Estimation des contraintes résiduelles dans des pièces composites à matrice polymère obtenues par impression 3D HT-FDM.

Estimation of residual stresses in HT-FDM 3D printed single polymer composite (SPC) parts.

C. A. Suarez-Afanador^{1,2}, Lukáš Jakabčin³, N. Lahellec¹, A. Maurel-Pantel¹, D. Bousaa¹ et S.P.A. Bordas²

 Équipe Matériaux et Structures, LMA-CNRS Aix-Marseille Université, Centrale Marseille
 Impasse Nikola Tesla, 13013 Marseille, France e-mail : suarez@lma.cnrs-mrs.fr

2 : Département de Mécanique, DSSE Université du Luxembourg, Maison du Nombre 6 Avenue de la Fonte, L-4364 Esch-sur-Alzette, Luxembourg camilo.suarez@uni.lu

> 3 : Laboratoire de Mécanique Gabriel Lamé Université d'Orléans
> 8 rue Leonardo da Vinci, 45072 Orléans, France

Résumé

Ce travail, résultat d'une thèse doctorale en collaboration de l'université d'Aix-Marseille et l'Université du Luxembourg, possède la finalité d'utiliser les outils de la mécanique des solides et la mécanique computationnelle dans la prédiction des contraintes internes dans les pièces composites obtenus par une procédure d'impression HT-FDM (High Temperature Fused Deposition Modeling). Le travail considère le problème multiéchelle par une procédure d'homogénéisation à deux étapes; en combinant des techniques d'homogénéisation en champ moyen à description probabiliste des paramètres microstructuraux, avec des approches par champ complet pour l'estimation du comportement macroscopique, tout en gardant une représentation mathématique du matériau qui est fidèle au comportement réel du polymère, en conclusion, on cherche une prédiction du comportement thermo-viscoélastique effective d'une pièce imprimé avec une représentation mathématique qui est sensible aux variations dans la cinétique des charges mécaniques et thermiques. Et en fin en présentant un scénario fiable et plausible du prototypage virtuel en impression 3D.

Abstract

This work, the result of a Ph.D. thesis in collaboration with the University of Aix-Marseille and the University of Luxembourg, aims to use solid mechanics and computational mechanics tools to predict internal stresses in composite parts obtained by HT-FDM (High Temperature Fused Deposition Modeling) printing. The work addresses the multiscale problem through a two-stage homogenization procedure; combining mean-field homogenization techniques with probabilistic description of the microstructural parameters, with full-field approaches for estimating the macroscopic behavior, while maintaining a mathematical representation of the material that agrees to the real behavior of the polymer. In conclusion, we seek a prediction of the effective thermo-viscoelastic behavior of a printed part with a mathematical representation that is sensitive to variations in the kinetics of mechanical and thermal loading. Finally, we present a reliable and plausible scenario for virtual prototyping in 3D printing.

Mots Clés : Homogénéisation, thermo-viscoélasticité, polymères composites, Impression 3D, contrainte résiduelle. **Keywords :** Homogenization, thermo-viscoelasticity, 3D printing, composite polymers, residual stress.

1. Introduction

Ce travail considère l'étude des contraintes résiduelles dans une pièce composite à matrice polymère qui est obtenue en utilisant la procédure de manufacture dénommée high-temperature fused deposition modeling (HT-FDM). La particularité de ce type d'impression 3D est l'utilisation des polymères à haute performance comme matière primaire. Ces polymères possèdent des caractéristiques thermomé-caniques et chimiques très intéressantes pour une grande variété des applications industrielles, parmi lesquelles on peut citer sa haute température de transition vitreuse (thermostabilité), sa haute résistance mécanique, sa basse masse volumique, sa résistance aux solvants organiques et quelques-uns sont même biocompatibles étant des remplaçants potentiels d'implants et prosthétiques. L'estimation des

contraintes résiduelles dans un tel matériau n'est pas triviale puisque le matériau comporte plusieurs échelles d'hétérogénéité comme il est montré dans la Fig. 1. D'après cette image, on peut observer deux échelles caractéristiques de la pièce considérée, la première échelle est celle du filament composite qui est extrudé, la *microéchelle*, et qui est composé d'une matrice thermoplastique amorphe (ici poly-éther-imide avec nom commercial Ultem® 1010), renforcée par des fibres élastiques de verre. La deuxième échelle est celle de la pièce fabriquée, qui est obtenue par superposition de couches minces du filament composites formées à partir de la juxtaposition des cylindres extrudés avec un certain dégrée de superposition des cylindres voisins, la *mesoéchelle*, comme montré dans la Fig. 1. Cette échelle constitue un réseau poreux, la géométrie des pores étant fonction des trajectoires planes d'impression de chaque couche. En addition, la matrice polymère n'a pas non plus un comportement trivial, son caractère thermo-viscoélastique implique une dépendance des propriétés mécaniques en fonction du temps et de la température. Dans ce travail, la dépendance à la température est modélisée en utilisant le principe de superposition temps-température (TTS) des matériaux thermo-rhéologiquement simples [1, 2].



FIG. 1. – Représentation schématique du problème multiéchelle considéré

L'implémentation de la méthodologie pour l'obtention d'une approximation des contraintes résiduelles (σ^{M}) implique l'estimation du comportement macroscopique effectif de la pièce, la procédure pour aboutir une description macro suit l'ordre suivant : la première échelle, la micro-échelle (estimation de \tilde{L}^{μ} et $\tilde{\alpha}^{\mu}$) est traitée en utilisant une méthode d'homogénéisation en champ moyen décrite dans une publication précédente des auteurs [3], dans laquelle l'estimation est obtenue par extension des méthodes d'homogénéisation de champ moyen conventionnelles (dérivées du problème d'Eshelby) en utilisant le principe de correspondance [4], ces calculs prennent en compte des paramètres microstructuraux permettant une représentation fidèle de la réalité des fibres dans le filament (c.-à-d. la prise en compte des distributions de longueur et d'orientation des fibres). La mésoéchelle (estimation de \tilde{L}^{m} et $\tilde{\alpha}^{m}$) est traitée par une méthode numérique d'homogénéisation de champ complet basé sur les éléments finis conventionnels, le calcul des propriétés thermo-viscoélastiques est réalisé à travers de simulations dynamiques à régime établi sur un espace de fréquence pertinent aux conditions de service de la pièce pour après subir une procédure d'identification selon [5]. En termes de validation, les estimations sont

comparées avec des calculs sur des domaines hétérogènes (la contrepartie réelle des approximations). Ayant une estimation du comportement macroscopique, la phase finale considère une expérience de laboratoire dans laquelle on étudie la déflexion d'une plaque mince (4 couches d'impression) imprimé dans une machine à chambre fermée qui suit une histoire de température contrôlée. La déflexion est donc comparée avec les prédictions du modèle.

2. Loi du comportement de la matrice thermoplastique.

Comme a été dit dans l'introduction, on cherche une description matérielle qui permet au mieux de se rapprocher au comportement réel du polymère. On utilise donc la théorie de la thermo-viscoélasticité comme étant actuellement une description capable de prendre en compte la dépendance du matériau à l'histoire du chargement et l'évolution de la température depuis un état de référence commun. La loi du comportement [2, 4, 6] s'écrit :

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}_0 + \left[\boldsymbol{L}(T, \cdot) \circledast \boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{L}(T, \cdot) \circledast \boldsymbol{\alpha}(T, \cdot) \circledast \boldsymbol{\theta} \right] (t)$$
(Eq. 1)

avec σ_0 étant la contrainte initiale à l'état de référence, L le tenseur de quatrième ordre des coefficients de relaxation de la matrice, α le tenseur de second ordre des coefficients de dilatation thermique, ε la déformation et $\theta = T - T_0$ la différence de température par rapport à l'état initial caractérise par $T(0) = T_0$. L'opérateur intégral \circledast correspond au produit de convolution de Stieltjes, qui traduit le fait que l'expression au-dessus permet de prendre en compte tous les états précédents du polymère pour définir l'état à un instant donné.

La modélisation des propriétés matérielles L et α de la matrice prend la forme des séries de Prony. Dans le cas des propriétés mécaniques cette représentation est commune aux polymères [7, 8, 9], en contraste la représentation du tenseur des coefficients de dilatation est couramment traité depuis courbes de température pour tabuler les valeurs, cependant ces modèles n'ont pas la capacité de reproduire la sensibilité à la cinétique thermique. La modélisation choisie pour α est celle de *A.J. Kovacs* in [10], une théorie conçue pour les polymères amorphes d'après le comportement observé lors des expériences de recouvrance isotherme dans des échantillons à une variation instantanée de la température et implementé dans le contexte des polymères à mémoire de forme [11]. Sachant que le polymère est isotrope, on a besoin que dé trois coefficients, $\kappa(t)$, $\mu(t)$ and $\alpha(t)$, pour définir entièrement les propriétés thermomécaniques. En addition, la sensibilité des propriétés à la température est représentée en utilisant le coefficient de décalage a_T du principe de superposition temps-température des matériaux thermorhéologiquement simples. Regardons donc la forme explicite des propriétés mentionnées :

$$\kappa(t,T) = \kappa_{\infty} + \sum_{u=1}^{U} \kappa^{(u)} \exp\left(\frac{-t}{a_T(T)\tau_{\kappa}^{(u)}}\right)$$
(Eq. 2)

$$\mu(t,T) = \mu_{\infty} + \sum_{u=1}^{U} \mu^{(u)} \exp\left(\frac{-t}{a_T(T)\tau_{\mu}^{(u)}}\right)$$
(Eq. 3)

$$\alpha(t,T) = \alpha_{\infty} - \sum_{u=1}^{U} \alpha^{(u)} \exp\left(\frac{-t}{a_T(T)\tau_{\alpha}^{(u)}}\right)$$
(Eq. 4)

Avec κ_{∞} , μ_{∞} et α_{∞} , étant les modules à long terme des propriétés ou de façon analogue (depuis le TTS) les valeurs à haute température. les distributions { $\kappa^{(u)}$, $\tau^{(u)}_{\kappa}$ }, { $\mu^{(u)}$, $\tau^{(u)}_{\mu}$ } et { $\alpha^{(u)}$, $\tau^{(u)}_{\alpha}$ } décrivent les spectres de relaxation en compressibilité et cisaillement pour les deux premiers, et le troisième, décrivant le fluage thermique dû à une variation instantanée de la température.

3. Traitement de la microéchelle

La procédure d'homogénéisation de la microéchelle est présentée dans une publication précédente des auteurs [3]. En général, ce qui a été développé dans cette publication est une méthodologie permettant l'application des méthodes d'homogénéisation en champ moyen dans le contexte de la thermo-viscoélasticité. Celui a été possible grâce à : i) la présence d'une unique phase polymère dans le matériau composite, et ii) le fait que ce polymère intègre le groupe des matériaux thermorhéolo-giquement simples. En conséquence, l'extension du TTS aux variations continues de la température (la technique du temps interne) en conjonction avec un changement de variable permet la formulation du problème thermo-viscoélastique d'homogénéisation en champ moyen à travers la correspondance symbolique des problèmes d'équilibre en passant par la transformée de Laplace-Carson, qui s'identifie de manière univoque avec le problème d'homogénéisation en thermoélasticité linéaire et pour ce problème, on connaît une large plage des méthodes dans la bibliographie [12, 13, 14]. Les résultats obtenus ont été comparés avec des simulations champs complets en montrant sa bonne performance et son avantage devant son référent, car le temps de calcul de propriétés effectives est négligeable devant le temps des simulations en champ complet.

4. Traitement de la mesoéchelle

La procédure d'homogénéisation de la mesoéchelle est évidement dépendant du pas précédent, car les sorties du pas précédent sont les entrées du pas actuel pour les propriétés de la matrice. La difficulté de cette échelle a été la représentation analytique d'une géométrie de pore comme celle observée dans la Fig. 1. En fait, les pores allongés à section en diamant courbé ne sont pas une géométrie triviale, raison pour laquelle on a décidé d'aborder le calcul des propriétés effectives de cette étape et utilisant une méthode par champ complet. Avant continuer, il faut qu'on rappelle qu'à cette échelle, dû à la nullité des propriétés mécaniques des pores, la dilatation thermique effective de l'échelle macroscopique est identique à celle de la matrice, ce qui réduit le calcul du comportement thermo-viscoélastique effectif au calcul du comportement viscoélastique effectif. La solution numérique est donc obtenue en utilisant des éléments finis conventionnels et des conditions aux bords de type periodique pour la cellule unitaire qui contient un diamant du pattern. Les résultats obtenus à cette échelle ont été comparées avec des simulations hétérogènes des domaines massifs. Les Figs. 2-3 montrent un exemple des résultats des simulations.



FIG. 2. – distribution du déplacement vertical u_2 , view isometrique.



FIG. 3. – distribution du déplacement vertical u_2 , view frontale.

5. Validation

Après d'avoir vérifié la qualité des approximations obtenues avec des comparaisons purement numériques, une tâche final a été envisagée ; comparer ce qu'on obtient avec la réalité physique. La situation choisie est celle du refroidissement d'une plaque mince orientée [0,0,90,90] dans une chambre d'impression et d'essayer de prédire la déflexion de la plaque dû à la distribution asymétrique des plies. Sachant qu'on est confronté à la réalité, plusieurs mesures expérimentales qui servent à l'identification des paramètres nécessaires ont été effectués, ce qui inclut : essais DMA, essais de dilatation et microtomographie des deux échelles caractéristiques.

Références

- [1] « A class of simple solids with fading memory *»International Journal of Engineering Science* Vol. 7, pp. 1173–1198, 1969, ISSN 0020-7225.
- [2] R. M. Christensen, Theory of viscoelasticity, Dover Publications Inc., 1982.
- [3] C. A. Suarez-Afanador, R. Cornnagia, A. Maurel-Pantel, N. Lahellec, J. Boussaa, H. Moulinec, S. P. A. Bordas « Effective thermo-viscoelastic behavior of short fiber reinforced thermo-rheologically simple polymers : An application to high temperature fiber reinforced additive manufacturing. », *Eur. J. Mech. A Solids*. Vol. 1 n° 2, pp. 18, 2022.
- [4] J. Mandel, Cours de Mécanique des milieux continus, Gauthier–Villars, 1966.
- [5] D. Jalocha, A. Constantinescu, R. Neviere « Revisiting the identification of generalized Maxwell models from experimental results », *Int. J. Solids. Struct.* Vol. 67-68, pp. 169–181, 2015, ISSN 0020-7683.
- [6] J. Salençon, Viscoelastic modeling for structural analysis, Wiley, 2019.
- [7] C. Zener « Theory of the Elasticity of Polycrystals with Viscous Grain Boundaries », *Phys. Rev.* Vol. 60, pp. 906–908, 1941.
- [8] D. Gutierrez-Lemini, Engineering viscoelasticity, Springer, 2014.
- [9] B. GROSS, E. L. da FONSECA, Mathematical structure of the theories of viscoelasticity, Actualités Scientifiques et Industrielles, 1953.
- [10] A. J. Kovacs, J. J. Aklonis, J. M. Hutchinson, A. R. Ramos « Isobaric volume and enthalpy recovery of glasses. II A transparent multiparameter theory. », J. Polym. Sci. B Polym. Phys. Vol. 34.
- [11] T. D. Nguyen, C. M. Yakacki, P. D. Brahmbhatt, M. L. Chambers « Modeling the Relaxation Mechanisms of Amorphous Shape Memory Polymers », Adv. Mater. Vol. 22 n° 31, pp. 3411–3423, 2010.
- [12] M. Bornert, T. Bretheau, P. Gilormini, Homogénéisation en mécanique des matériaux Tome 1, Hermes science, 2001.
- [13] G. W. Milton, The theory of composites, Cambridge University Press, ISBN ISBN 0521781256, May 2002.
- [14] T. Mura « Micromechanics of defects in solids », Vol. 3.