

## Chapitre 3

# MÉTHODOLOGIE

### 3.1 Méthodologie de résolution

La méthodologie de résolution choisie pour ce projet est inspirée de celles des articles, expliquées dans la section 2.7.

Comme indiqué dans le chapitre précédent (section 2.7), les logiciels sélectionnés pour notre étude sont les logiciels Solidworks<sup>®</sup>, Autodesk Moldflow<sup>®</sup> et COMSOL 5.4<sup>®</sup>.

#### 3.1.1 Présentation des logiciels

##### 3.1.1.1 Solidworks<sup>®</sup>

Solidworks<sup>®</sup> est un logiciel de conception 3D racheté en 1997 par l'entreprise Dassault Systèmes. Il permet de travailler sur la conception d'une pièce, sur un assemblage de plusieurs pièces et/ou sur une mise en plan [80]. Pour ce projet, Solidworks<sup>®</sup> a permis la reproduction de l'isolateur électrique testé ensuite avec le logiciel Moldflow<sup>®</sup>, présenté ci-après.

### 3.1.1.2 Moldflow Insight®

Moldflow® est un logiciel de simulation numérique par éléments finis spécialisé dans la simulation du moulage à injection de polymères. Il a été conçu par l'entreprise Autodesk®.

Ce logiciel contient une base de données de matériau très importante, permettant de modéliser le comportement de plusieurs polymères et plastiques au sein d'un moule. Cependant, il est plutôt complexe à maîtriser et à personnaliser, car la plupart des paramètres dépendent les uns des autres et les matériaux sélectionnés imposent certaines restrictions dans les modifications de ces paramètres. De plus, après avoir étudié les différentes tailles de textures que l'on peut modéliser avec Moldflow, nous avons pu constater qu'il n'est plus possible de modéliser les textures en dessous de 0,5 mm. En effet, ces dernières ne sont pas reconnues par le logiciel comme faisant partie de la géométrie, mais sont plutôt considérées comme des défauts de conception trop nombreux pour être corrigés. Il a donc été nécessaire de trouver un logiciel permettant de modéliser des textures de taille inférieure à 0,5 mm.

### 3.1.1.3 COMSOL Multiphysics®

Le logiciel COMSOL Multiphysics est un logiciel de simulation numérique par éléments finis conçu par l'entreprise du même nom. Il permet le couplage de plusieurs physiques entre elles (fluide, thermique, ...etc) et permet une grande personnalisation des modèles que l'on simule. De plus, il nous permet de modéliser des textures à des tailles microscopiques, ce qui est très intéressant pour ce projet. Il est cependant impératif de connaître avec précision les paramètres de notre projet, ainsi que les équations mathématiques qui le gouvernent et de les comprendre rigoureusement. En effet, COMSOL Multiphysics a besoin d'une description assez précise de la géométrie et des paramètres de simulation afin de donner des résultats

proches de la réalité. Il est également nécessaire, comme avec tous logiciels de simulation numérique, de vérifier les résultats obtenus à l'issue des simulations obtenues par COMSOL Multiphysics, à l'aide de cas test et d'expérimentations.

## 3.2 Géométrie de l'étude

Pour ce projet, nous considérons un isolateur électrique de la compagnie K-Line Insulators Limited. D'après les dimensions fournies par l'entreprise, il a été possible de dessiner l'isolateur sur Solidworks<sup>®</sup> afin de pouvoir lancer des simulations.

L'isolateur est composé de plusieurs jupes d'environ 150 mm de diamètre, mais seule une jupe a été considérée pour ce projet : ceci permet de simplifier le problème tout en gardant suffisamment proche de la réalité. La figure 3.1 présente la géométrie considérée pour ce projet :

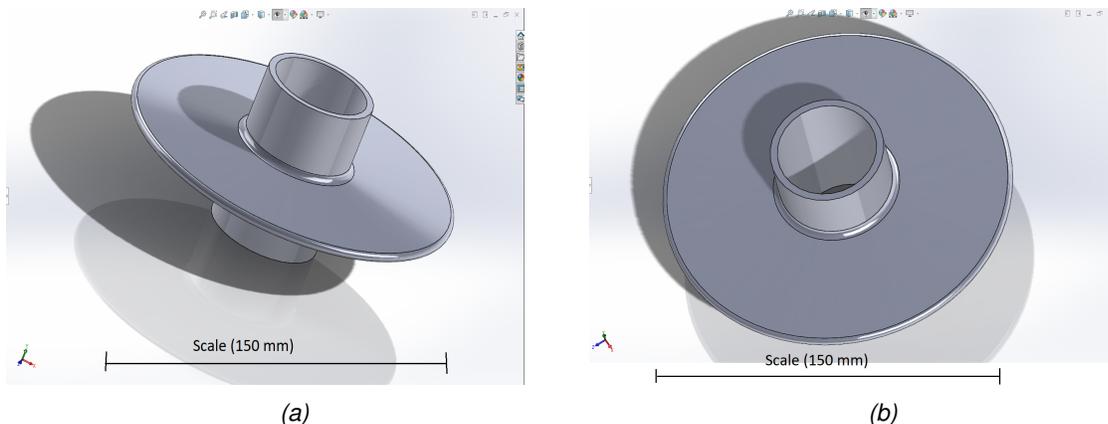


FIGURE 3.1 – Géométrie de l'isolateur utilisée pour les simulations avec Moldflow. Cette dernière est composée d'une seule jupe de l'isolateur, de diamètre 150 mm. Le diamètre intérieur est d'environ 40 mm et la longueur de la jupe simulée est d'environ 20 mm.

Les microtextures prises en considération pour ce projet ont été placées sur la face supérieure des jupes. D'après les articles consultés, nombreux s'accordent sur le fait que l'on peut considérer qu'en dessous de 200  $\mu\text{m}$ , on se trouve dans le domaine microscopique, comme le confirme le chapitre de livre écrit par Surace et al. [75].

Afin de remplir l'objectif fixé par l'entreprise, à savoir de mouler des isolateurs super-hydrophobes, il est donc important de bien tenir compte des dimensions de ces microtextures. La figure 3.2 présente ici les différentes textures considérées pour ce projet dans un premier temps : pour des raisons de facilité de remplissage et de démoulage, nous avons considéré des microtextures rectangulaires et triangulaires ordonnées (c'est-à-dire de tailles similaires).

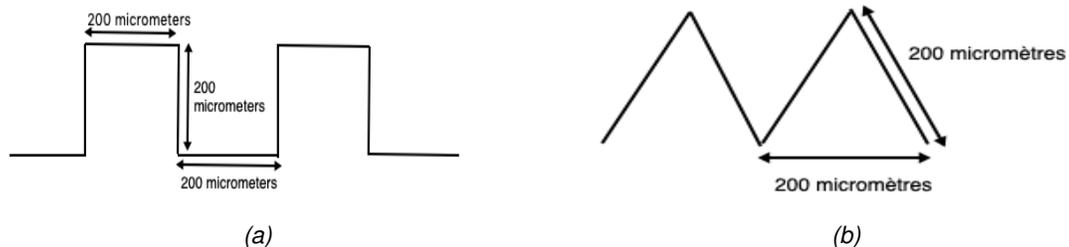


FIGURE 3.2 – Dimensions maximales des textures sur la surface de l'isolateur. (a) : Textures rectangulaires de 0,2 mm. (b) : Textures triangulaires de 0,2 mm.

Dans le cadre de différents projets avec K-Line Insulators Limited, plusieurs types de textures ont été développées, mais pour des raisons de simplification du problème, après avoir testé plusieurs types de textures avec le logiciel Moldflow, seules des microtextures rectangulaires ont été considérées pour ce projet lors des simulations avec COMSOL Multiphysics.

La taille des microtextures a été diminuée progressivement, lors des étapes de familiarisation des logiciels, de plusieurs centimètres à environ 0,1 mm, dans une optique tout d'abord d'essai/erreur, afin de voir ce qui fonctionnait le mieux pour notre projet, mais également afin de déterminer la tolérance des différents logiciels que nous avons testés.

### 3.3 Développement du modèle principal et validation

Le logiciel COMSOL Multiphysics 5.4<sup>©</sup> nous a permis de modéliser des micro-textures à la surface de la jupe de l'isolateur. Pour des raisons de rapidité de simulation, des textures

d'au moins 0,2 mm ont été simulées. Par un processus d'essai-erreur, une simulation numérique a ensuite été développée avec COMSOL Multiphysics 5.4<sup>®</sup>, tout d'abord en observant le comportement du polymère avec une température fixe et ambiante en sein du moule, puis en observant le comportement du polymère lorsque le moule est chauffé.

À chaque étape principale de ces simulations, il a été nécessaire de valider les résultats obtenus à l'aide de cas tests d'articles, ou encore d'expérimentation. Pour la validation de notre simulation COMSOL Multiphysics 5.4<sup>®</sup>, l'une des simulations présentées dans l'article de M. Héту et al. [61] a été sélectionnée. En effet, cet article présente des similarités avec notre projet et a l'avantage de donner des résultats assez complets pour qu'on puisse les comparer avec les nôtres. En effet, cet article étudie la simulation du remplissage d'un tube par un polymère thermodurcissable en fournissant des informations quantitatives et qualitatives de leurs résultats.

## **3.4 Modèles mathématiques adéquats au projet**

### **3.4.1 Équations de dynamique des fluides**

Comme expliqué dans la partie 2.6, beaucoup d'auteurs utilisent le modèle de Hele-Shaw pour résoudre leur problème de moulage à injection. Ce modèle est largement employé par les logiciels de simulation de moulage à injection tels que Autodesk Moldflow<sup>®</sup> et CadMould [22]. Il fait appel à de nombreuses simplifications pour résoudre les écoulements :

- Les forces de viscosité étant beaucoup plus importantes que les forces d'inertie, ces dernières sont ignorées ;
- La convection de chaleur dans la direction de l'épaisseur est ignorée ;
- La conduction est légèrement similaire à la convection dans la direction du flux de

polymère fondu, on considère donc qu'elle est ignorée.

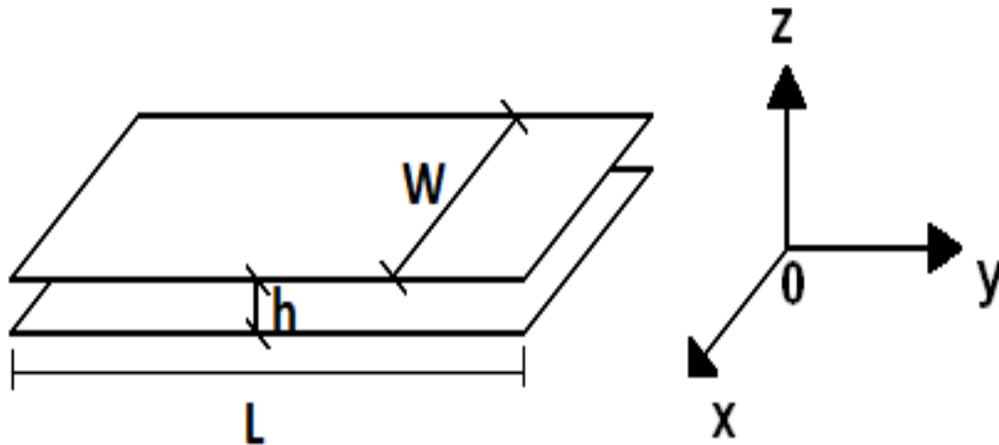


FIGURE 3.3 – Cellule de Hele-Shaw [95].

Comme le montre la figure 3.3, le modèle de Hele-Shaw considère le passage du fluide choisi entre deux plaques infinies. On a donc dans ce modèle les conditions aux limites suivantes :

- $\frac{h}{L} \ll 1$
- $\frac{h}{W} \ll 1$  (Avec  $L$  la longueur de la plaque,  $W$  la largeur de la plaque et  $h$  la distance entre les deux plaques.)
- Les forces d'inerties sont très petites devant les efforts de cisaillement causés par la viscosité.

Les équations fondamentales du modèle de Hele-Shaw résultent de l'adimensionnement des équations de Navier-Stokes. En effet, l'équation de continuité nous dit :

$$\nabla \cdot \underline{u} = 0 \quad (3.1)$$

et les équations de Navier Stokes simplifiées sont telles que :

$$\rho \frac{\partial \underline{u}}{\partial t} + \rho \underline{u} \cdot \nabla \underline{u} = -\nabla p + \eta \nabla^2 \underline{u} \quad (3.2)$$

$$\text{où } \underline{u} = u\vec{i} + v\vec{j} + w\vec{k}$$

u, v et w sont les composantes du vecteur vitesse dans la cellule de Hele-Shaw, et  $\vec{i}$ ,  $\vec{j}$  et  $\vec{k}$  sont les vecteurs directeurs selon les composantes d'espace x, y et z respectivement. Pour obtenir les équations du modèle de Hele Shaw, on commence par adimensionner les différentes composantes de vitesse et de position pour obtenir les variables suivantes :

$$\tilde{x} = \frac{x}{L} \quad \tilde{y} = \frac{y}{L} \quad \tilde{z} = \frac{z}{h} \quad (3.3)$$

et

$$\tilde{u} = \frac{u}{V} \quad \tilde{v} = \frac{v}{V} \quad \tilde{w} = \frac{w}{V} \quad (3.4)$$

L'obtention des équations de Hele-Shaw se fait en implémentant ces grandeurs adimensionnées dans les équations de Navier-Stokes et l'équation de continuité. Les conditions aux limites établies plus haut permettent ensuite de simplifier les équations et l'on obtient donc les équations de Hele-Shaw suivantes :

$$\frac{\partial p}{\partial x} = \mu \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \quad (3.5)$$

$$\frac{\partial p}{\partial y} = \mu \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \quad (3.6)$$

$$\frac{\partial p}{\partial z} = 0 \quad (3.7)$$

Retenir les simplifications et les conditions aux limites de ces logiciels de simulation de moulage à injection est important pour l'analyse des résultats : en effet, un résultat qui semble difficile à expliquer peut trouver sa réponse dans les équations choisies par le logiciel.

Au vu de la géométrie que nous avons choisi pour ce projet, à savoir un isolateur électrique, et les différentes simplifications inhérentes au modèle de Hele-Shaw, il a été décidé que le comportement du fluide serait mieux représenté par les équations de Navier-Stokes. En effet, ces équations sont les plus utilisées dans les articles les plus récents, et le modèle de Hele-Shaw utilise des simplifications qui ne sont pas valables dans notre cas.

Cependant, avant de se lancer dans la description des équations de Navier-Stokes utilisées, il est tout d'abord important de connaître le nombre de Reynolds de notre fluide afin de savoir dans quel régime celui-ci évolue lors de l'écoulement.

Le nombre de Reynolds s'écrit comme suit [81] :

$$Re = \frac{\rho V l}{\mu} \quad (3.8)$$

Où  $\rho$  est la densité du fluide,  $V$  est la vitesse du fluide,  $l$  est la longueur caractéristique de notre moule et  $\mu$  est la viscosité du matériau.

Pour notre projet, la longueur caractéristique choisie pour calculer le nombre de Reynolds est le diamètre d'une jupe de l'isolateur, car c'est la distance que va devoir parcourir l'écoulement pour remplir la jupe de l'isolateur, qui correspond donc à  $l = 156,16mm$

D'après la mécanique des fluides[10], il est reconnu que :

- Un  $Re < 2000$  signifie que le régime de l'écoulement est laminaire
- Un  $2000 < Re < 3000$  signifie que le régime de l'écoulement est transitoire
- Un  $Re > 3000$  signifie que le régime de l'écoulement est turbulent

Dans notre projet le calcul du nombre de Reynolds nous montre que ce dernier est inférieur à 2000. En effet, après calcul, nous obtenons un nombre de Reynolds tel que  $Re = 0,00114$ . Un nombre de Reynolds de cet ordre signifie que nous sommes donc dans un régime laminaire pour l'écoulement du LSR dans le moule. Plus particulièrement, un nombre de Reynolds tel que  $Re \ll 1$  signifie que l'écoulement de notre projet est gouverné par la viscosité et qu'il est dit rampant [82]

Après avoir déterminé le nombre de Reynolds, il est important de définir la forme des équations fluides que nous allons devoir utiliser. Comme souligné précédemment, les équations de Navier Stokes seront utilisées pour décrire le comportement du fluide dans ce projet. Ces formules permettent de décrire les liens entre la vitesse, la pression et la viscosité d'un fluide [10]. Elles sont composées d'un ensemble d'équations telles que présentées ci-après :

$$\rho \frac{\partial u}{\partial t} + \rho u \cdot \nabla u = \nabla[-p \cdot I_d + \mu(\nabla u + (\nabla u)^T)] - \left(\frac{2\mu}{3} - K_{dv}\right)(\nabla[u])I_d \quad (3.9)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(u) = 0 \quad (3.10)$$

### 3.4.2 Équations permettant le suivi du front d'écoulement

Ce qui nous intéresse le plus dans ce projet est de savoir si le polymère remplira correctement le moule ainsi que les textures qui le composent. Il est donc important de prendre en compte le suivi de l'écoulement, et notamment le suivi du front d'écoulement du fluide.

Concernant cet aspect, les résultats des travaux de recherches divergent, mais nombre d'entre eux [65, 76] s'accordent à utiliser la méthode des ensembles de niveau (level set method), qui est une méthode assez robuste du point de vue numérique. Cette méthode est définie par les équations suivantes [83] :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + u \nabla[\phi] = \gamma \nabla[\epsilon \nabla[\phi] - \phi(1 - \phi) \frac{\nabla[\phi]}{|\nabla[\phi]|}] \quad (3.11)$$

Où  $\phi$ ,  $\epsilon$  et  $\gamma$  sont des valeurs caractéristiques de la méthode des ensembles de niveau :

—  $\phi$  est la fonction caractéristique du polymère telle que

$$\phi(x, y) = 1 \text{ si l'on est en présence de polymère ;}$$

$$\phi(x, y) = 0 \text{ sinon}$$

—  $\epsilon$  est le paramètre contrôlant l'épaisseur de l'interface et est calculée par COMSOL comme suit :

$$\epsilon = \text{taille maximale des éléments du maillage}/2$$

—  $\gamma$  est le paramètre de réinitialisation qui permet de gérer la stabilité du modèle. En général, COMSOL considère que le paramètre de réinitialisation est égal à 1.

Ce modèle permet le suivi du front d'écoulement et ainsi permet de voir si le polymère remplit correctement le moule et les textures.

Afin de calculer l'écoulement du fluide au sein de la cavité du moule, Héту et al. [61] ont eux considéré une variation de la méthode des volumes de fluide connue sous le nom de fonction de pseudo-concentration  $F$ .

La méthode des volumes de fluide (VOF) consiste à discrétiser la géométrie en différentes cellules [22]. La méthode VOF va ainsi définir une fonction unité qui prendra la valeur 1 dans une cellule où le fluide est présent et 0 dans une cellule où le fluide est absent. La particularité de cette méthode est que chaque cellule étant seulement partiellement remplie du fluide aura pour valeur de fonction une valeur comprise entre 0 et 1 qui représentera la fraction volumique du fluide.

Cette fonction de pseudo-concentration utilisé par Héту et al. [61] permet de définir une fonction  $F(x,t)$  qui est plus grande qu'une valeur critique appelée  $F_c$  si le fluide est présent

dans la cellule, et plus petite dans le cas inverse.  $F_c$  est une valeur critique définie par le modèle de pseudo-concentration définie par Hétu et al. [61].

$$\frac{\partial F}{\partial t} + u \cdot \nabla F = 0 \quad (3.12)$$

La fonction  $F$  est transportée en utilisant la solution des équations de Stokes généralisée. Le volume où  $F > F_c$  représente le volume où la cavité est remplie, et l'inverse, le volume où la cavité est vide.

La différence majeure entre la méthode des volumes de fluides et la méthode level set est que la première (la méthode VOF) a une meilleure conservation de la masse, tandis que la deuxième a un meilleur suivi de la courbure de l'interface entre les fluides. Pour remplir l'objectif de ce projet, il est intéressant pour nous de savoir si le fluide remplit les textures dans le moule, nous allons donc travailler avec la méthode level set.

### 3.4.3 Comportements visqueux et température

L'utilisation d'un polymère fondu nous oblige à nous intéresser à la rhéologie du matériau que nous allons utiliser. La plupart des polymères n'étant pas considéré comme des fluides newtoniens, les équations utilisées devront prendre en considération cette notion et fournir une modélisation mathématique correcte des phénomènes fluidiques des polymères. En effet, un fluide est dit newtonien lorsque les contraintes observées à l'intérieur du fluide sont linéairement proportionnelles à la vitesse à l'intérieur du fluide, avec pour facteur de proportionnalité la viscosité [22]. Ainsi, dans un fluide newtonien, la viscosité ne dépend pas des contraintes extérieures qu'on lui applique et la loi de viscosité de Newton s'écrit :

$$\tau = \mu \left( \frac{dv}{dy} \right) \quad (3.13)$$

où  $\tau$  est le tenseur des contraintes de cisaillement,  $\mu$  est la viscosité dynamique du fluide et  $\frac{dv}{dy}$  est le taux de déformation du fluide.

Les fluides dont la viscosité du fluide est dépendante du cisaillement ayant lieu à l'intérieur de celui-ci sont appelés quant à eux des fluides non-newtoniens et sont régis par la loi de viscosité de Newton suivante [84] :

$$\tau = \mu \left( \frac{dv}{dy} \right)^n + B \quad (3.14)$$

Il existe plusieurs types de fluides visqueux non newtonien :

- les fluides rhéofluidifiants, qui représentent 90% des fluides non-newtoniens. Ces fluides voient leur viscosité diminuer avec l'augmentation du taux de cisaillement. Dans ce genre de fluide on peut donner comme exemple le ketchup.
- Les fluides rhéoépaississants, pour lesquels la viscosité augmente lorsque le taux de cisaillement augmente. Comme exemple, on peut citer les sables mouvants.
- Les liquides à seuils. Ces derniers deviennent liquides seulement à partir du moment où la contrainte appliquée au fluide dépasse un certain seuil de contrainte. Dans le cas contraire, ces fluides restent à l'état solide.
- Les fluides thixotropes et antithixotropes

De plus, les polymères thermodurcissables subissent également un phénomène de réticulation lorsqu'ils sont chauffés. La réticulation d'un polymère thermodurcissable est le phénomène de création de liaisons chimiques au sein d'un polymère. Une fois un polymère thermodurcissable réticulé, il a adopté sa forme finale et ne peut être moulé à nouveau. Ce processus peut prendre un certain temps, de plusieurs secondes à parfois plusieurs minutes ou heures, alors que le remplissage du moule est un processus plutôt rapide, quelques dizaines de secondes. Nous allons considérer dans ce projet que le remplissage du moule se

fait avant la réticulation du polymère. Il est donc possible d'établir que le lien entre la viscosité du polymère thermodurcissable et la température suit le modèle viscosité de Cross-WLF, qui décrit le comportement des polymères thermoplastiques et qui est très utilisé par le logiciel Moldflow et dans la bibliographie [51, 53, 77].

Le modèle de Cross-WLF lie la viscosité à la température dans un fluide non newtonien, et est défini comme suit :

$$\mu = \frac{\mu_0}{\left(1 + \left(\frac{\mu_0 \dot{\gamma}}{\tau^*}\right)^n\right)^{n-1}} \quad (3.15)$$

Avec :

- $\mu_0$  la viscosité à une température donnée lorsque le ratio de cisaillement est nul
- $\tau^*$  et  $n$  sont des paramètres du modèle
- $\dot{\gamma}$  est le ratio de cisaillement défini comme suit :

$$\|\dot{\gamma}\| = \sqrt{\frac{1}{2}(2u_y^2 + 2(u_x + v_y)^2 + (2v_x)^2 + 4\left(\frac{u}{y}\right)^2)} \quad (3.16)$$

La viscosité à cisaillement nul est déterminé par le modèle de WLF suivant :

$$\mu_0 = D_1 \cdot \exp\left[\frac{-A_1(T - T^*)}{A_2 + (T - T^*)}\right] \quad (3.17)$$

Concernant la température, le processus de chauffage du moule opté pour notre projet suit le protocole suivant :

Dans un premier temps, le moule est chauffé jusqu'à ce qu'il atteigne une température de 152 °C (425.15 °K), température communément utilisée dans l'industrie. Une fois celle-ci atteinte, le polymère à température ambiante est injecté dans la cavité du moule. En considérant les effets thermiques, et d'après différents articles, dont celui de Moguedet et al.[65],

on a donc l'équation de convection et de diffusion qui permet de décrire le comportement thermique du fluide :

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho C_p u \nabla T - \nabla [k \nabla T] = 0 \quad (3.18)$$

Il existe donc de nombreux modèles mathématiques permettant de décrire le comportement d'un polymère lors du moulage à injection, il est donc important de déterminer les modèles les plus à même de décrire le comportement de notre polymère.