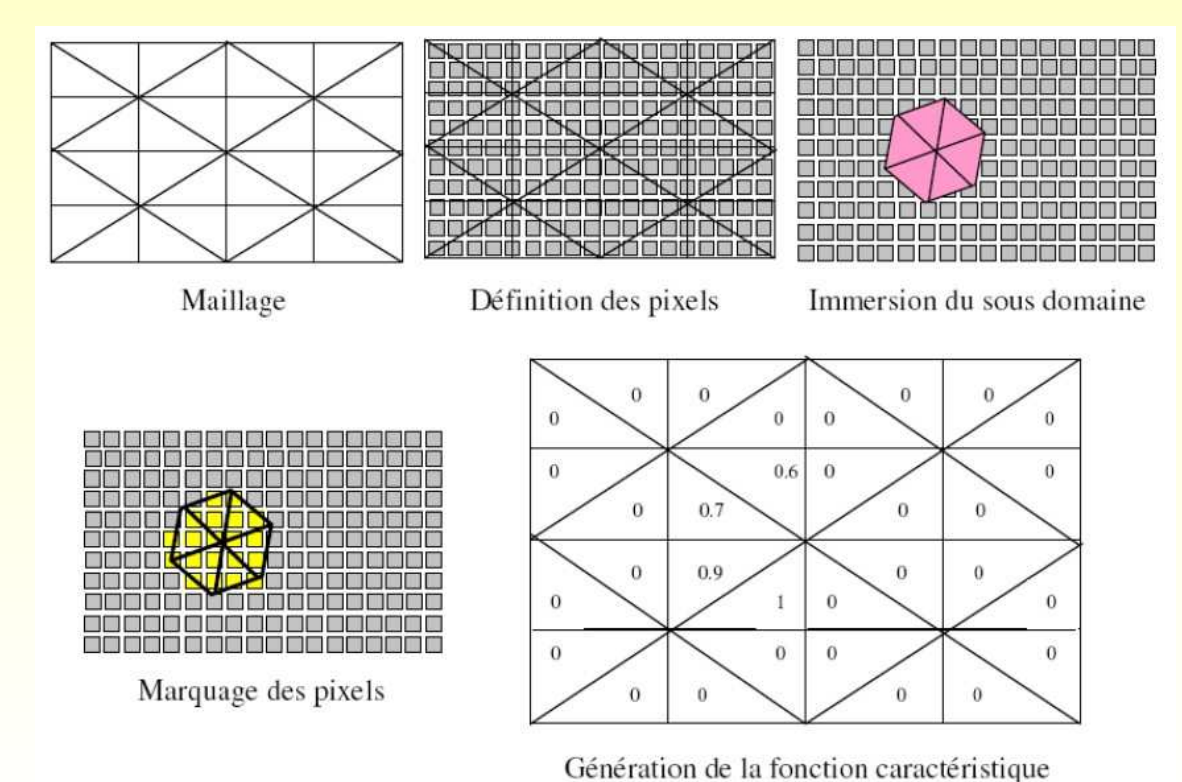
### 2. Particules sphériques grande concentration



## V Evolution de la phase solide (suite)



### 3. Mise à jour de $\mathbb{I}_{\Omega_s}$



## VIII Perspectives

### 1. Améliorations numériques

- Imposer des conditions périodiques réelles sur le champ de vitesse au bord, en tenant compte du cisaillement (conditions limites de Lee-Edwards)

- Meilleure prise en compte de la rigidité des particules (méthode de lagrangien augmenté)

### 2. Etude rhéologique

- étude d'écoulements "mésoscopiques" réalistes (taille de l'entrefre  $\approx$  longueur des fibres)

- homogénéisation numérique : loi de comportement pour des fluides avec plusieurs populations de particules

- étude numérique du changement de régime hydrodynamique/ non-hydrodynamique en fonction de la répartition de charges solides