

SOMMAIRE

INTRODUCTION -----	8
CHAPITRE I - LE PROCÉDÉ DE FABRICATION-----	12
 1 La fabrication directe par fusion laser de poudre -----	12
1.1 Cycle de fabrication -----	13
1.2 Paramètres influents pour la fabrication-----	16
 2 Études expérimentales du procédé-----	16
2.1 Introduction-----	16
2.2 Points clés du procédé -----	17
2.2.1 Les poudres et leurs températures caractéristiques pour le procédé -----	18
2.2.2 Le laser -----	19
2.2.3 Comportement de la matière-----	21
2.3 Mise en œuvre du procédé -----	24
2.3.1 Influence du matériau -----	24
2.3.2 Importance des paramètres procédé -----	25
2.3.3 Fenêtre énergétique-----	25
2.3.4 Vers une fabrication optimale -----	26
2.4 Analyse des pièces créées par fusion laser sélective-----	26
2.4.1 Propriétés mécaniques -----	26
2.4.2 Défauts de forme-----	28
2.4.3 Etats de surface-----	28
2.5 Le procédé aujourd’hui -----	29
2.5.1 Nouveaux développements du procédé -----	29
2.5.2 Développement de nouveaux matériaux -----	29
2.5.3 Les machines actuelles et leurs possibilités -----	29
 3 Étude analytique et numérique des mécanismes de coalescence et densification -----	30
3.1 Compréhension des mécanismes de coalescence -----	30
3.1.1 La coalescence de grains de polymère -----	30
3.1.2 Modèle de Frenkel-Eshelby-----	31
3.1.3 La coalescence dans la littérature -----	35
3.1.4 Simulations numériques de la coalescence et densification-----	42
 4 Conclusion du Chapitre 1 -----	47

CHAPITRE II - CARACTÉRISATION EXPERIMENTALE DES MATERIAUX ----- 49

1 Analyse thermique des poudres : fusion et cristallisation -----	49
1.1 Méthodologie expérimentale -----	50
1.2 Analyse calorimétrique des matériaux -----	50
1.2.1 Matériau A -----	50
1.2.2 Matériau B -----	51
2 Mesure de viscosité-----	52
2.1 Méthodologie expérimentale -----	52
2.2 Analyse rhéologique des matériaux -----	53
2.2.1 Matériau A -----	53
2.2.2 Matériau B -----	54
3 Mesure de tension de surface-----	55
3.1 Méthodologie expérimentale -----	55
3.2 Valeurs usuelles de tension de surface -----	56
3.3 Analyse de la tension superficielle des matériaux -----	57
3.3.1 Mise en place d'un protocole de mesure sur le PEHD-----	57
3.3.2 Tension de surface du PA12 -----	58
3.3.3 Mesure de la tension de surface d'un matériau PEEK-----	59
4 Caractérisation granulométrique -----	59
4.1 Méthodologie expérimentale -----	59
4.2 Caractérisation granulométrique des matériaux -----	61
4.2.1 Granulométrie du matériau A -----	61
4.2.2 Granulométrie du matériau B-----	62
5 Absorptivité du rayonnement laser -----	63
5.1 Méthodologie expérimentale -----	63
5.2 Absorptivité laser des matériaux -----	66
5.2.1 Absorptivité du PEEK : état dense et poudre -----	66
5.2.2 Absorptivité du matériau A -----	70
5.2.3 Absorptivité du matériau B -----	71
5.2.4 Conclusion-----	72

CHAPITRE III - DÉVELOPPEMENT DES MODÈLES NUMÉRIQUES DE SIMULATION ----- 73

1 Développement du modèle microscopique : fusion laser de la matière -----	73
1.1 Principes physiques à modéliser -----	73
1.1.1 Hydrodynamique -----	73
1.1.2 Thermique-----	76

1.1.3 Analyse du procédé : le soudage-----	77
1.2 Choix de la méthode numérique -----	77
1.2.1 Méthodes disponibles -----	77
1.2.2 Méthode C-NEM-----	78
1.3 Choix de l'implémentation hydrodynamique et thermique -----	80
1.4 Développement hydrodynamique -----	80
1.4.1 Mise en place de la méthode C-NEM Hydrodynamique-----	80
1.4.2 Résolution du système-----	91
1.5 Déplacement des nœuds-----	94
1.5.1 Choix du pas de temps-----	94
1.5.2 Calcul des nouvelles coordonnées-----	98
1.6 Supports de simulation - Conditions aux limites en déplacements-----	98
1.6.1 Goutte pendante-----	98
1.6.2 Coalescence et cavités-----	99
1.6.3 Procédé-----	99
1.7 Traitement du maillage-----	101
1.7.1 Le maillage en C-NEM-----	101
1.7.2 Le caractère plan des simulations mises en place-----	101
1.7.3 Les maillages simulés-----	102
1.7.4 De la poudre aux maillages initiaux de simulation-----	102
1.7.5 Procédures de remaillage-----	106
1.8 Modélisation thermique-----	115
1.8.1 Mise en place de la méthode C-NEM-----	115
1.8.2 Résolution du système-----	117
1.8.3 Mise en place du modèle thermique pour le laser-----	118
1.8.4 Détails numériques liés à la thermique -----	124
1.9 Evolution physique de la matière-----	125
1.9.1 État du polymère-----	126
1.9.2 Viscosité du fluide-----	126
1.9.3 Critère de soudage-----	126
1.10 Analyse de la simulation-----	127
1.10.1 Caractérisation du soudage-----	127
1.10.2 Étude cinétique de la densification-----	127
2 Développement du modèle macroscopique -----	127
2.1 Paramètres choisis pour les simulations -----	127
2.2 Mise en place de la démarche -----	128
3 Conclusion du Chapitre 3 -----	130

CHAPITRE IV - VALIDATION DU LOGICIEL C-NEM DÉVELOPPÉ----- 131

1 Validation hydrodynamique-----	131
1.1 Simulation de la goutte pendante -----	131
1.1.1 Méthodes de détermination de la tension de surface -----	131
1.1.2 Calcul de la tension de surface avec la géométrie de la goutte-----	132
1.1.3 Simulation de la goutte pendante bidimensionnelle -----	133
1.2 Simulation de la coalescence-----	134
1.2.1 Données mesurées en simulation -----	135
1.2.2 Influence des paramètres de simulation-----	136
1.2.3 Analyse adimensionnelle de la coalescence -----	144
1.2.4 Simulations et modèle de Frenkel établi en 2D -----	145
1.2.5 Simulations et travaux de Hopper -----	149
1.2.6 Etude de la vitesse des nœuds lors de la coalescence -----	156
1.3 Evolution de cavités fermées-----	161
1.3.1 Données de simulations -----	161
1.3.2 Disque de fluide avec cavité centrée-----	161
1.3.3 Disque de fluide avec cavité excentrée-----	163
1.4 Conclusion-----	165
2 Validation thermique à l'aide de trois cas tests-----	166
2.1 Température imposée sur un bord -----	166
2.2 Flux de convection imposé-----	168
2.3 Chauffage laser transitoire-----	169
2.3.1 Validation des modèles -----	170
2.3.2 Vérification de la validité des choix numériques -----	171
2.3.3 Comparaison de la thermique 2D et 3D-----	171
2.3.4 Correction 2D/3D-----	171
2.3.5 Prise en compte de l'enthalpie de fusion -----	173
3 Conclusion du Chapitre 4-----	175

CHAPITRE V - SIMULATION DU PROCÉDÉ DE FUSION LASER SÉLECTIVE ----- 176

1 Simulation du procédé-----	176
1.1 Echelle microscopique : fusion de la poudre-----	176
1.1.1 Aptitude des poudres à coalescer -----	176
1.1.2 Rappel des choix numériques de simulation-----	177
1.1.3 Simulation du procédé-----	177
1.1.4 Comparaison avec l'expérience -----	189

1.1.5 Synthèse des résultats de la simulation à l'échelle microscopique -----	192
1.2 Echelle macroscopique : maintien à l'état liquide-----	194
1.2.1 Paramètres intervenant dans la thermique lors de l'étalement-----	195
1.2.2 Effets des choix initiaux-----	195
1.2.3 Influence des différents paramètres d'étalement-----	198
1.2.4 Mise en place des courbes d'isovaleurs de refroidissement -----	200
1.2.5 Application de la démarche au PA12 -----	203
1.2.6 Synthèse sur l'étude de l'étalement d'une nouvelle couche -----	204
CONCLUSIONS -----	205
Références -----	209

INTRODUCTION

Les matières plastiques représentent un enjeu capital dans les déplacements de demain. Du fait de leurs masses volumiques réduites, elles investissent les nouvelles structures et sont souvent alliées à d'autres matériaux pour leur donner de bonnes caractéristiques mécaniques. Les gains de masse se répercutent sur les coûts, les consommations énergétiques et les charges transportables. La progression de nos connaissances en terme de mise en œuvre de ces matériaux, de leurs performances et de leur durabilité permet d'envisager de les intégrer de plus en plus au cœur des structures, tout en répondant à des exigences de plus en plus fortes, à la fois pour leur tenue mécanique, thermique et chimique en continu dans divers environnements. Parmi les procédés de mise en œuvre de matières plastiques, la fabrication directe est un procédé récent dans la continuité du procédé de prototypage rapide par fusion laser de poudres. Alors qu'en prototypage, l'objectif est de créer une géométrie en trois dimensions rapidement, en fabrication directe, les pièces doivent répondre à un cahier des charges fonctionnel. Ce procédé permet de créer, à partir d'une modélisation géométrique numérique, des pièces de géométries complexes en quelques heures sans besoin d'outillages (moules etc) et usinages. La fabrication dite additive est réalisée par étagement successif de couches de poudres de quelques dizaines de micromètres, dont une partie est fondue sous rayonnement laser et refroidie lentement afin de permettre la densification de la poudre par diffusion de l'air emprisonné et de limiter les distorsions. Les matériaux utilisés aujourd'hui industriellement sont les polyamides (PA) 11 et 12, mais leur température de fonctionnement en continu ne peut excéder 60°C à 70°C. Les pièces réalisées permettent une grande flexibilité de conception (Figure 1) et peuvent intégrer des fonctions diverses comme de l'isolation thermique ou de la déformation élastique (Figure 2) pour créer une mobilité cinématique.



Figure 1 Pièces thermoplastiques obtenues par fusion laser sélective équipant des aéronefs

Dassault Aviation, AEPR 2008



Figure 2 Démonstrateurs EOS : pièces élastiques déformables - www.eos.info

La poudre mise en œuvre possède une granulométrie variant entre 10 et 200 µm de diamètre (Figure 3), pour des épaisseurs de couches de quelques dizaines de micromètres.



Figure 3 Poudre de PA12 utilisée par Dassault

Le projet FUI CALYPSO démarré en 2009 s'est intéressé à la compréhension du procédé de fabrication directe pour ces matériaux polyamides. La maîtrise des performances des pièces créées par fusion laser est complexe. Les processus physiques mis en jeu lors de la fabrication sont aujourd’hui mieux compris pour le polyamide.

Le projet FUI FADIPLAST labellisé par les pôles de compétitivité Astech, Pegase et Plastipolis a pour objectif d'étendre la maîtrise du procédé aux matériaux hautes températures de type PEEK (PolyEtherEtherKetone). Ces matériaux peuvent être maintenus à des températures très élevées (150 à 200°C) pendant de longues périodes sans dégradation (Charrier, 1990). Mais du fait des très hautes températures de mise en œuvre des PEEK (environ 350°C), la bonne maîtrise de la qualité de la matière densifiée et la répétabilité des caractéristiques des pièces finales est délicate. En particulier, la présence de porosités dans la matière densifiée induit une baisse importante des caractéristiques mécaniques des pièces (Schmidt et al., 2007).

A ce jour, EOS est le seul groupe proposant une machine (EOSINT P800) et un matériau PEEK adapté (EOS PEEK HP3) permettant de fabriquer directement des pièces hautes performances à base de PEEK (Figure 4). Cependant, ces poudres adaptées à la fabrication directe ont un coût de l'ordre de 1000 €/kg là où le commerce propose des poudres PEEK à moins de 200 €/kg. En parallèle, les machines avoisinent le million d'euros, et les garanties machines disparaissent dès lors que des poudres non propriétaires sont utilisées. Ces coûts empêchent l'utilisation du procédé dans le contexte économique actuel, et les acteurs du projet FADIPLAST souhaitent développer une filière française indépendante afin d'utiliser cette technologie dans leurs produits.

Le consortium FADIPLAST est composé de trois grandes entreprises, Dassault Aviation, pilote du projet, MBDA et Thales Alenia Space. Deux PME possédant des machines de fusion laser sélective y participent, Solution F et Poly-Shape. Deux laboratoires, le Centre des Matériaux de l'école Mines ParisTech et le laboratoire PIMM (Procédés et Ingénierie en Mécanique et Matériaux) d'Arts et Métiers ParisTech et un centre technique, le Pôle Européen Plasturgie prennent part aux développements techniques.



Figure 4 Conduite d'aération thermoplastique obtenue par fusion laser sélective
EOS PEEK HP3 : premier matériau développé par EOS pour une utilisation dans ses machines
(www.eos.info)

Dans le cadre de ce projet, une première thèse au Centre des Matériaux à l'école Mines ParisTech a pour objectif d'étudier et de prédire les propriétés mécaniques des pièces PEEK créées par fusion laser sélective.

La seconde thèse, objet du présent travail, doit permettre de mieux comprendre les phénomènes physiques mis en jeu lors de la transformation de la poudre par fusion laser, notamment les processus menant à la densification des poudres, à travers la fusion et la coalescence des grains sous l'action laser et leur maintien à l'état liquide lors de l'étalement d'une nouvelle couche afin de favoriser la diffusion de l'air emprisonné. Ce travail a pour but l'optimisation du procédé.

Le procédé à l'échelle des grains est étudié à l'aide d'un logiciel de calcul fluide et thermique développé sur le logiciel Matlab avec la méthode C-NEM (Constrained Natural Element Method). La

simulation de la fusion laser des grains doit permettre de déterminer la profondeur liquéfiée, l'écoulement de la matière fondu sous l'action de la tension de surface, la coalescence et la densification de la poudre, la qualité du soudage obtenu, les cycles thermiques subis par la poudre et les conditions et temps de solidification éventuelle de la matière. Nous présentons en particulier les états de densification obtenus et les épaisseurs de couches soudées pour différents paramètres matériau et procédé. Un des objectifs est de déterminer quels matériaux sont plus aptes à être utilisés en fabrication directe thermoplastique, et quelles propriétés doivent être améliorées dans l'optique du développement de nouveaux matériaux pour la fusion laser sélective. Cette étude a aussi pour but d'optimiser les épaisseurs de couches afin d'augmenter l'efficacité des machines en diminuant les temps de fabrication. Les nouvelles couches de poudre sont étalées sur la matière fondu, induisant un refroidissement ponctuel, mais il semble que la matière doive rester à l'état liquide afin d'assurer une bonne densification, c'est pourquoi la thermique à l'échelle des couches de poudre est étudiée. Un logiciel éléments finis commercial (COMSOL) permet de déterminer les conditions d'étalement optimales pour que la matière fondu soit maintenue à l'état liquide.

Le premier chapitre de cette thèse présente une revue bibliographique sur le procédé de fusion laser sélective, sa mise en œuvre, les paramètres matériau et procédé influents mis en évidence à travers des études physiques de la matière fusionnée par laser, puis nous faisons un tour d'horizon des études analytiques et numériques sur la coalescence et la densification des poudres.

Le chapitre deux présente une étude des poudres du projet, dont les caractéristiques seront les données d'entrée des simulations mises en place. En particulier, nous étudions leurs caractéristiques thermiques, viscosités, tensions de surface, granulométries et leur absorption du rayonnement laser.

Le chapitre trois permet de définir les deux simulations mises en place, l'une à l'échelle des grains de poudre dans la couche permettant d'étudier finement leur fusion, l'autre à l'échelle des couches de poudre afin d'étudier la température de la matière fondu lors de l'étalement d'une nouvelle couche et de vérifier qu'elle reste supérieure à la température de cristallisation du polymère.

Le chapitre quatre permet de valider la simulation à l'échelle microscopique développée au chapitre trois, hydrodynamiquement et thermiquement afin de l'utiliser pour simuler le procédé.

Le chapitre cinq présente les résultats de l'étude du procédé aux deux échelles mentionnées précédemment.

CHAPITRE I - LE PROCÉDÉ DE FABRICATION

1 La fabrication directe par fusion laser de poudre

Le terme « fabrication directe » regroupe les procédés qui permettent de fabriquer des pièces directement à partir de données numériques 3D.

En mars 1986, aidé par l'arrivée d'ordinateurs et de logiciels pouvant commander des machines, Hull dépose le premier brevet US4575330 pour la production de pièces tridimensionnelles par stéréolithographie et fonde la société 3D Systems Inc. En 1988, la première machine dite de prototypage rapide par stéréolithographie est commercialisée (Pandey, 2012). Ce procédé consiste à fabriquer une pièce couche par couche par solidification spécifique de la surface libre d'un liquide photosensible (Ott, 1989). Chaque couche vient se consolider avec la précédente puis l'ensemble descend d'une épaisseur dans le bac, permettant au liquide de prendre place pour la prochaine couche. Cette méthode présente l'inconvénient de nécessiter une continuité géométrique de la pièce entre chaque couche. En effet, toute partie de la nouvelle couche doit nécessairement être en lien solide avec les précédentes, et la pièce elle-même doit être en lien avec le bac dans lequel elle est fabriquée. Un réseau tridimensionnel de liens peut donc être nécessaire, créé puis enlevé suite à la fabrication.

En parallèle, dès 1987, Carl Deckard de l'université du Texas observe que les poudres polymères pouvaient être fusionnées par laser, permettant de créer des pièces de géométries complexes. Le développement des ordinateurs permet alors de commencer le développement de cette nouvelle technologie. Deckard dépose le brevet US5316580 en 1992 sur cette technologie, accepté en 1994.

Cette première machine fut une révolution dans le monde de la fabrication rapide, les ventes de machines de fabrication additives connaissent une croissance importante depuis (Figure 5). En 2012, le rapport de Wohlers Associates, cabinet de conseil indépendant en développement rapide et fabrication additive, annonce une croissance annuel de 30 % dans ce domaine.

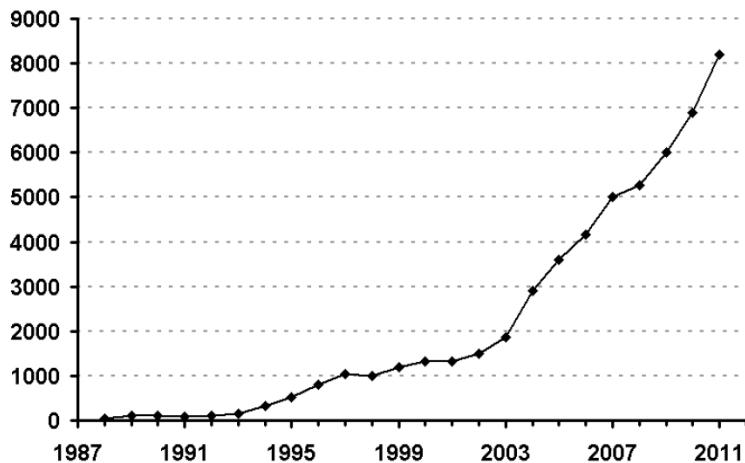


Figure 5 Nombre de machines de fabrication additive vendues chaque année dans le monde

2010 et 2011 sont des prévisions (Wohlers, 2010)

Aujourd’hui, plusieurs procédés de fabrication additive à partir de modèles numériques (prototypage rapide et fabrication directe) existent (Gebhardt, 1997 - Pandey, 2012 - Yang, 2012). On distingue la fabrication par apport de matière de la fusion sélective et la stéréolithographie. La fabrication par apport de matière (dépôt de fil, projection de poudre) consiste à apporter de la matière et à la consolider en parallèle pour former la pièce. Toute la matière apportée va former la pièce finale. La refusion sélective (poudres) et la stéréolithographie (liquide) consistent à faire réagir thermiquement ou par rayonnement une partie d’un bac afin de créer une pièce couche par couche en ne sélectionnant que les zones qui seront solidifiées.

Notre étude porte sur le procédé de fabrication directe par fusion laser sélective de poudres plastiques. Les pièces sont créées couche par couche par fusion laser d’une zone spécifique d’un lit de poudre.

1.1 Cycle de fabrication

Le cycle de fabrication de pièces par ce procédé est bien décrit dans la littérature (Hopkinson et al., 2006) et exposé en figure 6.

Lors de la fabrication, un modèle de la pièce à fabriquer est créé numériquement avec un logiciel de conception. Le modèle numérique est exploité par le logiciel de traitement de la machine de fabrication qui va le découper en tranches successives parallèles d’épaisseur donnée et établir le balayage dans le plan du faisceau laser.

Avant de commencer la fabrication, de la poudre est insérée dans les bacs d’alimentation de la machine de fabrication et quelques passes permettent d’établir une première épaisseur de poudre dans la zone de fabrication avant la conception de la pièce.

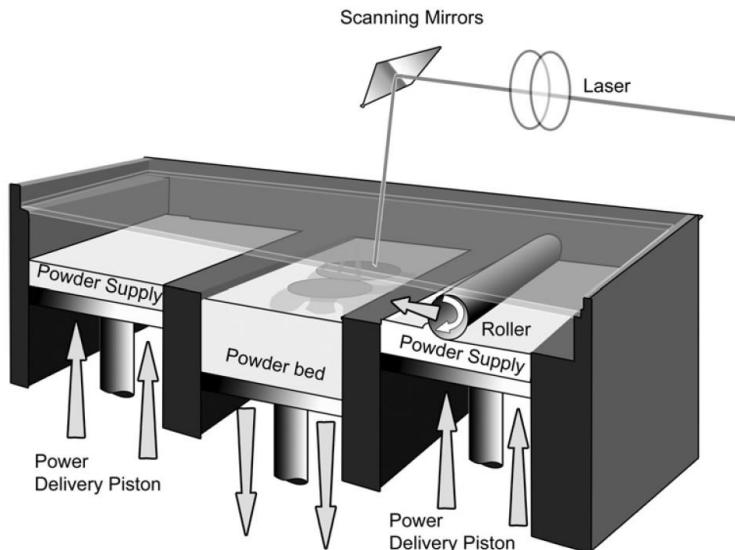


Figure 6 Principe des machines pour la fabrication par fusion laser sélective thermoplastique
(Hopkinson et al. 2006)

Les bacs possèdent en partie inférieure un piston mobile sur l'axe vertical afin de libérer de la poudre au niveau des bacs d'alimentation et de descendre la zone de fabrication pour permettre la création des couches successives de la pièce et son refroidissement. Deux bacs de surplus permettent de récupérer l'excédent de poudre emportée par le rouleau lors de chaque étalement.

Selon les fabricants, le système d'étalement est soit un rouleau, parfois chauffé, en rotation autour de son axe dont le sens permet de pousser la poudre (sens opposé d'un mouvement de roulement sans glissement du rouleau sur la poudre lors de l'étalement), soit un racleur.

Les bacs d'alimentation et de fabrication sont préchauffés à des températures différentes, un système de radiants au-dessus de la zone de fabrication (parfois au-dessus des zones d'alimentation) permet de réchauffer la poudre par rayonnement infrarouge.

Le laser est placé au-dessus de la zone de fabrication et permettra, à l'aide d'un système de miroirs, de fusionner la poudre de manière spécifique en surface de la zone de fabrication.

Lors de la fabrication d'une couche, la poudre est d'abord préchauffée dans le bac d'alimentation. Le premier piston d'alimentation monte afin de libérer de la poudre. Elle est déplacée à l'aide du rouleau/racleur jusqu'à la zone de fabrication. L'excédent de poudre est récupéré dans le bac de surplus. La poudre de la zone de fabrication est préchauffée par rayonnement infrarouge de radiants jusqu'à la température de consigne. Les radiants sont alors stoppés et le laser effectue la passe permettant de fondre une zone spécifique de la couche de poudre. Enfin, l'éclairage laser est interrompu et la zone de fabrication descend d'une épaisseur de couche.

Couche après couche, le processus se répète jusqu'à l'obtention de la pièce finale. La présence de deux bacs d'alimentation permet de gagner du temps entre chaque cycle, afin d'éviter un retour du rouleau/racleur inutile.

A chaque nouvelle couche, la pièce descend dans le piston de fabrication dont la température est contrôlée. Le refroidissement global est ainsi maîtrisé en profondeur. A la fin de la fabrication, le bac est rempli de poudre non fondu au sein de laquelle se trouve la pièce solidifiée. Il faut alors remonter le piston de fabrication, enlever la poudre non fondu et récupérer la pièce fabriquée.

Après fabrication, la poudre non fondu du bac de fabrication et la poudre excédante des bacs de surplus seront recyclées pour de futures pièces.

Les deux principaux fournisseurs de machines de fabrication directe par fusion laser sélective, E.O.S GmbH et 3D Systems Corporation. Pham et al. (2008), ont décrit les particularités de ces machines en précisant les conditions de fabrication pour le Polyamide 12. La figure 7 présente la machine P700 de EOS et les températures de mise en œuvre d'un PA12. Ainsi, le PA12 fusionnant à 185°C, il est préchauffé à 175 °C avant la fusion laser avec une précision de l'ordre du degré, puis refroidit dans le bac de fabrication maintenu à ses bords entre 130 et 150°C.

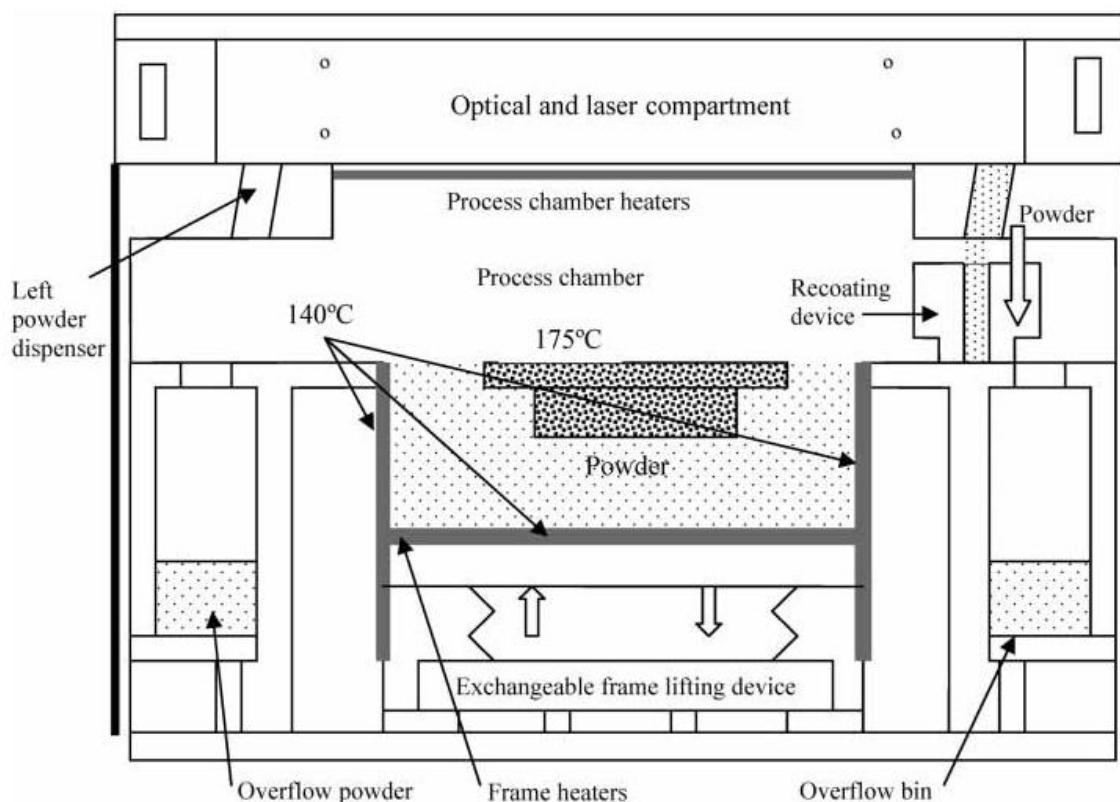


Figure 7 Machine EOSINT P700 - EOS GmbH

1.2 Paramètres influents pour la fabrication

Ce procédé fait intervenir un grand nombre de paramètres matériau (Tableau 1) et procédé (Tableau 2) (Ho et al., 1999 - Wang et al., 2006 - Caulfield et al., 2007 - Beal et al., 2009 - Dupin, 2012, Nelson et al., 1993, Dong et al. 2008).

Viscosité
Tension superficielle
Granulométrie
Conductivité thermique
Capacité calorifique
Absorptivité au rayonnement laser
Masse volumique

Tableau 1 Paramètres matériaux

Puissance laser
Vitesse du laser
Température de préchauffage de la poudre
Température de la zone de fabrication
Distance inter-passe
Rayon du spot laser
Epaisseur de couche de poudre
Vitesse d'étalement de la poudre
Temps entre couches successives

Tableau 2 Paramètres procédé

La majorité de ces paramètres sont liés à la thermique. Nous verrons que la clé du procédé réside dans la bonne maîtrise de cet ensemble de données.

2 Études expérimentales du procédé

2.1 Introduction

Le matériau souvent pris en comparaison avec celui des pièces fusionnées par laser est le matériau dense obtenu par un procédé d'injection. Salmoria et al. (2009) proposent de regarder deux poudres (PA6 et PA12) au microscope avant et après fusion laser dans les mêmes conditions (Figure 8).

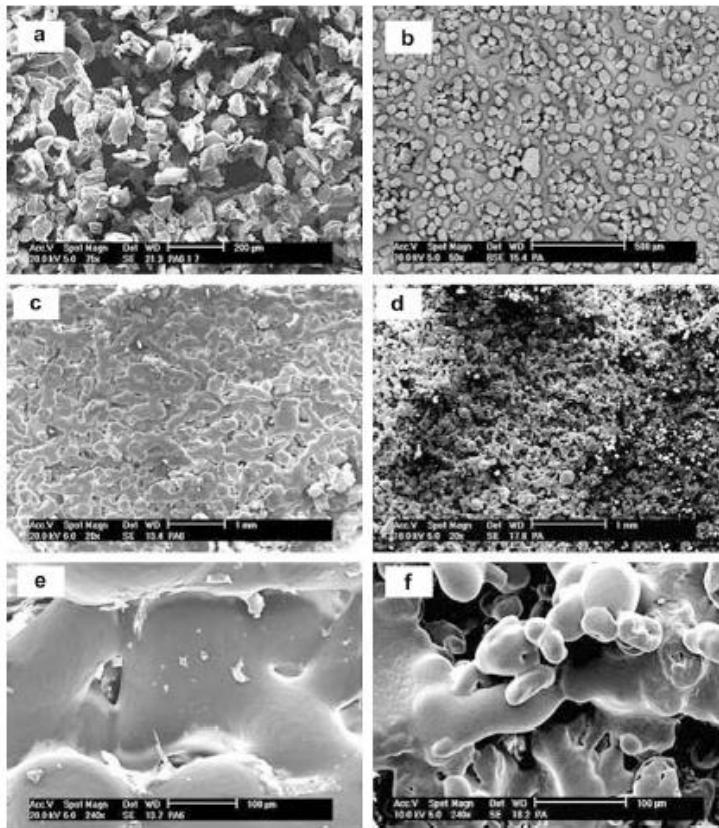


Figure 8 Micrographie de poudre PA6 (a c e) et PA12 (b d f) avec grossissement *20 (abcd) et *240 (ef) avant fusion (ab) et après fusion (cdef), d'après Salmoria et al. (2009)

La densification de chacune des poudres n'est pas totale et des porosités sont visibles. Alors que le PA6 semble avoir plutôt bien fondu, on remarque que le PA12 présente des grains juste attachés entre eux, n'ayant pas eu le temps de coalescer. On voit ici que les performances des pièces obtenues par fabrication directe laser vont être très dépendantes de l'état après fusion de la poudre. De même, l'interdépendance procédé/matériau est mise en évidence.

2.2 Points clés du procédé

De la poudre à la matière densifiée, plusieurs étapes importantes ont lieu. Le choix des matériaux utilisés, le préchauffage nécessaire mais limité de la poudre et son étalement, le préchauffage de la zone de fabrication et la maîtrise de son refroidissement, le choix du laser et son action sur la fusion de la matière sont autant d'étapes à bien maîtriser. Leur description détaillée permet d'appréhender les diverses difficultés de mise en œuvre du procédé. Du fait de la multitude de paramètres intervenant dans ce procédé, la reproductibilité même des propriétés des pièces créées est difficile (Leigh, 2010 - Dupin, 2012).

Un tour d'horizon sur les phénomènes de consolidation de la poudre dans le procédé de fusion laser sélective (Kruth et al., 2007 - Kruth et al., 2008 – Goodridge et al., 2012) permet de mettre en évidence les différents points abordés dans ce paragraphe.

2.2.1 Les poudres et leurs températures caractéristiques pour le procédé

2.2.1.a Préchauffage dans les bacs d'alimentation

Lors d'un cycle de fabrication, de la poudre servant à créer la nouvelle tranche de pièce est apportée dans la zone de fabrication. A chaque nouvelle couche de poudre étalée, la matière fondue précédemment dans la zone de fabrication voit son cycle thermique influencé. Un refroidissement est induit par l'arrivée de la nouvelle couche, plus froide que la matière fondue (Dupin, 2012). Il est nécessaire de ne pas faire passer la matière fondue en-dessous de sa température de cristallisation afin de la maintenir à l'état liquide le plus longtemps possible. C'est pourquoi la poudre des bacs d'alimentation est préchauffée. Cependant, ce préchauffage est limité, d'une part par la température de fusion du matériau utilisé afin de ne pas induire de changement d'état, d'autre part par l'influence de la température sur la coulabilité de la poudre (Ganesan et al., 2008). Dans le cas du polyamide 12 (Pham et al., 2008), un préchauffage de l'ordre de 170-175°C (10 à 15°C en-dessous de la température de fusion du matériau) est préconisé. Le bac d'alimentation est lui maintenu à des températures de l'ordre de 80°C.

2.2.1.b Étalement - Coulabilité des poudres

Les grains des poudres utilisées ont des diamètres moyens de 20-25 µm (Tan et al., 2003) à 250 µm (Salmoria et al., 2007). Les fabricants de poudres proposent en moyenne des poudres autour de 60-80 µm, diamètres utilisés en général dans les études sur le procédé (Wang et al., 2006 - Kim et al., 2006a - Kim et al., 2006b). Des tailles de grains de 75 à 100 µm (Shi, 2004) donnent de bons résultats en termes de densité et précision. La poudre préchauffée est étalée à l'aide d'un rouleau ou d'un racleur sur des épaisseurs de l'ordre de 100 à 250 µm (Kruth et al., 2004 - Wang et al., 2006 - Kim et al., 2006a - Kim et al., 2006b - Schmidt et al., 2007 - Bae et al., 2008).

L'étalement des poudres, c'est-à-dire leur coulabilité, est influencé par un grand nombre de paramètres (Ganesan et al., 2008).

Diverses études (Schulze, 2007 - Krantz et al., 2009 - Amado et al., 2011) proposent des méthodes de mesure pour déterminer la coulabilité des poudres, statiquement (angle de tas) et dynamiquement (cylindre rotatif).

Dans le cadre du procédé, l'humidité, la température et la taille des grains seront des facteurs influents. Les travaux réalisés dans la seconde thèse du projet FADIPLAST (Dumoulin et al., 2012) montrent que l'étalement des poudres est très influencé par la température en définissant la température maximale de bon étalement pour les sept matériaux étudiés.

Seville (1997) et Israelachvili (1992) montrent que les forces de Van der Waals sont négligeables devant les forces gravitationnelles tant que les grains sont assez grands. Lorsque le diamètre de ceux-ci devient inférieur à 50-100 µm (Condotta, 2005a et 2005b), ce n'est plus le cas, et la coulabilité est diminuée. Une distribution de taille étroite autour de 60µm pour un PA12 avec peu de grains en-dessous de 10µm donne une bonne coulabilité (Keller, 1998). Cependant, plus les grains sont gros,

plus la densité initiale du lit de poudre est faible, induisant des densités de pièces plus faibles. Enfin, une densité plus importante du lit de poudre induit une plus faible distance de pénétration du laser (Dupin, 2012), ce qui doit être pris en compte dans le choix des épaisseurs de couches.

Enfin, l'état de surface des grains de poudre a aussi une forte influence sur la coulabilité (Oshima et al., 1995). Ainsi, plus la circularité des grains est bonne, meilleure est la coulabilité.

2.2.1.c Chauffage de la zone de fabrication

Suite à l'étalement d'une couche de poudre à une température permettant une bonne coulabilité (80°C pour le PA12), la poudre apportée se réchauffe au contact de la matière fusionnée au cycle précédent ayant commencé à se refroidir vers 150°C pour le PA12 (Rietzel, 2011b - Dupin, 2012), puis doit être réchauffée à une température proche de sa température de fusion ($T_f = 184^\circ\text{C}$ pour le PA12) afin de garantir des conditions optimales pour son maintien à l'état liquide après fusion laser. Des chauffages radiants infrarouges sont actionnés pendant quelques secondes avant le passage laser afin de porter la poudre à une température d'environ 10°C en-dessous de sa température de fusion. Le préchauffage dans le cas de matériaux PEEK est de l'ordre de 340°C (Schmidt et al., 2007). Les températures de préchauffage doivent être maintenues très précisément : une variation de 4°C induit un abaissement de densité de la matière après fusion de 4 % pour un polyamide 12 (Alva & Childs, 2001). Les radiants sont donc contrôlés avec des correcteurs PID (Kim et al, 2005). La société 3D system propose, pour un PA12, d'élever la température jusqu'au point de début de fusion de la matière puis de la diminuer de 12°C.

La mise en œuvre des matériaux PEEK semble plus contraignante d'un point de vue thermique selon (Tan et al., 2003) qui ont mis en œuvre un PEEK du marché, le Vitrex 150XF qui possède une température de fusion de 342°C.

2.2.2 Le laser

2.2.2.a Choix de la source laser

Les rayonnements laser les mieux absorbés par les polymères sont les lasers CO₂ avec une longueur d'onde de 10.6 μm (Jacobs, 1992 - Tolochko et al, 2000 - Kruth et al., 2003). Chaque matériau a une absorptivité différente pour cette longueur d'onde. Le choix d'un laser doit être fait en tenant compte de cette absorptivité, de sa densité d'énergie, et de son mode continu ou pulsé. Il est possible d'utiliser des lasers Nd:Yag de longueur d'onde plus faible (1,064 μm). Dans ce cas, l'ajout de noir de carbone sensible à cette longueur d'onde permet une meilleure absorption de l'énergie laser (Wagner et al., 2004 - Woicke et al, 2005). On trouve aussi des lasers diode de longueurs d'onde autour de 800-940 nm, mais plutôt pour des applications de soudage de polymères (Ilie et al., 2007 - Speka et al., 2008). Généralement, le faisceau sortant de la source laser traverse un agrandisseur, puis une tête galvanométrique l'orientant à l'aide de miroirs mobiles sur la surface à fusionner en passant dans une lentille f-téta. Les lasers CO₂ utilisés fonctionnent généralement en mode de PWM (Pulse Width

Modulation), autrement dit, en adaptant le rapport cyclique (durée d'impulsion τ / période T), afin de réguler la puissance moyenne de sortie à puissance crête constante. Ainsi, une consigne de 10 W pour un laser de 50 W est obtenue pour des rapports cycliques de 20 %.

2.2.2.b Interaction laser matière

L'interaction laser matière est dépendante de la longueur d'onde de la radiation laser, de la composition chimique du matériau et de sa température (Keller et al., 1998). Sur les métaux massifs, l'absorption se fait sur des profondeurs très réduites (< 50 nm) par interaction électrons libres-photons, et peut donc être modélisée comme surfacique.

Cette interaction a été identifiée et représentée par une loi exponentielle décroissante (Jacobs, 1992) en profondeur de type Beer-Lambert, que ce soit pour des radiations UV ou IR, dans divers travaux permettant de déterminer une concordance entre le modèle et les études expérimentales (Keller et al., 1998 – Riedel & Castex, 1999 - Ilie et al., 2007a - Ilie et al., 2007b - Coelho et al., 2004).

Pour des profondeurs de pénétration très petites (faible porosité du lit de poudre), ce modèle peut être ramené à un modèle surfacique de flux de chaleur. C'est le cas par exemple lors de l'utilisation d'un laser Nd:YAG sur un matériau Titane qui pénètre à 6 nm de profondeur (Kolossov et al., 2004).

Dong et al. (2007 & 2008) utilisent une répartition gaussienne en surface afin de modéliser l'action laser (1). Ils se basent sur les travaux de Nelson et al. (1993) afin de représenter la dispersion gaussienne du flux en fonction de l'écart à l'axe du laser.

$$I(r) = (1 - R_e) I_0 e^{-\frac{2r^2}{w^2}} \quad (1)$$

où I est la densité de flux (W.m^{-2}), R_e la réflectivité de la surface, w (2) le rayon caractéristique (m), I_0 (3) l'intensité maximale du rayon laser (W.m^{-2}) et r la distance à l'axe du rayon laser,

$$w = \frac{R}{2.146} \quad (2)$$

où R est le rayon du spot laser,

$$I_0 = \frac{2P}{\pi w^2} \quad (3)$$

où P est la puissance laser.

A titre indicatif, la littérature propose des valeurs moyennes pour la réflectivité de l'ordre de 4 % pour de la poudre de polycarbonate (Sun et Beaman, 1991) et 5 % pour du PA12 (Jacobs, 1992). La réflectivité dépend de la longueur d'onde.

2.2.2.c Fusion de la matière

Le faisceau laser apporte l'énergie nécessaire au changement de phase de la matière sur une profondeur de quelques centaines de micromètres. Cette fusion est très rapide, de l'ordre de quelques millisecondes. La quantification de l'élévation de température provoquée par une fusion laser CO₂ sur des polymères est peu connue.

Dong et al. (2007) proposent un modèle éléments finis d'un domaine représentant de la poudre chauffé par un dépôt surfacique gaussien représentant le laser. Les auteurs estiment ainsi que la température passe de 398 K avant passage laser à 1321 K après, pour une puissance de 8 W et une vitesse de scanning de 0,33 m/s. Un tel échauffement peut entraîner une dégradation des matières plastiques. L'interaction laser-matière devant être modélisée en volume, cette élévation sera plus faible. L'année suivante (Dong et al., 2008) proposent de nouveaux résultats. Ainsi, l'échauffement obtenu pour une vitesse laser de 1.26 m/s et une puissance de 3.85 W est d'environ 340°C. Là aussi, le modèle choisi est un flux de chaleur surfacique. Des valeurs d'échauffements plus faibles sont donc attendues avec des lois d'absorption en profondeur.

Les travaux de Ilie et al. (2007) - Speka et al. (2008) - Ilie et al. (2009) sur le soudage par laser diode PMMA (transparent)/ABS-PC (absorbant) donnent un ordre de grandeur des échauffements à la surface du matériau absorbant. Pour P=5 W, V=2 mm/s, l'échauffement est de l'ordre de 240°C (Ilie et al., 2007), et pour P=10 W et V=16 mm/s, un échauffement de 90°C est observé (Ilie et al., 2009).

Enfin, les travaux de Franco et al. (2010) sur l'étude de la fusion sélective par laser CO₂ du Polyamide, indiquent des élévations de température de 15 à 180°C pour des vitesses de 0,25 à 2,5 m/s et des puissances laser de 12,5 à 50 W. Cette étude, complétée dans (Franco & Romoli, 2012) analyse les épaisseurs de poudre fondu par laser, et relie ces épaisseurs à la densité d'énergie laser apportée. En moyenne, des épaisseurs de 400-500 µm sont fusionnées.

La fusion des couches doit être parfaitement maîtrisée. Une trop faible énergie ne permettra pas de souder les différentes couches entre elles, une trop forte énergie induira une fusion de la poudre des couches précédentes pouvant augmenter les dimensions de la pièce en cours de fabrication, on parle de « Bonus Z ».

2.2.3 Comportement de la matière

2.2.3.a Coalescence des grains et densification de la poudre

A l'état liquide, les grains de poudre coalescent entre eux (Frenkel, 1945 – Eshelby, 1949), de façon à minimiser la courbure de l'interface de l'ensemble des grains. La coalescence de tous les grains du lit de poudre tend à densifier la matière et l'air présent entre les grains s'échappe à travers des chemins encore ouverts jusqu'à la surface du lit de poudre.

Dupin (2012) montre que la coalescence des grains de polymère est très rapide (quelques secondes) par rapport aux temps de maintien à l'état liquide du polymère (quelques dizaines de secondes) dans le procédé SLM.

2.2.3.b Densité des pièces - Diffusion des gaz

La littérature montre que les paramètres de première importance sur la densité finale des pièces sont la densité initiale du lit de poudre (Yan et al., 2011 - Rietzel, 2011 a & b), sa température de préchauffage (Tontowi & Childs, 2001), les différents paramètres énergétiques de mise en œuvre

couplés, la dégradation immédiate de la matière sous trop fort apport énergétique (Ho et al., 2003) et les paramètres matériaux. Tous ces paramètres ont une influence, d'une part sur la coalescence des grains de poudre, d'autre part sur la diffusion des gaz emprisonnés dans la matière.

En effet, en cours de densification de la matière, des cavités d'air occluses se forment (Narkis, 1979), créant des porosités fermées dans le matériau. Il se produit alors un processus de diffusion de l'air à travers le polymère (Spence & Crawford, 1996 - Kontopoulou & Vlachopoulos, 2001). Gogos (2004) détermine numériquement la durée de vie d'une bulle d'azote dans un polyéthylène à 189°C et ses résultats sont en accord avec les études antérieures (Spence, 1994 - Kontopoulou & Vlachopoulos, 1999). La différence entre la concentration en gaz à l'interface air/polymère définie par la loi d'Henry et la concentration loin de la bulle joue un rôle très important. Dans le cas d'un polymère non saturé en gaz, les temps de disparition de bulles de 10 à 265 µm de rayon vont de quelques millisecondes à une cinquantaine de secondes. La tension de surface a une faible influence. Cependant, dans le cas d'un polymère saturé, les temps deviennent plus importants, de 10 à 90 minutes pour les mêmes bulles, c'est alors la valeur de la tension de surface qui gouverne la cinétique de disparition des bulles (pression dans les bulles).

L'étude récente de Dupin (2012) sur le procédé de frittage laser permet de montrer que les phénomènes de coalescence sont rapides et que la porosité résiduelle des pièces ne peut pas être imputée à ce seul phénomène. Ainsi, l'évolution de la taille des porosités fermées dans la matière ne peut être expliquée que par la diffusion des gaz dans le polymère fondu. Pour obtenir une densification correcte, il est donc nécessaire de laisser le temps aux gaz de diffuser.

2.2.3.c Soudage des grains

Lorsque deux entités du même polymère sont mises en contact à l'état liquide, un soudage a lieu. Ce soudage correspond, à l'échelle microscopique, à l'interdiffusion des chaînes moléculaires entre les deux entités (De Gennes, 1971 - Yang, 2002). Ce phénomène est lent et dépend directement de la mobilité des chaînes, c'est-à-dire de la température du polymère. La quantification de la qualité du soudage (4) a été proposée pour un matériau PEEK (Nicodeau, 2005).

$$S = \int_{T_f}^{T_c} \frac{1}{t_r(T)} dt \quad (4)$$

où S est un critère devant être supérieur à 1 pour avoir la cicatrisation complète de la soudure et t_r le temps de relaxation terminal du polymère.

Avec des bornes dans l'ordre $[T_f ; T_c]$, cette intégrale est réalisée entre le moment où la matière passe au-dessus de sa température de fusion (devient liquide) et redescend en-dessous de sa température de cristallisation.

Dupin (2012) montre que les temps de diffusion des chaines pour un PA12 sont petits devant les temps de maintien à l'état liquide du polymère, et conclut que le soudage des grains fondus est obtenu très rapidement, avant la solidification des couches.

2.2.3.d Refroidissement et solidification de la matière

La matière fondu par laser subit différents refroidissements successifs : (1) juste après le passage du laser un premier refroidissement très rapide de la matière en fusion vers la température de la zone de fabrication, (2) un second refroidissement lors de l'étalement de la couche suivante, (3) un dernier refroidissement en profondeur dans le bac de fabrication.

Si la matière fusionnée par laser retrouve très rapidement une température proche de celle du lit de poudre environnant, il est nécessaire que cette température reste supérieure à la température de cristallisation afin de limiter les retraits à la solidification. Selon les conditions thermiques avoisinantes, les temps de cristallisation peuvent aller de quelques secondes à plusieurs heures à ces températures. L'objectif est de cristalliser le plus lentement possible, d'abord pour laisser le temps à l'air de diffuser (Dupin, 2012), ensuite afin de limiter les distorsions des pièces en profondeur (Wang et al., 2006) et enfin pour obtenir un taux de cristallinité élevé induisant une bonne rigidité de la matière (Zarringhalam, 2007).

On comprend donc ici l'intérêt d'utiliser des matériaux présentant une différence entre température de fusion et de cristallisation la plus grande possible, 30°C dans le cas du PA12 (Figure 9). Cette plage de température correspond à la fenêtre de préchauffage et de maintien en température la plus propice au procédé (Wendel, 2008).

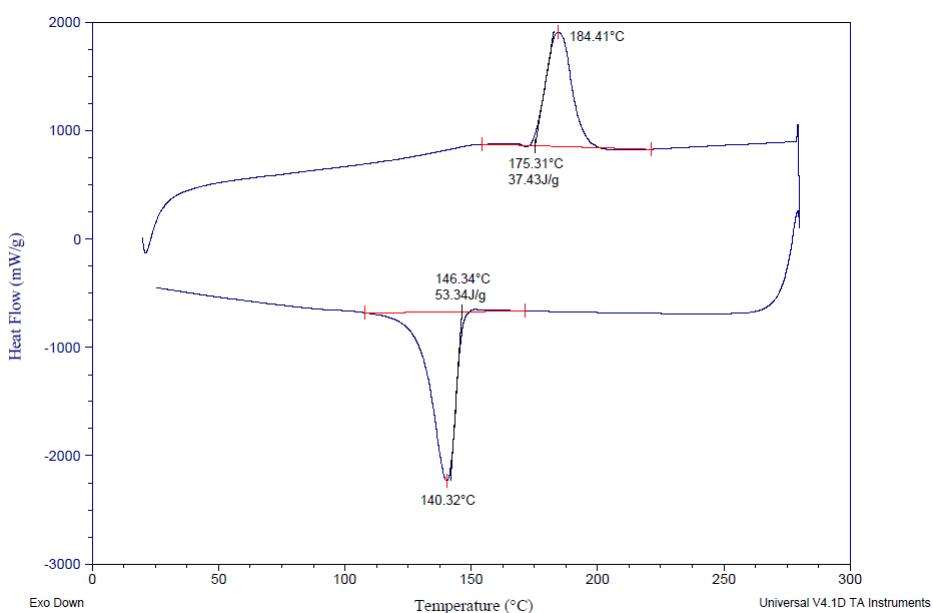


Figure 9 DSC du Polyamide 12 utilisé couramment en fabrication directe

2.2.3.e Dégradation de la matière

Portées à température importante pendant de longues heures dans des environnements gazeux divers, les poudres plastiques se dégradent (réticulation ou coupures de chaînes). Lors de la fabrication d'une pièce, environ 90 % de la poudre du bac de fabrication ayant subi un cycle thermique de fabrication n'est pas fondu. Pham et al. (2008) puis Dotchev et Yusoff (2009) étudient la dégradation de poudre de PA12 subissant plusieurs cycles de fabrication. Ils mettent en évidence une dégradation par pontage des chaînes, et la masse moléculaire du PA12 est multipliée par 12 après 3 recyclages. La viscosité se trouve alors augmentée et un effet « peau d'orange » est observé à la surface des pièces lors de l'utilisation de poudres recyclées.

Une stratégie de recyclage est alors possible. Ainsi, l'utilisation d'une poudre recyclée une fois mélangée à 35 % de poudre neuve permet de multiplier par 1.6 le poids moléculaire moyen de la poudre au lieu de 2 pour une poudre entièrement recyclée, ce qui augmente les performances des pièces créées. En fabrication directe par fusion laser, on parle de taux de rafraîchissement. La mise en place de cette technique nécessite un suivi des mélanges. Au-delà de 7 à 8 cycles, Gornet (2002a & 2002b) montre que la mise en œuvre n'est plus satisfaisante.

Dupin (2012) montre que le PA12 subit une réaction de post-condensation qui augmente sa masse molaire, ce qui impacte la cristallisation des futures pièces. La température de fabrication est directement liée à ces mécanismes de dégradation puisque l'auteur observe une augmentation de la température et de l'enthalpie de fusion de la poudre mise en forme. Enfin, une dégradation de la matière peut être observée lors d'un maintien à haute température. Une diminution de la viscosité a en effet été observée après 4 réutilisations de la même poudre.

2.3 Mise en œuvre du procédé

2.3.1 Influence du matériau

Yan et al. (2011) comparent la mise en œuvre de matériaux semi-cristallin (PA12) et amorphe (PS) dans le procédé de fusion laser sélective. La température de préchauffage d'un amorphe doit être proche de sa température de transition vitreuse, tandis qu'un semi-cristallin doit être préchauffé proche de sa température de fusion. Les pièces élaborées avec des matériaux amorphes possèdent des contraintes internes plus faibles et des distorsions diminuées par rapport aux semi-cristallins.

Une grande différence de densité est observée entre les pièces créées avec ces deux matériaux, qui peut être expliquée par la différence de viscosité entre le PA12 et le PS (on cherche à créer des matériaux amorphes à grande masse molaire pour contrer leur plus faible résistance mécanique).

Ainsi, la viscosité élevée, donc la faible densité des pièces de PS obtenues conduit à une résistance mécanique bien plus faible que pour le PA12. On peut alors envisager de combler ces porosités, par exemple par des époxys, afin d'améliorer leurs performances mécaniques. Sur les matériaux semi-cristallins, l'augmentation de résistance est possible via l'ajout de nano-composés dans la poudre.

2.3.2 Importance des paramètres procédé

La qualité des pièces est très dépendante du cycle thermique imposé lors de la fabrication. L'importance des divers paramètres du procédé a été étudiée et hiérarchisée, expérimentalement (Ho et al., 1999 - Wang et al., 2006 - Caulfield et al., 2007 - Beal et al., 2009 - Dupin, 2012), analytiquement (Nelson et al., 1993) ou bien numériquement (Dong et al. 2008). Nous pouvons ainsi classer les paramètres d'influence primaire par ordre d'importance (Tableau 3).

Paramètre	Influence sur la densité
Puissance laser	Augmentation avec la puissance
Température de préchauffage	Augmentation avec la température
Vitesse laser	Diminution avec la vitesse
Epaisseur de couche	Diminution avec l'épaisseur

Tableau 3 Influence des paramètres procédé sur la densité de la matière

La puissance laser est le paramètre ayant le rôle principal dans le procédé, en particulier sur la densité et la contrainte de déformation à 10 %. La densité des pièces augmente avec la puissance laser, mais diminue après un seuil au-delà duquel il y a dégradation. Une puissance laser trop importante localement peut conduire la poudre à s'accumuler et fondre au centre du spot laser, provoquant l'apparition de zones vides entre les passes du laser.

Le préchauffage de la poudre est aussi limité à quelques degrés en-dessous de la température de fusion (matériau thermoplastique) ou de transition vitreuse (matériau amorphe) afin de ne pas solidifier l'intégralité du bac.

La vitesse de scanning influence particulièrement la résistance mécanique des pièces, mais est elle aussi limitée. Au-delà d'une certaine vitesse, un effet « balling » apparaît (sphéroïdisation des zones fondues sous l'effet des tensions superficielles), le bain de fusion se séparant en divers bains, laissant des zones non fondues. Cette vitesse est par ailleurs limitée par la fréquence des impulsions du laser (au-delà d'une certaine vitesse, il n'y a plus recouvrement entre les spots laser, et la surface fondu est hétérogène).

Tous ces paramètres doivent être combinés afin d'obtenir la meilleure qualité possible, cela pour chaque matériau. Pour un même matériau, les paramètres induisant la meilleure densité ne sont pas les mêmes que ceux induisant le module de flexion maximum.

2.3.3 Fenêtre énergétique

Un critère énergétique souvent utilisé en fusion laser sélective de polymères est le paramètre E_a (5) :

$$E_a = \frac{P}{v \cdot h} \quad (5)$$

où E_a (J/m^2) est la densité surfacique d'énergie apportée par le laser, P (W) est la puissance laser, v la vitesse laser (m/s) et h (m) la distance entre deux balayages

Schmidt et al. (2007) ont mis en évidence une fenêtre énergétique étroite en caractérisant l'état d'un PEEK après fusion laser. Tout d'abord, la température de préchauffage doit être maintenue dans un intervalle de 12°C, proche de la température de fusion du PEEK (350°C), et l'énergie de surface est rapidement limitée. Une dépendance forte de la densité résiduelle vis-à-vis de l'énergie de surface est montrée. De plus, une mauvaise adhésion entre couche et une porosité importante sont observées en cas d'énergie E_a trop faible, et des distorsions sont visibles en cas d'apport énergétique trop important. Cependant, la densité de la pièce finale dépend aussi de la densité initiale de la poudre (Yan et al., 2011).

La fenêtre énergétique doit également être adaptée à l'épaisseur et la morphologie de la poudre. Etaler des couches épaisses de poudre nécessite un apport énergétique plus important afin de souder les couches entre elles, mais ne doit pas entraîner de dégradation du matériau en surface. Diminuer l'épaisseur de couche permet de refondre la couche inférieure, de mieux fondre la poudre ajoutée et de diminuer l'énergie apportée, mais nécessite des grains de poudre plus fins et augmente les temps de fabrication.

2.3.4 Vers une fabrication optimale

Cette étude nous permet de comprendre que la clé de la réussite du procédé réside dans la parfaite maîtrise de la thermique du lit de poudre. Maintenir la poudre très proche de sa température de fusion et loin de sa température de cristallisation permet de ralentir la cristallisation et de diminuer sa viscosité. Les bénéfices sont multiples : amélioration de la densification et du soudage des grains, augmentation de la diffusion des gaz dans la matière, agrandissement des cristaux et diminution des distorsions.

2.4 Analyse des pièces créées par fusion laser sélective

2.4.1 Propriétés mécaniques

Narkis (1979) montre que les propriétés des pièces dépendent de l'état de densification de la matière. Dans les premiers instants, les grains de poudre créent des contacts entre eux et ceux-ci grandissent rapidement. En parallèle, l'air entre les grains circule et s'évacue à la surface du lit de poudre. A partir d'un certain temps, des cavités fermées se créent, et l'évolution de la densification présente une cinétique plus faible. L'analyse du module de flexion en fonction de l'état de la matière montre trois types de comportements (Figure 10) : (1) le module augmente rapidement avec l'agrandissement rapide des zones en contact et de leurs surfaces, (2) le module chute pendant la création des porosités fermées, (3) le module ré augmente plus lentement.

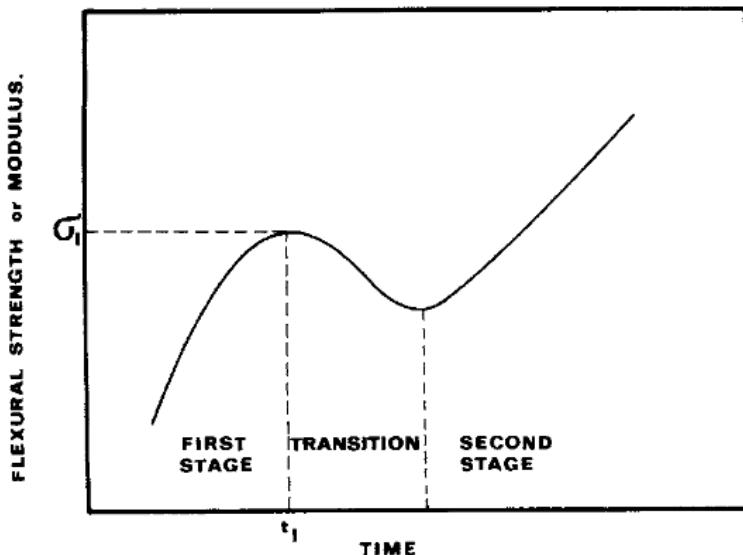


Figure 10 Courbe schématique de la résistance en flexion des pièces en fonction du temps, donc de l'état de densification, mettant en évidence plusieurs phénomènes (Narkis, 1979)

La résistance en flexion de pièces en PEEK fusionnées par laser est très dépendante de leur densité (Schmidt et al., 2007). Ainsi, des diminutions de l'ordre de 60 % sont obtenues pour une densité relative de 0.9, et de 90 % pour une densité relative de 0.8. Les travaux d'Ajoku et al. (2006a) déterminent l'effet de la porosité d'un Nylon sur son comportement en compression. Le module de la pièce obtenue par fusion laser est 10 % plus faible que celui d'une pièce injectée, en raison de la présence de pores répartis de façon hétérogène. Un travail de simulation vient confirmer l'influence de cette répartition hétérogène sur les caractéristiques mécaniques des pièces.

La tenue des pièces fabriquées ne dépend pas uniquement de leur porosité, mais de l'organisation de celle-ci au sein du matériau. L'orientation des pièces fabriquées par rapport aux 3 axes de fabrication X, Y et Z (Figure 11) influence fortement leur résistance mécanique (Gibson & Shi, 1997 - Ajoku et al., 2006b - Caulfield et al., 2007). La direction de scan Y est la direction dans laquelle la meilleure résistance est obtenue (sauf en cas de « balling »). La résistance dans la direction orthogonale au balayage X est soumise à la condition de soudage des différentes passes entre elles (notion de distance inter-passe). Enfin, la résistance dans la direction hors plan Z (empilement des couches) dépend de la bonne cohésion des couches entre elles, donc de leur épaisseur. Cette dernière est très dépendante de l'énergie apportée au matériau et à la distance inter passe (Ho et al., 1999).

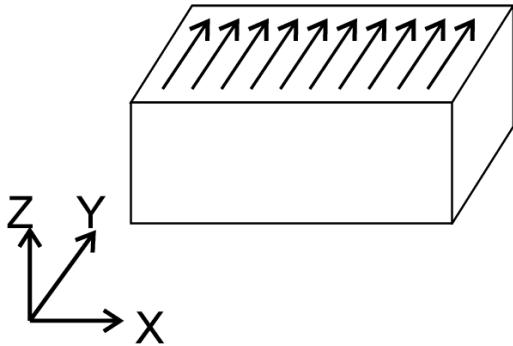


Figure 11 Directions de fabrication (Mercelis & Kruth, 2006)

Enfin, les propriétés mécaniques des pièces dépendent également des caractéristiques microscopiques de la matière obtenue après fusion laser. Ainsi, l'augmentation du taux de cristallinité de la matière élaborée améliore fortement ses propriétés mécaniques (Zarringhalam, 2007 - Majewski et al., 2008 - Dupin, 2012).

2.4.2 Défauts de forme

La fabrication directe thermoplastique met en œuvre des matériaux très sensibles aux gradients thermiques en raison de cristallisations non homogènes. La maîtrise parfaite de la thermique dans le bac de fabrication est délicate, les pièces présentent des défauts de forme de type gauchissement et distorsions (Wang et al., 2006). Ces défauts, lorsqu'ils apparaissent dans le bac, peuvent induire l'arrêt de la fabrication car le gauchissement peut entraîner une remontée de la matière qui peut entrer en collision avec le système d'étalement. Pour limiter les déformations, il est nécessaire de maintenir la température aussi proche que possible de la température de fusion du polymère et de maîtriser son homogénéité afin de maintenir une vitesse de cristallisation faible et homogène.

Wang et al. (2006) ont noté une différence de taille des pièces pour différentes puissances laser, qu'ils expliquent par la fusion plus importante de la poudre au bord du domaine dans le cas de puissances plus élevées. La conduction thermique peut alors amener des grains proches de la matière fondue à fondre partiellement et augmenter les tailles locales des pièces (McAlea, 1998 - Caulfield et al., 2007).

2.4.3 Etats de surface

On caractérise l'état de surface des pièces obtenues de deux manières. Tout d'abord, la fusion de la poudre entraîne localement une densification plus ou moins bonne et la rugosité induite peut être importante. Par ailleurs, la fusion par rayonnement laser génère un effet spécifique sur les bords de la pièce (Wang et al., 2006), de l'ordre de grandeur des épaisseurs de couches. En arrivant sur les bords, soit le laser s'arrête, soit il repart dans une autre direction. Du fait de la répartition gaussienne de son rayonnement, il n'apportera pas assez d'énergie sur sa périphérie pour fusionner la même épaisseur que sur les zones où il effectue une passe entière. Enfin, l'épaisseur de couche étant donnée, la création d'une géométrie dont le bord n'est pas vertical va induire un effet d'escalier par succession de couches. Bien souvent, la direction de fabrication est dévoilée par l'étude de cet effet en surface.

2.5 Le procédé aujourd’hui

2.5.1 Nouveaux développements du procédé

Différents travaux récents proposent de nouvelles idées afin d’optimiser la fabrication directe par fusion laser. L’utilisation de deux lasers en parallèle (Kim et al., 2005) permet de réduire les temps de fabrication des couches et de diminuer les vitesses de refroidissement du polymère en fusion. Il est alors possible d’augmenter la dimension des pièces, avec des zones de fabrication de l’ordre de 50 x 80 x 50 cm³. L’utilisation de deux lasers nécessite cependant de maîtriser les jonctions entre les parties de pièce créées par les deux sources. Les deux lasers ne doivent pas se croiser sur la poudre afin de ne pas la surchauffer. La trajectoire des lasers peut aussi être optimisée (Kim et al., 2006b) afin de gagner du temps. De nouvelles techniques adaptent le diamètre du faisceau laser et la distance inter-passe en fonction de la zone à fondre (Bae et al, 2008).

2.5.2 Développement de nouveaux matériaux

Le développement de nouveaux matériaux permet d’envisager l’augmentation des propriétés mécaniques des pièces et de leurs caractéristiques géométriques. Pour cela, des études s’orientent sur le développement de nouveaux matériaux contenant des nano-renforts (Wahab et al., 2009 - Yan et al., 2009), sur des mélanges de polymères (Salmoria et al., 2007), sur l’ajout de noir de carbone pour une meilleure absorption de la chaleur (Acherjee et al., 2012), et sur le développement de nouvelles formulations chimiques induisant des caractéristiques meilleures (Vasquez et al., 2012, Drummer et al., 2010).

2.5.3 Les machines actuelles et leurs possibilités

D’après les différentes études et selon les constructeurs, nous pouvons dégager des ordres de grandeur des paramètres du procédé (Tableau 4) utilisés dans les machines industrielles actuelles.

Dimension maximale des pièces	1500 x 1500 x 500 mm (Hofmann Innovation AG 2009)
Puissance laser	5 à 30 W
Vitesse laser	0.5 à 10 m/s
Diamètre du spot laser	200 à 300 µm
Température de préchauffage avant fusion	Température de fusion – 10°C
Distance inter-passe	200 µm
Taille des grains	20 à 250 µm
Epaisseur de couches	100 à 250 µm
Vitesse d’étalement	0.5 à 2 m/s
Temps entre couches	20 s
Temps de fabrication moyen	20 h

Tableau 4 Paramètres moyens dans le procédé de fusion laser sélective

3 Étude analytique et numérique des mécanismes de coalescence et densification

Le procédé de fusion laser sélective fait intervenir deux phénomènes physiques liés : (1) la coalescence de grains qui conduit à (2) la densification des poudres par évacuation de l'air. Pour les polymères, ces phénomènes ont aussi été étudiés dans le cadre du rotomoulage.

3.1 Compréhension des mécanismes de coalescence

Les premiers travaux abordant la coalescence de grains sont proposés par Frenkel en 1945 rapidement corrigés par Eshelby (1949), et par Mackenzie & Shuttleworth (1949). Ils s'intéressent à un écoulement visqueux de la matière pour étudier les mouvements de fluide sous l'action de la tension de surface. Depuis, différents modèles ont été présentés afin de représenter l'évolution de la coalescence de grains. Ces dernières années, le développement des moyens de calcul et l'arrivée de nouvelles méthodes numériques ont permis d'envisager la simulation des premiers instants de la coalescence, voire du processus complet.

3.1.1 La coalescence de grains de polymère

La figure 12 présente l'évolution au cours du temps de deux grains de poudre de polypropylène à 190°C (Bellehumeur et al., 1997).

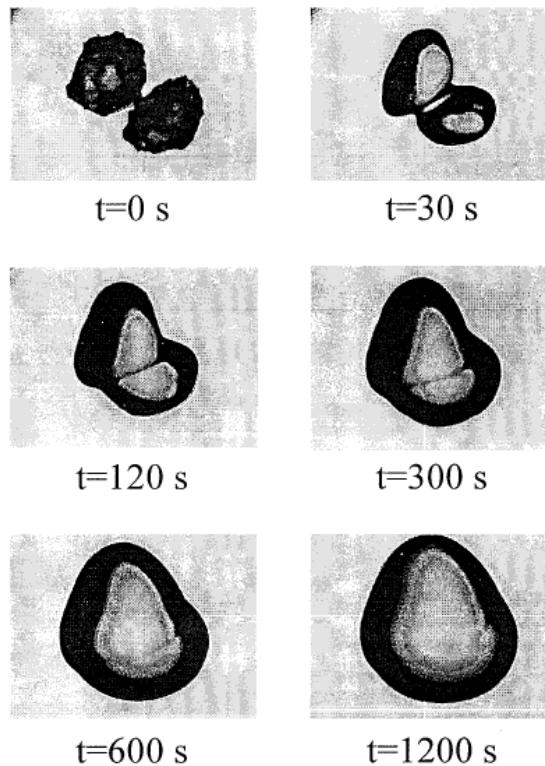


Figure 12 Processus de fusion laser de poudre de PP-MT4390HU à 190°C

La coalescence est un phénomène dont la cinétique relativement lente met en jeu divers paramètres.

3.1.2 Modèle de Frenkel-Eshelby

Frenkel (1945) et Eshelby (1949) mettent en place un modèle simple, dans lequel ils étudient la coalescence isotherme de deux sphères identiques à ses premiers instants. Ce modèle est intéressant car il permet de comprendre les paramètres influents dans le processus de coalescence, les résultats étant cohérents avec les mesures expérimentales trouvées dans la littérature aujourd’hui.

3.1.2.a Présentation du modèle

Frenkel propose de représenter la coalescence à l'aide de deux paramètres illustrés sur la figure 13, le rayon de la sphère a et le rayon de raccord y .

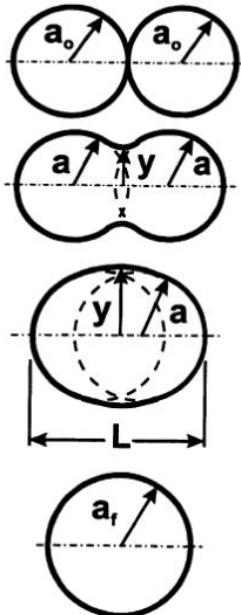


Figure 13 Représentation géométrique de la coalescence (Bellehumeur, 1997)

L'angle de coalescence θ représentatif du rapport $\frac{y}{a}$ est défini à l'aide de la figure 14.

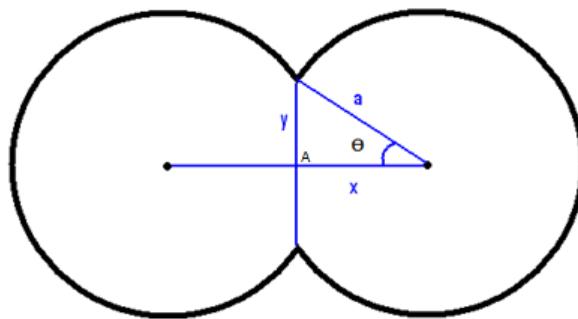


Figure 14 Modélisation de la géométrie lors de la coalescence de deux sphères

Plusieurs hypothèses sont faites afin de permettre l'établissement du modèle. Le système isolé est constitué de deux sphères de fluide visqueux newtonien incompressible (Eshelby, 1949) de mêmes diamètres, sans actions extérieures (contact, gravité, pression). La déformation est supposée constante

en tout point du volume et pour tout temps, décrite à l'aide du tenseur des taux de déformation D (6) dont la forme découle d'une transformation à volume constant et déterminée au centre du domaine.

$$D = \begin{pmatrix} -\frac{d\varepsilon}{dt} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2}\frac{d\varepsilon}{dt} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2}\frac{d\varepsilon}{dt} \end{pmatrix} \quad (6)$$

où ε est la déformation

Du fait des hypothèses précédentes, le volume du système reste constant et est facilement calculé. L'égalité entre le volume à tout instant en fonction de θ avec le volume initial est vérifiée (7) :

$$\frac{2}{3}\pi a^3(1 + \cos\theta)^2(2 - \cos\theta) = \frac{8}{3}\pi a_0^3 \quad (7)$$

avec a_0 le rayon initial des sphères

La relation entre $a(t)$ et $\theta(t)$ est donc donnée par l'équation (8) :

$$\frac{a(t)}{a_0} = \left(\frac{4}{(1 + \cos\theta)^2(2 - \cos\theta)} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (8)$$

Les deux puissances identifiées dans le mécanisme de coalescence sont la puissance développée par la tension de surface P_{ts} et la puissance dissipée par la viscosité P_{visc} . Les effets d'inertie étant négligés, les deux puissances sont égales (9) :

$$P_{ts} = P_{visc} \quad (9)$$

avec :

$$P_{ts} = \int_S -\Gamma \frac{dS}{dt} dS \quad (10)$$

$$P_{visc} = \int_V \tau : D dV = \int_V (2\eta D) : D dV \quad (11)$$

Ces puissances sont exprimées en fonction de la géométrie à l'aide de la relation (8) et des paramètres matériau et permettent d'établir une équation différentielle en θ (12).

$$\frac{d\theta}{dt} = \frac{\Gamma}{\eta a_0} 2^{-\frac{5}{3}} \left[\frac{\cos\theta (1 + \cos\theta)^{\frac{2}{3}} (2 - \cos\theta)^{\frac{1}{3}}}{\sin\theta} \right] \quad (12)$$

où Γ est la tension de surface, η la viscosité du fluide et a_0 le rayon initial des sphères.

Manquant de moyens numériques, l'approche de Frenkel-Eshelby a consisté à étudier la solution de cette équation au départ de la coalescence à l'aide d'un développement limité en 0 :

$$\theta(t) = \left(\frac{t\Gamma}{\eta a_0} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (13)$$

Les auteurs ont simplifié le rapport $\frac{y}{a}$ dont l'expression présente un sinus (14). Cette simplification rend le modèle très dépendant de l'hypothèse des premiers instants de la coalescence.

$$\sin \theta = \frac{y}{a} \sim \theta, \quad \theta \rightarrow 0 \quad (14)$$

En introduisant le temps adimensionné de la coalescence τ (15), l'évolution de la coalescence ne dépend que de ce paramètre (16).

$$\tau = t \frac{\Gamma}{\eta a_0} \quad (15)$$

$$\theta(t) = \tau^{\frac{1}{2}} \quad (16)$$

Il est alors possible d'exprimer le temps de demi-coalescence, lorsque $\frac{y}{a} = 0,5$ (17) :

$$t = 0,25 \frac{\eta a_0}{\Gamma} \quad (17)$$

La coalescence est donc un phénomène dont le temps caractéristique est proportionnel à la viscosité du fluide, au diamètre initial des grains, et inversement proportionnel à la tension de surface. La tension de surface est le moteur de la coalescence, la viscosité contrôle l'écoulement.

Pokluda et al. (1997) résolvent l'équation (12) numériquement et montrent que cette approximation est bonne en zéro, mais s'écarte très vite de la solution numérique (Figure 15).

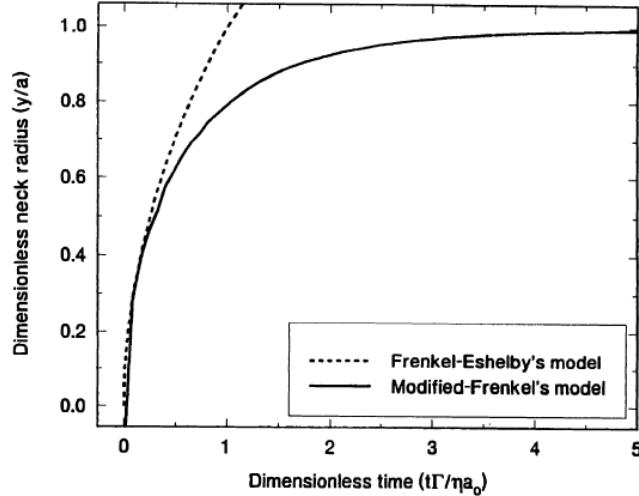


Figure 15 Comparaison du modèle Frenkel-Eshelby avec le modèle modifié par Pokluda et al.

Il est toutefois intéressant de comparer la résolution numérique de l'équation d'évolution de la coalescence avec la solution de Frenkel-Eshelby (Figure 16) en gardant la fonction sinus (18), plus représentative de la réalité.

$$\frac{y}{a} = \sin \theta(t) = \sin \left(\tau^{\frac{1}{2}} \right) \quad (18)$$

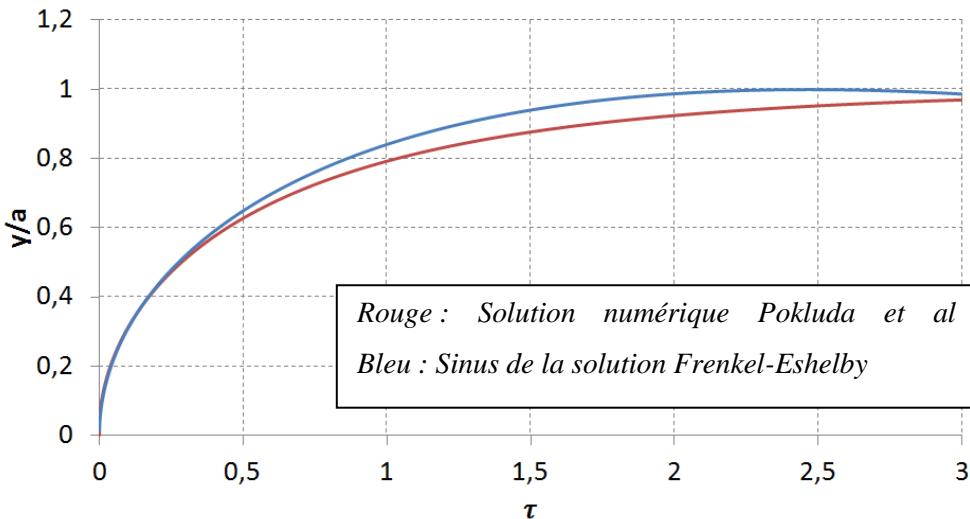


Figure 16 Évolution adimensionnelle de la coalescence

L'approximation faite en zéro en 1949, au sinus près, était très proche de la solution numérique de l'équation différentielle (12). La solution en sinus est toutefois imprécise pour des temps plus importants.

Les travaux de Bellehumeur (1997) permettent de comparer ce modèle avec des expériences réalisées sur divers polymères. Le modèle de Frenkel (Figure 17) semble assez bien représenter la réalité. Des travaux récents (Muller, 2008) montrent expérimentalement que ce modèle s'applique bien au début de la coalescence pour des matériaux de type PDMS et polybutène (fluide).

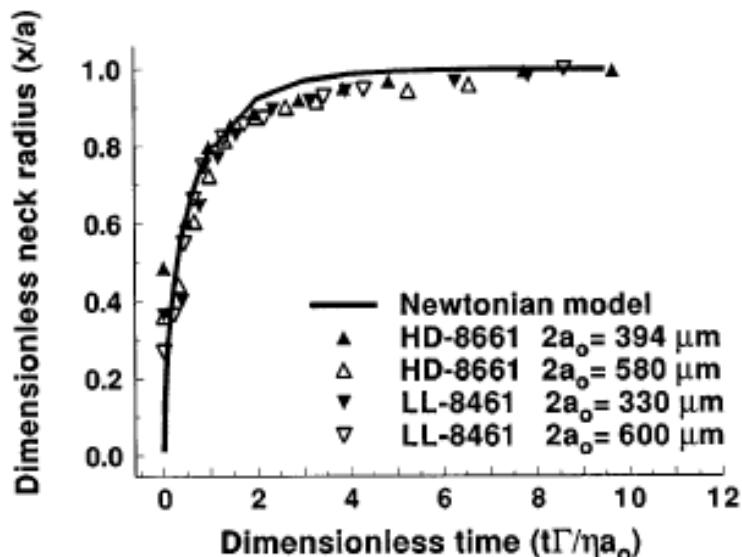


Figure 17 Comparaison du modèle Frenkel-Eshelby résolu par Pokluda et al.
avec différentes résines de polyéthylène

3.1.2.b Discussion du modèle

Ces travaux ne prennent pas en compte l'évolution géométrique réelle du système qui coalesce (Rosenzweig & Narkis, 1981). L'élasticité des matériaux polymères n'est pas considérée (Bellehumeur, 1997). Enfin, la matrice de déformation ne peut être constante en temps et en espace. Cependant, la présentation de ces travaux permet de définir les bases de la coalescence, les termes utiles et les éléments de compréhension des mécanismes à l'origine de ce phénomène.

3.1.3 La coalescence dans la littérature

La cinétique de coalescence de deux sphères a été décrite à l'aide d'un modèle simple permettant de comprendre les mécanismes mis en jeu. Cependant, les hypothèses des travaux présentés sont réductrices et ne permettent pas d'obtenir une bonne description de la réalité. Dans la suite de nos travaux, la simulation de cas simples bidimensionnels de fluides soumis à la tension de surface (coalescence, évolution de cavités) doit permettre de valider le logiciel mis en place. De même, la viscoélasticité peut avoir un impact sur la coalescence. Une revue de la littérature sur ces phénomènes est donc proposée.

3.1.3.a Etudes planes de la coalescence de cylindres infinis

i) Généralités

Hopper (1984 - 1992 - 1993a – 1993b), Richardson (1992) et Korwin et al. (1992) étudient la coalescence plane de cylindres infinis.

Les travaux de Hopper, souvent cités, permettent d'obtenir la solution exacte de l'évolution temporelle du raccord adimensionné pour la coalescence de cylindres infinis présentant un rapport de diamètres allant de 1 à l'infini. Hopper résout de manière exacte les équations de Navier-Stokes de fluides visqueux newtoniens incompressibles. Les effets d'inertie sont négligés.

Les travaux de Kuiken (1990) suivis de ceux de Van der Vorst et al (1992) & Van der Vorst (1993 – 1994) permettent de confirmer numériquement la validité du modèle analytique de Hopper.

Le développement de Hopper est repris par la suite pour étudier des configurations planes plus complexes (Crowdy, 2002 et 2003) prenant en compte la disparition de pores.

ii) Le modèle de Frenkel étendu aux cylindres infinis

Les travaux de Hopper (1993b) mentionnent la description bidimensionnelle du modèle de Frenkel réalisée par Hirao et Tomozawa pour le cas de deux cylindres de mêmes diamètres qui coalescent (19).

$$\frac{y}{a} = \left(\frac{3}{\pi} \tau' \right)^{\frac{1}{3}} \quad (19)$$

La définition de τ' est différente de celle de Frenkel puisque le temps est adimensionné par le diamètre initial D_0 des cylindres.

$$\tau' = \frac{\Gamma}{\eta D_0} t = \frac{1}{2} \frac{\Gamma}{\eta a_0} = \frac{\tau}{2} \quad (20)$$

La cinétique de coalescence de deux cylindres infinis exprimée en fonction du temps adimensionné de Frenkel vaut :

$$\frac{y}{a} = \left(\frac{3}{2\pi} \tau \right)^{\frac{1}{3}} \quad (21)$$

iii) Le modèle de Hopper

Les premiers travaux de Hopper (1984) partent du principe que la géométrie du système composé de deux cylindres infinis qui coalescent prend la forme de l'équation paramétrique d'une ellipse inverse (22). A partir de cette hypothèse, la résolution temporelle de la cinétique de la coalescence est réalisée et proposée en étudiant l'évolution de la demi-hauteur du raccord y adimensionnée par le rayon final R_0 du système en fonction du temps adimensionné, lui aussi en tenant compte du rayon final R_0 .

$$\begin{cases} x(\theta) = R_0 [(1 - m^2)(1 + m^2)^{-\frac{1}{2}} (1 + 2m \cos 2\theta + m^2)^{-1} (1 + m) \cos \theta] \\ y(\theta) = R_0 [(1 - m^2)(1 + m^2)^{-\frac{1}{2}} (1 + 2m \cos 2\theta + m^2)^{-1} (1 - m) \sin \theta] \end{cases} \quad (22)$$

où R_0 est le rayon final du système ($R_0 = \sqrt{2}R_i$ avec R_i le rayon initial) et m un nombre réel dans l'intervalle $[0 ; 1[$

Cette évolution est donc basée sur une forme supposée à priori, présentant l'avantage d'être parfaitement décrite et visuellement proche expérimentalement de la coalescence de deux cylindres.

Les travaux de Hopper (1993a - 1993b) dans la continuité des précédents, résolvent exactement les équations de Navier-Stokes sans présupposer la forme du système. Les effets d'inertie y sont négligés. Ils permettent de connaître l'évolution de la forme d'un système de deux cylindres infinis (Figure 19) pour différents temps et avec une échelle dimensionnelle précisée (chaque case est un carré de 0.2 de côté) pour différents rapports des diamètres initiaux D (≥ 1) des deux cylindres. L'analyse est adimensionnelle. Les temps de coalescence τ_{Hopper} (23) sont adimensionnés avec les paramètres matériau et le diamètre initial du plus petit cylindre D_s (Figure 18).

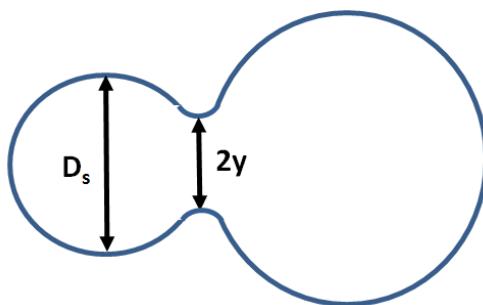


Figure 18 Mesure selon Hopper

$$\tau_{\text{Hopper}} = t \frac{\Gamma}{\eta D_s} \quad (23)$$

Afin de ne pas s'égarer dans les différents termes décrivant le raccord y , nous nommons le diamètre de raccord « $2y$ ». Notons que pour les cas $D = 1, 2, 5$ et 20 , nous suivrons la largeur y définie par la distance entre deux points initialement au raccord et évoluant avec le temps. Hopper propose généralement d'étudier la largeur minimale du système. Il n'est donc pas possible de la suivre jusqu'à la fin du phénomène. Dans notre étude, cette largeur minimale sera considérée uniquement dans le cas $D = \infty$.

Hopper donne la position géométrique de la frontière du système de deux cylindres infinis pour $D = (1, 2, 5, 20, \infty)$ à différents temps adimensionnés τ_{Hopper} . Ainsi, sur la figure 19, on a

- (a) $D = 1 - \tau_{\text{Hopper}} = (0,032 / 0,141 / 0,325 / 0,647 / 1,120 / \infty)$
- (b) $D = 2 - \tau_{\text{Hopper}} = (0,0224 / 0,170 / 0,350 / 0,703 / 1,529 / \infty)$
- (c) $D = 5 - \tau_{\text{Hopper}} = (0,0172 / 0,127 / 0,286 / 0,632 / 1,642 / \infty)$
- (d) $D = 20 - \tau_{\text{Hopper}} = (0,0199 / 0,149 / 0,345 / 0,603 / 3,519 / \infty)$
- (e) $D = \infty - \tau_{\text{Hopper}} = (0,035 / 0,248 / 0,390 / 0,631 / 1,107 / 1,749 / 3,207 / \infty)$

On peut remarquer sur cette figure que la différence entre la largeur minimale et le lieu du raccord entre les points qui faisaient le raccord à l'instant initial est très faible. Les erreurs liées au choix de la mesure sont donc du même ordre de grandeur. L'avantage du suivi des points matériels est de pouvoir décrire la coalescence jusqu'à la fin du phénomène.

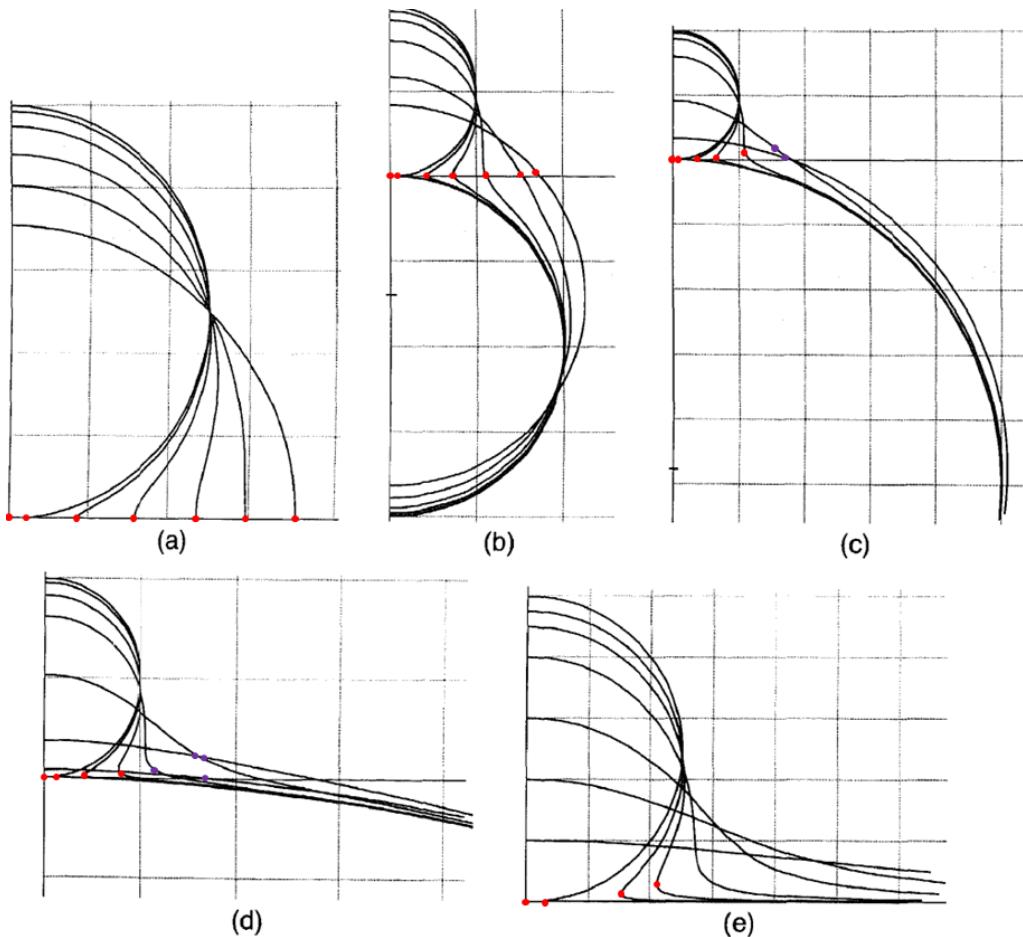


Figure 19 Résultat de la coalescence de Hopper - Rouge: les points de mesure parfaitement déterminés
Violet: les points de mesure de fiabilité plus faible, positionnés à l'aide des simulations à postériori

Il est ainsi possible de mesurer les différents raccords adimensionnés Y (24) sur la figure 19 pour les différents temps adimensionnés (on considère $\tau_\infty = 5$) pour les différents cas $D = (1, 2, 5, 20, \infty)$.

$$Y = \frac{2y}{D_S} = f(\tau_{\text{Hopper}}) \quad (24)$$

ou y est défini sur la figure 18

On peut alors soit étudier l'évolution temporelle de la largeur minimale jusqu'à ce qu'elle disparaîsse, ou bien l'évolution de la largeur entre les deux points matériels qui sont initialement au raccord et qui évoluent dans le temps.

Dans le cas $D=\infty$, la mesure est réalisée sur la largeur minimale, tant qu'elle existe. La dernière mesure n'est pas effectuée car la largeur minimale a déjà disparu. Cependant, Hopper nous donne le temps adimensionné à la disparition (0.5930) et la valeur du raccord adimensionné correspondant (1.0606). Ce point est donc considéré à part.

Dans les autres cas, la mesure est réalisée en un même point matériel pour les différents temps, estimé a priori et dont l'ordonnée augmente avec le temps. Dans les cas où $D=5$ et $D=20$, l'estimation des

derniers points est relativement hasardeuse. Ils sont donc placés à l'aide des résultats de simulation présentés au chapitre 4. Notons que l'image proposée par Hopper n'est pas orthonormée. La mesure des dimensions se faisant sur l'axe x, l'échelle sera prise avec cet axe.

A partir de ces données, il est possible d'établir les courbes d'évolution temporelle de la coalescence (Figure 20). Les résultats de Hopper (1984) sont modifiés afin de tracer le raccord adimensionné par le rayon initial des cylindres de manière à comparer ces résultats avec les résultats obtenus par la suite.

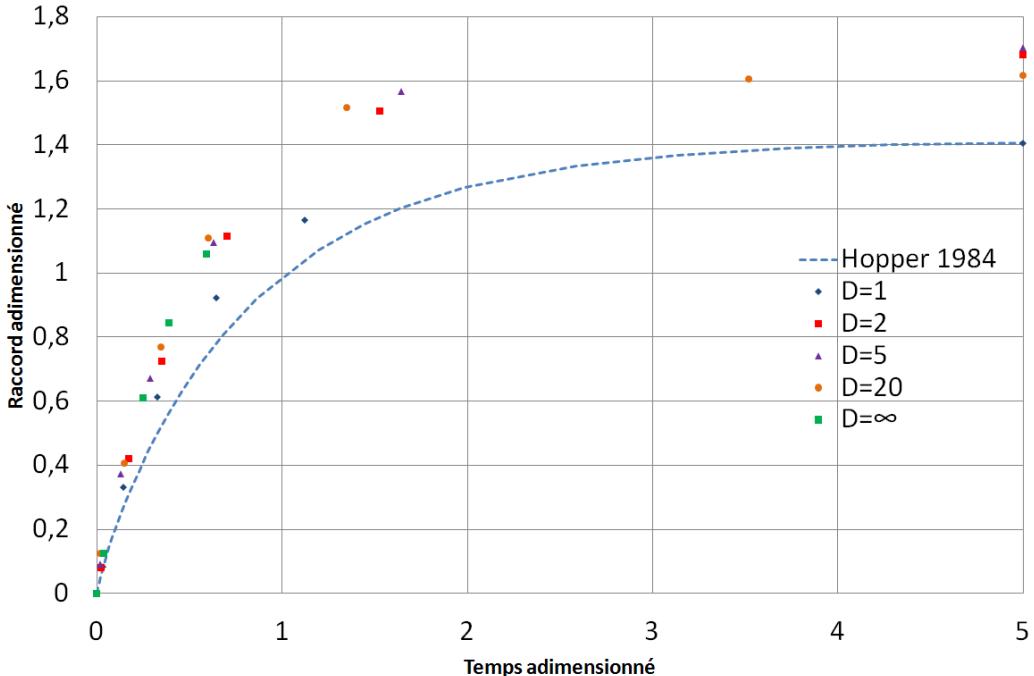


Figure 20 Mesure de l'évolution temporelle de la coalescence de Hopper

On peut donc remarquer que le premier modèle de Hopper décrivant l'évolution de la coalescence de deux cylindres infinis de mêmes diamètres comme une ellipse inverse sous-estime la cinétique de la coalescence.

iv) Coalescence bi- et tridimensionnelle

La littérature montre que les phénomènes bidimensionnels de coalescence et d'évolution de cavités sont représentatifs des phénomènes 3D (Manga & Stone, 1993 - Charles & Pozrikidis, 1998).

3.1.3.b Critique du modèle en puissance de Frenkel

Ross et al. (1981) montrent, à l'aide d'une analyse par éléments finis, que le modèle de Frenkel ne peut pas représenter le processus de coalescence avec une loi puissance constante. Ils déterminent une loi puissance avec un coefficient variant monotonement avec la coalescence.

Hiram & Nir (1983) utilisent une méthode intégrale axisymétrique pour déterminer la vitesse de la frontière de deux sphères qui coalescent. Ils montrent que la coalescence se décompose en 3 temps. Un premier régime dans les premiers instants de la coalescence, où la région du raccord subit une forte tension de surface et déformation. Un second régime est nommé « pseudo Frenkel ». Enfin, le

troisième régime lorsque la coalescence est presque terminée. Les résultats de simulation sont comparés aux essais expérimentaux de coalescence de PS à 180° (Rosenzweig, 1980) et une très bonne corrélation est obtenue. Le petit écart observé est supposé venir de la viscoélasticité non prise en compte dans le modèle. Les auteurs sont alors en mesure de montrer que le modèle de Frenkel à puissance constante est valable pendant le deuxième régime. Les auteurs estiment que ce coefficient diminue avec l'évolution de la coalescence et déterminent une puissance de 0.56 pour la loi de Frenkel sur le régime pseudo Frenkel là où celle de Frenkel vaut 0.5, constante durant tout le processus de coalescence. Rosenzweig (1980) montre lui aussi la nécessité d'une loi puissance non constante, et estime cette puissance sur la fin de la coalescence valant 0.3, lorsque le rayon de raccord adimensionné est compris entre 0.6 et 0.8.

3.1.3.c Rôle de la viscoélasticité

Kuczynski et al. (1970) montrent qu'il existe un effet de la viscoélasticité sur la coalescence. Ils proposent d'établir une loi puissance basée sur le modèle de Frenkel avec un coefficient variant avec la température. Narkis (1979) montre que l'effet élastique de la matière est visible aux premiers instants de la coalescence, et les expériences menées sur un PMMA sont très proches du modèle proposé par Lontz proposant de modifier le modèle de Frenkel avec prise en compte du temps de relaxation (1963 & 1964).

Pokluda et al. (1997) & Bellehumeur (1997) - Bellehumeur et al., (1998) ajoutent un modèle viscoélastique en régime quasi-statique au modèle de Frenkel-Eshelby résolu par Pokluda et al. (1997) et montrent une différence de comportement cinétique de la coalescence. La comparaison aux expériences n'est cependant pas encore exacte. L'approche consiste à utiliser un modèle « Lower Convected Maxwell » (LCM) sur un écoulement longitudinal quasi-statique. Une nouvelle équation différentielle est mise en place et l'effet de la viscoélasticité est discuté (Figure 21).

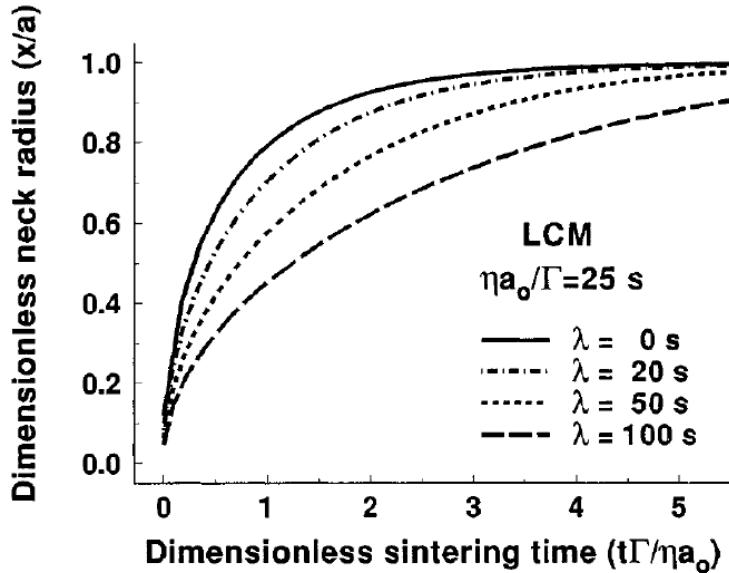


Figure 21 Coalescence du PP-XP1

Modèle Frenkel Eshelby amélioré par Pokluda et al.

LCM : Lower Convected Maxwell model - λ temps de relaxation du matériau

Réduisant la cinétique de coalescence, ce modèle permet de s'approcher des courbes de coalescence des matériaux étudiés, sans pour autant permettre de bien les décrire. Aucune remarque n'est proposée quant à la lecture de ces courbes dans les travaux de Bellehumeur et des travaux qui s'y réfèrent. Il est important de préciser que lorsque le temps de relaxation augmente, la viscosité du matériau augmente dans les mêmes proportions. Ainsi, à même temps adimensionné, le temps réel augmente, la coalescence est donc plus lente. Il aurait été intéressant de tracer ces courbes avec un temps adimensionné adapté à chaque valeur de temps de reptation.

Une modélisation éléments finis (Hooper et al., 2000) étudie l'influence de la viscoélasticité sur l'évolution de la forme, du temps de coalescence et des contraintes internes dans le fluide sur la coalescence de deux sphères de mêmes diamètres. Le champ de contraintes est très différent dès lors que l'élasticité est prise en compte, mais sans affecter pour autant l'évolution géométrique et la cinétique de la coalescence. Cependant, la définition des conditions initiales (choix des tailles des raccords initiaux et prédition de l'effet initial de l'élasticité) peut conduire à des résultats erronés. Les auteurs pensent qu'il est important d'étudier ce qu'il se passe au moment de la mise en contact des sphères afin de mieux représenter ce qu'il se passe ensuite.

Ces travaux et d'autres (Lin et al., 2001 - Scribben et al., 2006) montrent que la viscoélasticité du polymère a une influence au départ de la coalescence. Cependant, cela paraît ne pas avoir d'effet notable sur la cinétique de coalescence globale.

Bien que la viscoélasticité semble ralentir les taux de coalescence, les travaux de Mazur & Plazek (1994) et Mazur (1995) proposent des essais de coalescence et comparent les résultats à un modèle

newtonien. La comparaison montre une coalescence plus rapide des matériaux étudiés que le modèle newtonien.

Scribben et al (2006) montrent que malgré l'effet de la viscoélasticité, la solution converge vers la solution newtonienne. Ces travaux prennent en compte l'effet de la viscoélasticité avec un modèle UCM suite aux travaux de Bellehumeur, mais ne font pas l'hypothèse quasi-statique réalisée précédemment. Cet apport du caractère transitoire mène à des résultats inattendus. En effet, les taux de coalescence augmentent avec le temps de relaxation des polymères étudiés et contredisent les résultats précédents. Les résultats numériques présentent un bon accord avec l'expérience. La prise en compte du caractère transitoire permet d'intégrer l'effet rhéofluidifiant de la matière, à l'origine de cette augmentation de la cinétique de coalescence, c'est-à-dire de la diminution du temps de coalescence.

3.1.3.d Analyse du contact entre grains

Les analyses de coalescence abordées jusqu'ici ne parlent jamais des conditions de contact entre les sphères aux premiers instants. Souvent, les travaux font mention d'incertitudes sur ce qu'il se passe dans les premiers instants de la coalescence. En particulier, les forces de van der Waals créent une attraction locale lorsque deux surfaces sont proches dont l'effet est connu depuis longtemps. Johnson et al. (1971) mettent en place le modèle JKR permettant de décrire l'évolution du raccord entre deux sphères élastiques sous l'action de ces forces d'attraction. Jagota et al. (1998), à l'aide d'un modèle élément finis, couplent ces forces d'attraction aux forces de tension de surface. Les auteurs montrent qu'aux instants initiaux, un contact élastique se crée entre les sphères, puis les forces de Van der Waals induisent un rapprochement des deux parois des éléments qui coalescent, conduisant à un phénomène de « zipping » indépendant de la taille des sphères. Ce zipping correspond à une fermeture de la surface sur elle-même comme une fermeture éclair. La transition entre la phase de contact élastique et le zipping est viscoélastique. Enfin, la coalescence visqueuse a lieu. Ainsi, jusqu'à la fin du zipping, aucun modèle adimensionné ne peut représenter la cinétique de coalescence. L'écoulement visqueux semble apparaître très rapidement. Pour une sphère de rayon égal à 10 µm posée sur un plan semi-infini, celui-ci est établi dès un raccord de 0,1 µm de rayon.

3.1.4 Simulations numériques de la coalescence et densification

Suite à ces différentes études analytiques de la coalescence, le développement des moyens de calcul a permis de mettre en place la simulation de fluides sous l'action de la tension de surface. Diverses études ont tenté de simuler des phénomènes 3D. Cependant, les difficultés numériques rencontrées ne permettent pas de trouver de simulations complètes de tels écoulements. La littérature propose alors diverses études numériques de la coalescence et de l'évolution de cavités d'air emprisonnées dans des fluides avec tension de surface en 2D.

3.1.4.a Simulation numérique de la coalescence

Les premières simulations que nous trouvons dans la littérature à propos de fluides mis en mouvement par l'action de la tension de surface ont été réalisées par éléments finis et permettent d'étudier l'influence de la présence de diverses tailles de grains et l'influence de plusieurs grains mis ensemble sur la cinétique de coalescence.

Une des premières simulations éléments finis de coalescence est proposée par Ross et al. (1981) et étudie une ligne infinie de cylindres. Jagota & Dawson (1990) simulent la coalescence de deux sphères et étudient les premiers instants de la coalescence à l'aide d'une méthode éléments finis axisymétrique. Martínez-Herrera & Derby (1995) proposent un modèle éléments finis axisymétrique isotherme montrant l'influence d'un alignement de plusieurs grains de même taille sur la cinétique de la coalescence globale du système. Le premier modèle éléments finis 3D (Zhou & Derby, 1998) appliqué à des géométries initiales complexes a confirmé par ses premiers résultats la nécessité d'aller plus loin dans la simulation pour comprendre la coalescence de poudres. Les mêmes auteurs évoquent également les difficultés numériques rencontrées lors de la simulation de la coalescence (Zhou & Derby, 2001), et en particulier les problèmes de distorsions de maillage lors de grandes déformations des fluides et les limites des méthodes « Front Tracking ». Ces méthodes sont très utiles dans le cas de fluides conduits par la tension de surface car l'interface a besoin d'être bien déterminée, mais elles peuvent conduire à des imprécisions locales. De plus, les auteurs mentionnent des difficultés de convergence numérique des résolutions itératives dont l'origine serait due à la forme de la matrice obtenue, les distorsions de maillages accentuant ces difficultés. Il est donc souvent nécessaire de remailler les domaines ne présentant pas de description analytique aidant au positionnement des nouveaux noeuds. Walkley et al. (2005) mettent en œuvre une méthode éléments finis 3D avec remaillage et arrivent à simuler des écoulements fluides avec prise en compte de la tension de surface. Plusieurs choix numériques induisent une non-conservation du volume et des résultats dont la fiabilité doit être améliorée. On trouve en particulier la simulation d'une goutte pendante, présentée uniquement afin de montrer les possibilités de la méthode.

Pour se passer des difficultés rencontrées en éléments finis, la méthode des intégrales de frontière (BEM) a souvent été utilisée (Hiram & Nir, 1983, Van der Vorst et al (1992) & Van der Vorst (1993 - 1994), Garabedian & Helble., 2001 & 2007) en considérant la coalescence de deux sphères.

Les problèmes rencontrés lors de l'utilisation de ces méthodes sont majoritairement relatifs au nombre de nœuds et aux grandes déformations induisant des limites numériques et calculatoires importantes lors du passage en 3D.

A ce jour, aucune simulation numérique n'est allée plus loin en simulant un domaine composé de plusieurs grains arrangés aléatoirement et en considérant le caractère anisotherme global intrinsèque au procédé de fusion laser sélective par exemple. La littérature propose des modèles globaux (Tontowi et al, 2001) permettant de prédire l'évolution de la densité des lits de poudre à l'aide de la connaissance de l'histoire thermique de la matière et de lois d'évolution de cavités, que ce soit à l'aide

de modèles dérivés de celui de Frenkel (Bellehumeur & Tiang, 2002) pour l'étude de la coalescence ou de modèles d'évolution du volume des cavités fermées par diffusion de l'air dans le polymère (Crawford & Scott, 1987 - Gogos, 2004).

3.1.4.b Disparition de cavités

Différents travaux très intéressants (Van der Vorst, 1992 - Van der Vorst & Mattheij, 1992 - Van der Vorst, 1993 - Primo et al., 2000 - Kropinski, 2002) analysent l'évolution de cavités fermées d'un domaine plan à l'aide de la méthode des intégrales de frontière. Ces études ont pour but d'analyser la cinétique d'évolution et de disparition de cavités sous l'action de la tension de surface. Les effets d'inertie sont négligés. En aucun cas, la diffusion de l'air à travers le polymère n'est considérée. L'évolution de la frontière n'est due qu'à la tension de surface agissant sur l'intérieur d'une cavité dont la pression reste constante. Cette situation vise à reproduire un phénomène 3D, en imaginant, bien que le calcul soit bidimensionnel, que l'on étudie une coupe d'un domaine 3D dans lequel l'air peut s'échapper des cavités dans la troisième dimension. L'analyse bidimensionnelle proposée est un premier pas vers l'étude de la disparition de bulles d'air dans les cas réels 3D, les cinétiques de coalescence 2D étant représentatives des cinétiques 3D.

Kropinski (2002) met en place une démarche de résolution puis propose une validation de son logiciel basée sur les travaux antérieurs avant de simuler différents domaines composés de plusieurs cavités fermées et étudie l'évolution de la surface des cavités et la déformation du domaine global. Les travaux proposés considèrent que la pression dans la cavité et à l'extérieur du domaine sont égales et constantes tout au long de l'évolution.

Dans les études proposées, τ est bien le temps adimensionné proposé par Frenkel.

i) Cavité centrée dans un disque de fluide

La première étude menée sur des cavités d'air emprisonnées dans un fluide a été menée sur un disque de fluide contenant un trou centré (Figure 22).

La solution analytique décrivant l'évolution temporelle adimensionnelle des rayons intérieur et extérieur du disque troué est implicitement donnée dans les travaux de Van der Vorst (1993).

$$\begin{aligned}\tau &= 2(R_i - r_i) + \sqrt{3 + 4r_i^2} - \sqrt{3 + 4R_i^2} \\ \tau &= 2(r_0 - R_0) - \sqrt{4r_0^2 - 3} + \sqrt{4R_0^2 - 3}\end{aligned}\tag{25}$$

où R_i et R_0 sont le rayon initial intérieur et extérieur du disque de fluide adimensionnés par R_0 , r_i et r_0 les mêmes rayons au temps adimensionné τ adimensionnés eux aussi par R_0

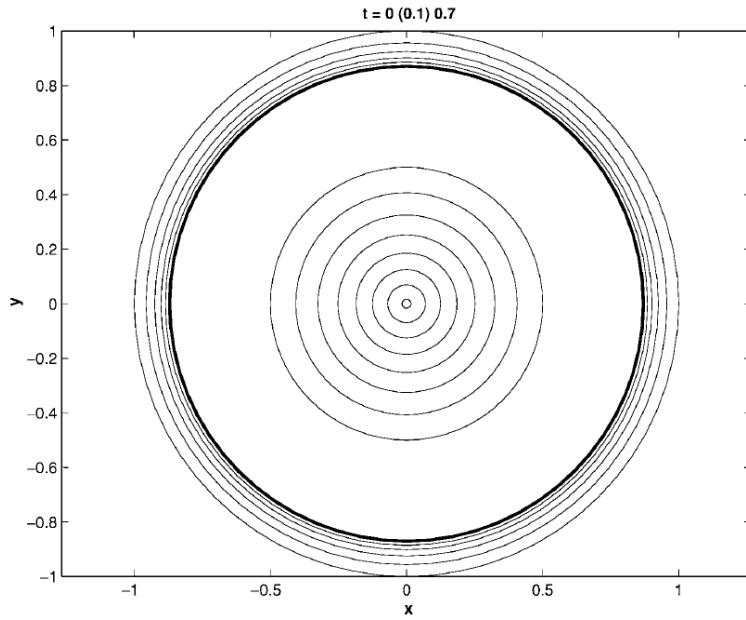


Figure 22 Evolution d'un disque de fluide avec cavité centrée

Frontières intérieur et extérieur

à différents temps adimensionnés : 0 / 0,1 / 0,2 / 0,3 / 0,4 / 0,5 / 0,6 / 0,7

(Kropinski, 2002)

L'évolution temporelle des rayons intérieur et extérieur du disque de fluide est ainsi représentée en fonction du temps sur la figure 23 (Kropinski, 2002). Alors que la cavité intérieure disparaît à $t=0.73$, le rayon extérieur du disque de fluide vaut $\sqrt{0.75}$.

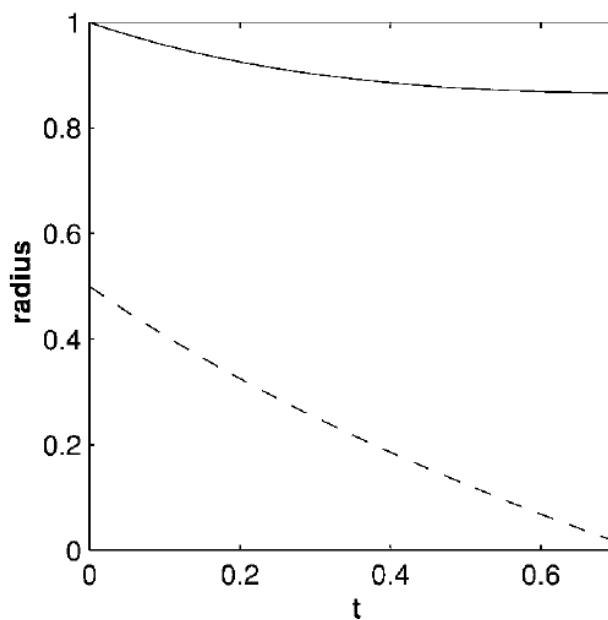


Figure 23 Evolution temporelle des rayons adimensionnés intérieur (tirets) et extérieur du disque de

fluide (trait plein)

(Kropinski, 2002)

ii) Cavité excentrée dans un disque de fluide

La seconde étude est un disque de fluide avec une cavité excentrée (Figure 24).

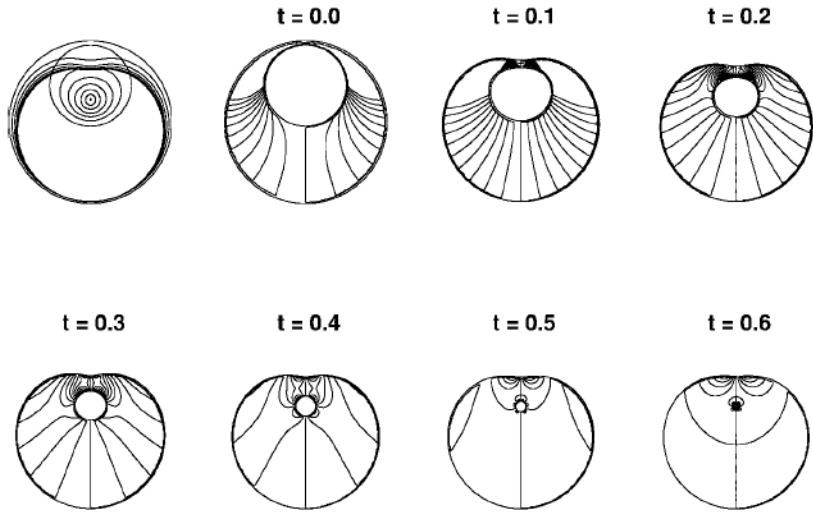


Figure 24 Support de validation numérique : Disque de fluide avec cavité excentrée (Kropinski, 2002)

Kropinski (2002) propose la comparaison de ses résultats avec ceux de Van der Vorst (1993) et représente l'évolution de l'aire de la cavité adimensionnée par l'aire du domaine total (disque plein de rayon le rayon extérieur du disque de fluide) en fonction du temps adimensionné (Figure 25).

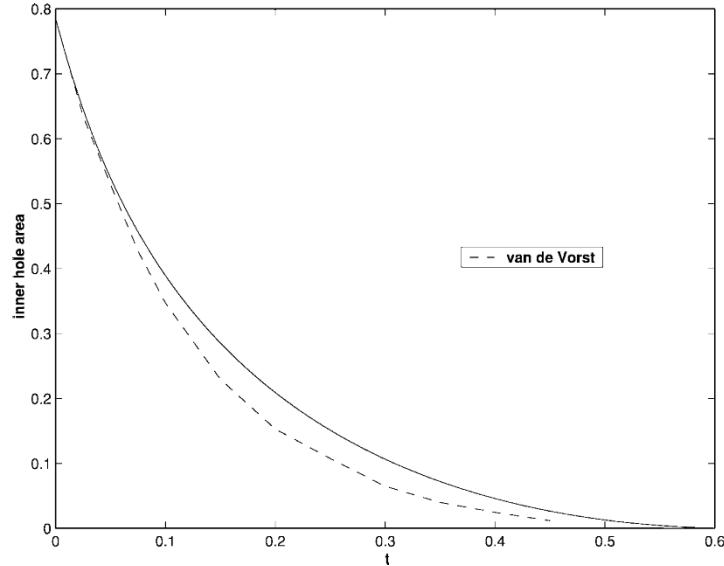


Figure 25 Aire de la cavité excentrée en fonction du temps adimensionné (Kropinski, 2002)

Tirets : solution de Van de Vorst - Trait continu : solution de Kropinski

Kropinski démontre que la méthode numérique utilisée dans ses travaux est d'un ordre supérieur aux méthodes utilisées chez Van de Vorst, donnant donc une meilleure précision que celle qui a mené à la courbe de Van de Vorst. Une comparaison de la conservation de la surface du domaine donne d'ailleurs une erreur chez Van de Vorst de 1 % contre 0.0001 % dans la résolution de Kropinski. Nous retiendrons donc la courbe en trait continu.

3.1.4.c Synthèse

La coalescence de grains est un phénomène qui a beaucoup été étudié, en considérant d'abord un écoulement de fluide visqueux newtonien incompressible. Différentes études expérimentales, analytiques et numériques ont montré que le comportement des matériaux polymères non newtoniens pouvait avoir un impact sur les premiers instants de la coalescence, soit en ralentissant la cinétique, soit en l'accélérant. Toutefois, l'impact de la viscoélasticité des matériaux sur la cinétique globale de la coalescence est faible. L'analyse de la cinétique de la coalescence et de la disparition de cavités réalisée dans ce chapitre permettra de comparer le logiciel mis en place dans nos travaux avec la littérature.

Au final, très peu d'études numériques représentant réellement la densification de poudre ont été trouvées dans la littérature. Des analyses globales d'évolution de la densité sont proposées, mais aucune modélisation géométrique anisotherme complète de la poudre et de son évolution à l'état liquide sous l'action de la tension de surface n'est disponible.

Différentes études décrivant la cinétique de disparition de cavités dans un domaine bidimensionnel sont cependant disponibles. Elles permettront de comparer notre logiciel aux résultats numériques déjà présents.

4 Conclusion du Chapitre 1

Le procédé de fusion laser sélective est un procédé très prometteur dans les transports de demain. Il permet de créer rapidement et simplement des pièces bonne matière en quelques heures sans outillages, en étant toutefois réservé à de petites séries.

La mise en œuvre de ce procédé est cependant délicate : la qualité des pièces fabriquées dépend d'un grand nombre de paramètres liés au matériau et au procédé et une bonne reproductibilité des pièces créées est parfois difficile à obtenir.

Lors de la fabrication, divers phénomènes permettent de transformer la poudre en matière dense. L'échauffement laser permet de transformer la matière de l'état solide à l'état liquide. La coalescence des grains conduit à la densification de la poudre jusqu'à l'apparition de cavités fermées après quelques secondes. Ces cavités évoluent ensuite par un effet de diffusion des gaz dans le polymère, sur des temps de l'ordre de la minute. Une bonne densité de pièce est donc obtenue si le polymère est maintenu à l'état fondu plusieurs minutes après la fusion laser. A l'inverse, la cristallisation rapide des pièces induit des distorsions néfastes à la fabrication et au respect des dimensions des pièces. Le maintien à l'état liquide permet d'obtenir une cristallinité optimale améliorant les performances finales des pièces créées.

Les études menées jusqu'à maintenant sur ce procédé ont eu pour but d'étudier ces différents phénomènes afin de créer des pièces de bonne géométrie, densité, forme, caractéristiques mécaniques, thermiques et chimiques. Pour cela, il est nécessaire de comprendre les phénomènes physiques mis en

jeu dans le procédé. Aucune étude de soudage en profondeur n'a été trouvée dans la littérature, ni aucun élément permettant d'analyser la cinétique et la qualité de la densification des poudres sous éclairage laser. On trouve seulement quelques développements numériques visant à développer des méthodes de simulation de fluides soumis à la tension de surface, mais ceux-ci se limitent à l'étude fine de phénomènes simples et isothermes, comme l'évolution de la coalescence et la disparition de porosités.

Dans ce contexte, nous allons nous intéresser à la simulation du procédé à deux échelles afin de compléter les travaux réalisés jusque-là. L'étude de la coalescence et de la densification des poudres permettra de comprendre concrètement l'influence des paramètres matériau et procédé, en considérant l'évolution de la coalescence des grains du lit de poudre, les profondeurs fondues et les cycles thermiques de la matière.

Par la suite, le polymère devant être maintenu à l'état fondu le plus longtemps possible, une analyse macroscopique sera menée afin de déterminer les refroidissements induits par l'étalement d'une nouvelle couche de poudre sur de la matière fusionnée.

Ces travaux devraient permettre de compléter l'état actuel de la connaissance du procédé de fusion laser sélective et de l'optimiser.

CHAPITRE II - CARACTÉRISATION EXPERIMENTALE DES MATÉRIAUX

La mise en œuvre des poudres lors du procédé de fusion laser sélective dépend des propriétés du matériau utilisé. En particulier, les travaux dans ce domaine ont montré que les caractéristiques thermiques de la matière, la viscosité du fluide, sa tension de surface, la granulométrie des poudres et l'absorption laser sont importants. C'est pourquoi nous avons caractérisé ces paramètres sur les poudres candidates du projet.

Pour des raisons de confidentialité, nous nommerons les deux poudres utilisées « Matériau A » et « Matériau B ». Ce sont des matériaux de la famille des polyéthercétones. Le matériau A est un PEEK, le matériau B un PEKK.

1 Analyse thermique des poudres : fusion et cristallisation

Lors du procédé de fusion laser sélective, le matériau est d'abord préchauffé quelques degrés en-dessous de sa température de fusion. La température de préchauffage ne doit pas excéder la température de fusion des premiers cristaux T_f' afin de ne pas solidifier le bac de poudre. Cette température doit donc être déterminée.

Ensuite, la poudre est portée au-dessus de sa température de fusion T_f par l'apport énergétique du laser permettant le changement d'état solide/liquide. Cette température de fusion doit donc être connue.

Un premier refroidissement très rapide jusqu'à la température de préchauffage du bac a lieu. Afin d'améliorer les performances des pièces, cette température ne doit pas induire de cristallisation même partielle. Il faut donc déterminer la température de début de cristallisation T_c' au refroidissement.

Enfin, un refroidissement en conditions quasi isothermes dans la profondeur du bac de fabrication intervient pendant plusieurs heures. La cristallisation a lieu dans ces conditions. Il est donc nécessaire de déterminer à quelle température T_c a lieu la cristallisation.

Ces quatre températures sont donc déterminées.

1.1 Méthodologie expérimentale

Dans le cas du matériau A, une DSC a été réalisée par la société Dassault Aviation avec des rampes de 10°C par minute, en première chauffe de l'ambiante à 400°C afin d'effacer l'histoire thermique du matériau, suivie d'un refroidissement jusqu'à l'ambiante puis d'une seconde chauffe identique.

Dans le cas du matériau B, une DSC réalisée par le fabricant, avec des vitesses de chauffage de 20°C/min ne met pas en évidence de pic de cristallisation. Compte tenu des conditions de mise en œuvre du procédé (refroidissement très lent rencontré dans les bacs de fabrication), nous avons réalisé plusieurs DSC de ce matériau au laboratoire en utilisant une Q1000 de chez TA Instrument jusqu'à des rampes de 1°C/min afin d'essayer de vérifier ce résultat.

Si elles existent, les températures de fusion et cristallisation sont déterminées aux sommets des pics, les valeurs extrêmes utiles des plages correspondantes sont déterminées à l'aide du croisement des tangentes de part et d'autre du changement de pente. La température de transition vitreuse, lorsqu'elle est visible, est déterminée par le point d'inflexion de la capacité calorifique.

1.2 Analyse calorimétrique des matériaux

1.2.1 Matériau A

Le traitement de la DSC du matériau A (Figure 26) permet de déterminer les différentes températures caractéristiques (Tableau 5).

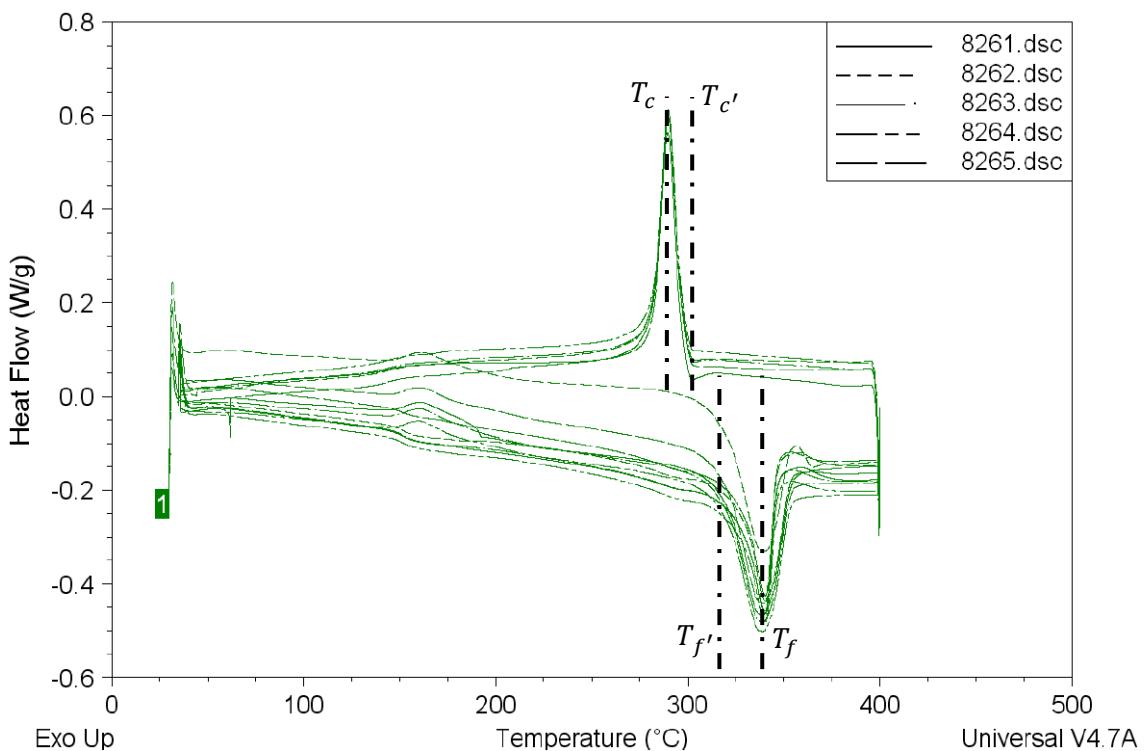


Figure 26 DSC du matériau A fournie par Dassault Aviation

Début de la fusion	$T_{f'} = 320^{\circ}\text{C}$
Pic de fusion	$T_f = 339^{\circ}\text{C}$

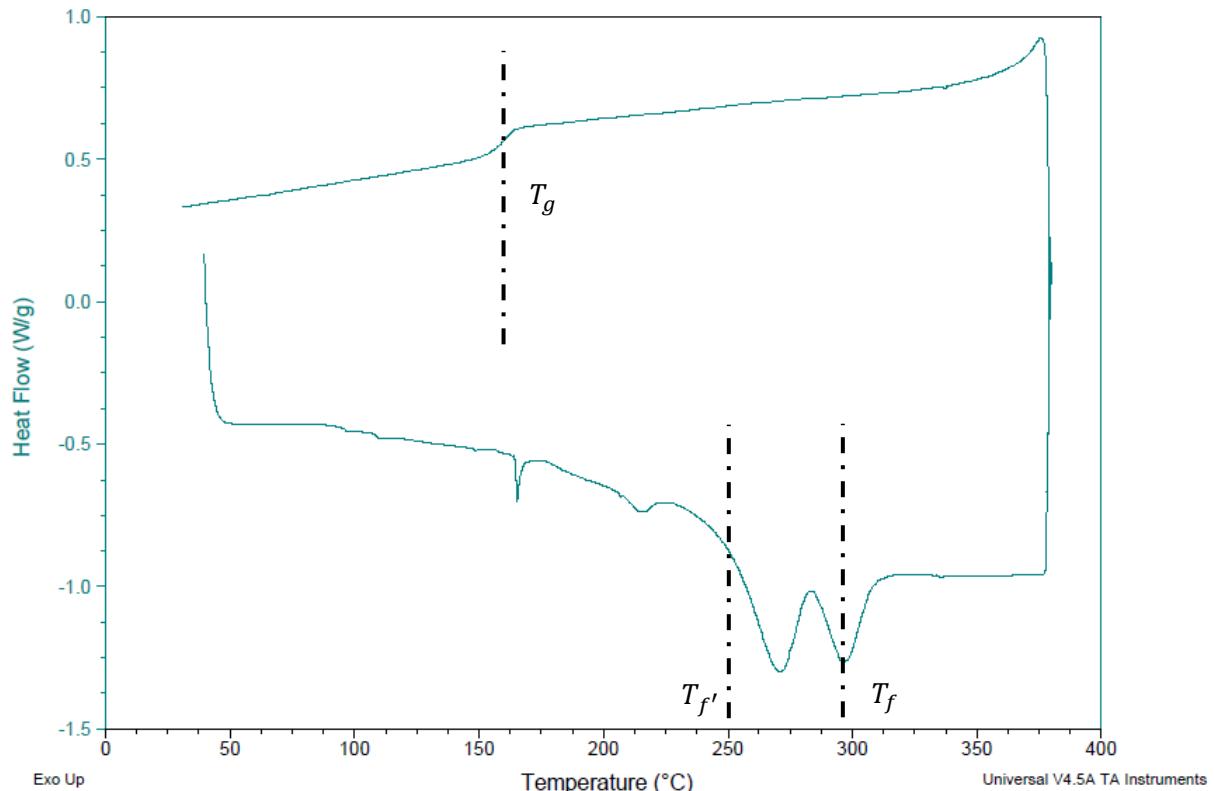
Début de la cristallisation	$T_{c'} = 300^{\circ}\text{C}$
Pic de cristallisation	$T_c = 290^{\circ}\text{C}$

Tableau 5 Températures de fusion et cristallisation du matériau A

La plage de préchauffage de ce matériau doit donc être située dans l'intervalle $300^{\circ}\text{C} - 320^{\circ}\text{C}$.

1.2.2 Matériau B

Le traitement de la DSC du matériau B (Figure 27) réalisée avec des rampes de $1^{\circ}/\text{min}$ met en évidence deux pics de fusion et permet de déterminer la température de fusion du matériau (2° pic).



Ce matériau, sous forme cristalline à l'état de poudre, reste amorphe dans les conditions du test. La caractérisation post-fabrication de pièces réalisées avec ce matériau par les PME du projet FADIPLAST montre qu'il cristallise du fait d'un refroidissement de plusieurs heures dans des bacs de fabrication dont la température diminue très lentement. Toutefois, dans les simulations réalisées par la suite, dont les temps n'excéderont pas l'ordre de la minute, il est nécessaire de connaître la température de solidification de la matière. Nous considérerons donc que cette température de solidification est la température de transition vitreuse T_g du matériau B.

Les données du matériau B utiles à nos travaux sont donc la température de transition vitreuse, le début de la fusion des premiers cristaux à l'échauffement et la température de fusion (Tableau 6). La fiche matériau du fabricant donne une température de fusion T_f de 301°C . Nous avons établi la courbe

ci-dessus dans le but de mettre en évidence une éventuelle cristallisation. Bien que le deuxième pic de fusion soit légèrement inférieur à 300°C, nous choisissons de retenir la donnée fabricant. La détermination de $T_{f'}$ est relativement délicate. D'après les PME du projet qui mettent en œuvre cette poudre, le préchauffage à 250°C est utilisé. Nous choisissons donc cette température pour $T_{f'}$.

Début de la fusion	$T_{f'} = 250^\circ\text{C}$
Pic de fusion	$T_f = 301^\circ\text{C}$
Transition vitreuse	$T_g = 160^\circ\text{C}$

Tableau 6 Températures de fusion et cristallisation du matériau B

La plage de préchauffage de ce matériau doit donc être située dans l'intervalle 160°C – 250°C.

2 Mesure de viscosité

2.1 Méthodologie expérimentale

Les mesures de viscosité ont été réalisées à l'aide d'un rhéomètre à plateaux Rheometrics ARES de TA Instruments entre disques de diamètre 25 mm en cisaillement constant.

La température du four du rhéomètre est régulée par un flux d'air. Les hautes températures ($> 300^\circ\text{C}$) ne permettent pas d'utiliser un flux d'azote.

La poudre est placée sur le disque inférieur. Après la fonte du polymère, il faut attendre quelques minutes pour que l'air emprisonné dans la poudre diffuse à la surface. Afin de limiter en temps ce phénomène de diffusion, de faibles épaisseurs de polymères sont utilisées et les mesures sont réalisées avec un entrefer de polymère liquide de 0,5 mm environ. Le zéro de l'entrefer est réalisé manuellement pour chacune des températures d'essais. La valeur exacte de l'entrefer est déterminée automatiquement par l'appareil lors de chaque mesure.

La viscosité en cisaillement est mesurée à des faibles valeurs de vitesses de déformation, représentatives du phénomène de coalescence, en allant des faibles vitesses de déformation vers les plus grandes : 0,030 / 0,065 / 0,139 / 0,3 / 0,646 s^{-1} . Le temps de mesure pour chaque vitesse de déformation est de 10 s et le temps entre chaque mesure de 10 s.

Afin de compléter ou confirmer des mesures, le module de la viscosité complexe a été aussi déterminé en dynamique et en faible déformation afin de se placer dans la zone de viscoélasticité linéaire. Pour minimiser l'effet de la dégradation (mesures très lentes à basses fréquences), nous avons fait varier la fréquence de 100 à 0,1 rd/s . Selon le principe de Cox-Merz, les viscosités dynamiques en rd.s^{-1} et en cisaillement en s^{-1} sont généralement équivalentes.

Les viscosités des matériaux A et B ont été mesurées à plusieurs températures afin de déterminer la dépendance Arrhenienne de la viscosité Newtonienne η_0 avec la température (26).

$$\eta(T) = A e^{\frac{E}{RT}} \quad (26)$$

où E est l'énergie d'activation de la viscosité, R la constante des gaz parfaits ($8,314 \text{ J.mol}^{-1}\text{K}^{-1}$) et T la température en Kelvin

Cette même équation peut se réécrire sous la forme (27) :

$$\eta(T) = \eta_0(T_f) e^{\frac{E(1-\frac{1}{T}-\frac{1}{T_f})}{R}} \quad (27)$$

L'analyse des courbes de viscosité nous a permis d'estimer le temps de reptation des matériaux à une température donnée (400°C pour le matériau A et 360°C pour le matériau B), assimilé au temps de relaxation terminal. Ce temps de relaxation est obtenu à partir de mesures rhéologiques dynamiques. Des travaux antérieurs (Nicodeau, 2005) nous permettent alors d'estimer la loi Arrhenienne d'évolution du temps de reptation en fonction de la température pour chacun des matériaux, connaissant leur énergie d'activation et une valeur de temps de reptation à une température.

2.2 Analyse rhéologique des matériaux

Nous avons étudié la viscosité des matériaux A et B et établi les lois d'Arrhenius correspondantes.

2.2.1 Matériau A

2.2.1.a Rhéologie

La viscosité en cisaillement du matériau A a été mesurée à trois températures, 345°C , 360°C et 400°C (Figure 28).

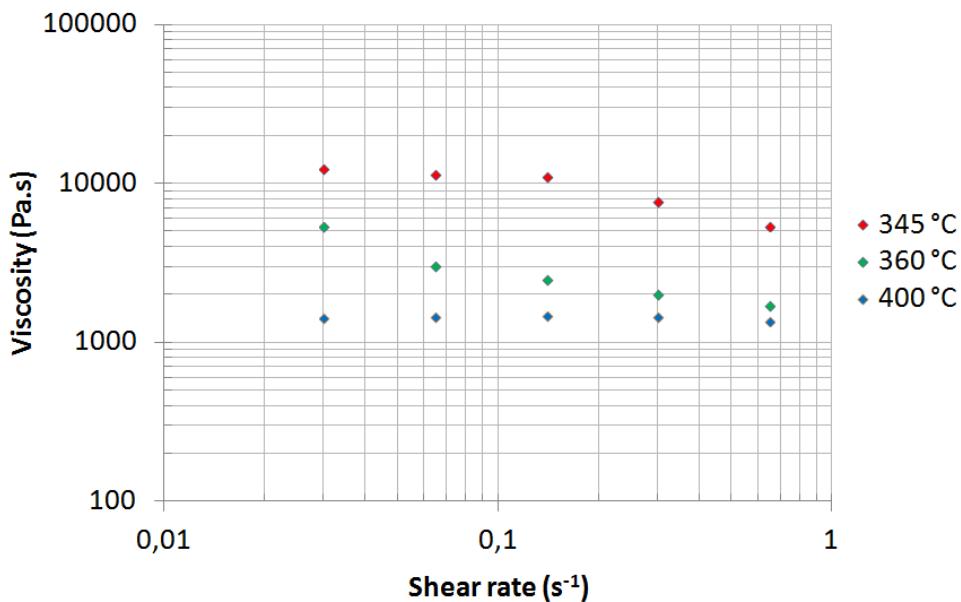


Figure 28 Analyse rhéologique du matériau A

A une température proche de la température de fusion, elle est de l'ordre de 10000 Pa.s et ne présente pas de caractère rhéofluidifiant aux valeurs de taux de cisaillement testées. Pour la dépendance de la viscosité Newtonienne avec la température, l'énergie d'activation peut être estimée à 60000 J/mol. La viscosité Newtonienne du matériau A est alors estimée à l'aide d'une loi d'Arrhenius (28) en Pa.s.

$$\eta(T) = 3784 e^{\frac{60000}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{612} \right)} \quad (28)$$

2.2.1.b Temps de reptation

L'analyse des courbes de rhéologie du matériau A permet d'estimer les paramètres du modèle décrivant le temps de reptation en secondes en fonction de la température (29). Ce temps vaut 1 s à la température de 400°C.

$$t_r(T) = 2,21 \cdot 10^{-5} e^{\frac{60000}{RT}} \quad (29)$$

2.2.2 Matériau B

2.2.2.a Rhéologie

La viscosité en cisaillement du matériau B a été mesurée à cinq températures : 280°C, 300°C, 320°C, 340°C et 360°C (Figure 29).

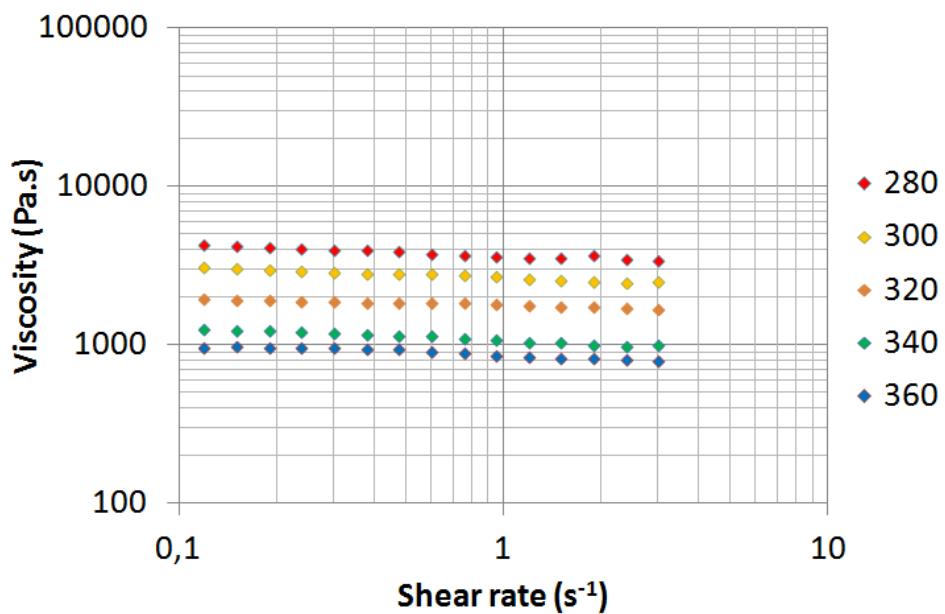


Figure 29 Analyse rhéologique du matériau B

A une température proche de la température de fusion, elle est de l'ordre de 3000 Pa.s et ne présente pas de caractère rhéofluidifiant aux valeurs de taux de cisaillement testées. Pour la dépendance de la viscosité Newtonienne avec la température, l'énergie d'activation peut être estimée à 56721 J/mol. La viscosité Newtonienne du matériau B est alors estimée à l'aide d'une loi d'Arrhenius (30) en Pa.s.

$$\eta(T) = 2979 e^{\frac{56721}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{574} \right)} \quad (30)$$

2.2.2.b Temps de reptation

L'analyse des courbes de rhéologie du matériau B permet d'estimer les paramètres du modèle décrivant le temps de reptation en secondes en fonction de la température (29). Ce temps vaut 1 s à la température de 360°C.

$$t_r(T) = 2,09 \cdot 10^{-5} e^{\frac{56721}{RT}} \quad (31)$$

3 Mesure de tension de surface

3.1 Méthodologie expérimentale

Parmi les différentes méthodes de mesure de tension de surface existantes (Xing et al., 2000 - Demarquette, 2003), la méthode de la goutte pendante est choisie (Stauffer, 1965). Cette méthode consiste à étudier la forme d'une goutte pendante à son équilibre sous l'action de la gravité, puis d'en déduire la tension de surface du matériau Γ (32) à partir de la connaissance de d_s et d_e (Figure 30). Cette méthode est basée sur l'équation de Young-Laplace (161).

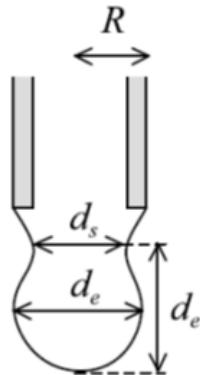


Figure 30 Analyse géométrique de la goutte pendante

$$\Gamma = \frac{\rho g d_e^2}{H} \quad (32)$$

où Γ est la tension de surface (N.m^{-1}), ρ la masse volumique (kg.m^{-3}), g la gravité ($9,81 \text{ m.s}^{-2}$), d_e la mesure présentée précédemment et H un coefficient tabulé en fonction du rapport d_s/d_e (Stauffer, 1965).

Les mesures de tension de surface sont effectuées avec un appareil Digidrop de la société GBX (Figure 31).

Le polymère est inséré dans une seringue métallique chauffante contrôlée en température (Figure 31). La seringue est positionnée sur la chambre d'étude contrôlée elle aussi en température. Un piston permet alors d'exercer une pression sur le polymère fondu qui sort dans la chambre d'étude sous atmosphère contrôlée (Azote) en formant une goutte.

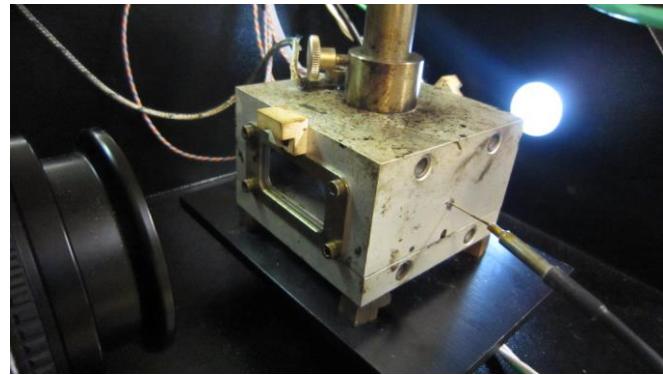


Figure 31 Chambre chauffante de l'appareil Digidrop

Un système optique permet de visualiser la goutte formée (Figure 32) et de mesurer les données nécessaires au calcul de la tension de surface.

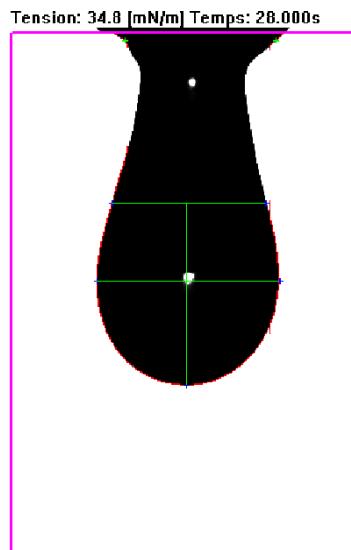


Figure 32 Visualisation de la goutte formée

Une seringue adaptée à nos matériaux a été fabriquée avec un diamètre de sortie de 500 µm de diamètre.

3.2 Valeurs usuelles de tension de surface

Aucune valeur de tension de surface des matériaux de la famille des polyéthercétones n'a été trouvée dans la littérature. Dans un premier temps, une revue de la littérature sur les ordres de grandeur de la tension de surface permet d'appréhender les valeurs qui devront être trouvées sur les matériaux du projet.

Moreira & Demarquette (2000) déterminent la tension de surface de différents matériaux en fonction de la température (Tableau 7) : Polystyrène (PS), Polypropylène isotactique (i-PP), Polyéthylène à basse densité linéaire (LLDPE).

Polystyrène		i-PP		LLDPE	
180°C	29-36 mN.m ⁻¹	180°C	24-26 mN.m ⁻¹	220°C	23 mN.m ⁻¹
200°C	26-35 mN.m ⁻¹	200°C	22-24 mN.m ⁻¹	240°C	21 mN.m ⁻¹
220°C	24-32 mN.m ⁻¹	220°C	20-21 mN.m ⁻¹	260°C	20 mN.m ⁻¹

Tableau 7 Valeurs usuelles de tension de surface (Moreira et al., 2000)

Demarquette et al. (2000) déterminent la tension de surface d'un Polyéthylène Basse densité (LDPE) à 100°C et à 150°C et trouvent respectivement 30 mN.m⁻¹ et 27 mN.m⁻¹.

Morais et al. (2006) étudient la tension de surface d'un Poly(vinyl butyral) entre 240°C et 260°C et montrent une évolution linéaire décroissante avec la température de 37 à 23 mN.m⁻¹.

Morita et al. (2002) analysent la tension de surface d'un Polypropylène (PP) à 240°C et déterminent une valeur de 19 mN.m⁻¹.

Ces valeurs sont confirmées dans l'ouvrage de Nwabunma & Kyu (2007) qui répertorie les valeurs de tension de surface de différents polymères à 20°C, 140°C et 180°C.

Enfin, Wei et al. (2010) proposent une formule analytique permettant de caractériser la tension de surface d'un Polyéthylène haute densité (PEHD) en fonction de la température et de la pression d'hydrogène (33).

$$\Gamma = 31,7534 - 0,04611 T - 0,00165 P \quad (33)$$

où Γ est la tension de surface (N.m⁻¹), T la température (°C) entre 125°C et 190°C et P la pression d'hydrogène (psi) entre 500 psi (34 Bar) et 1500 psi (103 Bar)

3.3 Analyse de la tension superficielle des matériaux

La méthode de la goutte pendante a été très difficile à mettre en œuvre sur nos matériaux (dégradation rapide à haute température, viscosité élevée, obstruction de la seringue). Nous avons donc dans un premier temps mis en place un protocole de mesure sur un PEHD dont les caractéristiques sont connues afin d'appliquer le même protocole à nos poudres. Nous avons alors mesuré la tension de surface d'un PEEK commercial, le PEEK Victrex 150 Xf, dont la viscosité a permis d'établir des mesures fiables. La tension de surface étant une propriété ne dépendant que de la nature chimique des matériaux étudiés, nous avons alors fait l'hypothèse que celle-ci était peu différente pour les matériaux A, B et le PEEK mesuré.

3.3.1 Mise en place d'un protocole de mesure sur le PEHD

Nous mesurons la tension de surface d'un PEHD en fonction de la température à la pression atmosphérique. Nous choisissons d'utiliser l'équation de Wei et al. (2010) et d'étendre sa validité initiale (500-1500 psi) à la pression atmosphérique (14.7 psi) (34).

$$\Gamma = 31,7534 - 0,04611 T - 0,024255 \quad (34)$$

Nous établissons un protocole expérimental permettant d'obtenir des valeurs de tension de surface à différentes températures. Partant de 220°C jusqu'à 130°C, la fiabilité des mesures augmente et nous passons de 15 mesures (220°C) à 3 mesures (130°C).

Lors de ces mesures, la difficulté est d'obtenir une goutte bien formée et en équilibre pendant le temps d'analyse. Il faut maîtriser le volume de la goutte en parallèle de l'établissement de sa forme sous l'action de la tension de surface. Trop peu de matériau induit un mouillage important de la seringue, une remontée du matériau sur celle-ci et cela augmente le diamètre supérieur de la goutte, ce qui conduit à une goutte finale trop grande pour l'analyse dans la machine Digidrop. Trop de matériau fait tomber la goutte rapidement sans qu'elle n'ait pu prendre une forme permettant une mesure fiable de la tension de surface.

En traçant (Figure 33) les résultats expérimentaux avec barres d'erreurs indiquant les valeurs extrêmes mesurées et la droite du modèle de Wei et al. (2010), nous pouvons confirmer la possibilité de mesurer correctement la tension de surface avec le protocole mis en place.

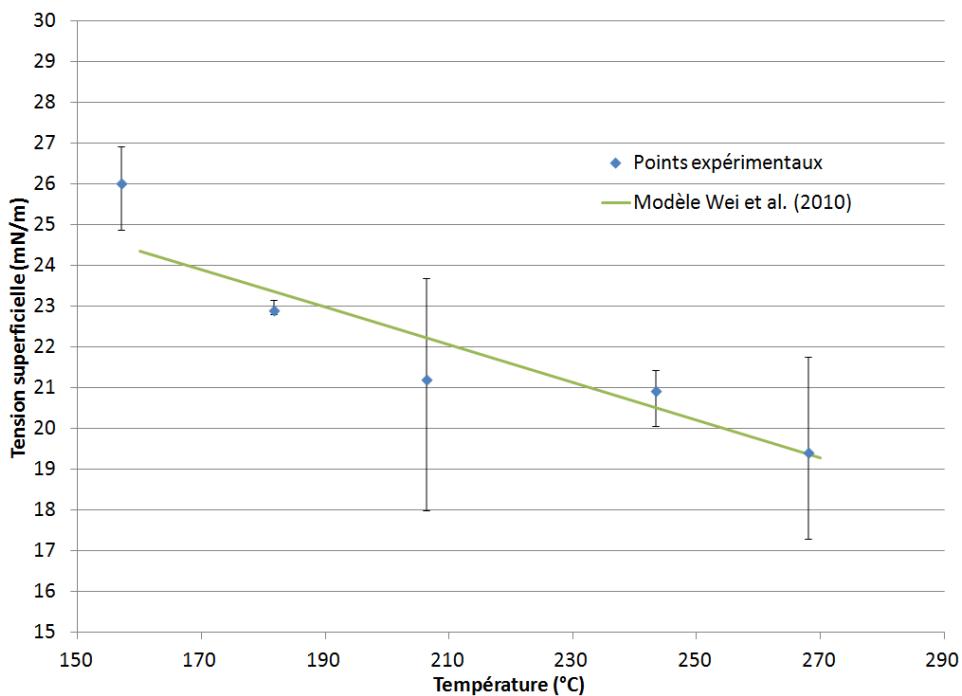


Figure 33 Mesures de la tension de surface du PE-HD et comparaison au modèle de Wei et al (2010)

3.3.2 Tension de surface du PA12

Le matériau usuellement utilisé en fabrication directe est le Polyamide 12 et nous avons mesuré à sept reprises sa tension de surface à 200°C (Tableau 8).

Moyenne	24 mN.m^{-1}
Ecart type	0,57

Tableau 8 Mesure de la tension de surface du PA12

La tension de surface du PA12 à 20°C au-dessus de sa température de fusion est donc de 24 mN.m⁻¹.

3.3.3 Mesure de la tension de surface d'un matériau PEEK

Le PEEK Victrex 150 Xf est une poudre de PEEK commerciale. Elle présente la particularité d'être faiblement visqueuse pour que les mesures de tension de surface soient possibles avec la machine Digidrop. Une analyse par DSC permet de déterminer la température de fusion de ce matériau : 346°C. Nous nous plaçons donc à une température de 367°C et dix mesures de la tension de surface du matériau sont réalisées (Tableau 9).

Moyenne	32,2 mN.m ⁻¹
Ecart type	2,47

Tableau 9 Mesure de la tension de surface du PEEK

Malgré l'aptitude de ce PEEK à être mis en œuvre dans la machine utilisée, la dispersion des mesures est importante. Nous pouvons établir la tension de surface moyenne à 32,2 mN.m⁻¹.

Nous n'avons pas trouvé d'influence significative de la température compte-tenu des dispersions de mesure.

Nous considérerons que les matériaux A et B ont donc une tension de surface fixe de 32,2 mN.m⁻¹.

4 Caractérisation granulométrique

La granulométrie des poudres est un des paramètres très importants du procédé. Le diamètre des grains influence en effet directement la cinétique de coalescence.

4.1 Méthodologie expérimentale

Nous sommes allés au laboratoire NAVIER UMR 8205 de l'École des Ponts à paris afin d'étudier les poudres du projet à l'aide de l'appareil de microtomographie X de la Fédération Francilienne de Mécanique.

Cette technique permet de réaliser des images représentant des coupes de l'échantillon. Elles sont obtenues en envoyant un faisceau X à travers un échantillon, puis en récupérant et en traitant le signal transmis d'un ensemble de clichés de l'échantillon obtenu par rotation de celui-ci sur 360°. Le logiciel de traitement permet de reconstruire l'échantillon en 3 dimensions à l'aide de voxels (3D), analogues aux pixels (2D). La meilleure résolution disponible sur la machine utilisée est 1 µm par voxel. La taille de la zone d'étude dépend de la résolution attendue. Un objet est correctement défini à partir de la donnée de 10 voxels dans les 3 directions de l'espace. Nos poudres possédant des grains allant jusqu'à 10 µm de diamètre en taille minimale, la résolution la plus fine de 1 µm par voxel permettra d'obtenir au moins 10 voxels par direction pour les plus petits grains. A cette résolution, une analyse prend en moyenne 6 h. Enfin, Le diamètre de la zone d'étude de la machine correspond à 1800 voxels, soit dans

le cas de notre analyse, un diamètre maximal de 1800 μm . La hauteur d'étude est de 1200 voxels, soit dans notre cas au maximum 1200 μm .

La figure 34 permet d'introduire les différents éléments constituant la machine: source de rayons X (cylindre jaune horizontal), capteur analysant le signal transmis (cylindre noir horizontal), plateau circulaire tournant et échantillon.

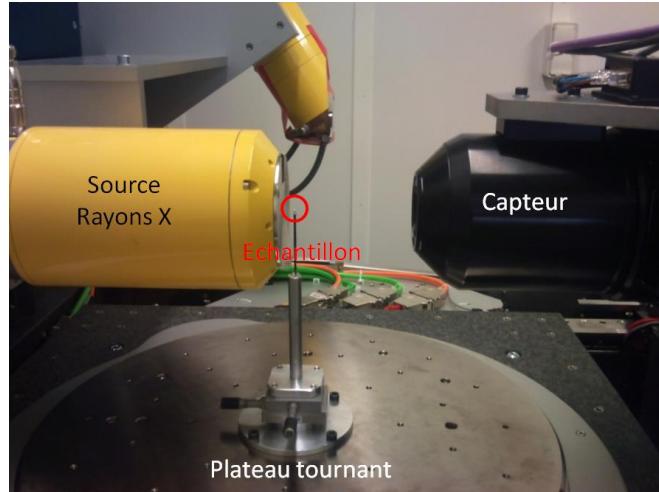


Figure 34 Éléments constituant le microtomographe

Nous avons fabriqué un support pour nos poudres. Le matériau choisi est le PMMA extrudé à 1.5 mm de diamètre dans lequel nous avons usiné un trou de 1 mm de diamètre (Figure 35). Le PMMA est un matériau plutôt transparent aux rayons X et permet de ne pas gêner les mesures au sein de la poudre.

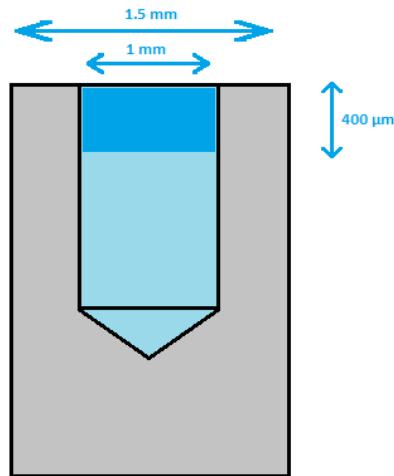


Figure 35 Support des poudres en PMMA

La zone en bleu foncé correspond à la zone qui sera analysée, d'un diamètre de 1000 μm sur une hauteur de 400 μm .

4.2 Caractérisation granulométrique des matériaux

4.2.1 Granulométrie du matériau A

4.2.1.a Analyse de granulométrie préliminaire

Dans un premier temps, nous disposons de l'analyse granulométrique du matériau A (Figure 36) réalisée dans le cadre du projet FADIPLAST par Emmanuel Dumoulin, du Centre des Matériaux.

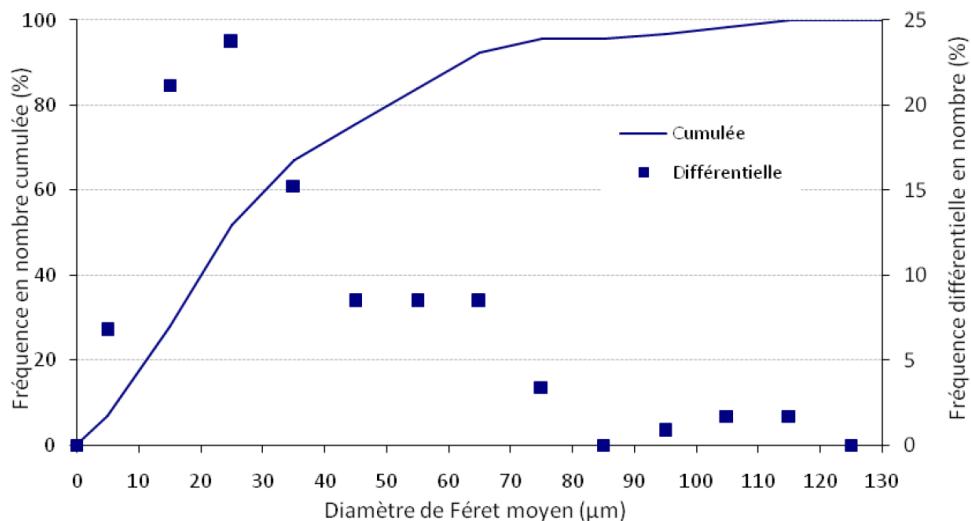


Figure 36 Granulométrie en nombre de particules du matériau A
(Emmanuel Dumoulin - FADIPLAST)

Cette analyse permet de connaître les diamètres des grains et de choisir les conditions de mise en œuvre des mesures en microtomographie (résolution).

Les résultats sont exprimés pour trois valeurs d₁₀, d₅₀ et d₉₀. La valeur en µm pour un d_X quelconque est telle que X % des particules ont un diamètre inférieur à la valeur donnée. Le complément (100-X) représente les particules ayant un diamètre plus grand. Le tableau 10 présente les résultats pour le matériau A.

d ₁₀	d ₅₀	d ₉₀
7 µm	24 µm	62 µm

Tableau 10 Granulométrie cumulée du matériau A

4.2.1.b Microtomographie de la poudre de matériau A

La poudre du matériau A a été placée dans le support en PMMA sans être tassée, afin de remplir la cavité. L'analyse par microtomographie de cette poudre nous a permis d'obtenir un grand nombre de clichés en coupe verticale de la poudre (Figure 37).

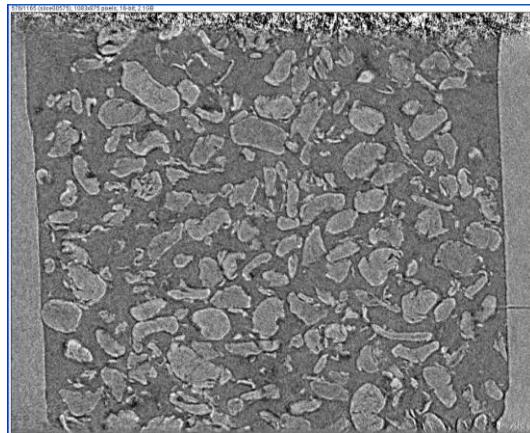


Figure 37 Cliché en microtomographie de la poudre du matériau A
Coupe verticale du cylindre en PMMA au diamètre maximal de 1200 μm

Ces clichés serviront de base pour la création du maillage initial du matériau A pour les simulations.

4.2.2 Granulométrie du matériau B

4.2.2.a Analyse de granulométrie préliminaire

Comme pour le matériau A, nous disposons de l'analyse granulométrique du matériau B (Figure 38) réalisée dans le cadre du projet FADIPLAST par Emmanuel Dumoulin.

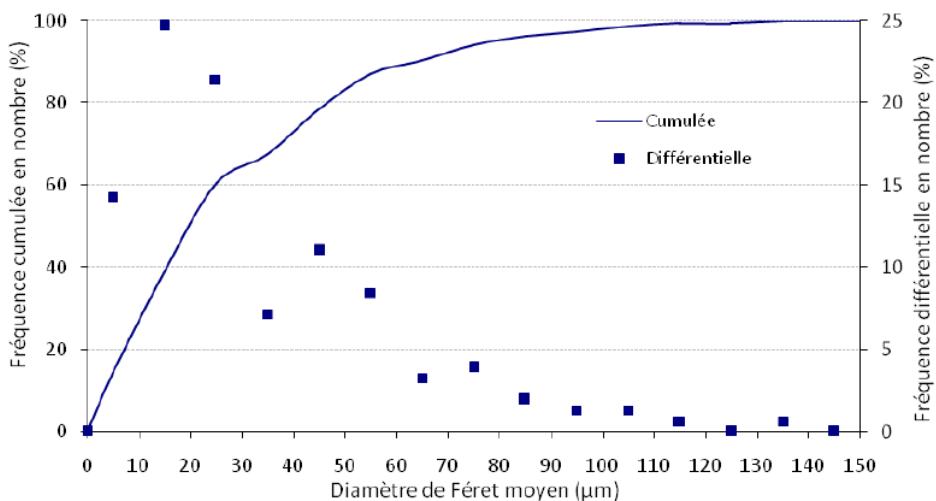


Figure 38 Granulométrie en nombre de particules du matériau B
(Emmanuel Dumoulin - FADIPLAST)

Le tableau 11 présente un récapitulatif des résultats pour le matériau B.

d10	d50	d90
3 μm	20 μm	64 μm

Tableau 11 Granulométrie cumulée du matériau B

4.2.2.b Microtomographie de la poudre de matériau B

Une coupe caractéristique de la poudre du matériau B est donnée en figure 39.

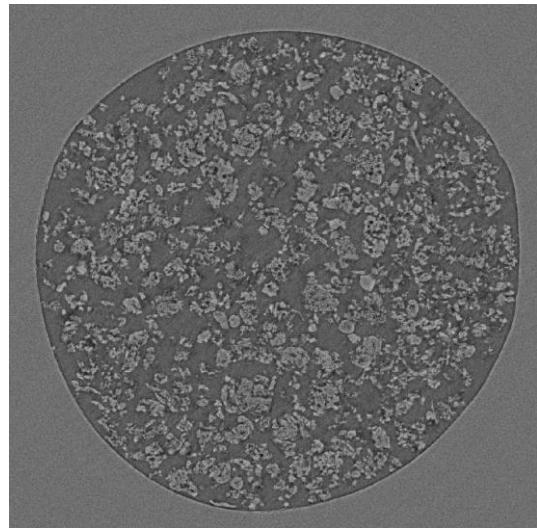


Figure 39 Cliché en microtomographie de la poudre du matériau B

Coupe horizontale du cylindre en PMMA de diamètre 1200 µm

5 Absorptivité du rayonnement laser

L'absorptivité du rayonnement des matériaux conditionne la fusion de la poudre, et donc tous les phénomènes conduisant à la fabrication des pièces. Il faut donc caractériser l'aptitude de la matière à absorber l'énergie apportée par le laser dans la profondeur du lit de poudre.

5.1 Méthodologie expérimentale

Le banc d'essai développé au laboratoire PIMM (Figure 40) dans le cadre du projet FADIPLAST est utilisé afin de mesurer l'absorptivité des poudres du projet.



Figure 40 Banc d'essai de fusion laser sélective développé au PIMM

Ce banc d'essai est équipé des mêmes éléments que les machines de fabrication directe industrielles (Figure 41). On y trouve une source laser CO₂ de puissance maximale 55 W, modulable par variation de la durée d'impulsion à 5 kHz. Un agrandisseur, une tête galvanométrique et une lentille f-theta de focale 230 mm permettent de déplacer le faisceau focalisé sur la zone de fabrication. Un bac d'alimentation et un bac de fabrication sont préchauffés par des résistances situées sous les plateaux. La zone de fabrication est surmontée de chauffages radiants infrarouges de longueur d'onde λ supérieure à 1,3 µm, choix réalisé à l'aide de mesures par spectrophotométrie infrarouge. Un racleur non présent sur la figure 41 permet l'étalement des différentes couches. Différents diagnostics de mesure sont ajoutés (caméra thermique FLIR SC4000, thermocouples, caméra rapide). Enfin, un ordinateur permet de contrôler les différents éléments sous Labview.

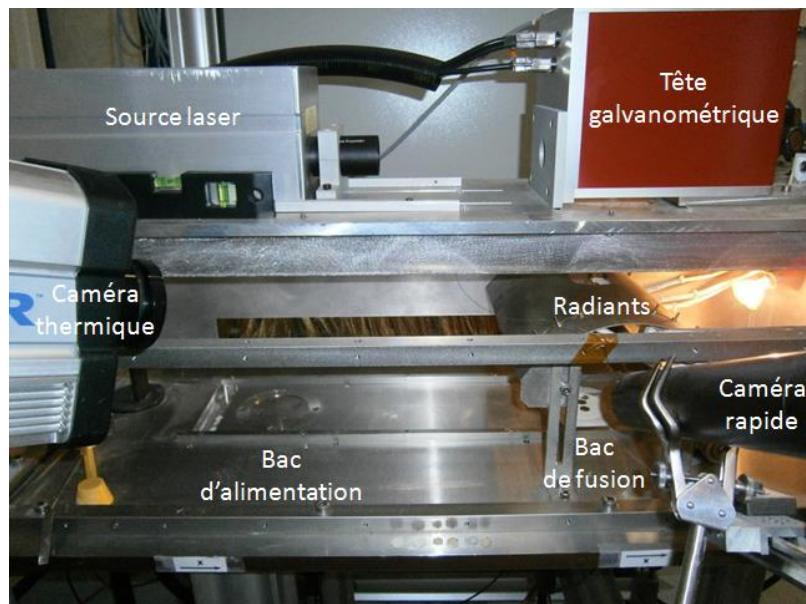


Figure 41 Éléments constituant le banc de fusion laser du PIMM

Nous souhaitons déterminer l'absorptivité des poudres au rayonnement laser CO₂. Pour cela, nous avons choisi de mesurer la quantité de puissance transmise à travers différentes couches de poudre d'épaisseurs données pour une puissance laser fixe de 1,71 W.

Nous avons donc créé un support cylindrique creux en son centre (Figure 42a et Figure 43) permettant de maîtriser l'épaisseur de poudre présente et de laisser passer la puissance non absorbée par la poudre afin de la mesurer à l'aide d'un calorimètre (Figure 42 a et b). Le laser est non focalisé afin d'utiliser une puissance laser la plus importante possible avec une densité d'énergie la plus faible possible pour ne pas fondre la poudre et obtenir pour une meilleure précision.

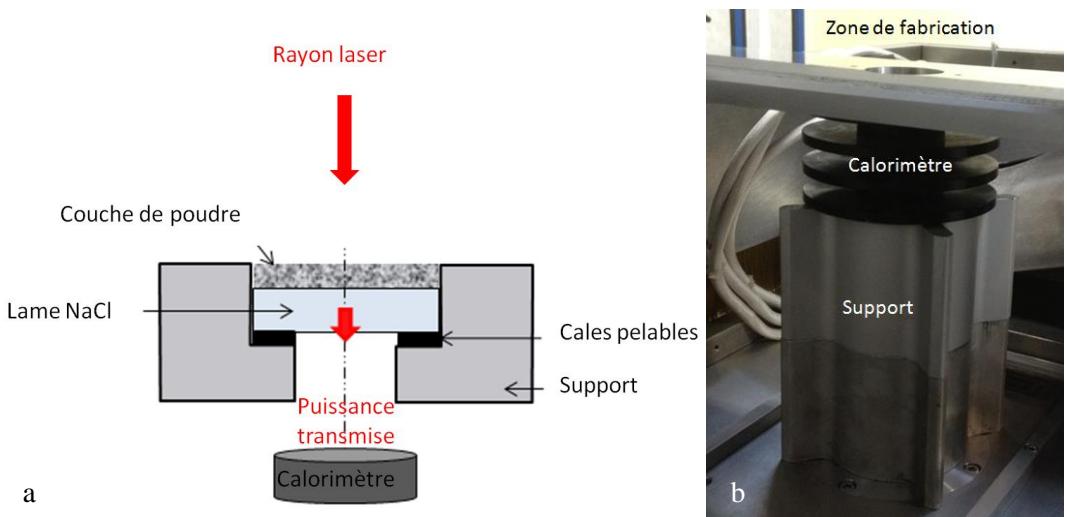


Figure 42 a) Schéma du montage expérimental pour la mesure de transmission b) Montage du calorimètre sous la zone de fabrication

La poudre est supportée par une lame NaCl non absorbante à la longueur d'onde du laser ($10.6 \mu\text{m}$). Des cales pelables par couches de $25 \mu\text{m}$ permettent de maîtriser l'épaisseur de poudre obtenue pour chaque mesure. Nous avons réalisé 3 ensembles cale/lame NaCl afin de réaliser des épaisseurs de couches de $200 \mu\text{m}$, $300 \mu\text{m}$ et $400 \mu\text{m}$. Un étalement permettant des mesures fiables pour des couches d'épaisseurs inférieures à $200 \mu\text{m}$ est irréalisable du fait de l'état de surface très lisses des lames NaCl sur lequel la poudre n'adhère pas. Au-delà de $500 \mu\text{m}$, les mesures sont trop faibles pour être précises, l'augmentation de la puissance laser induisant la fusion de la poudre.



Figure 43 Exemple d'un étalement de poudre pour une mesure d'absorption

La figure 43 présente un étalement de poudre permettant de déterminer la puissance transmise à travers une épaisseur de poudre donnée. Dans la mesure du possible, nous avons essayé d'étaler les poudres comme cela est fait lors de la fabrication, à l'aide d'un rouleau/racleur. Aucun tassemement volontaire n'est exercé.

Dans la suite du projet, nous aurons également besoin de l'absorptivité des matériaux du projet à leur état dense afin d'entrer ces valeurs dans le modèle laser tenant compte des cavités comme non

absorbantes, invisibles au rayonnement laser. Les poudres du projet n'étant pas disponibles à l'état de feuilles minces nous avons mesuré l'absorptivité du rayonnement sur des feuilles de PEEK d'épaisseurs 25 µm, 100 µm, 200 µm et 400 µm, puis nous l'avons comparé à deux poudres de PEEK différentes, le PEEK Victrex 150 Xf et le PEEK Victrex 450 Xf dont les propriétés d'absorption sont équivalentes, mais qui présentent des compactations différentes. Nous définissons la compaction C comme le rapport de la masse volumique de la poudre sur la masse volumique du matériau dense :

$$C = \frac{\rho^{Poudre}}{\rho^{Dense}} \quad (35)$$

où ρ^{Poudre} est la masse volumique de la poudre (kg.m^{-3}) et ρ^{Dense} celle du matériau dense (kg.m^{-3})

Nous pourrons ainsi relier l'absorptivité à la compaction des poudres. Dans un second temps, nous mesurerons l'absorptivité des poudres des matériaux A et B, puis nous déduirons de la connaissance de leur compaction, l'absorptivité équivalente du matériau dense.

Pour réaliser ces travaux, nous disposons de l'analyse des masses volumiques à température ambiante des matériaux réalisée dans le cadre du projet (Tableau 12).

Donnée	PEEK Victrex 150	PEEK Victrex 450	Matériau A	Matériau B
Masse Volumique kg.m^{-3}	1330	1327	1296	1312

Tableau 12 Masses volumiques des matériaux

5.2 Absorptivité laser des matériaux

Nous allons mesurer différentes absorptions, et nous proposerons un modèle de type Beer-Lambert (36) pour modéliser la puissance transmise P en profondeur.

$$P(p) = P_0 e^{-\alpha p} \quad (36)$$

où P_0 est la puissance laser apportée (W), p la profondeur (m) et α le coefficient d'absorptivité (m^{-1})

5.2.1 Absorptivité du PEEK : état dense et poudre

Nous mesurons la puissance transmise à travers les feuilles de PEEK Victrex d'épaisseurs 25 µm, 100 µm, 200 µm et 400 µm, et mesurons l'énergie transmise à travers les poudres de PEEK Victrex 150 Xf et 450 Xf pour des épaisseurs de 200 µm, 300 µm et 400 µm. Les résultats sont présentés dans le tableau 13. L'énergie laser apportée est de 0,46 W afin de ne pas fondre les feuilles de PEKK. Les poudres des matériaux A et B seront mesurées avec une énergie laser plus importante (1,71 W). Nous rapportons donc nos mesures à une puissance laser de 1,71 W par une règle de proportionnalité.

Épaisseur de poudre	PEEK Victrex dense	PEEK Victrex 150 Xf Poudre	PEEK Victrex 450 Xf Poudre
0 µm	1,71 W	1,71 W	1,71 W
25 µm	0,46 W	---	---
100 µm	0,2 W	---	---
200 µm	0,03 W	0,07 W	0,18 W
300 µm	---	0,025 W	0,09 W
400 µm	0,01 W	0 W	0,03 W

Tableau 13 Absorption du matériau PEEK Victrex dense et en poudre

Le tableau 14 donne les coefficients d'absorptivité déterminés afin de représenter au mieux les données expérimentales à l'aide d'un modèle de Beer-Lambert.

Donnée	PEEK Victrex dense	PEEK Victrex 150 Xf Poudre	PEEK Victrex 450 Xf Poudre
Absorptivité	20000 m ⁻¹	15000 m ⁻¹	13000 m ⁻¹

Tableau 14 Coefficient d'absorptivité du modèle de Beer-Lambert

Ces résultats sont représentés sous forme graphique (Figure 44).

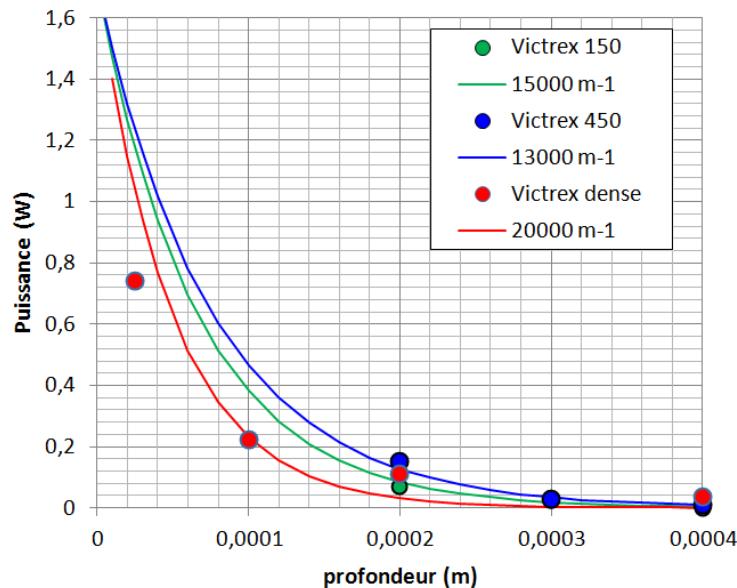


Figure 44 Mesures de transmission du faisceau laser à travers le PEEK dense et en poudre

Les caractéristiques chimiques de ces trois matériaux étant identiques, les trois lois d'absorption diffèrent du fait de leurs compactations différentes. Nous mesurons donc la compaction de chacune des poudres utilisées (Tableau 15).

Donnée	PEEK 150	PEEK 450
Volume (cm ³)	25	25
Masse (g)	7,17	8,59
Masse volumique Poudre (kg.m ⁻³)	287	344
Masse volumique matériaux (kg.m ⁻³)	1330	1327
Compaction	0,217	0,259

Tableau 15 Compaction des poudres

$$P^{PEEK}_{C=1}(p) = P_0 e^{-20000p} \quad (37)$$

Nous avons ensuite proposé un modèle pour la loi d'absorption des deux poudres PEEK basé sur le modèle du PEEK dense (37), et dépendant de leur compaction C.

$$P^{PEEK}_C(p) = P_0 e^{-Cap} \quad (38)$$

où C est la compaction de la poudre étudiée

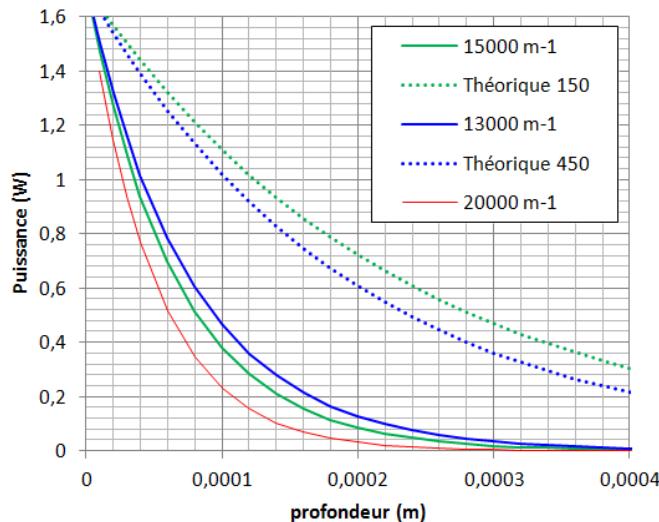


Figure 45 Modèles d'absorption des poudres avec une dépendance unique à la compaction

Nous remarquons (Figure 45) que l'hypothèse d'une dépendance de la transmission du rayonnement uniquement avec la compaction C donne des résultats très éloignés de la réalité, et que la transmission du rayonnement semble plus importante pour la compacité la plus élevée. De plus, la poudre absorbe ou diffuse de manière bien plus importante l'énergie du laser que ne le prévoit le modèle.

L'origine de cette différence peut venir de l'influence de la granulométrie et des états de surface de la poudre, qui peuvent avoir un effet important sur l'interaction laser-poudre compte-tenu de la proximité entre la longueur d'onde du laser (10.6 μm) et la taille des grains. Nous sommes en effet dans le cadre de la diffusion de Mie, les rapports entre les rayons des particules et la longueur d'onde du laser variant de 1 à 5 environ.

Une seconde hypothèse peut concerner l'état cristallin de la poudre, bien différent de l'état cristallin du matériau dense.

Nous proposons donc d'ajouter au modèle d'absorption du PEEK Victrex dense (37) un coefficient k de correction du coefficient d'absorption (39) :

$$P^{PEEK} c(p) = P_0 e^{-k C \alpha p} \quad (39)$$

où C est la compaction de la poudre étudiée

Nous avons donc identifié un coefficient de correction k pour les deux poudres afin de mieux représenter les lois de Beer-Lambert expérimentales (Tableau 16). Les résultats obtenus avec les coefficients correctifs sont présentés en figure 46. Globalement le coefficient k est proche de 3, avec une forte incertitude.

Poudre	Compaction C	Facteur de correction k	Facteur multiplicatif de l'absorption du matériau dense
PEEK 150	0,216	3,5	0,755
PEEK 450	0,245	2,5	0,648

Tableau 16 Facteur multiplicatif de l'absorption du matériau dense

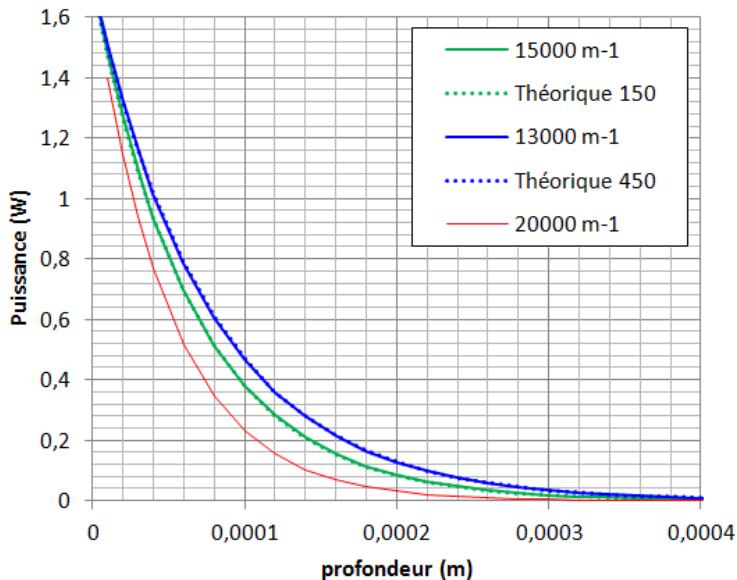


Figure 46 Correction des coefficients appliqués à la loi de Beer-Lambert du matériau dense

Un travail complémentaire pourrait être effectué afin d'expliquer et de prédire ces coefficients, en particulier en s'intéressant à la diffusion de Mie (1908).

Les travaux de Stout et al. (2003), Jarrige et al. (2011) et Jarrige (2012) utilisant l'équation de transfert radiatif (ETR) pourraient permettre de caractériser l'influence de la géométrie des grains sur l'absorption de nos poudres sous rayonnement laser. Pour utiliser ce modèle, il serait nécessaire de déterminer l'indice optique complexe des matériaux utilisés (40).

$$\tilde{n} = n + ik \quad (40)$$

où n est l'indice de réfraction du matériau (rapport de la célérité de l'onde sur la célérité de la lumière) et k est lié à l'absorption de la matière

Une analyse locale fine des phénomènes de réflexion, réfraction et diffraction à la longueur d'onde du laser utilisé pourrait être menée à l'aide de la méthode « Ray tracing » (Bordival et al., 2010 – Cosson et al., 2011).

5.2.2 Absorptivité du matériau A

Nous étudions la poudre du matériau A et obtenons la puissance transmise en fonction de l'épaisseur de poudre (Figure 47). Nous traçons en parallèle le modèle de Beer-Lambert passant au mieux par les mesures expérimentales.

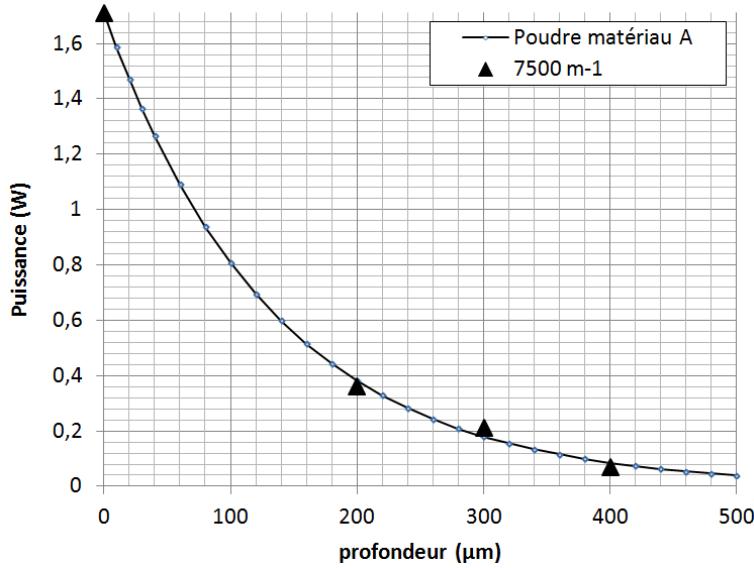


Figure 47 Mesure de la puissance transmise de la poudre du matériau A

Le coefficient d'absorption du modèle de Beer-Lambert de la poudre du matériau A vaut 7500 m^{-1} (41), correspondant à une longueur caractéristique d'absorption $1/\alpha$ de 133 μm .

$$P_{Poudre\ A}(p) = 1,71e^{-7500p} \quad (41)$$

Donnée	Poudre du matériau A
Volume (cm^3)	25
Masse (g)	8,47
Masse volumique poudre (kg.m^{-3})	338,8
Masse volumique matériau (kg.m^{-3})	1296
Compaction C^A	0,261

Tableau 17 Compaction de la poudre du matériau A

Connaissant la compaction de la poudre du matériau A (Tableau 17) et considérant que le coefficient de correction de l'absorption k vaut $3 +/- 0,5$ comme pour le PEEK Victrex, nous en déduisons le coefficient d'absorption équivalent du matériau dense A (42).

$$\begin{aligned}
P^A(p) &= 1,71e^{-7500p} = 1,71 \\
kC^A\alpha^A &= 7500 \\
\alpha^A &= \frac{7500}{kC^A} = \frac{7500}{3 * 0,261} = 9579 \text{ m}^{-1}
\end{aligned} \tag{42}$$

L'absorptivité du matériau dense A est donc considérée égale à 9579 m^{-1} et l'absorptivité du matériau Poudre A vaut 7500 m^{-1} .

5.2.3 Absorptivité du matériau B

De la même façon, nous étudions la poudre du matériau B et obtenons la puissance transmise en fonction de l'épaisseur de poudre (Figure 47).

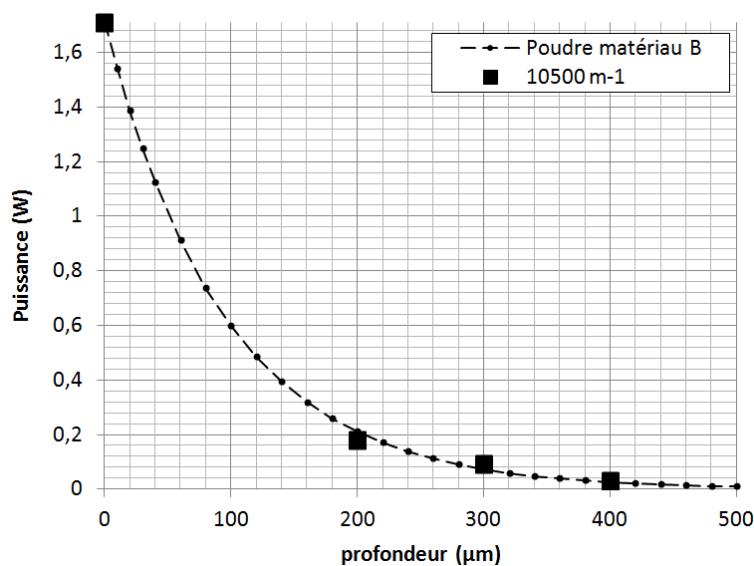


Figure 48 Mesure de la puissance transmise de la poudre du matériau B

Le coefficient d'absorption du modèle de Beer-Lambert correspondant à la poudre du matériau B vaut alors 10500 m^{-1} (43), correspondant à une longueur caractéristique d'absorption $1/\alpha$ de $95 \mu\text{m}$.

$$P^{Poudre B}(p) = 1,71e^{-10500p} \tag{43}$$

Donnée	Poudre du Matériaux B
Volume (cm ³)	25
Masse (g)	8,043
Masse volumique poudre (kg.m ⁻³)	321,72
Masse volumique matériau (kg.m ⁻³)	1312
Compaction C^B	0,245

Tableau 18 Compaction de la poudre du matériau B

Comme pour la poudre A, à l'aide des données de la poudre B (Tableau 18), nous en déduisons le coefficient d'absorption équivalent du matériau dense B (44).

$$\begin{aligned}
 P^B(p) &= 1,71e^{-10500p} = 1,71 \\
 kC^B\alpha^B &= 10500 \\
 \alpha^B &= \frac{10500}{kC^B} = \frac{10500}{3 * 0,245} = 14286 \text{ m}^{-1}
 \end{aligned} \tag{44}$$

L'absorptivité du matériau dense B est donc considérée égale à 14286 m⁻¹ et l'absorptivité du matériau Poudre B vaut 10500 m⁻¹.

5.2.4 Conclusion

Même si les mesures de puissances transmises sont délicates, elles permettent, sur des films de matériaux denses, de déterminer un coefficient d'extinction de la matière dense. Cependant, ces mesures négligent les différentes réflexions ou diffusions pouvant intervenir au sein même de la plaque.

Les mesures réalisées sur les poudres sont également très difficiles en raison des faibles épaisseurs concernées, et de la nécessité de ne pas fondre la matière au cours de l'essai.

Toutefois, il a été possible de déterminer les coefficients d'extinction pour les deux poudres du projet éclairées par un rayonnement à $\lambda = 10.6 \mu\text{m}$.

La déduction de coefficients d'extinction sur le matériau dense des poudres mesurées ne peut pas être réalisée sans considérer la géométrie de la poudre. En effet, les ordres de grandeur de la longueur d'onde et des tailles de grains nous placent dans le cadre de la diffusion de Mie. De futurs travaux pourraient permettre de tenir compte de cet effet.

Pour ces raisons, il n'a donc pas été possible de déterminer un coefficient d'extinction des matériaux denses, puis d'envisager de considérer uniquement l'influence des porosités comme non absorbantes dans les simulations. Dans notre étude, les coefficients utilisés pour simuler le dépôt de puissance laser en volume seront donc les coefficients mesurés directement sur les poudres.

CHAPITRE III - DÉVELOPPEMENT DES MODÈLES NUMÉRIQUES DE SIMULATION

Deux échelles de simulations sont présentées :

- A l'échelle microscopique, la fusion de la poudre par laser, la coalescence, la densification et le soudage des grains sont décrits à l'aide d'un logiciel de calcul développé sous Matlab
- L'étalement de la couche de poudre induisant un refroidissement local de la matière fondue sur la couche précédente qui peut la faire cristalliser et empêcher la densification, cet effet est également modélisé et étudié à une échelle macroscopique à l'aide du logiciel éléments finis commercial COMSOL.

1 Développement du modèle microscopique : fusion laser de la matière

1.1 Principes physiques à modéliser

Différents mécanismes sont à prendre en compte afin de modéliser le procédé à l'échelle microscopique. Il faut donc : (1) considérer l'écoulement hydrodynamique d'un fluide sous l'action de la tension de surface, (2) modéliser l'interaction laser matière et la thermique correspondante et (3) modéliser le phénomène de soudage de la matière afin d'en déduire l'état final de la matière.

Les équations décrivant ces phénomènes sont introduites ou rappelées ci-après. Elles sont la base des travaux numériques qui suivent. La modélisation du procédé se fera en 2 dimensions afin d'en diminuer à la fois la complexité et les temps de calcul induits. C'est évidemment une hypothèse forte, mais cela permettra de mettre en place les bases d'une possible évolution vers la 3D. Ainsi nous n'aborderons pas le phénomène de diffusion de l'air emprisonné dans les cavités.

1.1.1 Hydrodynamique

1.1.1.a Le fluide

Après fusion, compte tenu des faibles vitesses de déformation, le polymère est considéré comme un fluide Newtonien incompressible. Différentes analyses du comportement du fluide (CHAPITRE I .3.1.3.c) permettent de montrer que le phénomène viscoélastique a lieu au départ de la coalescence, pendant des instants très courts, et à des températures où les matériaux sont assez visqueux. Nous faisons l'hypothèse que les temps caractéristiques d'action de l'élasticité sont petits face aux phénomènes étudiés du fait d'un échauffement très important après passage laser.

La dynamique du polymère fondu peut donc être représentée à l'aide des équations d'équilibre locales (45) pour un fluide incompressible dans le cas des déformations planes.

$$\begin{cases} \underline{\underline{\sigma}} + \underline{\underline{f_d}} = \rho \underline{\underline{\gamma}} \\ \text{div}(\underline{\underline{V}}) = 0 \end{cases} \quad (45)$$

où $\underline{\underline{\sigma}}$ (46) est le tenseur des contraintes (Pa), $\underline{\underline{f_d}}$ les efforts volumiques internes (N.m^{-3}), ρ la masse volumique du fluide (Kg.m^{-3}), $\underline{\underline{\gamma}}$ l'accélération (m.s^{-2}) et $\underline{\underline{V}}$ est le champ de vitesse (m.s^{-1}), avec pour loi de comportement :

$$\underline{\underline{\sigma}} = -p \underline{\underline{I}} + 2\eta \underline{\underline{D}} \quad (46)$$

où p la pression du fluide (Pa), $\underline{\underline{I}}$ le tenseur identité, η sa viscosité (Pa.s) et $\underline{\underline{D}}$ (47) le tenseur des déformations (s^{-1}), qui s'écrit en deux dimensions (déformations planes):

$$\underline{\underline{D}} = \frac{1}{2} (\underline{\underline{\text{grad}}(\underline{\underline{V}})} + \underline{\underline{\text{grad}}(\underline{\underline{V}})^T}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \\ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) & \frac{\partial v}{\partial y} \end{pmatrix} \quad (47)$$

où u est la composante de $\underline{\underline{V}}$ suivant x (m.s^{-1}) et v sa composante suivant y (m.s^{-1})

L'analyse du nombre de Reynolds (48) pour les écoulements fluides nous permet de négliger les termes d'inertie (Tableau 19).

$$R_e = \frac{\rho U L}{\eta} \quad (48)$$

où U est la vitesse du fluide (vitesse maximale au niveau du raccord entre grains) et L la dimension caractéristique du problème (taille des grains).

Variable	Ordre de grandeur
ρ	1300 Kg.m^{-3}
U	$5,10^4 \text{ m.s}^{-1}$
L	$25,10^{-6} \text{ m}$
η	10^2 Pa.s
R_e	$1,5.10^7$

Tableau 19 Détermination du nombre de Reynolds des écoulements simulés

La valeur de la vitesse maximale U a été estimée à priori puis confirmée à l'aide des simulations de coalescence (CHAPITRE IV .1.2.6.a). La dimension caractéristique est supposée être proche du rayon des grains de poudre, soit environ $25 \mu\text{m}$ en moyenne. La viscosité est choisie dans la gamme basse des viscosités de nos polymères.

Les équations locales d'équilibre sont donc simplifiées (49).

$$\begin{cases} \operatorname{div} \underline{\sigma} + \underline{f}_d = 0 \\ \operatorname{div}(\underline{V}) = 0 \end{cases} \quad (49)$$

1.1.1.b La tension de surface

La tension de surface est une force par unité de longueur (N.m^{-1}) qui s'exerce en tout point de l'interface dans le plan tangent. Elle induit une différence de pression entre les deux volumes délimités par l'interface, inversement proportionnelle aux rayons de courbures principaux au point étudié, qui est décrite par l'équation de Young-Laplace (50).

$$\Delta P = \Gamma \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) \quad (50)$$

où ΔP est la différence de pression extérieure/intérieure (Pa), Γ la tension de surface (N.m^{-1}), R_1 et R_2 les rayons de courbure principaux au point considéré.

Dans le cas d'une étude plane, cette expression se simplifie et devient :

$$\Delta P = \frac{\Gamma}{R} \quad (51)$$

En isolant un élément d'interface d'angle θ (θ très petit, l'interface peut être représentée par un arc de cercle) à l'équilibre (Figure 49), la résultante de pression issue de la différence de pression \vec{F}_p suivant l'axe \vec{e}_r (52) est équilibrée par les deux actions de la tension de surface \vec{F}_T dont la résultante est aussi portée par \vec{e}_r (53). Nous souhaitons donc déterminer l'action équivalente aux deux actions de tension de surface au point A afin de savoir comment l'introduire dans les calculs.

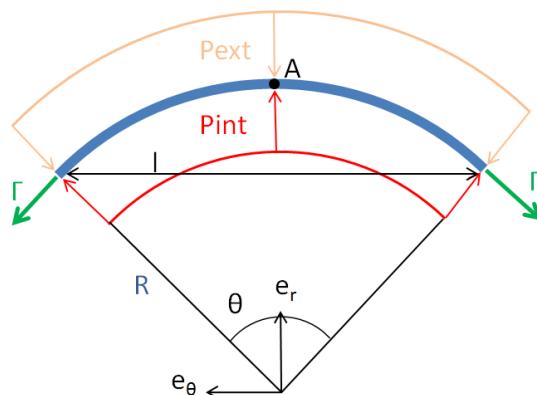


Figure 49 Isolement d'une partie d'interface sous l'action de la tension de surface

$$\vec{F}_p = Ll(P_{int} - P_{ext})\vec{e}_r \quad (52)$$

où L est la longueur suivant z

$$\vec{F}_T = 2\Gamma \sin(\theta) L \vec{e}_r = 2\Gamma \frac{1}{2R} L \vec{e}_r = \frac{\Gamma}{R} l L \vec{e}_r \quad (53)$$

Notons qu'en égalisant ces deux forces, on retrouve, dans le cas plan, la relation de Young-Laplace (54).

$$\vec{F}_T = \vec{F}_p \Leftrightarrow (P_{int} - P_{ext}) = \frac{\Gamma}{R} \quad (54)$$

L'action de la tension de surface peut donc être représentée par une pression valant $\frac{\Gamma}{R}$ suivant la normale à l'interface (61).

$$\vec{F}_T = \frac{\Gamma}{R} l L \vec{e} r = \int_S \frac{\Gamma}{R} \vec{n} ds \quad (55)$$

1.1.2 Thermique

1.1.2.a Thermique de la matière

La température du polymère fondu obéit à l'équation de la chaleur en conditions instationnaires (56).

$$\lambda \Delta T + q = \rho c \frac{dT}{dt} \quad (56)$$

où λ est la conductivité thermique ($\text{W.m}^{-1}\text{.K}^{-1}$), T la température (K), ρ la masse volumique (Kg.m^{-3}), c la chaleur spécifique massique ($\text{J.Kg}^{-1}\text{.K}^{-1}$), q la puissance produite au sein du matériau (W.m^{-3}) et Δ l'opérateur Laplacien

Les conditions aux limites sont de deux types, des températures (Dirichlet) ou des flux imposés (Neumann). Dans le cas de flux, la relation entre flux et température est donnée (57).

$$\varphi = -\lambda \nabla T \quad (57)$$

où φ est le flux de chaleur (W.m^{-2})

1.1.2.b Interaction laser matière

L'interaction laser matière a été étudiée précédemment (CHAPITRE I .2.2.2.b). Nous mêlons une représentation Gaussienne en surface et la représentation de type Beer-Lambert en profondeur (58). Le terme k est ajouté au modèle de la littérature du fait de la répartition en profondeur du type Beer-Lambert.

$$I(r, w) = (1 - R_e) k I_0 e^{-\frac{2r^2}{w^2}} e^{-kp} \quad (58)$$

où I est la puissance volumique injectée (W.m^{-2}), R_e la réflectivité laser, w le rayon caractéristique (m), I_0 l'intensité maximale du rayon laser (W.m^{-2}), r la distance à l'axe du rayon laser mobile (m), k le coefficient d'extinction (m^{-1}) et p la profondeur dans le matériau (m).

1.1.2.c Volume des cavités fermées

Lorsque la pression sera considérée, les cavités fermées verront leur pression reliée à leur volume et leur température, via la loi des gaz parfaits (59).

$$PV = nRT \quad (59)$$

où P est la pression de l'air (Pa), V le volume de la cavité (m^3), n le nombre de moles de gaz, R la constante des gaz parfaits ($8.314 \text{ J.mol}^{-1}\text{.K}^{-1}$) et T la température (K).

1.1.3 Analyse du procédé : le soudage

Le soudage a été étudié au premier chapitre (CHAPITRE I .2.2.3.c) et le modèle permettant de le quantifier à l'aide d'une variable S ($S = 0$: aucun soudage ; $0 < S < 1$: soudage incomplet ; $S \geq 1$ soudage complet) est rappelé ci-dessous :

$$S = \int_{T_f}^{T_c} \frac{1}{t_r(T)} dt \quad (60)$$

où $t_r(T) = Ae^{\frac{E}{RT}}$

1.2 Choix de la méthode numérique

De nos jours, une multitude de méthodes numériques sont disponibles, avec divers avantages et inconvénients. Nous allons proposer un petit aperçu des méthodes disponibles et présenter la méthode choisie.

1.2.1 Méthodes disponibles

La méthode des éléments finis est un bon candidat pour nos travaux. Cependant, la présence de grandes déformations dans les simulations à réaliser nécessite la mise en œuvre d'une méthode de remaillage. Les travaux de Zhou & Derby (2001) donnent un aperçu des difficultés rencontrées avec ce type de méthodes.

Les travaux de Vigneaux (2007) permettent de faire un point sur diverses méthodes numériques pour la simulation de fluides. L'auteur a choisi d'implémenter la méthode Level Set. Cette méthode utilise une fonction φ égale à la distance en tous points de l'interface, avec $\varphi = 0$ à l'interface, et $\varphi < 0$ ou $\varphi > 0$ de part et d'autre de celle-ci. La collision d'interfaces et leur fusion est aussi très simplement prise en compte. Ainsi, cette méthode est particulièrement adaptée pour décrire l'évolution des interfaces locales, comme dans le cas de la coalescence de grains. Cette fonction est portée par le fluide et il faut donc résoudre une équation de transport (61).

$$\frac{\partial \varphi^{LS}}{\partial t} + \underline{V} \cdot \underline{\text{grad}} \varphi^{LS} = 0 \quad (61)$$

Ce transport déforme la fonction distance (Tanguy, 2004). Son gradient évolue et ne reste alors pas à une valeur unitaire. Pour avoir de bonnes propriétés géométriques, il faut donc créer des méthodes visant à modifier la fonction φ de manière à retrouver les propriétés de distance algébrique. Une méthode consiste ainsi à résoudre un algorithme de réinitialisation (Sussman et Fatemi., 1999). C'est ici que la méthode a un coût de mise en œuvre important.

La méthode Level Set demande donc de résoudre les équations de l'hydrodynamique, l'équation de transport de la fonction et un algorithme de réinitialisation. Un inconvénient de la méthode Level Set est la non conservation de la masse.

La méthode VOF (Volume Of Fluid) est une méthode qui peut aussi être utilisée pour la simulation d'écoulements fluides, mais la bonne définition géométrique de l'interface peut être plus hasardeuse.

Pourtant, c'est là que le travail est le plus important pour une bonne prise en compte de la tension de surface.

Ces méthodes et d'autres, la méthode des éléments de frontière en particulier, ont été étudiées afin de voir si leur mise en œuvre était envisageable dans le cadre de nos simulations. Notre choix s'est porté sur la méthode de type C-NEM. Le choix des éléments finis conduit à la nécessité d'employer des algorithmes de remaillage du domaine soumis à de grandes déformations. La méthode C-NEM ne le nécessite pas et nous disposons de cet outil développé au laboratoire sous l'impulsion initiale de F. Chinesta (2011).

1.2.2 Méthode C-NEM

Le choix s'est donc porté sur la méthode C-NEM : Constrained Natural Element Method (Yvonnet et al., 2004 - Illoul, 2008), développée sur les bases de la NEM (Traversoni, 1994 - Sambridge et al., 1995 - Sukumar, 1998) et utilisée pour des applications métalliques (Alfaro et al., 2007) et de mécanique des fluides (Martinez et al., 2004). Cette méthode est en cours de développement au laboratoire et très prometteuse dans le cadre des simulations numériques en grandes déformations. Elle permet de mettre en place une approche Lagrangienne du mouvement (dérivées droites et partielles identiques). Une plateforme d'échange est disponible en ligne ([plateformesn-m2p](#)) et permet de télécharger le code source.

Si cette méthode présente de grandes similarités avec la méthode des éléments finis classique, la première différence réside dans l'interpolation des champs qui est réalisée avec de nouvelles fonctions de formes, les fonctions Sibson (Figure 50). Elles présentent la particularité de ne pas être nulles là où les fonctions de formes éléments finis linéaires le sont, à la frontières des éléments. Elles sont toutefois bien nulles aux nœuds non concernés par l'interpolation.

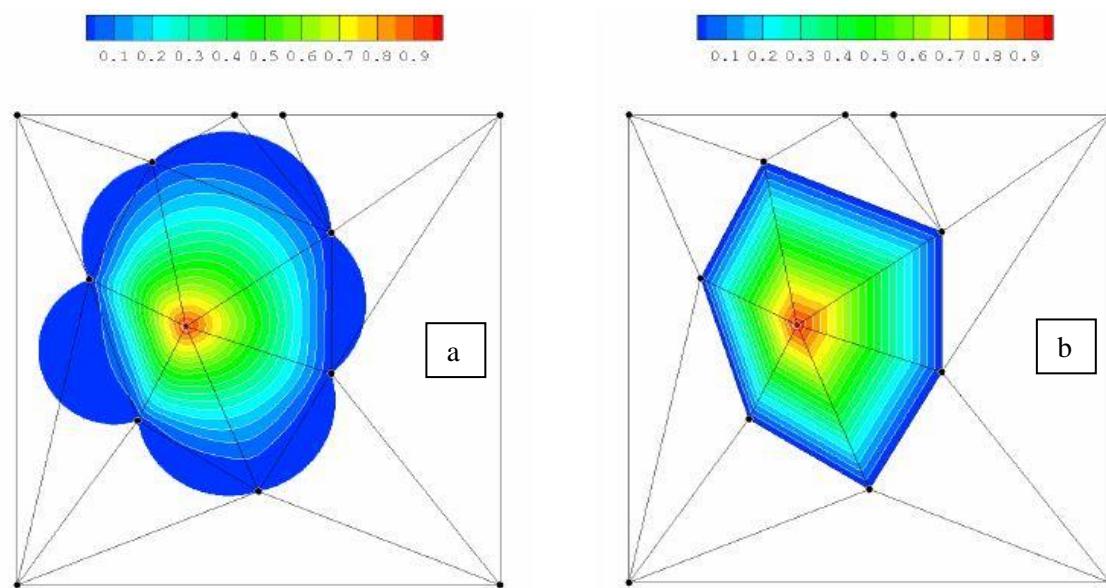


Figure 50 Comparaison des fonctions de forme C-NEM 2D (a) et éléments finis linéaires (b)

La deuxième différence réside dans l'intégration SCNI (Stabilized Conform Nodale Integration) des champs sur le domaine. Plus concrètement, les principales différences entre les éléments finis et la méthode C-NEM concernent la matrice de rigidité et la matrice thermique, qui sont différentes.

Le calcul des fonctions de forme Sibson contraintes est basé sur les cellules de Voronoï autour des nœuds du domaine, avec prise en compte des frontières des domaines étudiés. Le calcul des matrices est effectué à l'aide d'une intégration stabilisée (valeur moyenne du gradient sur des sous domaines, appliquée aux nœuds – Intégration nodale), avec comme support les cellules de Voronoï autour des nœuds tronquées par les frontières. L'intégration SCNI donne de meilleurs résultats qu'une intégration par points de Gauss du fait de la forme rationnelle des fonctions de forme Sibson (Yvonnet et al., 2006). Le degré d'interpolation de la pression doit être au moins une fois inférieur à l'interpolation des vitesses.

Cette méthode, à mi-chemin entre les méthodes éléments finis et les méthodes sans maillages, présente la particularité de très bien prendre en compte l'influence des nœuds à proximité d'un point d'évaluation (Figure 2 – Illoul, 2008). Les diamètres des cercles rouges autour des nœuds représentent la contribution de chaque fonction de forme à l'interpolation au point x (point central).

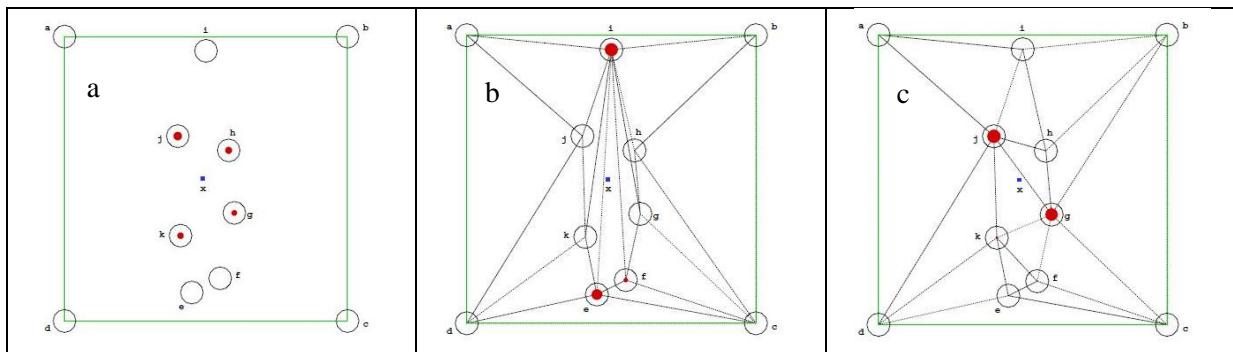


Figure 51 Comparaison de l'influence des nœuds périphériques – NEM (a) – FEM (b & c)

En éléments finis, on voit que le maillage a une grande influence sur l'interpolation des champs, et que ce ne sont pas forcément les nœuds les plus proches qui sont pris en compte. La méthode des éléments naturels prend en compte tous les plus proches voisins selon leur proximité et les volumes/surfaces autour d'eux. Ainsi, on ne se limite plus à des éléments. C'est pourquoi on parle de méthode sans maillage.

L'un des avantages de cette méthode est de ne pas rencontrer de difficultés lorsque des nœuds se retrouvent alignés, alors qu'en éléments finis, cela induirait des éléments plats problématiques avec nécessité de faire du remaillage.

Les conclusions de la thèse d'Illoul (2008) sont les suivantes : « L'approche CNEM donne des résultats d'une qualité supérieure aux éléments finis linéaires, que le maillage éléments finis soit optimisé ou non. Il faut cependant noter l'importance du gradient stabilisé. Ainsi, si une démarche gradient stabilisé est appliquée à l'interpolation éléments finis, pour un maillage de Delaunay ou un maillage optimisé, les approches CNEM et éléments finis donnent, en élasticité linéaire, des résultats de qualité similaire ».

Cette méthode récente a été mise en place dans le cadre de la simulation du procédé de cisailage adiabatique (Illoul, 2008), et a été utilisée récemment pour simuler le soufflage de bouteilles (Cosson et al., 2008), le perçage laser (Girardot et al., 2012) et la nano impression (Teyssedre et al., Projet ANR Sincrone).

1.3 Choix de l'implémentation hydrodynamique et thermique

Compte tenu des outils numériques liés à la méthode C-NEM disponibles au laboratoire lors du développement du logiciel, une double résolution est mise en place. D'un côté, le champ de vitesse (U, V) et la pression (P) sont déterminés à l'aide d'une résolution hydrodynamique. De l'autre, une résolution thermique permet de déterminer le champ de température (T). La méthode C-NEM implémentée permet de mettre en place une description Lagrangienne du mouvement, découpant température et vitesse. Un regroupement de ces deux résolutions dans une fonction adaptée serait envisageable.

1.4 Développement hydrodynamique

1.4.1 Mise en place de la méthode C-NEM Hydrodynamique

1.4.1.a Des équations locales au système à résoudre

i) Formulation variationnelle

A partir des équations locales d'équilibre (46), (47) et (49), nous mettons en place une formulation variationnelle (62) permettant de déterminer un système sur le domaine Ω .

$$\forall \underline{V}^* CA \text{ à } 0$$

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} \underline{V}^* \operatorname{div} \underline{\sigma} d\Omega + \int_{\Omega} \underline{V}^* \underline{f}_d d\Omega = 0 \\
& - \int_{\Omega} \underline{\operatorname{grad}}(\underline{V}^*) : \underline{\sigma} d\Omega + \int_{\partial\Omega} \underline{V}^* \underline{\sigma} \underline{n} dS + \int_{\Omega} \underline{V}^* \underline{f}_d d\Omega = 0 \\
& \int_{\Omega} \underline{\operatorname{grad}}(\underline{V}^*) : (-p\underline{I} + 2\eta\underline{D}) d\Omega = \int_{\partial\Omega} \underline{V}^* \frac{\Gamma}{R} \underline{n} dS + \int_{\partial\Omega} \underline{V}^* (-P^e \underline{n}) dS + \int_{\Omega} \underline{V}^* \underline{f}_d d\Omega \tag{62} \\
& \int_{\Omega} 2\eta \underline{\operatorname{grad}}(\underline{V}^*) : \underline{D} d\Omega - \int_{\Omega} p (\underline{\operatorname{grad}}(\underline{V}^*) : \underline{I}) d\Omega = \int_{\partial\Omega} \underline{V}^* \left(\frac{\Gamma}{R} - P^e \right) \underline{n} dS + \int_{\Omega} \underline{V}^* \underline{f}_d d\Omega \\
& \int_{\Omega} 2\eta \underline{D}^* : \underline{D} d\Omega - \int_{\Omega} p (\underline{D}^* : \underline{I}) d\Omega = \int_{\partial\Omega} \underline{V}^* \left(\frac{\Gamma}{R} - P^e \right) \underline{n} dS + \int_{\Omega} \underline{V}^* \underline{f}_d d\Omega
\end{aligned}$$

où \underline{n} est le vecteur normal sortant à la surface, R le rayon de courbure de l'interface et P^e la pression s'appliquant sur la frontière extérieure

L'incompressibilité du polymère est ensuite prise en compte (63).

$$\begin{aligned}
& \operatorname{div}(\underline{V}) = 0 \\
& \left\{ \int_{\Omega} p^* \operatorname{div}(\underline{V}) d\Omega = 0 \right. \tag{63}
\end{aligned}$$

ii) Discrétisation des champs inconnus

Le champ de vitesse est discrétisé à l'aide des fonctions de forme C-NEM (64) sur un maillage constitué de N nœuds.

$$\underline{V}(x, y) = \sum_{i=1}^N \varphi_i(x, y) \begin{pmatrix} U_i \\ V_i \end{pmatrix} \tag{64}$$

où φ_i est la fonction de forme C-NEM associée au nœud i, N le nombre de nœuds, U_i et V_i les inconnues de vitesse nodales suivant x et y au nœud i

La méthode C-NEM nécessite d'interpoler la pression avec au moins un degré inférieur au degré de l'interpolation de la vitesse. Nous introduisons donc les fonctions de forme ψ_i , constantes par morceaux sur les cellules de Voronoï autour de chaque nœud i. L'interpolation de la pression p est ainsi décrite (65).

$$p(x, y) = \sum_{i=1}^N \psi_i(x, y) P_i \quad (65)$$

iii) Introduction des notations pour une mise en forme matricielle

Une notation matricielle est introduite avec la matrice $\underline{\underline{N}}$ des fonctions de forme et le vecteur \underline{U} des inconnues nodales de vitesse (66).

$$\underline{V}(x, y) = \underline{\underline{N}}^T \underline{U} = \begin{pmatrix} \varphi_1 & 0 & \dots & \varphi_k & 0 & \dots & \varphi_N & 0 \\ 0 & \varphi_1 & \dots & 0 & \varphi_k & \dots & 0 & \varphi_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_1 \\ V_1 \\ \vdots \\ U_k \\ V_k \\ \vdots \\ U_N \\ V_N \end{pmatrix} \quad (66)$$

De même, l'interpolation de la pression est effectuée à l'aide du vecteur des fonctions de forme pour la pression $\underline{\underline{N}}$ et du vecteur des inconnues nodales de pression \underline{P} (67).

$$p(x, y) = \underline{\underline{N}}^T \underline{P} = (\psi_1 \ \dots \ \psi_k \ \dots \ \psi_N) \begin{pmatrix} P_1 \\ \vdots \\ P_k \\ \vdots \\ P_N \end{pmatrix} \quad (67)$$

La matrice de déformations (47) est notée comme suit (68) :

$$\underline{\underline{D}} = \begin{pmatrix} D_{11} & D_{12} \\ D_{12} & D_{22} \end{pmatrix} \quad (68)$$

On introduit la notation vectorielle $\underline{\widetilde{D}}$ de la matrice $\underline{\underline{D}}$ (69), et la matrice $\underline{\underline{B}}$ (70).

$$\underline{\widetilde{D}} = \begin{pmatrix} D_{11} \\ D_{22} \\ \sqrt{2}D_{12} \end{pmatrix} \quad (69)$$

$$\underline{\underline{B}} = \begin{pmatrix} \varphi_{1,x} & 0 & \dots & \varphi_{k,x} & 0 & \dots & \varphi_{N,x} & 0 \\ 0 & \varphi_{1,y} & \dots & 0 & \varphi_{k,y} & \dots & 0 & \varphi_{N,y} \\ \frac{\varphi_{1,y}}{\sqrt{2}} & \frac{\varphi_{1,x}}{\sqrt{2}} & \dots & \frac{\varphi_{k,y}}{\sqrt{2}} & \frac{\varphi_{k,x}}{\sqrt{2}} & \dots & \frac{\varphi_{N,y}}{\sqrt{2}} & \frac{\varphi_{N,x}}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \quad (70)$$

$\underline{\widetilde{D}}$ s'exprime en fonction de $\underline{\underline{B}}$ (71) et le produit contracté de $\underline{\underline{D}}$ avec elle-même s'écrit comme produit scalaire de $\underline{\widetilde{D}}$ avec lui-même (72).

$$\underline{\widetilde{D}} = \underline{\underline{B}} \underline{U} \quad (71)$$

$$\underline{\underline{D}} : \underline{\underline{D}} = \underline{\widetilde{D}} \cdot \underline{\widetilde{D}} = \underline{\widetilde{D}}^T \underline{\widetilde{D}} \quad (72)$$

La formulation variationnelle faisant intervenir le produit contracté de $\underline{\underline{D}}$ avec la matrice identité $\underline{\underline{I}}$, le même type de notation et propriété est proposé (73).

$$\underline{\underline{D}} : \underline{\underline{I}} = \underline{\underline{D}} \cdot \underline{\underline{I}} = \underline{\underline{D}}^T \underline{\underline{I}} \quad ; \quad \underline{\underline{I}}^T = (1 \quad 1 \quad 0) \quad (73)$$

iv) Mise en forme matricielle du système

A l'aide des notations introduites précédemment, la formulation variationnelle est modifiée (74).

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} 2\eta \underline{\underline{D}}^* : \underline{\underline{D}} d\Omega - \int_{\Omega} p(\underline{\underline{D}}^* : \underline{\underline{D}}) d\Omega &= \int_{\partial\Omega} \underline{V}^* \left(\frac{\Gamma}{R} - P^e \right) \underline{n} dS + \int_{\Omega} \underline{V}^* \underline{f}_d d\Omega \\ \int_{\Omega} 2\eta \left(\underline{\underline{B}} \underline{U}^* \right)^T \underline{\underline{B}} \underline{U} d\Omega - \int_{\Omega} (\underline{\underline{N}}^T \underline{P}) \left(\underline{\underline{B}} \underline{U}^* \right)^T \underline{\underline{I}} d\Omega \\ &= \int_{\partial\Omega} \left(\underline{\underline{N}}^T \underline{U}^* \right)^T \left(\frac{\Gamma}{R} - P^e \right) \underline{n} dS + \int_{\Omega} \left(\underline{\underline{N}}^T \underline{U}^* \right)^T \underline{f}_d d\Omega \\ \int_{\Omega} 2\eta \underline{U}^{*T} \underline{\underline{B}}^T \underline{\underline{B}} \underline{U} d\Omega - \int_{\Omega} \underline{U}^{*T} \underline{\underline{B}}^T \underline{\underline{I}} (\underline{\underline{N}}^T \underline{P}) d\Omega \\ &= \int_{\partial\Omega} \underline{U}^{*T} \underline{\underline{N}} \left(\frac{\Gamma}{R} - P^e \right) \underline{n} dS + \int_{\Omega} \underline{U}^{*T} \underline{\underline{N}} \underline{f}_d d\Omega \\ \underline{U}^{*T} \left[\int_{\Omega} 2\eta \underline{\underline{B}}^T \underline{\underline{B}} d\Omega \right] \underline{U} - \underline{U}^{*T} \left[\int_{\Omega} \underline{\underline{B}}^T \underline{\underline{I}} \underline{\underline{N}}^T d\Omega \right] \underline{P} \\ &\quad - \underline{U}^{*T} \left[\int_{\partial\Omega} \underline{\underline{N}} \left(\frac{\Gamma}{R} - P^e \right) \underline{n} dS + \int_{\Omega} \underline{\underline{N}} \underline{f}_d d\Omega \right] = 0 \end{aligned} \quad (74)$$

En introduisant les matrices $\underline{\underline{K}}_1, \underline{\underline{K}}_2$ et le vecteur $\underline{\underline{F}}^{dep}$ (75), le problème est mis sous forme matricielle (76).

$$\begin{cases} \underline{\underline{K}}_1 = \left[\int_{\Omega} 2\eta \underline{\underline{B}}^T \underline{\underline{B}} d\Omega \right] \\ \underline{\underline{K}}_2 = \left[\int_{\Omega} \underline{\underline{B}}^T \underline{\underline{I}} \underline{\underline{N}}^T d\Omega \right] \\ \underline{\underline{F}}^{dep} = \left[\int_{\partial\Omega} \underline{\underline{N}} \left(\frac{\Gamma}{R} - P^e \right) \underline{n} dS + \int_{\Omega} \underline{\underline{N}} \underline{f}_d d\Omega \right] \end{cases} \quad (75)$$

$$\underline{U}^{*T} \underline{\underline{K}}_1 \underline{U} - \underline{U}^{*T} \underline{\underline{K}}_2 \underline{P} - \underline{U}^{*T} \underline{\underline{F}}^{dep} = 0 \quad (76)$$

Il reste à prendre en compte l'incompressibilité (77).

$$\begin{aligned}
\int_{\Omega} p^* \operatorname{div}(\underline{V}) d\Omega &= 0 \\
\int_{\Omega} p^* \operatorname{div}(\underline{V}) d\Omega &= \int_{\Omega} (\tilde{N}^T \underline{P}^*) \underline{\underline{I}}^T \underline{\underline{B}} \underline{U} d\Omega = \int_{\Omega} \underline{P}^{*T} \underline{\underline{N}} \underline{\underline{I}}^T \underline{\underline{B}} \underline{U} d\Omega \\
&= \underline{P}^{*T} \left[\int_{\Omega} \underline{\underline{N}} \underline{\underline{I}}^T \underline{\underline{B}} d\Omega \right] \underline{U} \\
&= \underline{P}^{*T} \underline{\underline{K}_3} \underline{U} = 0 \\
\underline{\underline{K}_3} &= \left[\int_{\Omega} \underline{\underline{N}} \underline{\underline{I}}^T \underline{\underline{B}} d\Omega \right]
\end{aligned} \tag{77}$$

en rappelant la propriété entre la trace de $\underline{\underline{D}}$ et la divergence de \underline{V} (78).

$$\operatorname{div}(\underline{V}) = \operatorname{tr}(\underline{\underline{D}}) = \underline{\underline{D}} : \underline{\underline{I}} = \underline{\underline{D}}^T \underline{\underline{I}} = \underline{\underline{I}}^T \underline{\underline{D}} = \underline{\underline{I}}^T \underline{\underline{B}} \underline{U} \tag{78}$$

En conclusion, la formulation variationnelle de l'équation d'équilibre et d'incompressibilité a été transformée en un système d'équations dépendant des vecteurs d'inconnues nodales de vitesse \underline{U} et de pression \underline{P} (79).

$$\begin{cases} \underline{U}^{*T} \underline{\underline{K}_1} \underline{U} - \underline{U}^{*T} \underline{\underline{K}_2} \underline{P} - \underline{U}^{*T} \underline{F}^{dep} = 0 \\ \underline{P}^{*T} \underline{\underline{K}_3} \underline{U} = 0 \end{cases} \tag{79}$$

Les matrices sont alors calculées par intégration avec la méthode des gradients stabilisés (SCNI) puis l'assemblage du système (80) est mis en œuvre en introduisant un unique vecteur des inconnues nodales $\underline{\underline{U}}$ en vitesse et pression (81).

$$\underline{\underline{U}}^{*T} \underline{\underline{K}} \underline{\underline{U}} - \underline{\underline{U}}^{*T} \underline{F} = 0 \tag{80}$$

$$\underline{\underline{U}} = \begin{pmatrix} U_1 \\ V_1 \\ P_1 \\ \vdots \\ U_N \\ V_N \\ P_N \end{pmatrix} \tag{81}$$

Avec $\underline{\underline{K}}_{ij}$ la matrice hydrodynamique qui lie les nœuds i et j explicité de manière purement mathématique (82).

$$\underline{\underline{K}}_{ij} = \int_{\Omega} \begin{pmatrix} 2\eta \left(\varphi_{i,x} \varphi_{j,x} + \frac{\varphi_{i,y} \varphi_{j,y}}{2} \right) & \eta \varphi_{i,y} \varphi_{j,x} & -\varphi_{i,x} \psi_j \\ \eta \varphi_{i,x} \varphi_{j,y} & 2\eta \left(\varphi_{i,y} \varphi_{j,y} + \frac{\varphi_{i,x} \varphi_{j,x}}{2} \right) & -\varphi_{i,y} \psi_j \\ -\varphi_{j,x} \psi_i & -\varphi_{j,y} \psi_i & 0 \end{pmatrix} d\Omega \tag{82}$$

et \underline{F} le vecteur des actions extérieures (83).

$$\underline{F} = \int_{\Omega} \begin{pmatrix} \varphi_1 & 0 \\ 0 & \varphi_1 \\ 0 & 0 \\ \vdots & \vdots \\ \varphi_k & 0 \\ 0 & \varphi_k \\ 0 & 0 \\ \vdots & \vdots \\ \varphi_N & 0 \\ 0 & \varphi_N \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \rho \begin{pmatrix} f_x \\ f_y \end{pmatrix} d\Omega + \int_{\partial\Omega} \left(\frac{\Gamma}{R} - P^e \right) \begin{pmatrix} \varphi_1 & 0 \\ 0 & \varphi_1 \\ 0 & 0 \\ \vdots & \vdots \\ \varphi_k & 0 \\ 0 & \varphi_k \\ 0 & 0 \\ \vdots & \vdots \\ \varphi_N & 0 \\ 0 & \varphi_N \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n_x \\ n_y \end{pmatrix} dS \quad (83)$$

où f_x et f_y sont les composantes suivant x et y de $\underline{f_d}$, n_x et n_y les composantes suivant x et y du vecteur normal \underline{n}

\underline{F} est décomposé en trois composantes (84): gravité, pression et tension de surface.

$$\underline{F} = \underline{F}_{gravité} + \underline{F}_{pression} + \underline{F}_{tension} \quad (84)$$

L'introduction de cette notation nécessite de nouvelles notations d'interpolation. Ainsi, l'interpolation en vitesse est introduite à l'aide de la nouvelle matrice des fonctions de forme en vitesse $\underline{\underline{N}}$ (85) et le nouveau vecteur des fonctions de forme en pression $\underline{\underline{N}}$ (86).

$$\underline{V}(x, y) = \underline{\underline{N}}^T \underline{U} = \begin{pmatrix} \varphi_1 & 0 & 0 & \dots & \varphi_k & 0 & 0 & \dots & \varphi_N & 0 & 0 \\ 0 & \varphi_1 & 0 & \dots & 0 & \varphi_k & 0 & \dots & 0 & \varphi_N & 0 \end{pmatrix} \underline{U} \quad (85)$$

$$p(x, y) = \underline{\underline{N}}^T \underline{U} = (0 \ 0 \ \psi_1 \ \dots \ 0 \ 0 \ \psi_k \ \dots \ 0 \ 0 \ \psi_N) \underline{U} \quad (86)$$

1.4.1.b Calcul des termes du système

Le système hydrodynamique est explicite. Il faut à présent calculer la matrice hydrodynamique $\underline{\underline{K}}$ et le vecteur des actions extérieures \underline{F} . Les fonctions de calcul écrites en C abordées dans ce paragraphe ont été mises en place selon les besoins physiques de nos simulations par Lounès Illoul.

i) Matrice hydrodynamique

Une fonction écrite en C permet de calculer la matrice hydrodynamique. La formulation faible est intégrée par intégration nodale. Le gradient de vitesse est calculé par la méthode SCNI. La pression est considérée constante par cellules de Voronoï et la vitesse de degré minimum 1, induit par la méthode C-NEM. La viscosité est considérée constante par morceaux sur chaque cellule de Voronoï, valant la valeur au noeud considéré. Cette hypothèse peut avoir une influence sur les résultats si le maillage est grossier.

Afin de gagner en temps de calcul, la matrice hydrodynamique peut ne pas être calculée à tous les pas de temps. Un critère en nombre de pas de temps entre chaque calcul est introduit. Cependant, elle est tout de même calculée dès lors qu' :

- un remaillage est effectué (création ou suppression de noeud)
- un changement d'état d'au moins un noeud a lieu

ii) Conditions limites dans le domaine

Dans cette étude, les conditions aux limites dans le domaine vont se limiter à la gravité (87).

$$\underline{f}_d = \begin{bmatrix} 0 \\ g \end{bmatrix} \quad (87)$$

où $g = -9.81 \text{ m.s}^{-2}$

Le vecteur $\underline{F}_{gravité}$ (88) du vecteur \underline{F} (83) doit être calculé sur le domaine.

$$\underline{F}_{gravité} = \int_{\Omega} \begin{pmatrix} \varphi_1 & 0 \\ 0 & \varphi_1 \\ 0 & 0 \\ \vdots & \vdots \\ \varphi_k & 0 \\ 0 & \varphi_k \\ 0 & 0 \\ \vdots & \vdots \\ \varphi_N & 0 \\ 0 & \varphi_N \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \rho \begin{pmatrix} 0 \\ g \end{pmatrix} d\Omega \quad (88)$$

Le choix est fait de considérer la gravité constante par morceaux sur le domaine, prenant sur la cellule de Voronoï de chaque nœud la valeur au nœud considéré. Du fait de la constance de la gravité dans le cadre de ce procédé, cette hypothèse n'a pas d'influence sur la qualité des résultats.

Nous utilisons une fonction C qui calcule un vecteur VolC. Chaque composante VolC(i) vaut l'aire de la cellule de Voronoï autour du nœud i et permet de calculer $\underline{F}_{gravité}$.

iii) Conditions limites en surface

Les termes de contour sont constitués de la pression extérieure et de la tension de surface.

Pression

La pression ne sera pas toujours prise en compte. Lorsqu'elle le sera, elle sera considérée constante sur chaque interface. Sa valeur sera la pression atmosphérique moyenne pour les surfaces libres (101325 Pa) et suivra la loi des gaz parfaits dans le cas de cavités (CHAPITRE III .1.1.2.c). La normale est considérée constante par morceaux, déterminée à l'aide de la discréétisation de l'interface (maillage).

$$F_{pression} = \int_{\partial\Omega} -P^e \begin{pmatrix} \varphi_1 & 0 \\ 0 & \varphi_1 \\ 0 & 0 \\ \vdots & \vdots \\ \varphi_k & 0 \\ 0 & \varphi_k \\ 0 & 0 \\ \vdots & \vdots \\ \varphi_N & 0 \\ 0 & \varphi_N \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n_x \\ n_y \end{pmatrix} dS \quad (89)$$

Une fonction C permet de calculer $F_{pression}$ (89) en considérant la pression constante sur l'intégralité de chaque interface sans prendre en compte la normale. Un calcul est donc effectué afin de prendre en

compte la normale moyenne sur chacun des domaines d'intégration. L'intégrale est réalisée sur des sous domaines constitués de chaque demi-segment autour de chaque nœud.

Tension de surface

Le terme de tension de surface du système (90) doit être calculé.

$$F_{tension} = \int_{\partial\Omega} \frac{\Gamma}{R} \begin{pmatrix} \varphi_1 & 0 \\ 0 & \varphi_1 \\ 0 & 0 \\ \vdots & \vdots \\ \varphi_k & 0 \\ 0 & \varphi_k \\ 0 & 0 \\ \vdots & \vdots \\ \varphi_N & 0 \\ 0 & \varphi_N \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n_x \\ n_y \end{pmatrix} dS \quad (90)$$

La tension de surface est un des éléments les plus importants dans le cadre des mouvements de fluides sous l'action de capillarité. Sa valeur varie avec l'inverse du rayon de courbure de l'interface (CHAPITRE III .1.1.1.b). Elle peut être modélisée par une pression dont la valeur dépend du rayon de courbure local.

Le rayon de courbure R et la normale n sont déterminés géométriquement pour chaque nœud à l'aide de la détermination du cercle passant par le nœud considéré et les deux nœuds adjacents. La normale est considérée constante par morceaux le long de l'interface.

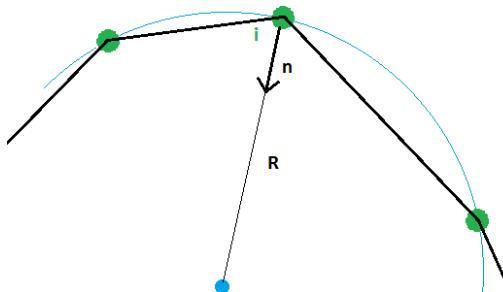


Figure 52 Calcul de la tension de surface sur le domaine discrétré

La courbure pouvant rapidement évoluer le long de l'interface, nous choisissons de considérer la tension de surface linéaire le long de l'interface. Connaissant la valeur de la tension de surface et la géométrie de l'interface, son expression est décrite linéairement à l'aide de ses valeurs nodales (91).

$$\frac{\Gamma}{R}(x, y)\underline{n} = \begin{pmatrix} \varphi_1 & 0 \\ 0 & \varphi_1 \\ 0 & 0 \\ \vdots & \vdots \\ \varphi_k & 0 \\ 0 & \varphi_k \\ 0 & 0 \\ \vdots & \vdots \\ \varphi_N & 0 \\ 0 & \varphi_N \\ 0 & 0 \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} n_{1_x} \\ n_{1_x} \\ 0 \\ \vdots \\ n_{k_x} \\ n_{k_x} \\ 0 \\ \vdots \\ n_{N_x} \\ n_{N_x} \\ 0 \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} \frac{\Gamma_1}{R_1} \\ \frac{\Gamma_1}{R_1} \\ 0 \\ \vdots \\ \frac{\Gamma_k}{R_k} \\ \frac{\Gamma_k}{R_k} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \frac{\Gamma_N}{R_N} \\ \frac{\Gamma_N}{R_N} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (91)$$

L'expression de $\underline{F}_{\text{tension}}$ découlant de cette hypothèse est donc déterminée (92).

$$\underline{F}_{\text{tension}} = \int_{\partial\Omega} \begin{pmatrix} \varphi_1 & 0 \\ 0 & \varphi_1 \\ 0 & 0 \\ \vdots & \vdots \\ \varphi_k & 0 \\ 0 & \varphi_k \\ 0 & 0 \\ \vdots & \vdots \\ \varphi_N & 0 \\ 0 & \varphi_N \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_1 & 0 \\ 0 & \varphi_1 \\ 0 & 0 \\ \vdots & \vdots \\ \varphi_k & 0 \\ 0 & \varphi_k \\ 0 & 0 \\ \vdots & \vdots \\ \varphi_N & 0 \\ 0 & \varphi_N \\ 0 & 0 \end{pmatrix}^T dS \begin{pmatrix} n_{1_x} \\ n_{1_x} \\ 0 \\ \vdots \\ n_{k_x} \\ n_{k_x} \\ 0 \\ \vdots \\ n_{N_x} \\ n_{N_x} \\ 0 \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} \frac{\Gamma_1}{R_1} \\ \frac{\Gamma_1}{R_1} \\ 0 \\ \vdots \\ \frac{\Gamma_k}{R_k} \\ \frac{\Gamma_k}{R_k} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \frac{\Gamma_N}{R_N} \\ \frac{\Gamma_N}{R_N} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (92)$$

Le calcul de ce terme est réalisé à l'aide d'une fonction C sur des sous domaines constitués de chaque demi-segment autour de chaque noeud.

1.4.1.c Suppression des mouvements de corps rigide pour certaines études - Lagrange

Nous souhaitons simuler la coalescence de grains de poudre et la densification d'un lit de poudre dans le cas du procédé. Dans le premier cas, des conditions aux limites en déplacements sont nécessaires afin de bloquer les mouvements de solide rigide du domaine. Dans le second, le blocage de noeuds du contour sera suffisant.

Suite aux essais effectués, nous avons choisi de créer des conditions globales sur tous les noeuds du domaine. En effet, nous avons vu que le blocage d'un seul noeud d'un domaine fluide peut conduire à une déformation indésirable sur ce noeud. Ces conditions globales sont ajoutées au système initial par

une méthode des multiplicateurs de Lagrange. Trois lignes sont donc ajoutées au système, permettant de bloquer globalement les mouvements de solide rigide suivant \underline{x} et \underline{y} , et la rotation suivant \underline{z} .

Comme l'intégrale des actions extérieures sur le contour du domaine est nulle (pression, tension de surface), son centre de gravité est immobile en translation et rotation. Cette propriété permet de mettre en place des conditions aux limites manquantes.

i) Blocage des translations suivant \underline{x} et \underline{y}

Comme le centre de gravité du domaine est immobile en translation, nous pouvons appliquer le théorème de la résultante cinétique projeté suivant \underline{x} et \underline{y} (93).

$$\begin{aligned}\int_{\Omega} \rho \underline{V} \cdot \underline{x} d\Omega &= m \underline{V}(G) \cdot \underline{x} = 0 \\ \int_{\Omega} \rho \underline{V} \cdot \underline{y} d\Omega &= m \underline{V}(G) \cdot \underline{y} = 0\end{aligned}\tag{93}$$

En utilisant l'interpolation du champ de vitesse, nous mettons en place une égalité devant être respectée (94) suivant \underline{x} . La même démarche est appliquée suivant \underline{y} .

$$\int_{\Omega} \underline{V} \cdot \underline{x} d\Omega = \int_{\Omega} \underline{\underline{N}}^T \underline{\underline{U}} \cdot \underline{x} d\Omega = \int_{\Omega} \underline{x}^T \underline{\underline{N}}^T \underline{\underline{U}} d\Omega = \int_{\Omega} \underline{x}^T \underline{\underline{N}}^T d\Omega \underline{\underline{U}} = 0\tag{94}$$

Nous obtenons deux lignes à ajouter à la matrice hydrodynamique $\underline{\underline{K}}$ (95).

$$\begin{aligned}&\int_{\Omega} \underline{x}^T \underline{\underline{N}}^T d\Omega \\ &\int_{\Omega} \underline{y}^T \underline{\underline{N}}^T d\Omega\end{aligned}\tag{95}$$

La transposée de ces lignes est aussi ajoutée à la dernière colonne de $\underline{\underline{K}}$. Le bloc vide manquant dans $\underline{\underline{K}}$ est complété par des valeurs nulles. Le vecteur \underline{F} est complété de deux valeurs nulles.

ii) Blocage de la rotation suivant \underline{z}

Considérons un point C du domaine discréétisé autour duquel le domaine tourne à la vitesse $\underline{\Omega}_i$ porté par \underline{z} . A tout point M_i du domaine, la composante de vitesse associée à cette rotation peut être exprimée (96).

$$\underline{u}_{rotation}(M_i) = \underline{\Omega}_i \wedge \underline{CM}_i\tag{96}$$

La vitesse de rotation $\underline{\Omega}_i$ s'exprime donc en fonction de la vitesse \underline{u}_i des points M_i (97).

$$\underline{\Omega}_i = \frac{\underline{u}_i \cdot (\underline{z} \wedge \underline{CM}_i)}{\|\underline{CM}_i\|^2}\tag{97}$$

En prenant comme point C le centre de gravité G du domaine, et comme la vitesse de rotation rigide du domaine est la même en tout point, notée $\underline{\Omega}$, la vitesse de rotation $\underline{\Omega}_i$ est la même en tout point (98).

$$\forall i, \Omega_i = \frac{\underline{u}_i \cdot (\underline{z} \underline{\Lambda} \underline{G} \underline{M}_i)}{\|\underline{G} \underline{M}_i\|^2} = \Omega \quad (98)$$

Comme le centre de gravité du domaine est immobile en rotation, la vitesse de rotation de chacun des nœuds du domaine est donc nulle quel que soit le point où elle est exprimée, ce qui permet d'établir une relation vérifiée par toutes les vitesses des points du domaine (99).

$$\begin{aligned} \forall i, \Omega_i &= \Omega = 0 \\ \Leftrightarrow \sum_{i=1}^N \Omega_i &= 0 \\ \Leftrightarrow \sum_{i=1}^N \frac{\underline{u}_i \cdot (\underline{z} \underline{\Lambda} \underline{G} \underline{M}_i)}{\|\underline{G} \underline{M}_i\|^2} &= 0 \end{aligned} \quad (99)$$

Introduisons le vecteur \underline{L}_{rot}^i pour chaque nœud i du domaine (100).

$$\underline{L}_{rot}^i = \frac{(\underline{z} \underline{\Lambda} \underline{G} \underline{M}_i)}{\|\underline{G} \underline{M}_i\|^2} = \begin{bmatrix} \underline{L}_{rot_x}^i \\ \underline{L}_{rot_y}^i \end{bmatrix} \quad (100)$$

La relation (101) doit être vérifiée.

$$\sum_{i=1}^N \underline{u}_i \cdot \underline{L}_{rot}^i = \sum_{i=1}^N (U_i \underline{L}_{rot_x}^i + V_i \underline{L}_{rot_y}^i) = 0 \quad (101)$$

La dernière ligne de la matrice hydrodynamique $\underline{\underline{K}}$ notée \underline{L}_{rot} est donc déterminée à l'aide de la détermination du centre de gravité du domaine et des coordonnées des différents nœuds (102).

$$\underline{L}_{rot} = [\underline{L}_{rot_x}^1 \ \underline{L}_{rot_y}^1 \ 0 \ \dots \ \underline{L}_{rot_x}^k \ \underline{L}_{rot_y}^k \ 0 \ \dots \ \underline{L}_{rot_x}^N \ \underline{L}_{rot_y}^N \ 0] \quad (102)$$

La transposée de cette ligne est aussi ajoutée à la dernière colonne de $\underline{\underline{K}}$. Le bloc vide manquant dans $\underline{\underline{K}}$ est complété par des valeurs nulles. Le vecteur \underline{F} est complété d'une valeur nulle.

1.4.1.d Loi de conservation dans les cavités

Dans un premier temps, nous avons choisi de laisser l'application d'une pression sur les interfaces. La surface libre est donc soumise à la pression atmosphérique, et la pression des cavités est mise à jour à l'aide de sa surface et sa température selon la loi des gaz parfaits (CHAPITRE III .1.1.2.c). Cette démarche était très contraignante car elle nécessitait une diminution drastique des pas de temps de calcul. En effet, si le pas de temps était trop élevé par rapport aux mouvements de l'interface, une variation de surface importante avait lieu dans chaque cavité, dépassant alors fortement la surface d'équilibre, puis au pas de temps suivant, le dépassement avait lieu dans l'autre sens et des oscillations divergentes apparaissaient.

Nous avons donc finalement choisi d'imposer la surface des cavités, soit constante, soit en connaissant sa valeur du fait de la connaissance de la pression à avoir et de sa température.

Pour cela, nous avons ajouté de nouvelles conditions de Lagrange sur les vitesses.

L'aire d'une surface fermée discrétisée peut être obtenue en choisissant un point fixe O quelconque du plan, et en faisant une somme de produits vectoriels (103).

$$Vol = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i=1 \\ i+1=1 \text{ si } i=N}}^N \underline{OM_i} \wedge \underline{M_i M_{i+1}} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i=1 \\ i+1=1 \text{ si } i=N}}^N \begin{pmatrix} x_i \\ y_i \end{pmatrix} \wedge \begin{pmatrix} x_{i+1} - x_i \\ y_{i+1} - y_i \end{pmatrix} \quad (103)$$

où M_i est un nœud de la surface et M_{i+1} le nœud suivant le long de l'interface, O est l'origine du plan

On exprime ensuite la dérivée de la surface d'une cavité constituée de N nœuds (104).

$$\begin{aligned} \frac{dVol}{dt} &= \frac{Vol(t+dt) - Vol(t)}{dt} \\ \frac{dVol}{dt} &= \frac{d}{dt} \left[\frac{1}{2} \sum_{\substack{i=1 \\ i+1=1 \text{ si } i=N}}^N \begin{pmatrix} x_i \\ y_i \end{pmatrix} \wedge \begin{pmatrix} x_{i+1} - x_i \\ y_{i+1} - y_i \end{pmatrix} \right] \\ \frac{dVol}{dt} &= \frac{1}{2} \sum_{\substack{i=1 \\ i+1=1 \text{ si } i=N}}^N \left[\begin{pmatrix} U_i \\ V_i \end{pmatrix} \wedge \begin{pmatrix} x_{i+1} \\ y_{i+1} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} U_{i+1} \\ V_{i+1} \end{pmatrix} \wedge \begin{pmatrix} x_i \\ y_i \end{pmatrix} \right] \\ \frac{dVol}{dt} &= \frac{1}{2} \sum_{\substack{i=1 \\ i+1=1 \text{ si } i=N}}^N [U_i y_{i+1} - V_i x_{i+1} - U_{i+1} y_i + V_{i+1} x_i] \end{aligned} \quad (104)$$

La condition de Lagrange sur la surface des cavités fermées s'exprime donc à l'aide d'une nouvelle ligne \underline{L}_{vol} dans la matrice hydrodynamique pour chaque cavité dont les 3 termes courants liés au nœud k sont explicités (105).

$$\underline{L}_{vol}[3(k-1) + 1: 3(k-1) + 3] = \begin{bmatrix} y^+ - y^- & -x^+ - x^- & 0 \end{bmatrix}, k = 1:N \quad (105)$$

où k est le numéro du nœud concerné et x^+ x^- y^+ y^- les coordonnées des nœuds avant et après le nœud k le long de l'interface

La transposée de ces lignes est aussi ajoutée à la dernière colonne de \underline{K} . Le bloc vide manquant dans \underline{K} est complété par des valeurs nulles. Le vecteur \underline{F} est complété de la valeur de la dérivée à imposer à chaque cavité.

1.4.2 Résolution du système

Tous les éléments du système (106) sont déterminés. Les conditions de Lagrange spécifiques au problème que nous traitons sont ajoutées. Il reste à déterminer le vecteur d'inconnues $\underline{\overline{U}}$.

$$\underline{\overline{U}}^{*T} \underline{\underline{K}} \underline{\overline{U}} - \underline{\overline{U}}^{*T} \underline{F} = 0 \quad (106)$$

1.4.2.a Types de résolution

Ce système peut être résolu de manière directe ou en utilisant des méthodes itératives.

i) Résolution usuelle

La solution usuellement utilisée avec Matlab pour la résolution de systèmes est l'opérateur \ (107).

$$\underline{\bar{U}} = \underline{K} \backslash \underline{F} \quad (107)$$

Cette solution présente l'avantage d'être rapidement mise en œuvre, et de donner une solution unique. Cependant, elle est très coûteuse en mémoire RAM et en temps de calcul dès que l'on augmente le nombre de noeuds du domaine. C'est pourquoi nous choisissons d'implémenter une méthode de résolution itérative

ii) Résolution itérative - Compressibilité

Nous choisissons d'utiliser la méthode BICGSTAB (gradient bi conjugué stabilisé) disponible dans Matlab. Partant d'un vecteur initial, la méthode cherche à minimiser un résidu permettant de s'approcher de la solution du système avec un critère d'arrêt. Les paramètres choisis pour le système peuvent influencer la qualité du résultat obtenu.

La mise en œuvre de cette méthode sur nos systèmes s'est avérée difficile. L'origine suspectée de nos problèmes de convergence vient de l'ordre de grandeur des termes en vitesse dans le vecteur inconnu (10^6 m.s^{-1}) face à ceux en pression (10^2 Pa). Nous avons choisi de modifier le système en ajoutant la compressibilité au fluide étudié, tout en imposant un coefficient de compressibilité le rendant quasi incompressible.

Compte tenu des outils disponibles lors de la mise en place du logiciel, nous avons fait le choix d'utiliser la fonction de calcul de la matrice hydrodynamique incompressible. Une méthode de pénalisation sur la compressibilité est ajoutée afin de transformer le système permettant d'obtenir la matrice de la formulation compressible tout en choisissant des paramètres imposant une quasi-incompressibilité.

Pour cela, l'équation (108) est prise en compte à la place de (77).

$$\operatorname{div}(\underline{V}) + \varepsilon p = 0 \quad (108)$$

La formulation variationnelle est alors mise en place comme précédemment (109).

$$\begin{aligned} & \forall p^* \operatorname{CA} \text{ à } 0 \\ & \int_{\Omega} p^* \operatorname{div}(\underline{V}) d\Omega + \varepsilon \int_{\Omega} p^* p d\Omega = 0 \\ & \underline{P}^{*T} \underline{\underline{K}_3} \underline{U} + \varepsilon \int_{\Omega} (\underline{\tilde{N}}^T \underline{P}^*) (\underline{\tilde{N}}^T \underline{P}) d\Omega = 0 \\ & \underline{P}^{*T} \underline{\underline{K}_3} \underline{U} + \varepsilon \underline{P}^{*T} \int_{\Omega} \underline{\tilde{N}} \underline{\tilde{N}}^T d\Omega \underline{P} = 0 \\ & \underline{\underline{K}_4} = \int_{\Omega} \underline{\tilde{N}} \underline{\tilde{N}}^T d\Omega \end{aligned} \quad (109)$$

La nouvelle équation traduisant le comportement compressible du fluide est ainsi obtenue (110).

$$\underline{P}^{*T} \underline{\underline{K}_3} \underline{U} + \varepsilon \underline{P}^{*T} \underline{\underline{K}_4} \underline{P} = 0 \quad (110)$$

Compte tenu des fonctions d'interpolation en pression constantes par morceaux dans notre étude, $\underline{\underline{K}_4}$

est diagonale. Il suffit donc d'ajouter le terme ε au bon endroit dans le système existant. Pour cela, le système incompressible initial (80) est dans un premier temps arrangé afin de regrouper les termes en vitesse ensemble (\underline{U}'), puis les termes en pression (\underline{P}') dans le vecteur \underline{U} . Ensuite, le système est découpé par morceaux en introduisant dans $\underline{\underline{K}}$ les blocs $\underline{\underline{M}'}$ $\underline{\underline{N}'}$ $\underline{\underline{Q}'}$ et dans $\underline{\underline{F}}$ les blocs $\underline{\underline{F}'}$ et $\underline{\underline{G}'}$ (111).

$$\begin{pmatrix} \underline{\underline{M}'} & \underline{\underline{N}'} \\ \underline{\underline{N}'^T} & \underline{\underline{Q}'} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \underline{U}' \\ \underline{P}' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \underline{\underline{F}'} \\ \underline{\underline{G}'} \end{pmatrix} \quad (111)$$

Le système obtenu est donc de la forme suivante (112).

$$\begin{cases} \underline{\underline{M}'\underline{U}'} + \underline{\underline{N}'\underline{P}'} = \underline{\underline{F}'} \\ \underline{\underline{N}'^T\underline{U}'} + \underline{\underline{Q}'\underline{P}'} = \underline{\underline{G}'} \end{cases} \quad (112)$$

Notons que $\underline{\underline{G}'}$ est un vecteur nul et $\underline{\underline{Q}'}$ une matrice nulle. Le coefficient ε est ajouté à la diagonale de la matrice $\underline{\underline{Q}'}$.

La seconde équation du système obtenu permet d'exprimer la pression (113).

$$\underline{P}' = \underline{\underline{Q}'^{-1}} \underline{\underline{G}'} - \underline{\underline{Q}'^{-1}} \underline{\underline{N}'^T} \underline{U}' \quad (113)$$

On remplace ensuite la pression dans la première équation (114). On obtient alors un nouveau système portant uniquement sur le vecteur des vitesses \underline{U}' (115).

$$\begin{aligned} \underline{\underline{M}'\underline{U}'} + \underline{\underline{N}'\underline{P}'} &= \underline{\underline{F}'} \\ \underline{\underline{M}'\underline{U}'} + \underline{\underline{N}'(\underline{\underline{Q}'^{-1}}\underline{\underline{G}'} - \underline{\underline{Q}'^{-1}}\underline{\underline{N}'^T}\underline{U}')} &= \underline{\underline{F}'} \\ \underline{\underline{M}'\underline{U}'} + \underline{\underline{N}'\underline{\underline{Q}'^{-1}}\underline{\underline{G}^c}} - \underline{\underline{N}'\underline{\underline{Q}'^{-1}}\underline{\underline{N}'^T}\underline{U}'} &= \underline{\underline{F}'} \\ (\underline{\underline{M}'} - \underline{\underline{N}'\underline{\underline{Q}'^{-1}}\underline{\underline{N}'^T}}) \underline{U}' &= \underline{\underline{F}'} - \underline{\underline{N}'\underline{\underline{Q}'^{-1}}\underline{\underline{G}^c}} \end{aligned} \quad (114)$$

$$(\underline{\underline{M}'} - \underline{\underline{N}'\underline{\underline{Q}'^{-1}}\underline{\underline{N}'^T}}) \underline{U}' = \underline{\underline{F}'} \quad (115)$$

Ce système est de dimension diminuée par rapport au système incompressible, possédant 2/3 des inconnues du système initial. Si nous mettons en place sa résolution, les gains en mémoire et temps de calculs seront intéressants.

La nouvelle matrice compressible est obtenue (116).

$$\underline{\underline{K}}^{comp} = \underline{\underline{M}'} - \underline{\underline{N}'\underline{\underline{Q}'^{-1}}\underline{\underline{N}'^T}} \quad (116)$$

Nous choisissons $\varepsilon = 10^{-6}$ Pa.s.

Cette démarche permet d'utiliser la fonction C-NEM incompressible pour toutes les applications désirées.

1.4.2.b Application des conditions limites en déplacement

L'application des conditions limites en déplacement est effectuée de manière usuelle en supprimant les lignes et colonnes du système correspondant aux nœuds bloqués.

1.5 Déplacement des nœuds

La résolution du système permet d'obtenir les vitesses des nœuds. Il faut ensuite déplacer les nœuds du domaine à l'aide d'un pas de temps. Cette démarche décrit une approche Lagrangienne du mouvement. Si nous avions pris en compte les effets d'inertie, l'accélération aurait été calculée à l'aide de la dérivée droite ou dérivée partielle de la vitesse, celles-ci étant identiques.

1.5.1 Choix du pas de temps

Le pas de temps est variable, calculé en fonction de la géométrie. Dans le cas général, il est calculé selon les vitesses de la frontière pour limiter la rotation locale des segments de la frontière autour des nœuds de celle-ci. Cependant, dans le cas particulier de la simulation du procédé, il doit être adapté aux mouvements locaux de frontière dans les zones où un nœud solide est à côté d'un nœud liquide et que la géométrie à conduit à avoir un angle de frontière important.

1.5.1.a Cas général

Le choix du pas de temps est extrêmement important dans les problèmes de fluides soumis à la tension de surface. En effet, l'action de tension de surface tend, localement, à aplatiser les triangles formés sur l'interface, de manière à minimiser le rayon de courbure local.

La figure 53 A présente une portion d'interface. Localement, une imperfection doit être lissée par la tension de surface. Les nœuds permettent de déterminer au nœud $i(t)$, le rayon de courbure local $R(t)$ et la direction de la tension de surface (droite verte), tendant à agrandir le rayon local en déplaçant le nœud $i(t)$ suivant la direction de la vitesse (flèche verte). La vitesse étant connue, le pas de temps permet de déplacer le nœud $i(t)$ plus ou moins loin. La figure 53 B présente une évolution de la position du nœud $i(t)$ au nœud $i(t+dt_1)$ avec un premier pas de temps dt_1 , permettant de lisser la courbe. La figure 53 C montre le même nœud avec un pas de temps dt_2 plus grand que dt_1 , et montre qu'il est possible d'induire une imperfection plus importante du fait de la tension de surface. Les pas de temps suivant induiront les mêmes problèmes, avec possibilité d'amplification du phénomène.

D'un point de vue uniquement hydrodynamique, il faut donc choisir un pas de temps adapté aux mouvements induits par la tension de surface.

Appelons angle courant $\theta(t)$ d'un nœud de frontière l'angle à gauche de la frontière lorsqu'on la parcourt dans son sens de définition ($i-1, i, i+1$), entre le segment précédent et le segment suivant le nœud considéré.

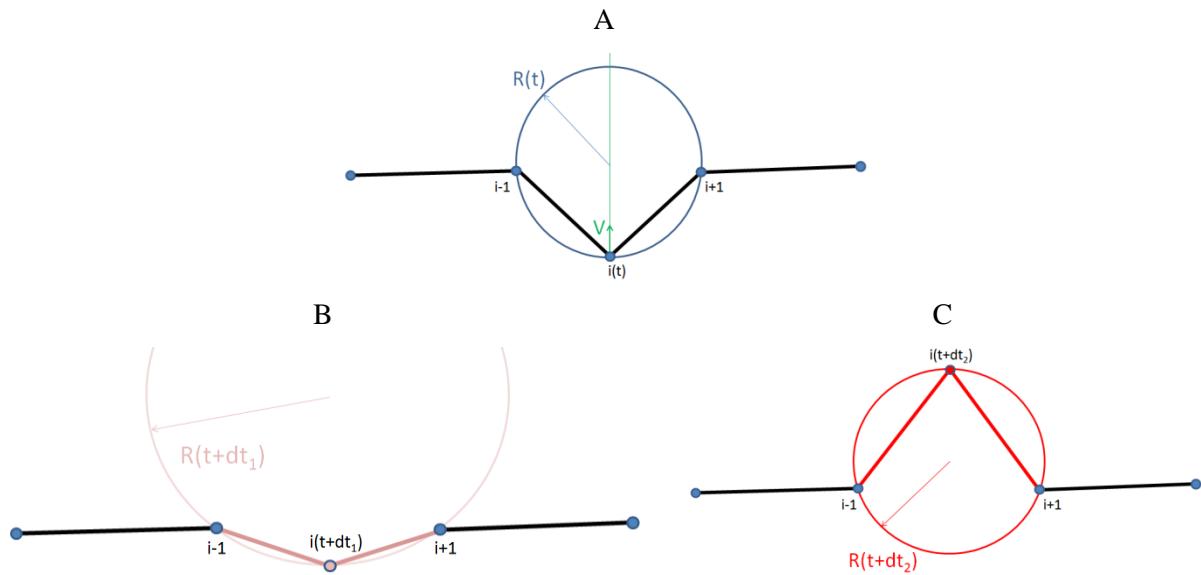


Figure 53 Influence du pas de temps sur l'interface

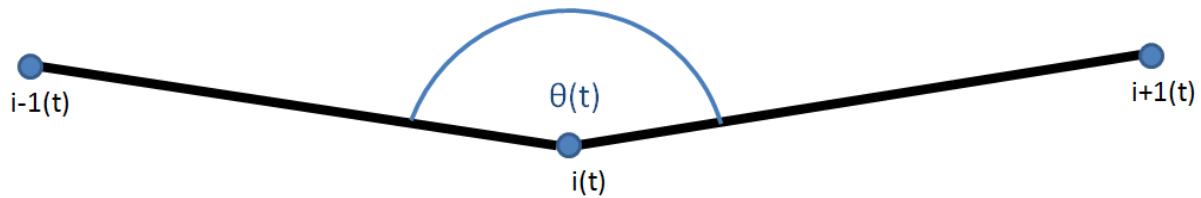


Figure 54 Angle courant le long d'une interface

Le choix est fait de calculer, pour chaque nœud de l'interface, la formule analytique de l'évolution de l'angle courant $\theta(t)$ en fonction d'un pas de temps inconnu dt , puis de calculer le pas de temps induisant une variation limite prédefinie θ^{\lim} . Ensuite, le pas de temps final est le plus petit des temps permettant localement à l'angle courant d'évoluer, au maximum, de cette valeur limite imposée.

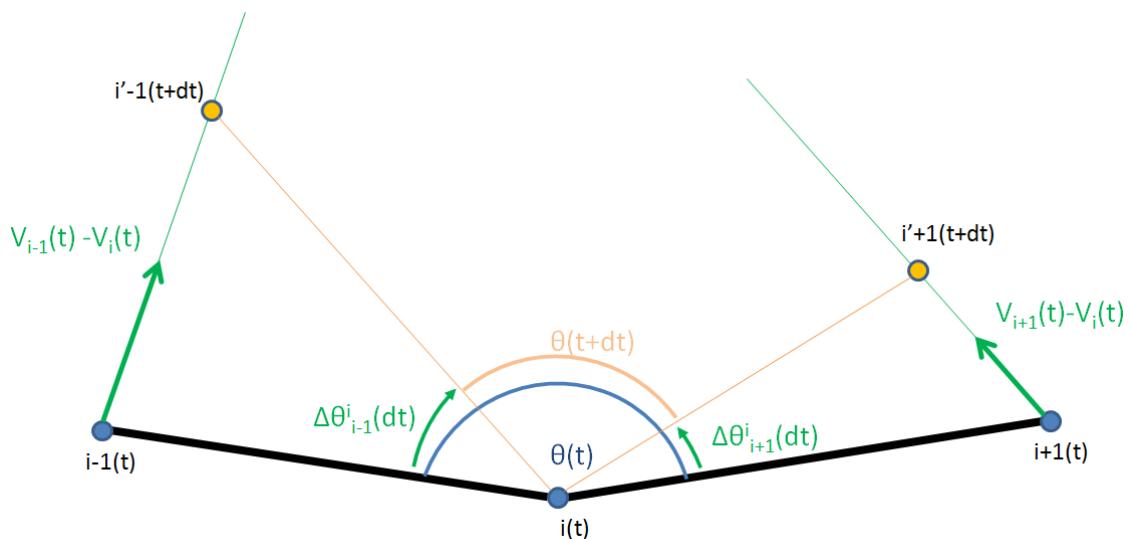


Figure 55 Détermination de l'évolution de l'angle courant en fonction de dt

La figure 55 présente un nœud $i(t)$, ses deux nœuds adjacents $i-1(t)$ et $i+1(t)$. La vitesse des trois nœuds étant connue, les flèches vertes présentent la vitesse relative des nœuds $i-1$ et $i+1$ par rapport au nœud i . $i'-1(t+dt)$ et $i'+1(t+dt)$ sont les nœuds $i-1$ et $i+1$ après déplacement avec un pas de temps inconnu dt , relativement au nœud $i(t)$.

Notons que selon le schéma de déplacement des nœuds choisi, ordre 1 ou ordre 2 (124), il faut calculer la vitesse effective des nœuds qui peut être différente de leur vitesse V_i résultant du calcul hydrodynamique. Ainsi, selon le schéma choisi, la vitesse effective V^e des nœuds est calculée (117).

$$V^e(t) = V(t) \text{ à l'ordre 1 en déplacement}$$

$$V^e(t) = V(t) + \frac{V(t) - V(t - dt)}{2} \text{ à l'ordre 2 en déplacement} \quad (117)$$

Le calcul de $\Delta\theta_{i-1}^i(dt)$ et $\Delta\theta_{i+1}^i(dt)$ est effectué à l'aide des formules l'Al Kashi (118). Détailons le calcul de $\Delta\theta_{i-1}^i(dt)$ appelé θ_a sur la figure 56.

$$a^2 = b^2 + c^2 - 2bcc\cos\theta_a \quad (118)$$

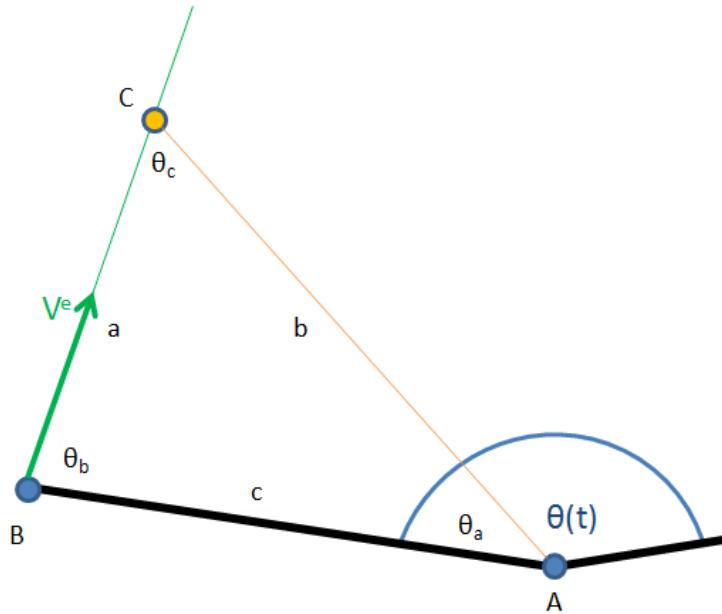


Figure 56 Calcul de l'angle $\Delta\theta^i=\theta_a$ à l'aide des formules d'Al Kashi

Les longueurs des segments sont déterminées à l'aide des coordonnées des points connus (A et B) et de la vitesse pour le point inconnu (C) (119).

$$a = V^e dt$$

$$b = \sqrt{(X_B - X_A + V^e_X dt)^2 + (Y_B - Y_A + V^e_Y dt)^2} \quad (119)$$

$$c = \sqrt{(X_B - X_A)^2 + (Y_B - Y_A)^2}$$

On en déduit alors la formule de la variation angulaire autour du nœud i issue du mouvement du nœud $i-1$: $\Delta\theta^i_{i-1} = \theta_a$ (120).

$$\theta_a = \cos^{-1} \left(\frac{-V^e_x dt(i)^2 + c^2 + (X_B - X_A + V^e_x dt)^2 + (Y_B - Y_A + V^e_y dt)^2}{2c\sqrt{(X_B - X_A + V^e_x t)^2 + (Y_B - Y_A + V^e_y t)^2}} \right) \quad (120)$$

Connaissant ainsi les deux variations angulaires, la variation totale $\Delta\theta^i(dt)$ est obtenue en fonction de dt (121).

$$\Delta\theta^i(dt) = \Delta\theta^i_{i-1}(dt) - \Delta\theta^i_{i+1}(dt) \quad (121)$$

Une minimisation (122) permet de déterminer le pas $dt(i)$ permettant à chaque nœud i de respecter cette condition de rotation θ^{\lim} .

$$dt(i) = \min_{dt} |\Delta\theta^i(dt) - \theta^{\lim}| \quad (122)$$

Enfin, le pas de temps global pour le mouvement des nœuds est égal au minimum des pas de temps permettant à chaque nœud de respecter la condition de rotation imposée (123).

$$dt = \min_i dt(i) \quad (123)$$

1.5.1.b Cas particulier du procédé

Dans le cadre de la simulation du procédé, le pas de temps peut être amené à être relimité par le biais de la valeur θ^{\lim} dans certaines situations particulières. En effet, le domaine présente une partie de ses nœuds à l'état solide, l'autre à l'état liquide. Ainsi, le long de l'interface, une zone liquide à proximité d'une zone solide peut évoluer vers une situation où l'angle extérieur à la matière α peut diminuer fortement (Figure 57).

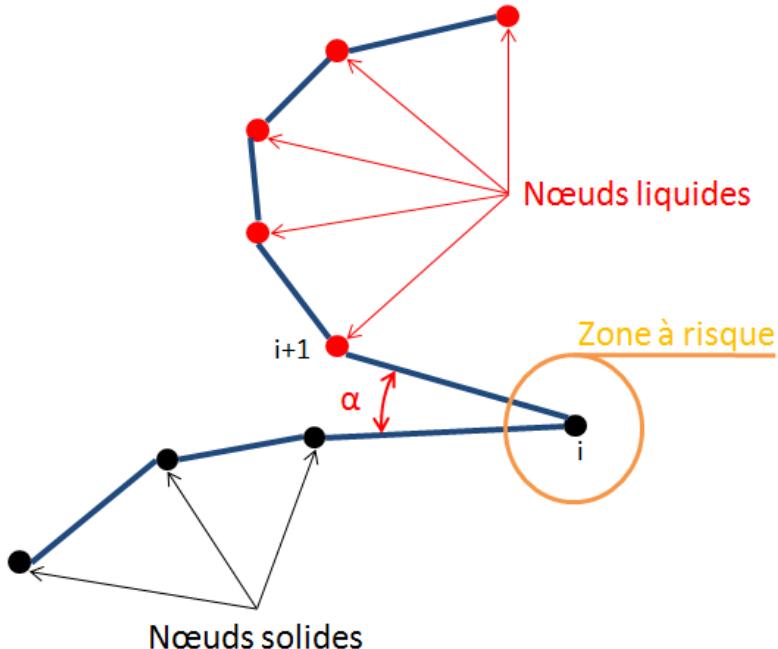


Figure 57 Présence d'une zone susceptible d'entraîner une relimitation de pas de temps

Si $\alpha < \theta^{\lim}$ et si la vitesse du nœud $i+1$ induit une diminution de l'angle α au prochain pas de temps, alors θ^{\lim} est diminué localement pour le nœud i de manière à empêcher au nœud $i+1$ de rentrer dans la matière solide.

1.5.2 Calcul des nouvelles coordonnées

Connaissant la vitesse des nœuds et le pas de temps, les coordonnées des nœuds sont mises à jour à l'aide d'un développement de Taylor à l'ordre 2 (124).

$$x(t + dt) = x(t) + v(t)dt + \gamma(t) \frac{dt^2}{2} \quad (124)$$

Le calcul de l'accélération est effectué en utilisant la vitesse au pas considéré et la vitesse au pas précédent (125).

$$\gamma(t) = \frac{v(t) - v(t - dt)}{dt} \quad (125)$$

1.6 Supports de simulation - Conditions aux limites en déplacements

Dans le cadre de l'étude réalisée, trois types de simulations seront mis en place : (1) l'étude d'une goutte pendante permettra de valider le logiciel hydrodynamique mis en place, puis il sera possible d'étudier (2) la coalescence ainsi que l'évolution de cavités et (3) le procédé de fusion laser sélective. Nous présentons donc trois schémas de principe permettant d'appréhender les domaines qui seront réalisés, leurs référentiels ainsi que les particularités d'application des conditions limites en déplacements et thermiques.

1.6.1 Goutte pendante

Dans le cas de la simulation de la goutte pendante, une surface est bloquée sur un support horizontal (Figure 58) et son évolution sera guidée par la gravité. Quelques nœuds du maillage sont donc à vitesse imposée nulle. La température de tous les nœuds du domaine est maintenue constante durant toute la simulation.

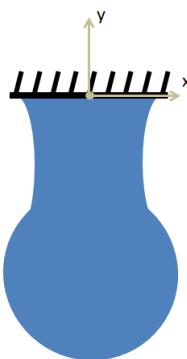


Figure 58 Conditions aux limites en déplacement pour une goutte pendante

1.6.2 Coalescence et cavités

Dans le cas de la simulation de la coalescence et de l'évolution de cavités fermées (Figure 59), les conditions limites sont appliquées de manière globale comme précisé précédemment (CHAPITRE III .1.4.1.c). La température de tous les nœuds du domaine est ici aussi maintenue constante durant toute la simulation.

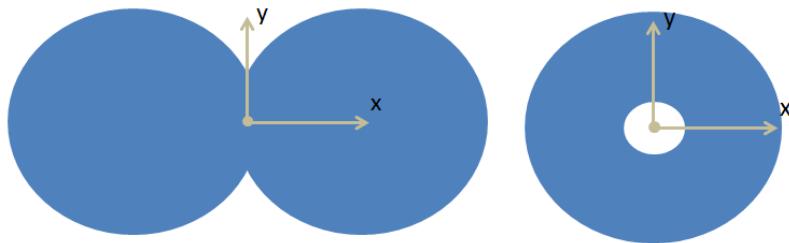


Figure 59 Conditions aux limites en déplacement pour la coalescence et l'évolution de cavités

1.6.3 Procédé

Dans le cas de la simulation du procédé, les conditions limites en déplacement permettent de bloquer les nœuds sur la partie inférieure du domaine et une condition de symétrie est imposée sur les bords latéraux.

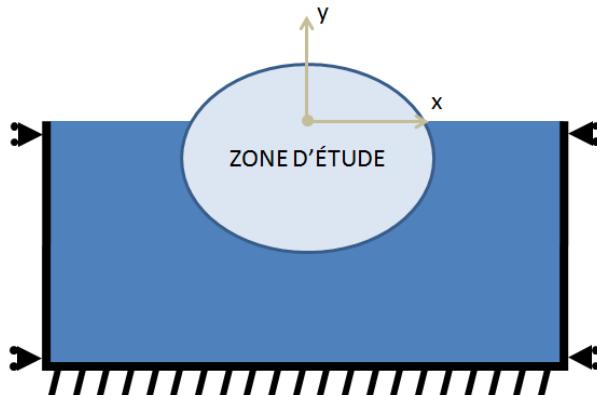


Figure 60 Conditions aux limites en déplacement lors de la simulation du procédé de fusion laser

Afin de garder la symétrie sur la tension de surface (courbure nulle et normale de la surface verticale), une condition de Lagrange (126) est ajoutée au système afin de maintenir les segments extrêmes de la surface supérieure horizontaux. Cette condition de Lagrange se traduit par la mise en place d'une ligne et colonne de zéros dont deux valeurs sont non nulles :

$$\underline{L_{vitesse}}[Ind] = [0 \ 1 \ 0 \ 0 \ -1 \ 0] \quad (126)$$

$$Ind = [3(k_1 - 1) + 1: 3(k_1 - 1) + 3, 3(k_2 - 1) + 1: 3(k_2 - 1) + 3]$$

où k_1 et k_2 sont les numéros des nœuds i et i-1 (Figure 61)

Ainsi, de chaque côté de la surface supérieure, sur la partie droite dans cet exemple, la vitesse verticale du nœud extrême i est imposée comme égale à la vitesse verticale du nœud le plus proche $i-1$ sur la surface à l'air libre (Figure 61).

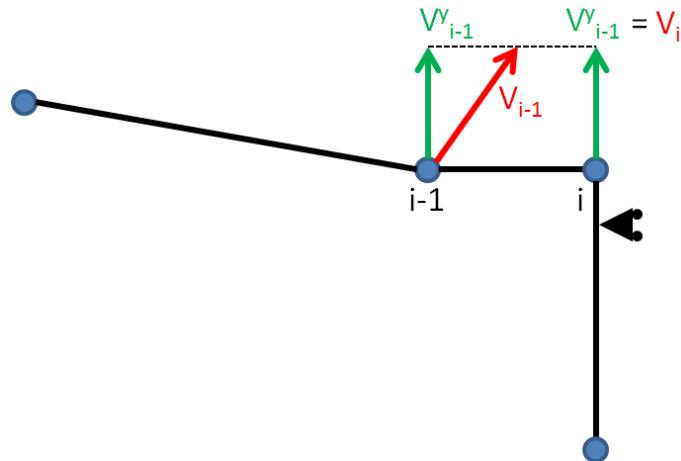


Figure 61 Condition de Lagrange ajoutée afin de maintenir la symétrie en tension de surface

Les conditions limites thermiques sont mises en place afin de représenter le procédé (Figure 62).

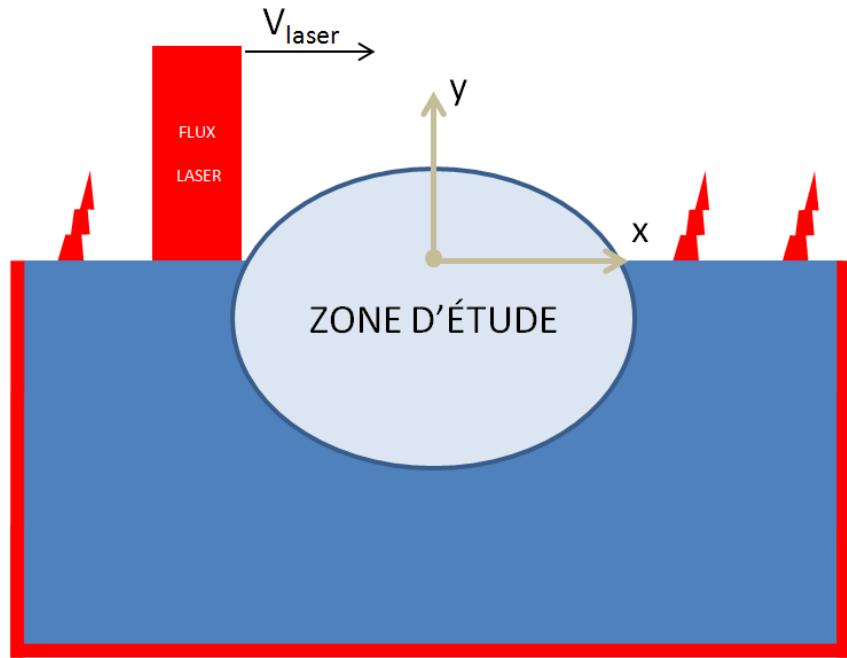


Figure 62 Conditions aux limites thermiques lors de la simulation du procédé de fusion laser

La température est imposée sur les trois bords latéraux, la surface supérieure permet un échange thermique par convection avec l'air et un laser passe de gauche à droite.

1.7 Traitement du maillage

Comme d'autres méthodes numériques, la méthode implémentée nécessite un maillage sur lequel sont interpolées les fonctions inconnues. La méthode C-NEM présente des avantages par rapport à la méthode des éléments finis classique. Le caractère plan des simulations est discuté, puis nous présentons les maillages initiaux de simulation utilisés. Enfin, un remaillage nécessaire aux problèmes traités est mis en place durant la simulation, sur les frontières et dans le domaine à leur proximité.

1.7.1 Le maillage en C-NEM

La particularité de la méthode C-NEM réside dans la non dépendance des résultats aux « éléments » plats. Ainsi, dans le cas de grandes déformations, un maillage initial quelconque peut être déformé sans que les résultats numériques ne dépendent de l'organisation des nœuds au sein du domaine. Il n'est donc pas nécessaire d'utiliser des algorithmes de remaillage complexes et couteux dans le domaine pour obtenir de bons résultats.

Cependant, les problèmes traités font entrer en jeu la tension de surface, une action extrêmement dépendante de la géométrie de la frontière (CHAPITRE III .1.1.1.b). Il est donc nécessaire de maintenir un maillage correct le long des interfaces, tout en supprimant d'éventuels nœuds inutiles afin de diminuer les coûts des résolutions.

D'expérience, les déformations près des frontières conduisent à créer des triangles allongés dans le domaine près des frontières. Cela induit une mauvaise discréétisation du domaine près de l'interface. La bonne prise en compte de la tension de surface dans ces zones nécessite un remaillage dans le domaine sur les triangles liés à la frontière.

1.7.2 Le caractère plan des simulations mises en place

La simulation actuelle est une simulation plane et ne permet donc pas de prendre en compte le caractère tridimensionnel des grains et de la poudre. Les maillages utilisés présentent une invariance en translation hors plan, un cercle représentant donc un cylindre infini.

D'un point de vue hydrodynamique, la cinétique de coalescence de deux sphères est du même ordre de grandeur que la cinétique de coalescence de deux cylindres infinis de mêmes diamètres (CHAPITRE I .3.1.3.a .iv). Dans le but de respecter les cinétiques de coalescence, les cylindres infinis qui représenteront la poudre réelle doivent avoir les mêmes diamètres que les grains constituant la poudre. D'un point de vue thermique, la simulation bidimensionnelle induit un échauffement un petit peu plus important qu'en trois dimensions du fait de l'absence de diffusion thermique dans la troisième direction. Dans le cas de la simulation de coalescence isotherme, le problème ne se pose pas. Dans le cadre de la simulation du procédé, une diffusion thermique fictive dans la troisième dimension sera ajoutée.

1.7.3 Les maillages simulés

Deux types de maillages initiaux vont être pris en compte.

Dans un premier temps, une validation du logiciel sera mise en place afin de simuler une goutte pendante.

Dans un second temps, des maillages de sections de cylindres infinis seront mis en place afin d'étudier le phénomène de coalescence et de comparer les résultats aux précédents travaux réalisés.

Dans un troisième temps, des maillages basés sur l'analyse des poudres du projet seront utilisés afin d'étudier le procédé.

Notons que les maillages doivent représenter un domaine unique pour être pris en compte d'un point de vue numérique. Ainsi, tous les cylindres seront en contact à l'état initial.

1.7.4 De la poudre aux maillages initiaux de simulation

Nous disposons des clichés de chacune des poudres du projet obtenus par microtomographie aux rayons X (CHAPITRE II .4.2). Pour chaque poudre, après avoir choisi un cliché de microtomographie représentatif (image de référence), nous balayons un volume autour de la coupe choisie et déterminons les plus grands diamètres de chaque grain visible sur la coupe de référence. Nous proposons alors une coupe modifiée basée sur l'image de référence à laquelle sont ajoutées les images des sections les plus grandes de chaque grain. Cette image est alors utilisée pour créer le maillage de la poudre étudiée.

Le logiciel Catia Dassault System est utilisé afin de générer un domaine surfacique avec le module « Generative Shape Design ». Afin de représenter au mieux la géométrie des grains, l'esquisse du domaine créé est élaborée en utilisant le module « Sketch Tracer ». Ce module permet de mettre une image en arrière-plan et d'y définir une échelle. Cela permet donc de créer, à l'aide de l'outil d'esquisse « Courbe », les contours des grains très précisément. Le domaine est alors maillé à l'aide de l'outil « Advanced Meshing Tools » et exporté en fichier « .dat » afin d'être interprété par Matlab.

Du fait de l'analyse du procédé mise en place au chapitre 1, nous décidons d'étudier une zone carrée de 500 µm de côté.

1.7.4.a Modélisation du matériau A

La figure 63a) présente une coupe verticale en microtomographie aux rayons X du matériau A. Le diamètre intérieur du support contenant la poudre est de $1200\mu\text{m}$.

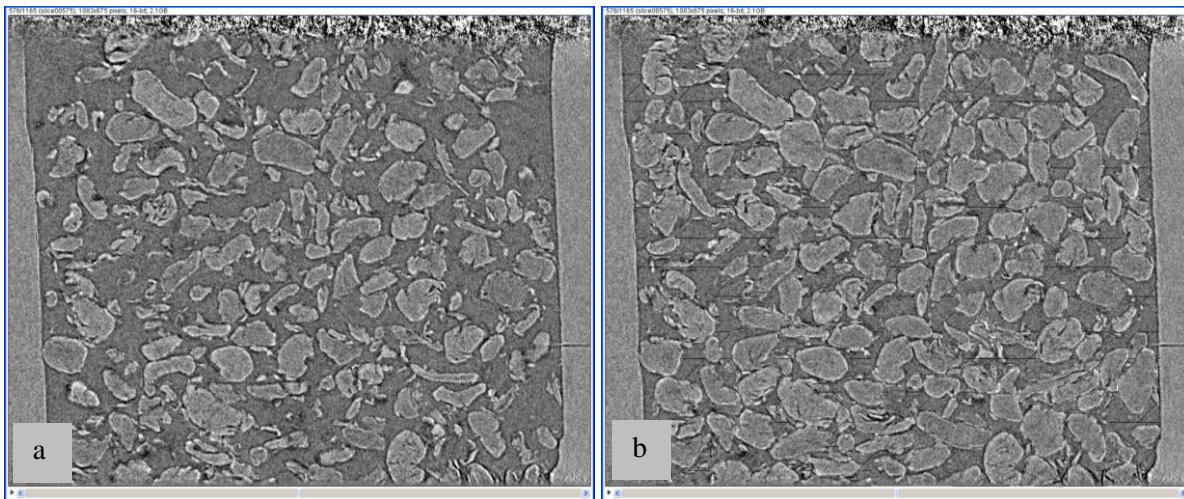


Figure 63 Coupe en microtomographie aux rayons X du matériau A

a) Coupe réelle – b) Coupe reconstruite

Après avoir modifié la coupe afin d'y faire apparaître les plus grands diamètres des grains visibles sur la coupe initiale (Figure 63 b), une zone carrée de $500\mu\text{m}$ de côté est choisie (Figure 64).

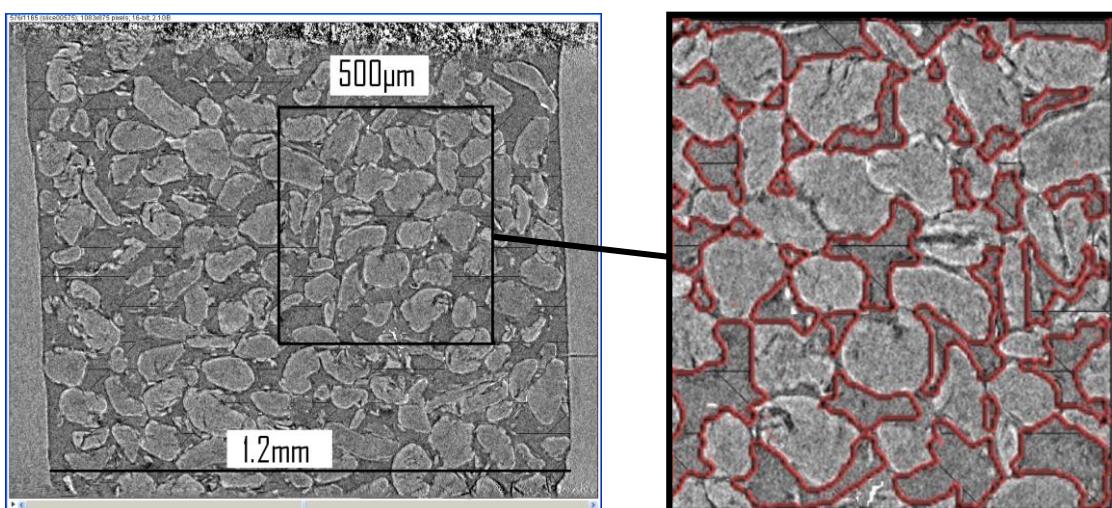


Figure 64 Choix de la zone d'étude du matériau A et dessin des contours sous Catia

Le dessin des contours est effectué sous Catia et présenté en rouge sur la figure 64, en transparence avec la coupe modifiée de la poudre. Enfin, le maillage est généré et importé sous Matlab (Figure 65).

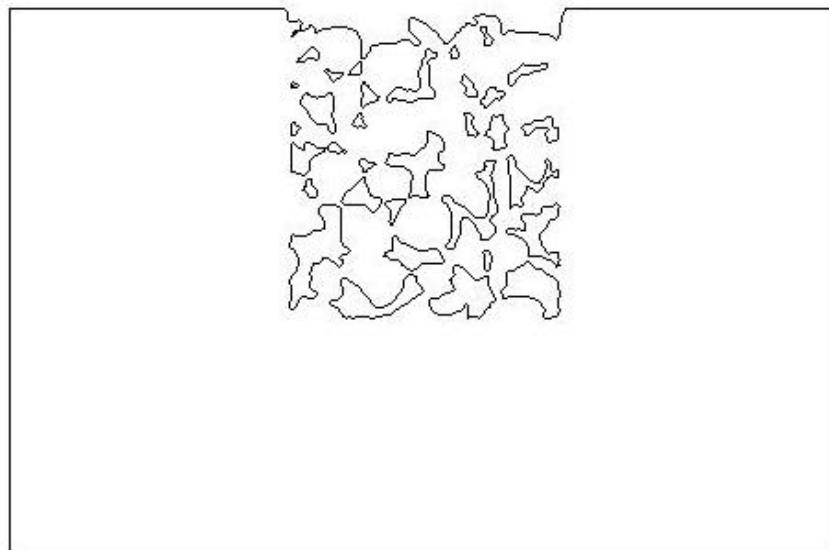


Figure 65 Contours du maillage du matériau A obtenu sous Matlab

1.7.4.b Modélisation du matériau B

La figure 66 présente une coupe horizontale en microtomographie aux rayons X du matériau B. Le diamètre intérieur du support contenant la poudre est de 1200 µm.

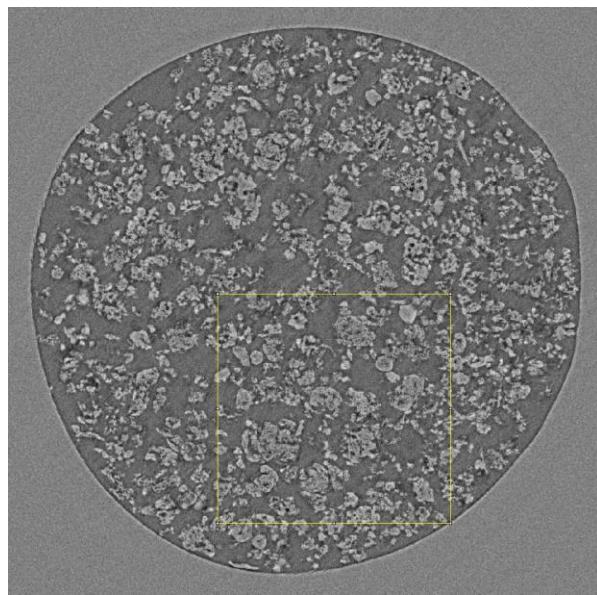


Figure 66 Coupe en microtomographie aux rayons X du matériau B

Du fait de la plus grande quantité de grains dans cette poudre, la zone d'étude carrée de 500 µm de côté (Figure 66 et Figure 67a) est déterminée avant de modifier la coupe afin d'y faire apparaître les plus grands diamètres des grains visibles sur la coupe initiale (Figure 67b).

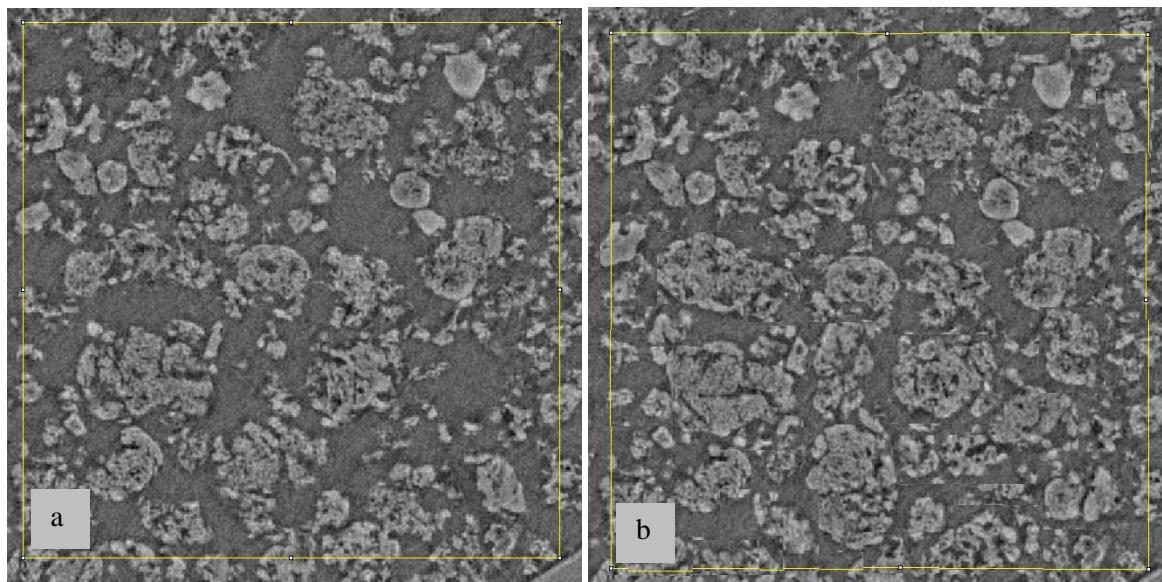


Figure 67 Coupe en microtomographie aux rayons X du matériau B
a Coupe réelle - b Coupe reconstruite

Le dessin des contours est effectué sous Catia et présenté en rouge sur la figure 68 en transparence avec la coupe modifiée de la poudre.

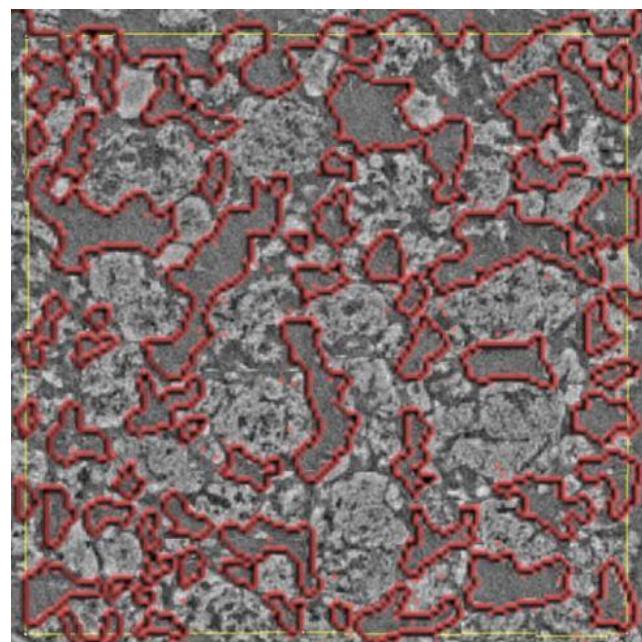


Figure 68 Dessin des contours sous Catia pour le matériau B

Enfin, le maillage est généré et importé sous Matlab (Figure 69).

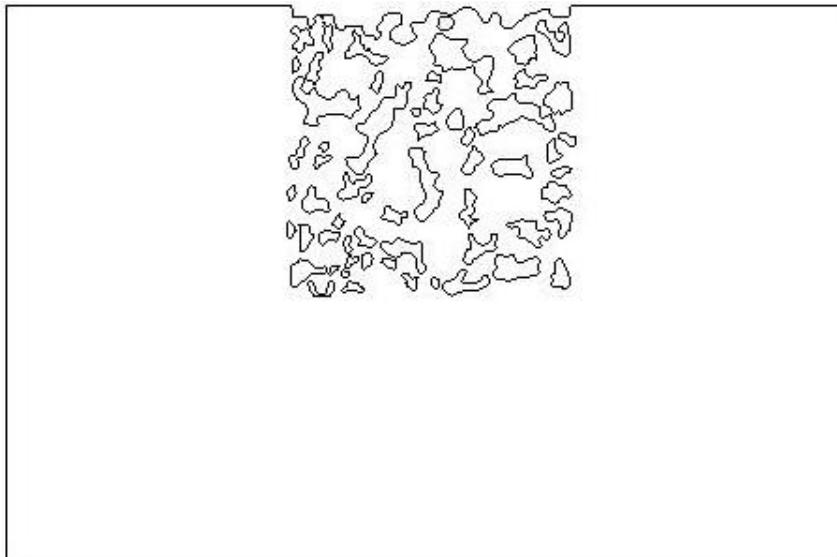


Figure 69 Contours du maillage du matériau B obtenu sous Matlab

1.7.5 Procédures de remaillage

Les procédures de remaillage mises en œuvre suppriment ou créent des nœuds selon des critères précis. Dans le cas de la création de nœuds, les données qui leurs sont attribuées (température, vitesse, état de soudage etc.) sont calculées à l'aide des données des nœuds avoisinants, en considérant une interpolation linéaire. Ainsi, un nœud créé sur un segment de la frontière se verra attribuer la valeur moyenne des données des nœuds aux extrémités du segment concerné. De même, un nœud ajouté dans un triangle se verra attribuer la valeur moyenne des données des 3 nœuds du triangle concerné.

Suite à divers développements, un gain en temps de calcul très important a été obtenu en mettant en place un critère d'entrée en procédure de remaillage, qu'elle soit sur la frontière ou dans le domaine, basé sur un critère sur l'évolution de la courbure de la frontière remaillée. Ainsi, pour chaque frontière du domaine (surface libre et cavités), le remaillage est tenté sur celle-ci si la courbure moyenne de cette frontière a évolué d'un critère fixé depuis le dernier remaillage. De même, les procédures de remaillages sont appliquées uniquement au niveau des nœuds de frontière présentant un état liquide. Deux procédures de remaillage sont développées, l'une sur la frontière, l'autre dans le domaine le long des interfaces. Elles sont toutes deux dépendantes de la courbure locale de l'interface.

1.7.5.a Maillage des contours

Afin de prendre en compte correctement l'action motrice de la tension de surface, la frontière du domaine doit être bien décrite. En particulier, les rayons de courbure et centres de courbure locaux doivent être déterminés très précisément. Les zones à courbure importante doivent présenter assez de nœuds pour bien les décrire, à contrario les zones à courbure proche de zéro doivent être allégées afin de libérer de l'espace mémoire et de gagner en temps de calcul.

Le critère mis en place est un nombre de degrés par nœud le long de l'interface θ_{adm} , tout en limitant les suppressions de nœuds dans les zones à courbure faible avec un critère en distance à maintenir le long de l'interface. La figure 70 présente deux maillages issus de deux critères en degrés par nœuds différents sur un cercle.

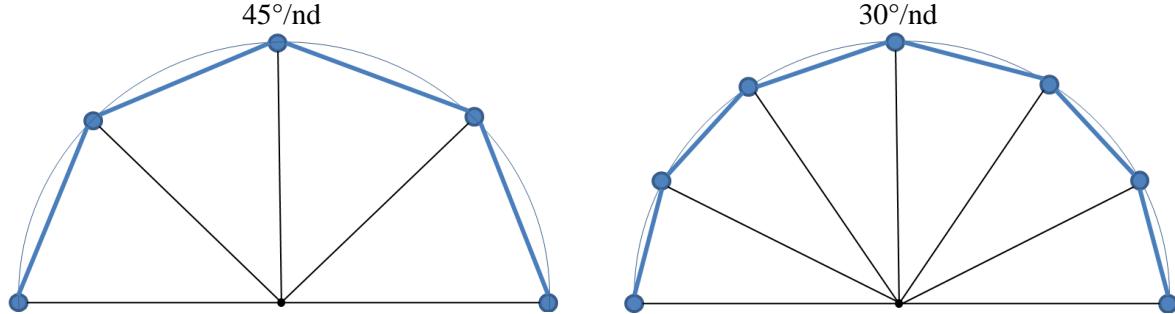


Figure 70 Exemple de deux critères de maillage de contour en degrés par nœud

Cette approche est étendue à une courbe quelconque à l'aide de la connaissance des rayons de courbure et centres de courbure locaux.

En pratique (Figure 71), connaissant le rayon de courbure local $R(i)$ d'un nœud i , la distance linéaire $D(i)$ au prochain nœud $i+1$ est calculée et comparée à un intervalle $I(i)$ (128) adapté à $D_{adm}(i)$ (127), la distance admissible pour respecter le critère choisi, et calculée à l'aide de $R(i)$. Le choix d'un intervalle (Figure 72) permet d'éviter des phénomènes d'hystérésis (nœud créé, supprimé, recréé etc.).

$$D_{adm}(i) = R(i)\theta_{adm} \quad (127)$$

$$I(i) = \left[\frac{D_{adm}(i)}{2}; 2D_{adm}(i) \right] \quad (128)$$

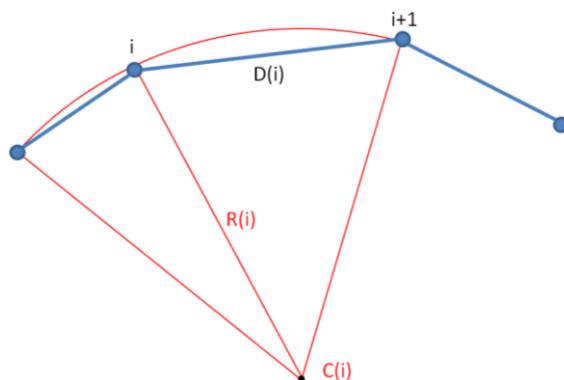


Figure 71 Données locales autour d'un nœud i

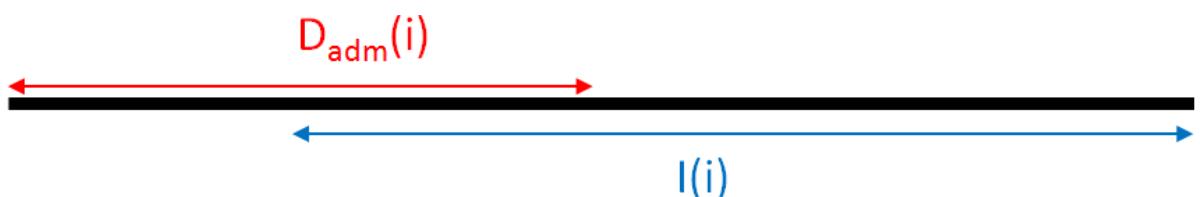


Figure 72 Illustration de l'intervalle de tolérance $I(i)$ des distances de frontière $D(i)$

Lors de la création de nœuds, deux choix sont implémentés. Le premier consiste à ajouter le nœud i' sur le cercle passant par les trois points de calcul de la courbure locale, afin de diviser en deux parties égales le demi-cercle reliant les nœuds i et $i+1$ (Figure 73). La seconde méthode consiste à ajouter le nouveau nœud i'' directement sur le segment $[i, i+1]$.

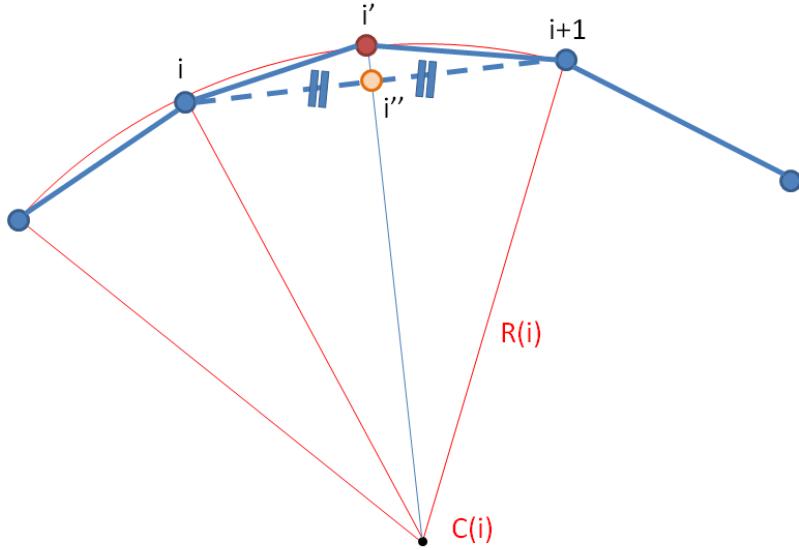


Figure 73 Crédit du nœud i'

Deux nœuds à la suite ne sont jamais supprimés. Notons que suite à divers problèmes, le rayon de courbure permettant de calculer la distance admissible après chaque nœud est pris comme minimum d'une dizaine de nœuds autour du nœud i , ce qui permet par ailleurs d'avoir une évolution plus douce du maillage. Un critère permettant d'éviter des évolutions brutales de taille est ajouté. La suppression de nœuds est interdite dans les zones où la courbure change de signe et dans les zones après une zone à courbure très faible. Enfin, comme la majorité des courbures évoluent en diminuant sous l'action de la tension de surface, et afin de palier à quelques problèmes locaux, le rayon local à chaque nœud réellement pris en compte ne peut être inférieur au rayon minimal initial de la frontière entière.

La procédure de remaillage est répétée jusqu'à ce qu'à chaque nœud, le maillage respecte le critère θ_{adm} . La valeur de ce critère sera choisie dans le prochain chapitre.

1.7.5.b Maillage dans le domaine près des frontières

La figure 74 présente une partie d'un domaine évoluant sous l'action de la tension de surface, sans remaillage dans le domaine près des frontières, chronologiquement dans l'ordre a b et c. Très rapidement, les mouvements du fluide créent des zones à très faible discréttisation dans le domaine le long de la frontière, dans des lieux où la tension de surface est alors mal prise en compte et induit des problèmes locaux de calcul des vitesses. Ces problèmes induisent l'arrivée de très petits rayons de courbure locaux conduisant à un remaillage de frontière important. Des angles de plus de 90° apparaissent sur la frontière du fait de mauvaises vitesses, il s'ensuit un temps de calcul extrêmement

important pour une simple simulation et des erreurs d'évolution très visibles (comparer la figure 74 (a,b) aux suivantes: Figure 78 (a,b,c) et Figure 79 (a,b,c) où le cadre d'observation est inchangé). Pour des besoins d'illustration, la fenêtre de prise de vue de l'image c de la figure 74 a été modifiée afin de montrer la différence entre le maillage dans le domaine et le maillage de frontière.

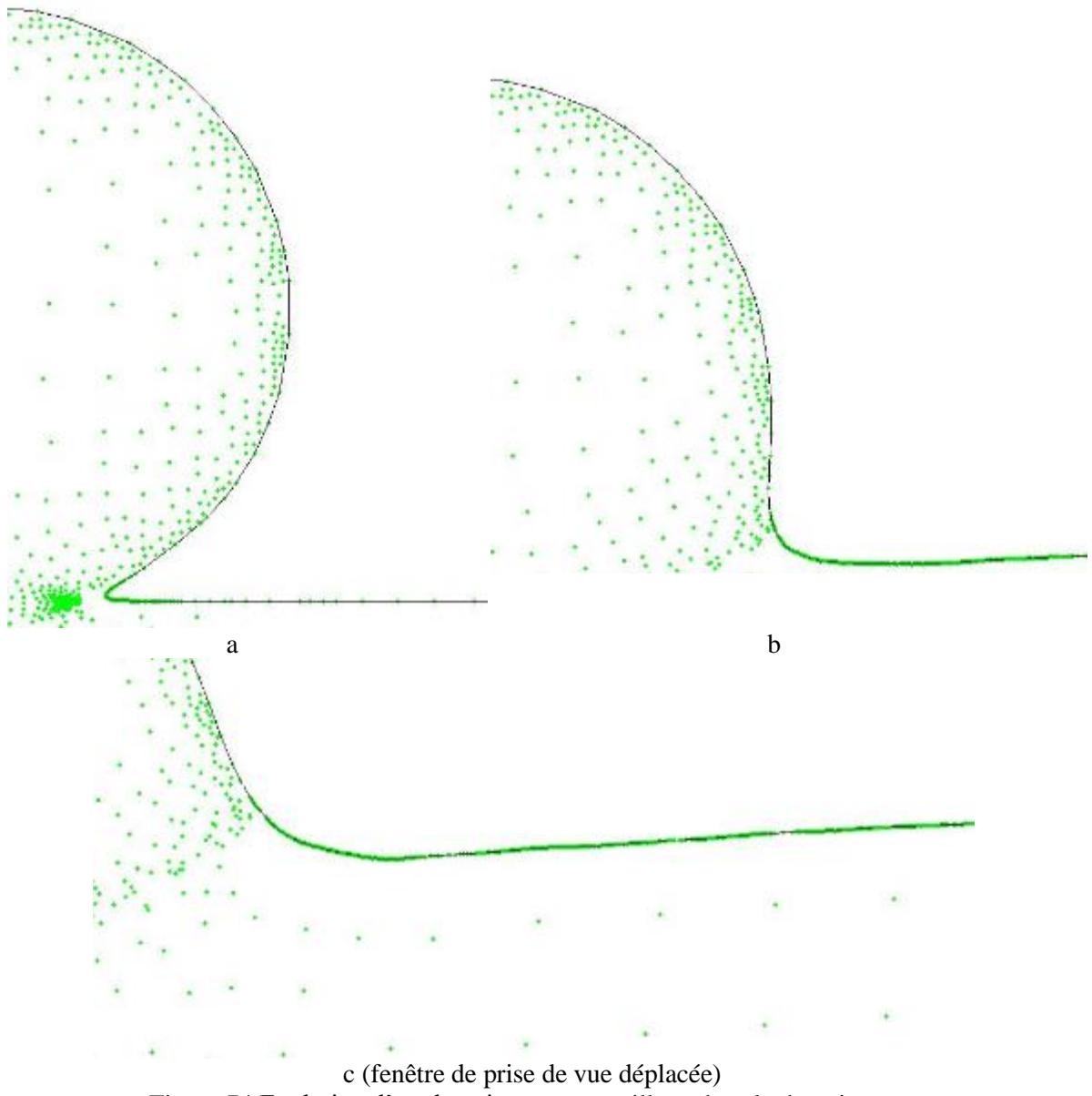


Figure 74 Evolution d'un domaine sans remaillage dans le domaine

Pour remédier à ces problèmes, une procédure de création de nœuds dans le domaine près des frontières est mise en place. Le travail est effectué sur deux types de triangles présents à l'interface et les dimensions de ces triangles sont comparées aux dimensions des segments de l'interface afin de déterminer s'il doit y avoir création de noeud ou non. La frontière étant remaillée en fonction de sa courbure locale, le remaillage dans le domaine est rendu dépendant de la courbure locale de la même manière.

Dans le domaine à l'interface, deux types de triangles sont présents. Des triangles (type 1) possèdent deux nœuds sur l'interface (Figure 75, 1 à 4) et d'autres (type 2) n'ont qu'un sommet appartenant à celle-ci (Figure 75, A_{i-1} , A_i , B_i , C_i , A_{i+1} , B_{i+2}).

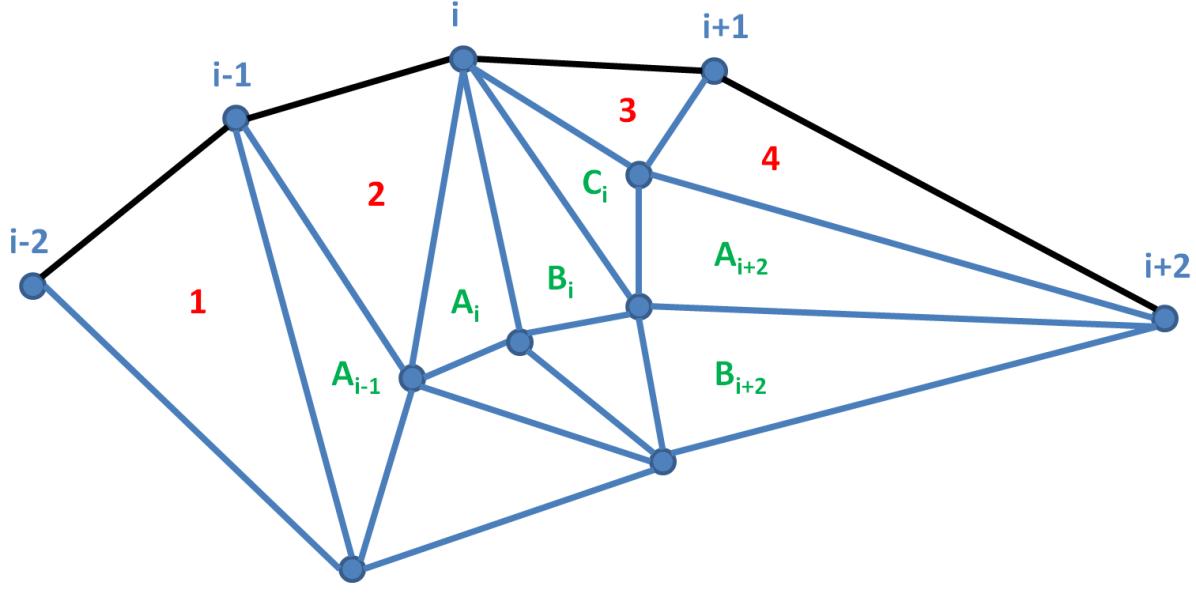


Figure 75 Triangles en lien avec l'interface

Dans un premier temps, le travail est réalisé sur les triangles de type 1 (1 à 4). Pour chacun d'eux, la dimension des deux segments internes au domaine est comparée à la dimension du segment de l'interface (Figure 76). Si le rapport est supérieur à 2 (129), un nœud est créé au barycentre du triangle concerné.

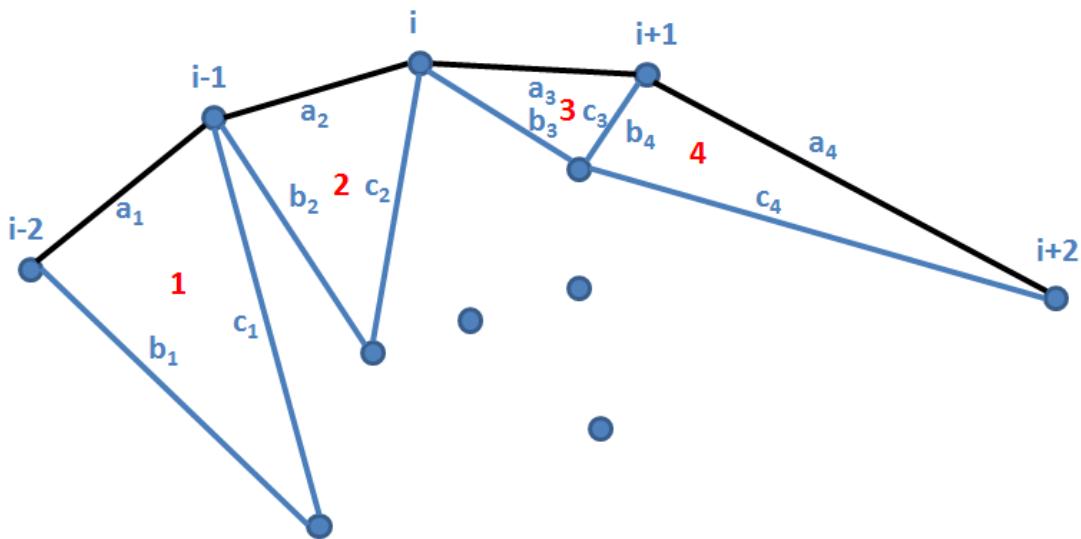


Figure 76 Détail des dimensions utilisées pour la création de nœuds des triangles de type 1

$$\max_{\text{triangles } j} \left(\frac{b_j}{a_j}; \frac{c_j}{a_j} \right) > 2 \Rightarrow \text{Création dans triangle } j \quad (129)$$

Dans un second temps, le travail est réalisé sur les triangles de type 2. Le détail de l'un de ces triangles est présenté sur la figure 77.

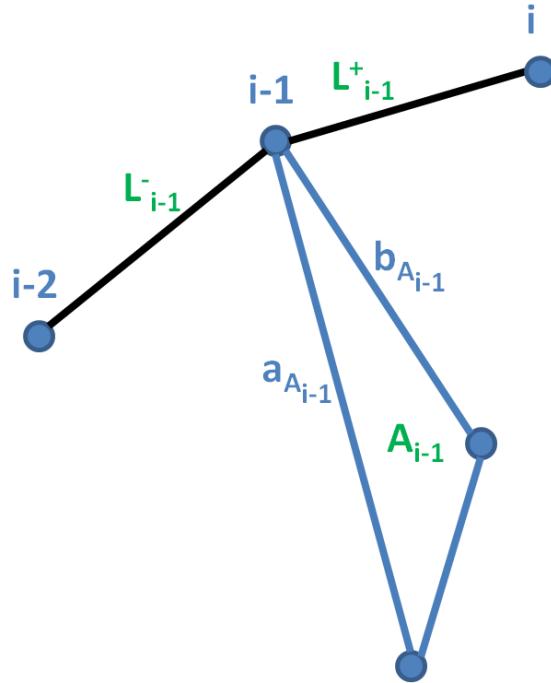


Figure 77 Détail des dimensions utilisées pour la création de nœuds des triangles de type 2

De la même manière, pour chaque triangle A_j ($B_j \dots$) lié au nœud j , les deux dimensions liées au nœud j a_{A_j} et b_{A_j} sont comparées au maximum des dimensions de la frontière avant (L^-_j) et après (L^+_j) le nœud j (130). La prise en compte du maximum et non du minimum est importante, un remaillage infini pouvant apparaître dans ce dernier cas.

$$\max_{\text{triangles } A_j(B_j \dots)} \left(\frac{a_{A_j}}{\max(L^-_j; L^+_j)}, \frac{b_{A_j}}{\max(L^-_j; L^+_j)} \right) > 2 \Rightarrow \text{Création triangle } j \quad (130)$$

Les résultats de cette procédure sont présentés sur la simulation précédente (Figure 78) où les nœuds créés dans le domaine sont en noir.

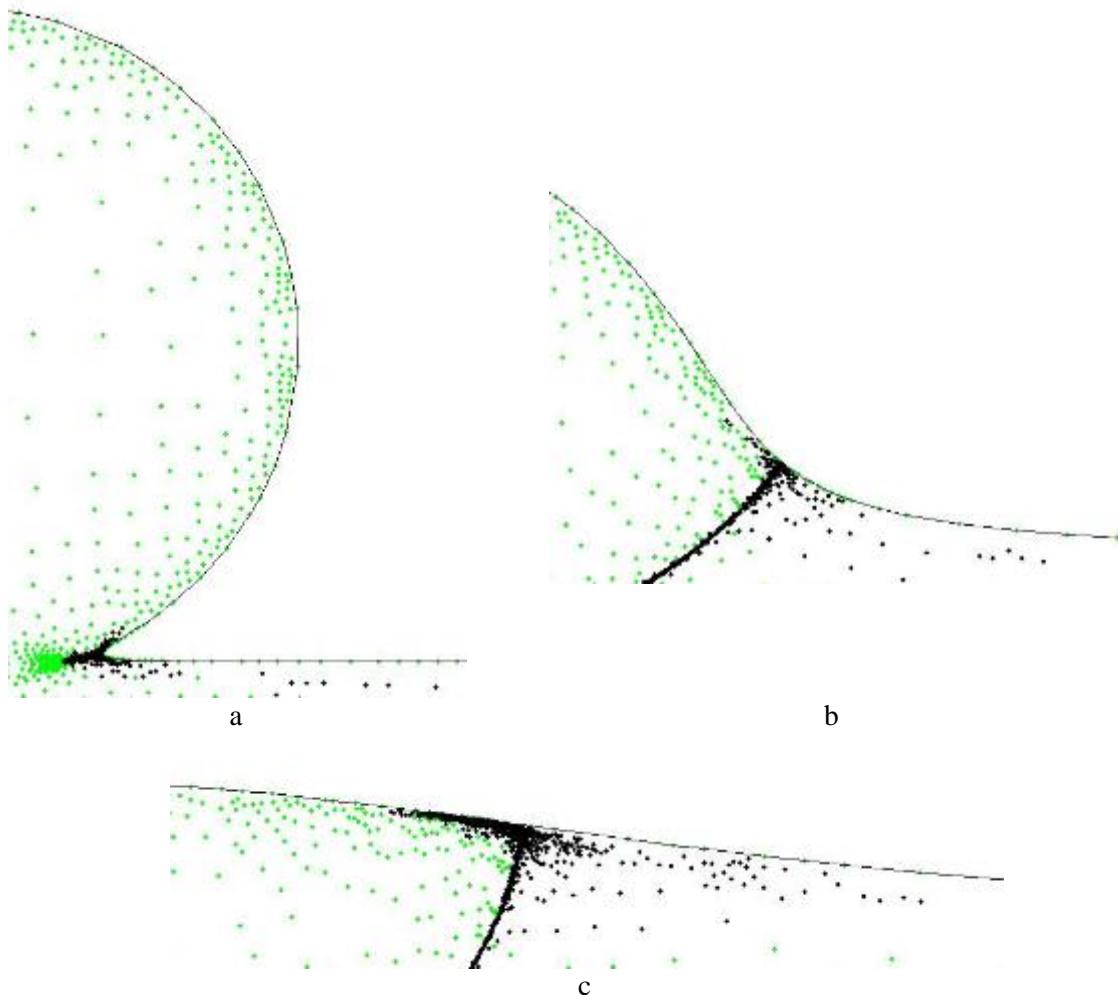


Figure 78 Crédit de nœuds dans le domaine près des frontières

Cet apport de nœuds résout les problèmes rencontrés précédemment. Cependant, ces nœuds deviennent rapidement noyés dans le domaine du fait des déformations observées, ne sont plus utiles et augmentent les temps de calcul et le besoin de mémoire. Une durée de vie leur est donc finalement attribuée (Figure 79) basée sur un critère d'évolution de la courbure moyenne de la frontière concernée.

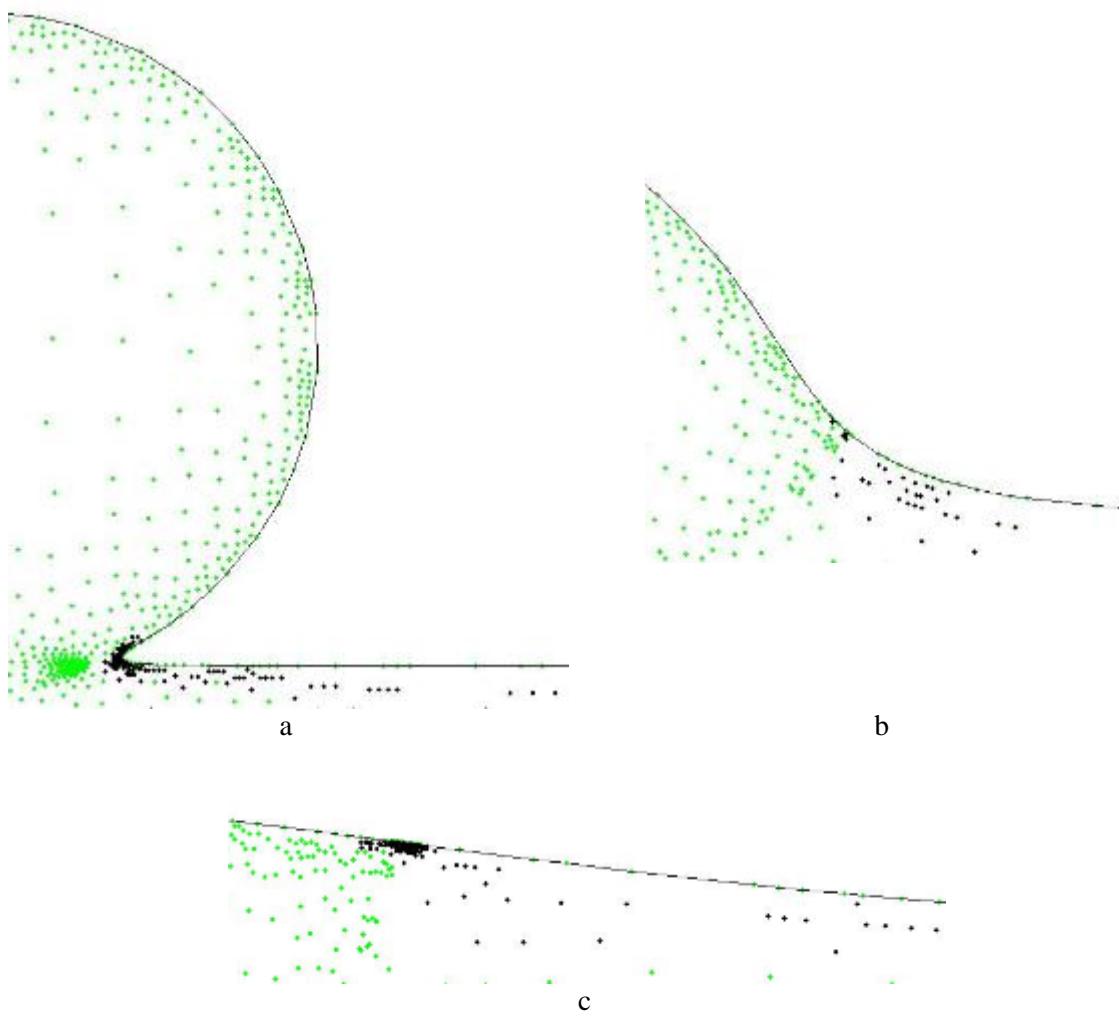


Figure 79 Création de nœuds dans le domaine, suivie de leur suppression

1.7.5.c Traitements spécifiques des maillages

i) Condition de symétrie – Procédé

Dans le cas de la simulation du procédé, un traitement particulier est fait dans les deux zones où la symétrie sur la tension de surface est traitée (Figure 61). En effet, la procédure de remaillage de frontière peut supprimer le nœud $i-1$ (Figure 80 Nœud rouge) et induire une perte de la condition de symétrie. Dans ce cas, un nouveau nœud est recréé à la même hauteur y que le nœud de bord, à mi-distance suivant x du prochain nœud existant (Figure 80 Nœud vert).

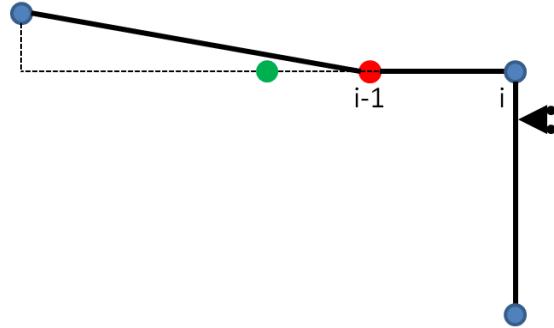


Figure 80 Ajout d'un nœud en cas de suppression indésirable

ii) Lieux de transition Liquide/Solide

Le long de la frontière, le remaillage est adapté à la courbure locale. Cependant, il ne doit pas y avoir de remaillage dans les zones de la frontière où une transition liquide/solide a lieu. En effet, dans ces zones (Figure 81), les nœuds solides ne se déplacent pas alors que les nœuds liquides sont libres. Cela induit localement des angles pouvant se réduire à quelques degrés, que la procédure initiale de remaillage chercherait à traiter, induisant localement des non-sens physiques.

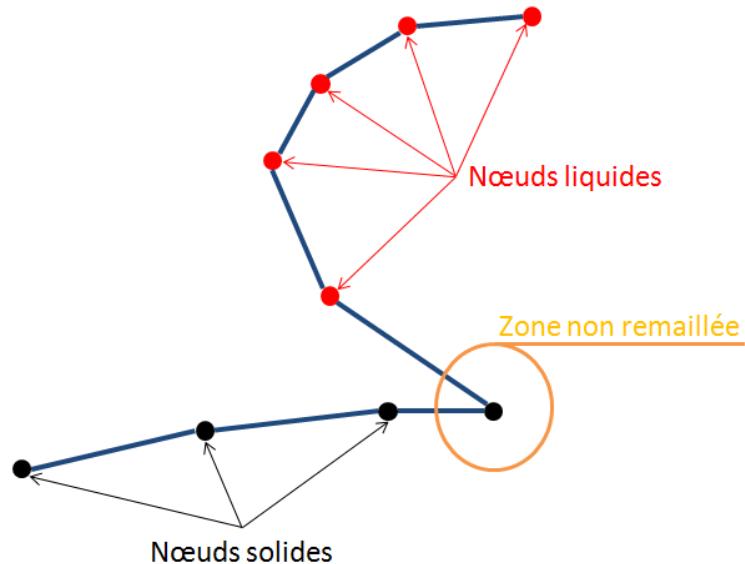


Figure 81 Non remaillage des zones de transition liquide/solide

1.8 Modélisation thermique

1.8.1 Mise en place de la méthode C-NEM

Nous disposons de la méthode C-NEM utilisée pour le développement hydrodynamique. La même méthode est utilisée pour le développement thermique.

1.8.1.a Des équations locales au système à résoudre

i) *Formulation variationnelle*

A partir de l'équation de la chaleur (56), la formulation variationnelle du problème est établie (131).

$$\begin{aligned} \forall T^* & CA \text{ à } 0 \\ \int_{\Omega} T^* \lambda \Delta T \, d\Omega + \int_{\Omega} T^* q \, d\Omega &= \int_{\Omega} T^* \rho c \frac{\partial T}{\partial t} \, d\Omega \\ \int_{\Omega} T^* \lambda \operatorname{div}(\overrightarrow{\operatorname{grad}}(T)) \, d\Omega + \int_{\Omega} T^* q \, d\Omega &= \int_{\Omega} T^* \rho c \frac{\partial T}{\partial t} \, d\Omega \end{aligned} \quad (131)$$

La méthode C-NEM étant une méthode lagrangienne, on a la relation suivante :

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\partial T}{\partial t} \quad (132)$$

En introduisant de nouvelles notations (133), la formulation variationnelle est réécrite (134)

$$\begin{aligned} b &= \frac{q}{\rho c} \\ k &= \frac{\lambda}{\rho c} \\ \underline{\varphi} &= -\lambda \overrightarrow{\operatorname{grad}}(T) \end{aligned} \quad (133)$$

où $\underline{\varphi}$ est le flux imposé sur le bord (W.m^{-2}) et k est considéré constant

$$-\frac{1}{\rho c} \int_{\partial\Omega} T^* \underline{\varphi} \cdot \vec{n} \, d\Gamma - k \int_{\Omega} \overrightarrow{\operatorname{grad}}(T^*) \overrightarrow{\operatorname{grad}}(T) \, d\Omega + \int_{\Omega} T^* b \, d\Omega = \int_{\Omega} T^* \frac{\partial T}{\partial t} \, d\Omega \quad (134)$$

ii) *Discrétisation du champ inconnu*

La température est interpolée à l'aide des fonctions de forme C-NEM φ_i par les valeurs nodales de température T_i (135).

$$T(x, y) = \sum_{i=1}^N \varphi_i(x, y) T_i \quad (135)$$

iii) *Introduction des notations pour une mise en forme matricielle*

Soit \bar{T} le vecteur de température aux nœuds du maillage et \underline{N} le vecteur d'interpolation de la température (136).

$$T(x, y) = \underline{N}^T \bar{\underline{T}} = (\varphi_1 \quad \dots \quad \varphi_k \quad \dots \quad \varphi_N) \begin{pmatrix} T_1 \\ \vdots \\ T_k \\ \vdots \\ T_N \end{pmatrix} \quad (136)$$

iv) Mise en forme matricielle du système

La formulation précédente est modifiée en y ajoutant la discréétisation du problème (137).

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{\rho c} \int_{\partial\Omega} \underline{N}^T \bar{\underline{T}}^* \underline{\varphi} \cdot \vec{n} \, d\Gamma - k \int_{\Omega} \overrightarrow{\text{grad}}(\underline{N}^T \bar{\underline{T}}^*) \overrightarrow{\text{grad}}(\underline{N}^T \bar{\underline{T}}) \, d\Omega + \int_{\Omega} \underline{N}^T \bar{\underline{T}}^* b \, d\Omega \\ &= \int_{\Omega} \underline{N}^T \bar{\underline{T}}^* \underline{N}^T \frac{\partial \bar{\underline{T}}}{\partial t} \, d\Omega \end{aligned} \quad (137)$$

En utilisant la forme discréétisée de $\overrightarrow{\text{grad}}(T)$ (138), la formulation finale est obtenue (139).

$$\overrightarrow{\text{grad}}(T) = \overrightarrow{\text{grad}}(\underline{N}^T \bar{\underline{T}}) = \begin{pmatrix} \varphi_{1,x} & \cdots & \varphi_{k,x} & \cdots & \varphi_{N,x} \\ \varphi_{1,y} & \cdots & \varphi_{k,y} & \cdots & \varphi_{N,y} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_1 \\ \vdots \\ T_k \\ \vdots \\ T_N \end{pmatrix} = \frac{\partial \underline{N}^T}{\partial \underline{x}} \bar{\underline{T}} \quad (138)$$

$$\bar{\underline{T}}^{*T} \left[-\frac{1}{\rho c} \int_{\partial\Omega} \underline{N} \underline{\varphi} \cdot \underline{n} \, d\Gamma + \int_{\Omega} \underline{N} b \, d\Omega \right] - \bar{\underline{T}}^{*T} k \int_{\Omega} \frac{\partial \underline{N}}{\partial \underline{x}} \frac{\partial \underline{N}^T}{\partial \underline{x}} \, d\Omega \bar{\underline{T}} - \bar{\underline{T}}^{*T} \int_{\Omega} \underline{N} \underline{N}^T \, d\Omega \frac{\partial \bar{\underline{T}}}{\partial t} = 0 \quad (139)$$

En introduisant les matrices $\underline{\underline{K}}$, $\underline{\underline{B}}$, $\underline{\underline{M}}$ et la notation $\dot{\bar{\underline{T}}}$ (140), le système à résoudre est obtenu (141).

$$\begin{aligned} \underline{\underline{K}} &= k \int_{\Omega} \frac{\partial \underline{N}}{\partial \underline{x}} \frac{\partial \underline{N}^T}{\partial \underline{x}} \, d\Omega \\ \underline{\underline{B}} &= -\frac{1}{\rho c} \int_{\partial\Omega} \underline{N} \underline{\varphi} \cdot \underline{n} \, d\Gamma + \int_{\Omega} \underline{N} b \, d\Omega \\ \underline{\underline{M}} &= \int_{\Omega} \underline{N} \underline{N}^T \, d\Omega \\ \dot{\bar{\underline{T}}} &= \frac{\partial \bar{\underline{T}}}{\partial t} \\ \bar{\underline{T}}^{*T} \underline{\underline{K}} \bar{\underline{T}} + \bar{\underline{T}}^{*T} \underline{\underline{M}} \dot{\bar{\underline{T}}} - \bar{\underline{T}}^{*T} \underline{\underline{B}} &= 0 \end{aligned} \quad (140) \quad (141)$$

1.8.1.b Calcul des termes du système

Le système thermique est explicité. Il faut à présent calculer les matrices $\underline{\underline{K}}$ et $\underline{\underline{M}}$ ainsi que le vecteur des conditions aux limites thermiques $\underline{\underline{B}}$. Les fonctions de calcul utilisées sont les mêmes que celles utilisées pour le développement hydrodynamique.

i) Matrices thermiques

Comme pour le calcul de la matrice hydrodynamique, la matrice thermique $\underline{\underline{K}}$ et la matrice $\underline{\underline{M}}$ sont intégrées par la méthode des gradients stabilisés à l'aide des fonctions développées au laboratoire. La conductivité thermique est considérée constante par morceaux sur chaque cellule de Voronoï.

Comme pour la matrice hydrodynamique, ces matrices peuvent ne pas être calculées à tous les pas de temps afin de gagner en temps de calcul.

ii) Conditions limites dans le domaine

Les conditions limites dans le domaine B_{vol} (142) sont intégrées sur le domaine comme la gravité dans le cadre hydrodynamique en considérant que le terme source b est constant par cellule de Voronoï.

$$B_{vol} = \int_{\Omega} \underline{N} b \, d\Omega \quad (142)$$

Dans le cadre de la simulation du procédé, elles correspondront aux termes source induits par le rayonnement laser.

iii) Conditions limites en surface de type flux

Les conditions aux limites en surface B_{surf} (143) sont intégrées sur les bords du domaine comme la tension de surface en considérant que le flux est linéaire sur le bord.

$$B_{surf} = -\frac{1}{\rho c} \int_{\partial\Omega} N \vec{\phi} \cdot \vec{n} \, d\Gamma \quad (143)$$

Dans le cadre de la simulation du procédé, elles correspondront au flux échangé avec l'air par convection.

1.8.2 Résolution du système

La solution du système (141) est solution de l'équation suivante (144).

$$\underline{\underline{M}} \dot{\underline{T}} = -\underline{\underline{K}} \bar{\underline{T}} + \underline{B} \quad (144)$$

1.8.2.a Schéma implicite de résolution

On utilise un développement de Taylor à l'ordre 1 pour exprimer la dérivée en température (145).

$$\dot{\underline{T}}^n = \frac{\bar{\underline{T}}^{n+1} - \bar{\underline{T}}^n}{\Delta t} \quad (145)$$

où $\bar{\underline{T}}^{n+1}$ est la température au pas de temps n+1, $\bar{\underline{T}}^n$ la température au pas de temps n et Δt le pas de temps (s)

Le schéma implicite du système à résoudre (146) permet d'exprimer la température nodale au temps n+1 (147).

$$\underline{\underline{M}} \frac{\bar{\underline{T}}^{n+1} - \bar{\underline{T}}^n}{\Delta t} = -\underline{\underline{K}} \bar{\underline{T}}^{n+1} + \underline{B}^{n+1} \quad (146)$$

$$\underline{\bar{T}}^{n+1} = \left[\underline{\underline{M}} + \Delta t \underline{\underline{K}} \right]^{-1} \left(\underline{\underline{M}} \underline{\bar{T}}^n + \Delta t \underline{\underline{B}}^{n+1} \right) \quad (147)$$

$\underline{\underline{B}}^{n+1}$ n'étant pas connu, on approxime $\underline{\underline{B}}^{n+1}$ à l'aide de $\underline{\underline{B}}^n$.

1.8.2.b Résolution directe et itérative

Comme pour la résolution hydrodynamique, le calcul de la solution peut être effectué par inversion directe ou par méthode itérative BICGSTAB.

1.8.2.c Prise en compte des conditions aux limites en température

Les conditions aux limites en températures imposées dans les simulations sont maintenues pendant toute leur durée et s'appliquent sur les frontières du domaine. C'est pourquoi, ayant imposé une température initiale, la dérivée de la température est imposée nulle en modifiant les lignes correspondantes aux températures imposées dans le système initial (144). Ces lignes sont imposées nulles et un coefficient 1 est ajouté dans la diagonale de la matrice $\underline{\underline{M}}$.

1.8.3 Mise en place du modèle thermique pour le laser

Le laser apporte une puissance volumique b dans la matière. L'étude bibliographique (0) nous conduit à modéliser cette action à l'aide d'une loi de Beer-Lambert en profondeur et une répartition gaussienne en surface (58). Bien que les lasers CO₂ utilisés soient en mode pulsé, nous représenterons dans un premier temps leur action en mode continu. La mise en application de ce modèle nécessite de déterminer la profondeur des nœuds p . Nous ajouterons ensuite un asservissement numérique afin de contrôler la puissance réellement injectée dans le domaine.

1.8.3.a Modification du modèle de la littérature

i) Puissance globale

L'intégration de la distribution théorique de puissance proposée dans la littérature sur la surface supérieure du domaine ne permet pas de retrouver exactement la puissance laser de consigne (148).

$$\begin{aligned} \int_S I_0 e^{-\frac{2r^2}{w^2}} dr &= 2\pi I_0 \int_0^R r e^{-\frac{2r^2}{w^2}} dr = \frac{w^2}{2} \pi I_0 \left[e^{-\frac{2r^2}{w^2}} \right]_0^R \\ \int_S I_0 e^{-\frac{2r^2}{w^2}} dr &= \frac{w^2}{2} \pi I_0 \left(e^{-\frac{2R^2}{w^2}} - 1 \right) = P(e^{-2c} - 1) = 0.9863P \end{aligned} \quad (148)$$

où $c = 2,146$

Le modèle implémenté pour la simulation du procédé est donc le suivant (149).

$$\begin{aligned} I(r, p) &= (1 - R_e) k I_0 e^{-\frac{2r^2}{w^2}} e^{-kp} \\ I_0 &= \frac{2P}{(e^{-2c} - 1)\pi w^2} \quad \text{et} \quad w = \frac{R}{c} \end{aligned} \quad (149)$$

ii) Répartition Gaussienne

Suite à diverses analyses numériques et expérimentales, le modèle donné dans la littérature pour la répartition Gaussienne du laser CO₂ nous a paru erroné. Nous avons donc analysé la distribution spatiale de puissance selon le rayon du faisceau afin de déterminer le coefficient c correspondant à notre laser.

Pour cela, nous avons procédé à des tirs laser sur une plaque épaisse transparente d'un matériau polymère pour deux puissances laser différentes, 50 % et 99 % de la puissance nominale de 55 W. A ces puissances, la déformation par fusion-vaporisation de la surface nous permet de remonter à la distribution de puissance. Les images des trous pour une netteté adaptée à différentes profondeurs P1, P2 et P3 sont présentées (Tableau 20). Ces hauteurs ne sont proposées qu'à titre indicatif, des mesures précises des profils des trous sont menées par la suite.

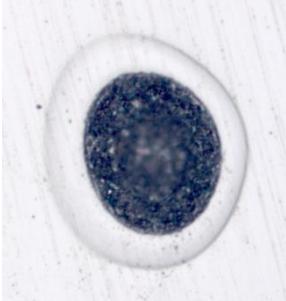
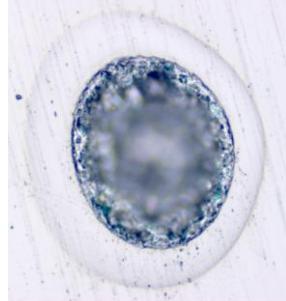
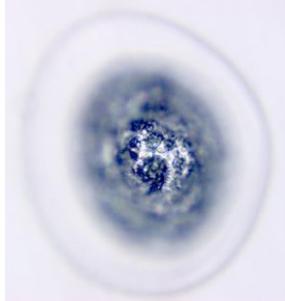
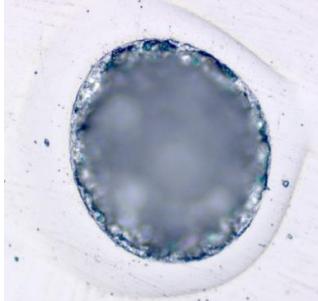
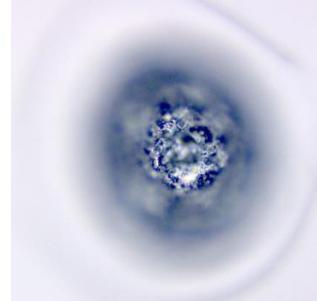
Puissance	P1	P2	P3
50%			
99%			

Tableau 20 Images des impacts laser

Le diamètre de la zone de l'impact est de l'ordre de 200 µm à 50 % et 250 µm à 99 %. A l'aide d'un profilomètre à stylet, nous avons mesuré la géométrie des trous obtenus et avons déterminé une répartition gaussienne permettant de représenter cette profondeur en fonction de la distance radiale à l'axe du laser (Figure 82).

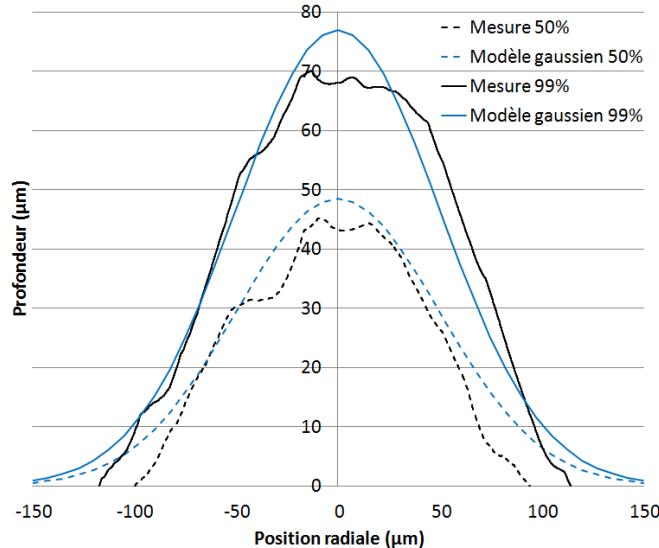


Figure 82 Analyse et modélisation de la répartition Gaussienne du trou suite à l'impacte

Il a été nécessaire de corriger le coefficient c valant 2,146 proposé dans la littérature et de le remplacer par une valeur de 1,5 afin de se rapprocher du profil obtenu, que ce soit à 50 % ou à 99 % de la puissance nominale du laser.

En comparant le modèle de la littérature au modèle déterminé avec $c=1,5$ (Figure 83), on remarque que le pic de puissance est diminué d'un facteur 2, ce qui se rapproche des estimations effectuées au premier abord. Ces résultats seront détaillés lors de la comparaison de la simulation du procédé avec les essais expérimentaux au dernier chapitre de cette thèse.

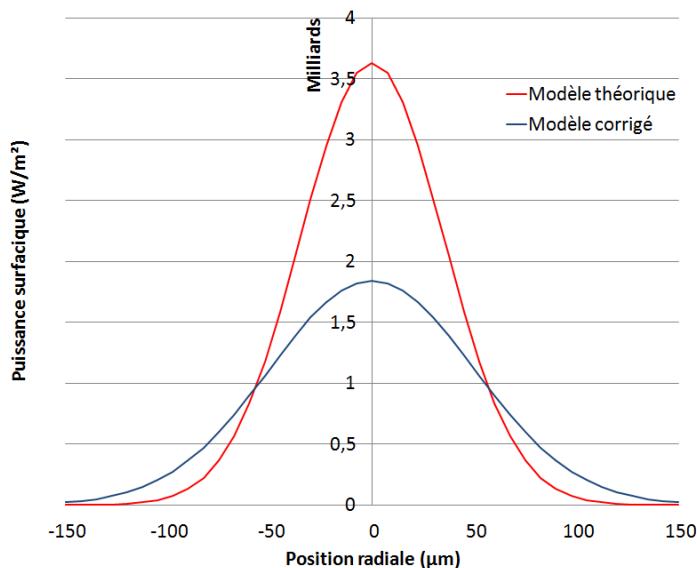


Figure 83 Comparaison du modèle de la littérature avec la nouvelle répartition gaussienne

1.8.3.b Calcul des profondeurs des nœuds

i) *Détermination des nœuds de la frontière sous laser*

Le premier travail à effectuer est la détermination des nœuds de la surface supérieure du domaine directement sous le rayonnement laser vertical de haut en bas. Pour cela, nous avons développé une procédure décrite ci-dessous. Nous utiliserons un exemple de surface supérieure pour illustrer la démarche (Figure 84).

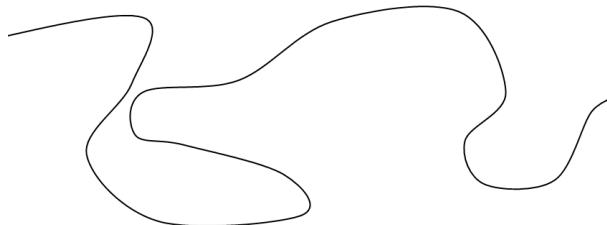


Figure 84 Surface supérieure illustrant la démarche de détermination des nœuds sous laser

Appelons « rebroussement de frontière » noté R un lieu où la frontière change de sens d'évolution suivant l'axe des abscisses (axe horizontal).

La méthode consiste à (Figure 85) :

- 1 – Découper la surface supérieure en différents morceaux dont les limites sont les rebroussements R_i .
- 2 – Identifier toutes les surfaces S_i susceptibles d'être exposées au laser. En parcourant la surface de gauche à droite, toute portion entre deux rebroussements dont le premier nœud a une abscisse inférieure au dernier nœud est considérée.
- 3 – Déterminer la section contenant le nœud N le plus haut parmi les nœuds des surfaces identifiées: S_3 .
- 4 – Déterminer parmi les sections S_i , les portions réellement sous laser. En partant de la section supérieure S_3 , vers la gauche, on détermine si un nœud à l'extrémité droite d'une section S_i à gauche de S_3 (S_1 ou S_2) possède une abscisse et une ordonnée supérieure au nœud extrême gauche R_4 de la section en cours S_3 . Comme c'est le cas avec le nœud R_1 , seule la portion P_{31} de S_3 à droite de P_3 est prise en compte. Sinon, comme c'est le cas vers la droite, toute la portion P_{32} à droite du nœud N de S_3 est prise en compte. On passe ensuite à chaque section suivante. Parmi ses nœuds, par exemple pour S_2 représentant le cas le plus contraignant, ne sont pas pris en compte les nœuds de droite dont l'abscisse est supérieure au minimum des abscisses des nœuds d'extrémité gauche des sections à droite, ici le nœud R_4 . Ainsi, S_2 est limitée à droite par le point P_1 . De même, à gauche ne sont pas pris les nœuds dont l'abscisse est inférieure au maximum des abscisses des nœuds d'extrémité droite des sections à gauche, ici le nœud R_1 . Ainsi, S_2 est limitée à gauche par le point P_2 . Aucun nœud de S_2 n'est donc retenu. Dans le cas de S_4 , seuls les nœuds à droite de P_4 sont retenus.

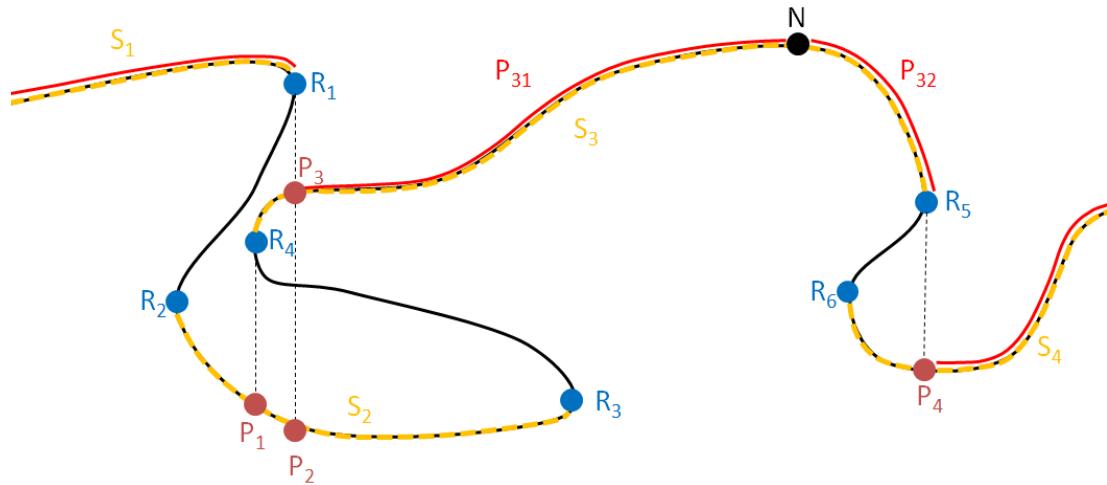


Figure 85 Détermination des nœuds sous laser

ii) Calcul de la profondeur des nœuds du domaine

Le modèle laser développé considère que les porosités laissent passer le rayonnement. Cette hypothèse est réelle, mais comme nous l'avons montré précédemment (CHAPITRE II .5.2), d'autres facteurs influencent la pénétration du rayonnement en profondeur.

Afin de calculer la profondeur sous laser des nœuds, une démarche numérique est développée. Elle consiste à (Figure 86):

- 1 - Déterminer comme précisé au paragraphe précédent les nœuds de la surface supérieure directement exposés au rayonnement (trait rouge). Ces nœuds sont à profondeur nulle.
- 2 - Calculer, pour chaque nœud i du domaine, la distance d_i le séparant du segment de la surface contenant les deux nœuds de surface à profondeur nulle au-dessus de lui à droite et à gauche.
- 3 - Retirer à chaque distance d_i la somme des longueurs vides L_i au-dessus de chaque nœud i issues de la présence des cavités.
- 4 - Retirer, lorsque des nœuds de la surface supérieure ne sont pas directement sous laser, la quantité de vide restante H_i .

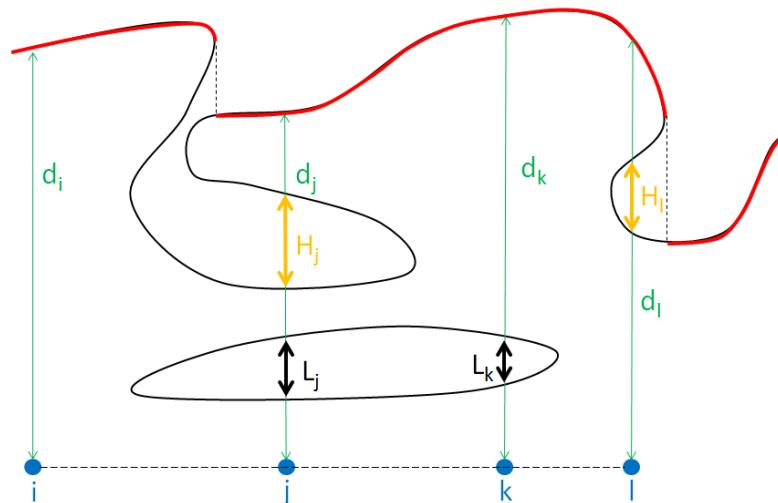


Figure 86 Calcul des profondeurs sous laser des nœuds du domaine

Cette figure 86 rassemble tous les cas de figure possible, lorsqu'il n'y a qu'une cavité. L'ajout de cavités induit la soustraction de longueurs L_i en plus. Voici le résultat (Figure 87) d'un calcul de profondeur réelle avec la méthode développée. Nous pouvons vérifier la parfaite concordance entre les couleurs et les zones vides du domaine. Nous utiliserons donc cette méthode par la suite.

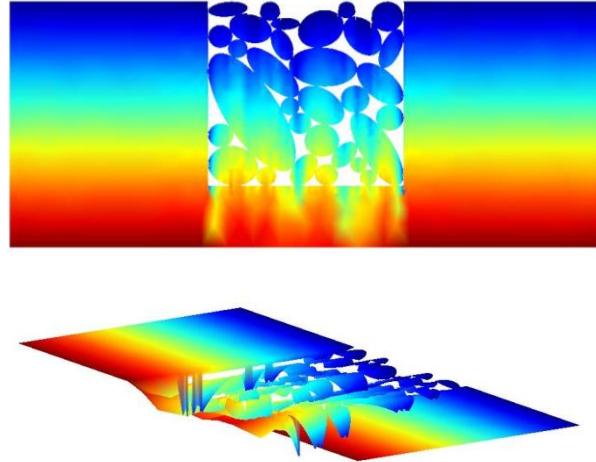


Figure 87 Calcul de profondeur sur domaine multi-grains

Le dégradé de couleurs va du bleu (profondeur nulle) au rouge (profondeur maximale)

1.8.3.c Asservissement numérique de la puissance injectée

En 2D comme en 3D, la puissance réellement injectée $P_{injectée}$ ne correspond pas à la puissance théorique P_{2D} à apporter car les intégrations du flux volumique b sont réalisées de manière constante par morceaux. Un asservissement numérique est donc programmé afin de calculer, après imposition de la formule théorique de la puissance volumique, la puissance réellement injectée dans le matériau. Ensuite, un coefficient correcteur C permet de modifier la puissance injectée afin qu'elle soit égale à la puissance à injecter (150).

$$C = \frac{P_{2D}}{P_{injectée}} \quad (150)$$

Deux cas de figure peuvent être simulés. Soit la répartition de puissance est considérée uniformément répartie sur le spot laser, soit elle est Gaussienne.

La simulation étant bidimensionnelle, la consigne de puissance à injecter sur le matériau n'est pas la puissance laser mais une puissance linéique P_{2D} dans la tranche de matériau étudiée.

i) Répartition constante

Soit P_{surf} la puissance surfacique moyenne apportée par le laser constante sur le spot laser (151).

$$P_{surf} = \frac{P}{\pi R^2} \quad (151)$$

où R est le rayon du spot laser et P la puissance laser (W)

La puissance injectée dans une tranche de matériau P_{2D} sur un diamètre du laser peut être calculée par intégration sur le diamètre du laser (152).

$$P_{2D} = \int_{-R}^R P_{surf} dr = \frac{2P}{\pi R} \quad (152)$$

ii) Répartition Gaussienne

Dans le cas d'une répartition Gaussienne, P_{2D} ne peut pas être calculée de la même manière. En effet, la courbe de Gauss est donnée dans la littérature et il faut calculer combien P_{2D} vaut sur un diamètre du laser (153).

$$\begin{aligned} P_{2D} &= \int_{-R}^R (1 - R_e) I_0 e^{-\frac{2r^2}{w^2}} dr = (1 - R_e) I_0 2 \int_0^R e^{-\frac{2r^2}{w^2}} dr \\ P_{2D} &= 2(1 - R_e) I_0 \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\frac{\sqrt{2}}{w}R} e^{-u^2} \frac{w}{\sqrt{2}} du \\ P_{2D} &= (1 - R_e) I_0 w \sqrt{\frac{\pi}{2}} \operatorname{erf}\left(\frac{\sqrt{2}}{w} R\right) \end{aligned} \quad (153)$$

On obtient donc P_{2D} dans le cas d'une répartition Gaussienne (152).

$$P_{2D} = (1 - R_e) I_0 w \sqrt{\frac{\pi}{2}} \operatorname{erf}\left(\frac{\sqrt{2}}{w} R\right) \quad (154)$$

1.8.4 Détails numériques liés à la thermique

Le pas de temps de simulation est calculé à l'aide des vitesses des nœuds (CHAPITRE III .1.5.1) et peut prendre des valeurs assez grandes pour pénaliser la thermique. De même, lors du passage laser, le pas de temps doit être réduit afin de bien représenter le chauffage laser, mais il faut toutefois que les pas de temps hydrodynamiques soient pris en compte correctement.

1.8.4.a Réduction du pas de temps

Afin de réduire le pas de temps hydrodynamique lors de la simulation en dehors du passage laser et lorsque c'est nécessaire, celui-ci est adapté pour limiter l'évolution de température du nœud dont la variation de température est la plus importante.

Pour cela, un calcul de la dérivée temporelle de la température en chaque nœud est mis en place. Ensuite, un pas de temps thermique est calculé pour que le nœud présentant la plus grande dérivée ne voie pas sa température évoluer de plus d'un facteur seuil permettant des résultats corrects. Si ce temps est inférieur au pas de temps hydrodynamique, alors c'est celui-ci qui est appliqué comme pas de temps global.

1.8.4.b Ajout d'un terme de dissipation thermique afin de correspondre à la 3D

La simulation bidimensionnelle sous-estime le refroidissement après passage laser, par l'absence de conduction thermique selon la troisième dimension.

Suite à plusieurs essais, le modèle retenu pour corriger ce problème introduit des dissipations de chaleur supplémentaires pour représenter les pertes 3D :

- (1) Un premier terme est ajouté en surface (155), sous forme d'un flux de chaleur proportionnel à la différence de température entre chaque nœud de la surface et la température initiale/finale du domaine (température imposée sur les bords).

$$\varphi_s = k^{2D3D} s (T - T_0) \quad (155)$$

- (2) Un second terme correspond à une dissipation de chaleur dans le domaine dépendant de la profondeur z ($z>0$) (156). Ce flux surfacique est proportionnel à la différence entre la température de chaque nœud du domaine et la température initiale/finale du domaine. Il est défini comme nul à la surface et constant à partir d'une certaine profondeur. Un modèle en exponentielle est donc retenu.

$$b_z = k^{2D3D} v (T - T_0) (1 - e^{-\alpha^{2D3D} z}) \quad (156)$$

Les coefficients dissipatifs surfaciques et volumiques k^{2D3D}_s et k^{2D3D}_v seront déterminés dans le paragraphe de validation thermique.

1.8.4.c Passage laser : Couplage thermique/hydrodynamique

Pendant le passage du faisceau laser, un calcul thermique est mis en œuvre avec un pas de temps fixe adapté à toute la durée du cycle. Ce pas de temps est piloté par un paramètre permettant à un point de la surface de voir l'action laser pendant N calculs successifs.

La durée du passage laser dépend de la largeur du domaine et de la vitesse du laser. Il est possible que le pas de temps hydrodynamique dt^{hydro} soit plus court que le temps de passage laser T^{laser} . C'est pourquoi une méthode est proposée afin de prendre en compte les différents cas de figures.

Si $dt^{hydro} = T^{laser}$, le calcul du chauffage laser est effectué en une seule fois, et la fin du calcul thermique correspond au moment où les nœuds sont déplacés.

Si $dt^{hydro} > T^{laser}$, dt^{hydro} est redéfini et imposé à T^{laser} .

Si $dt^{hydro} < T^{laser}$, le calcul du chauffage laser est effectué en plusieurs fois. Après chaque étape de calcul permettant au laser de se déplacer pendant dt^{hydro} , les nœuds sont déplacés, un nouveau pas de temps dt^{hydro} est calculé, puis la comparaison entre dt^{hydro} et T^{laser} permet de déterminer dans lequel des 3 cas précédents il faut à nouveau se placer.

1.9 Evolution physique de la matière

L'échauffement laser permet de fondre la poudre de polymère. Après fusion, la diminution de température peut induire la cristallisation de la matière. Durant sa phase liquide, les chaînes macromoléculaires dont la mobilité dépend de la viscosité se déplacent et permettent d'obtenir un état de soudage entre grains. Il est donc nécessaire de prendre en compte ces aspects dans la simulation numérique.

1.9.1 État du polymère

Le changement d'état d'un matériau se traduit par des échanges de calories (enthalpie de changement d'état) qu'il faut normalement prendre en compte. Une méthode usuelle consiste à utiliser un coefficient de capacité calorifique évoluant brutalement avec la température au moment du changement d'état ($\Delta H_f = \int_{T_f}^T Cp(T) dT$). Cette prise en compte nécessite que les pas de temps numériques de la simulation soient adaptés, en chaque nœud, afin de décrire cette évolution lors de l'ensemble du cycle thermique (chauffage laser, diffusion de la chaleur et refroidissement à l'arrêt du laser).

Dans le cadre des simulations du procédé de fusion laser sélective, chaque nœud est à une température différente avec de forts gradients thermiques. De ce fait, les changements d'état ont lieu aléatoirement et à des moments différents. La prise en compte de l'enthalpie de changement d'état impose donc d'adapter et par conséquent de réduire les pas de temps pendant la majeure partie de la simulation, induisant des temps de simulation excessifs dans le cadre de cette étude.

C'est pourquoi nous avons choisi de considérer les changements d'état sans prise en compte de l'enthalpie ΔH_f , en imposant un état « tout ou rien » sur l'état du fluide.

Ainsi, en appelant T_f la température de fusion du polymère, et T_c sa température de cristallisation, l'état liquide au pas de temps n est décrit à l'aide de la variable $E(n)$ valant 1 à l'état liquide, et 0 à l'état solide (157).

$$\begin{aligned} E(n) &= 1 \text{ si } \begin{cases} T(n) > T_f \\ T_c < T(n) < T_f \text{ et } E(n-1) = 1 \end{cases} \\ E(n) &= 0 \text{ si } \begin{cases} T(n) < T_c \\ T_c < T(n) < T_f \text{ et } E(n-1) = 0 \end{cases} \end{aligned} \quad (157)$$

1.9.2 Viscosité du fluide

La viscosité nodale du fluide est introduite à l'aide d'une loi d'Arrhenius (158) et recalculée à chaque pas de temps.

$$\mu(T) = K e^{\frac{E}{RT}} \quad (158)$$

1.9.3 Critère de soudage

En utilisant la caractérisation du soudage décrite précédemment (CHAPITRE III .1.1.3), l'étude nodale de l'évolution du soudage du polymère est introduite en intégrant à chaque pas de temps la valeur du critère de soudage ajoutée à chaque nœud, tant qu'il est à l'état liquide.

Une valeur nodale comprise entre 0 et 1 est ainsi obtenue pour chaque nœud.

1.10 Analyse de la simulation

Les données étudiées dans le cadre de la simulation du procédé sont le soudage en profondeur des grains de poudre et la cinétique de densification de la poudre du fait de la coalescence des grains entre eux.

1.10.1 Caractérisation du soudage

Le calcul de l'état de soudage aux nœuds du domaine permettra d'obtenir une cartographie de l'état de soudage en fin de simulation, ainsi que l'évolution de la profondeur soudée avec le temps.

1.10.2 Étude cinétique de la densification

L'analyse de la courbure adimensionnée de la surface supérieure du domaine permettra de caractériser la cinétique de la coalescence des grains et donc, de la densification de la poudre.

2 Développement du modèle macroscopique

Maintenue à une température entre la fusion et la cristallisation, la poudre de polymère subit un échauffement rapide lors de l'action laser lui permettant de passer à l'état liquide. Dès lors, sa température redescend à la température de préchauffage de la zone de fabrication à laquelle elle reste liquide, permettant à l'air de diffuser dans la matière afin d'améliorer la densité finale du matériau.

Par la suite, une nouvelle couche de poudre est étalée sur la matière en fusion. Cette couche, pour des questions de coulabilité, ne peut être préchauffée à la même température que celle de la zone de fabrication. Elle induit donc un refroidissement au moment de son étalement, puis la température remonte à la température de préchauffage de la zone de fabrication.

Les paramètres liés à cet apport de poudre sont la température de la couche étalée, la vitesse d'étalement et l'épaisseur de la couche. Combinés à la température de préchauffage de la zone de fabrication, leur effet sur la thermique de la matière peut être étudié afin de déterminer s'il y a ou non possibilité de cristallisation du matériau liquide.

L'objet de cette partie est donc de simuler l'apport d'une couche de poudre thermoplastique sur un matériau en fusion à une température entre la fusion et la cristallisation en prenant en compte les trois paramètres liés à l'étalement.

2.1 Paramètres choisis pour les simulations

Dans un premier temps, le coefficient d'échange par convection naturelle entre le polymère et l'air est fixé à $15 \text{ W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$.

Les paramètres matériau retenus pour cette étude (Tableau 21) sont les paramètres d'un PEEK à 400°C (Zoller et al., 1995).

Masse volumique	$\rho = 1072 \text{ kg.m}^{-3}$
Conductivité thermique	$\lambda = 0,25 \text{ W.m}^{-1}.K^{-1}$
Capacité calorifique	$C_p = 1600 \text{ J.kg}^{-1}.K^{-1}$

Tableau 21 Paramètres du polymère fondu à 400°C

Ces paramètres sont appliqués au matériau dense, à l'état liquide. Cependant, la couche de poudre apportée n'est pas dense. Cette couche est assimilée à un matériau dense et ses paramètres doivent donc être modifiés en conséquence. Sa masse volumique est directement reliée à sa compaction. Les différentes analyses menées sur les poudres du projet au chapitre 2 donnent une compaction moyenne $c = 0,25$. La masse volumique ρ' de la poudre est donc diminuée en conséquence : $\rho' = \rho c$, la capacité calorifique massique de la poudre reste inchangée, la conductivité thermique de la poudre λ' doit être modifiée. La poudre peut être assimilée à un matériau composite composé d'air et de polymère, la conductivité de l'air, 0,026 W/m/K, étant presque 10 fois inférieure à celle du PEEK.

Différents modèles de la littérature permettent de supposer la conductivité thermique des matériaux composites. Considérons que la matrice est l'air, et que les fibres sont les grains de polymère. Les premiers modèles simples parallèle et série permettent de donner des bornes inférieures et supérieures (Bigg, 1995) à la valeur de conductivité à appliquer à la poudre (Tableau 22).

Modèle Série	$\lambda'_{\text{parallèle}} = f\lambda_f + (1 - f)\lambda_m$	$\lambda = 0.0822 \text{ W.m}^{-1}.K^{-1}$
Modèle Parallèle	$\lambda'_{\text{série}} = \frac{1}{\frac{1}{\lambda_f} + \frac{1-f}{\lambda_m}}$	$\lambda = 0.0338 \text{ W.m}^{-1}.K^{-1}$

Tableau 22 Conductivité thermique des modèles parallèle et série

Les travaux de Maxwell (1873), basés sur une théorie potentielle pour un matériau composite composé d'une matrice et de sphères réparties de manière homogène et sans interactions entre elles dans un milieu homogène, donnent une conductivité plus réaliste λ' , plus largement utilisée aujourd'hui.

$$\lambda'_{\text{Maxwell}} = \frac{\lambda_f + 2\lambda_m + 2f(\lambda_f - \lambda_m)}{\lambda_f + 2\lambda_m - f(\lambda_f - \lambda_m)} = 0.0440 \text{ W.m}^{-1}.K^{-1} \quad (159)$$

Bien que nos poudres présentent des interactions entre les grains, nous choisissons d'utiliser ce modèle simple pour l'estimation de la conductivité de nos poudres. L'interaction entre les grains devrait augmenter la conductivité globale du matériau, le choix du modèle de Maxwell devrait donc conduire à sous-estimer la conductivité réelle de la poudre.

2.2 Mise en place de la démarche

Le logiciel utilisé est le logiciel COMSOL Multiphysics (module de thermique). Deux domaines sont créés et maillés (Figure 88). Une simulation bidimensionnelle est suffisante pour représenter un cas idéal d'étalement. Les conditions aux limites en flux nul ou température sur les bords du domaine

autre que la zone d'étalement, peuvent avoir une influence sur le résultat. Un échange par convection avec l'air ambiant est modélisé sur la surface supérieure du domaine.

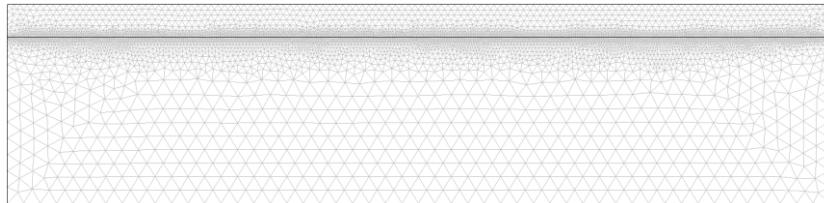


Figure 88. Domaines simulés pour l'étalement d'une couche de poudre

Les paramètres du matériau dense sont attribués au domaine inférieur et les paramètres de la poudre sont affectés au matériau supérieur. La zone d'interface entre poudre et matériau dense est finement maillée. Afin de simuler l'apport d'une couche en fonction du temps, la conductivité thermique du domaine supérieur est initiée à une valeur très grande, puis la conductivité thermique des nœuds est activée en cours de simulation à l'aide d'une fonction créneau de la conductivité $\lambda(t,x,y)$ (160) décrivant l'étalement à la vitesse V de gauche à droite (Figure 89). Ainsi, au départ et tant qu'elle n'a pas été activée, la couche de poudre est rendue invisible pour la thermique ($\lambda = 0$), puis elle devient égale à $\lambda(T)$ du polymère sur une largeur de transition Δx .

$$\lambda(t, x, y) = \lambda \cdot (1 - \text{flc2hs}(x - Vt, \Delta x)) \quad (160)$$

Avec flc2hs la fonction créneau (de Heaviside) de COMSOL et Δx la largeur du front de transition

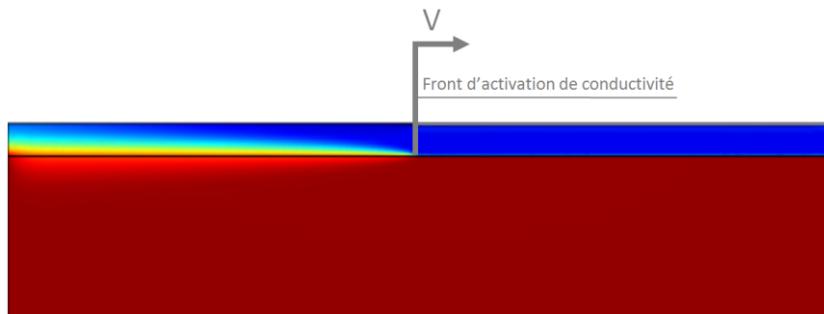


Figure 89 Activation de la conductivité de la poudre

La température de la matière est considérée à différentes profondeurs: dans la couche de poudre (50 µm), et dans la matière fondue initiale à -10, -50 et -100 µm de profondeur (Figure 90). La mesure sur l'interface est perturbée par les conditions de transition entre deux matériaux distincts. C'est pourquoi elle ne sera pas analysée.

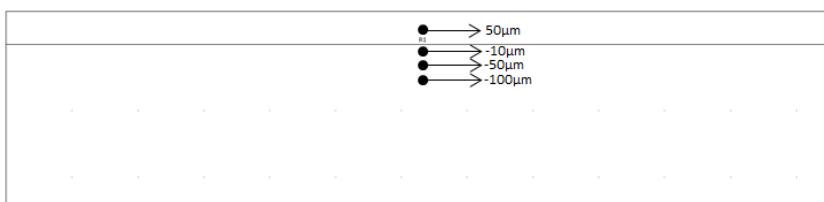


Figure 90 Points de mesure de la température

3 Conclusion du Chapitre 3

Dans un premier temps, une simulation fluide anisotherme avec prise en compte de la tension de surface et un modèle thermique laser a été mise en place afin de simuler la fusion laser sélective de poudres thermoplastiques. Le fluide est considéré visqueux newtonien incompressible et les effets d'inertie sont négligés. Les principales difficultés rencontrées lors du développement de ce logiciel ont été liées à la prise en compte de la tension de surface.

Le choix de la méthode C-NEM a permis de créer des procédures de remaillage simples et adaptées aux problèmes traitant de la tension de surface. En particulier, un remaillage de frontière adapté à la courbure locale et un remaillage dans le domaine près des frontières lui-même adapté à la courbure ont permis d'alléger les temps de calcul et la mémoire utilisés.

Un travail particulier a également été mis en œuvre afin de déterminer un pas de temps limitant les rotations locales de la frontière autour des nœuds de frontière. Ce critère semble très bien adapté au traitement de fluides soumis à la tension de surface.

Une intégration linéaire de la tension de surface sur les bords et un schéma de déplacement des nœuds de Taylor à l'ordre 2 ont été implémentés et ont permis de limiter les phénomènes d'oscillations de frontière.

Des essais ont été menés afin de lisser la tension de surface sur les frontières mais ils ont provoqué des problèmes inattendus. En effet, la non prise en compte de la force locale réelle ne participe pas au lissage de la frontière, et une résultante globale de la tension de surface sur la frontière apparaît, induisant des mouvements globaux néfastes à la simulation. Rappelons que cette résultante, sur une surface fermée où présentant à ses deux extrémités des segments parallèles, est nulle.

Les différents choix numériques établis seront précisés, validés et fixés au cours du prochain chapitre.

La simulation mise en place est bidimensionnelle. Bien que les résultats qui seront obtenus soient quelque peu différents de la réalité, ils permettront dans un premier temps de comparer les temps caractéristiques des différents phénomènes mis en jeu. En effet, les temps caractéristiques de la coalescence de deux cylindres infinis et de deux sphères de mêmes diamètres sont du même ordre de grandeur. Ces résultats permettront aussi d'évaluer les profondeurs soudées. Le comportement thermique 2D étant différent de celui existant en 3D, une diffusion fictive a été ajoutée au domaine afin de représenter la perte réelle 3D dans la direction transverse.

Dans un second temps, un modèle bidimensionnel de l'étalement de couches de poudres permettant d'étudier le refroidissement induit par l'étalement a été développé avec le logiciel COMSOL.

L'analyse des différentes phases du procédé va donc pouvoir être mise en place. Il est cependant nécessaire, dans un premier temps, de valider les modèles, et de préciser les différents choix numériques permettant d'obtenir des résultats fiables le plus rapidement possible.

CHAPITRE IV - VALIDATION DU LOGICIEL C-NEM DÉVELOPPÉ

Le logiciel étant mis en place, une phase de validation doit permettre de montrer que la simulation hydrodynamique avec tension de surface et la simulation thermique sont correctes. La simulation d'une goutte pendante dont la géométrie est gouvernée par la tension de surface, puis la simulation de la coalescence de cylindres infinis, des essais de disparition de cavités et enfin trois essais thermiques simples doivent permettre de valider le logiciel.

1 Validation hydrodynamique

La simulation de la coalescence de cylindres infinis et de la disparition de cavités permettra de valider la bonne prise en compte de l'écoulement fluide en comparant les résultats obtenus aux résultats du modèle de Hopper (CHAPITRE I .3.1.3.a .iii). Cette simulation permettra par ailleurs de fixer certains choix numériques afin d'augmenter les capacités du logiciel mis en place.

Toutes les simulations réalisées dans cette partie sont effectuées en résolvant les systèmes de manière directe, pour un comportement fluide incompressible en recalculant les matrices à chaque pas de temps.

1.1 Simulation de la goutte pendante

1.1.1 Méthodes de détermination de la tension de surface

Lorsqu'une goutte pendante est stabilisée (Figure 91), une analyse de sa géométrie permet de calculer la tension de surface du matériau (Stauffer, 1965). Deux calculs peuvent être effectués. L'un utilise le rapport $\frac{ds}{de}$ (Figure 91 – de est le plus grand diamètre de la goutte et ds le diamètre à la hauteur de depuis le bas de la goutte) et permet de déterminer la tension de surface à l'aide d'abaques. Le second permet d'équilibrer le poids de la goutte avec les forces de tension de surface à partir du lieu de l'inflexion de la goutte. Cette méthode est plus incertaine car la détermination précise du point de l'inflexion est entachée de plus d'imprécision.

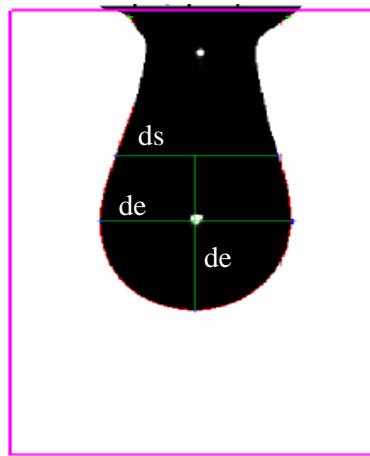


Figure 91 Image obtenue lors d'une mesure de tension de surface sur Visio Drop

1.1.2 Calcul de la tension de surface avec la géométrie de la goutte

La simulation mise en place dans ce travail est bidimensionnelle, les abaques ne peuvent donc servir.

C'est pourquoi la seconde méthode est retenue. Soit une goutte pendante à l'équilibre (Figure 92).

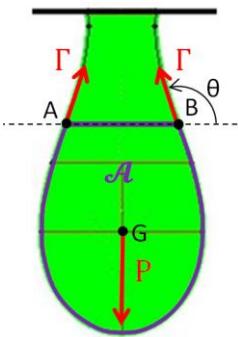


Figure 92 Equilibre de la goutte pendante

Les points A et B sont les points d'inflexion où la courbure de l'interface dans le plan change de signe. Le rayon de courbure en A et B est donc infini. Du fait du caractère bidimensionnel, le rayon de courbure hors plan est lui aussi infini. La relation de Laplace (161) permet d'en déduire que la pression sur le segment AB est égale à la pression extérieure à la goutte.

$$\Delta P = \Gamma \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) = 0 \quad (161)$$

Ainsi, en isolant l'aire \mathcal{A} sous le segment AB de la goutte (contour violet), la résultante de pression s'exerçant sur ce dernier est nulle. Ce domaine est d'une part soumis à son poids P, d'autre part aux deux forces de tension de surface Γ . Le principe fondamental de la statique appliqué à ce domaine et projeté sur la direction verticale (162) permet d'obtenir la relation liant tension de surface, gravité et géométrie de la goutte (163).

$$\rho \mathcal{A} g = 2\Gamma \sin \theta \quad (162)$$

$$\Gamma = \frac{\rho \mathcal{A} g}{2 \sin \theta} \quad (163)$$

1.1.3 Simulation de la goutte pendante bidimensionnelle

Une première simulation de goutte pendante (Figure 93) permet de mettre en place le post traitement nécessaire au calcul de Γ (détermination numérique des points d'inflexion) et de mettre en évidence la nécessité de bien choisir l'aire initiale de fluide suspendu.

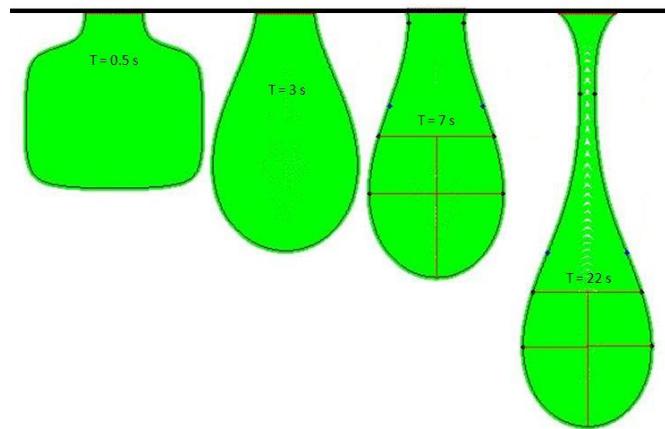


Figure 93 Simulation de la goutte pendante sans équilibre

Lorsque la masse de fluide est trop élevée vis-à-vis de la tension de surface du matériau et de la dimension de la zone d'accroche de la goutte au support, la goutte s'écoule doucement et n'atteint pas d'équilibre.

Les paramètres sont alors affinés (Tableau 23). Le matériau choisi pour ces simulations est le matériau A et la température est fixée à 500°C afin d'obtenir une fluidité permettant une stabilisation sur quelques dizaines de secondes.

Diamètre du col de maintien	1 mm
Tension de surface	32,2 mN.m ⁻¹
Aire initiale du domaine	5,296.1 ^{e-6} m ²
Gravité	9,81 m.s ⁻²
Viscosité	167,1 Pa.s
Masse volumique	1300 kg.m ⁻³

Tableau 23 Paramètres de la goutte pendante

La forme initiale du domaine est choisie arbitrairement avec la volonté de ne pas représenter de goutte dans le but de ne pas avoir d'influence sur la forme présumée qui doit être obtenue. La figure 94 présente plusieurs captures de l'évolution de la forme de la goutte jusqu'à sa forme stabilisée.

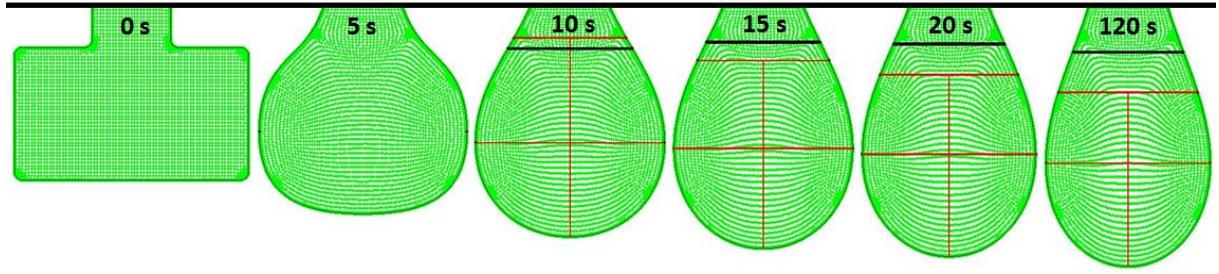


Figure 94 Simulation de la goutte pendante avec équilibre

Le segment horizontal noir est le segment AB précédemment présenté. La mesure est initiée dès que la hauteur de la goutte dépasse sa largeur maximale. Les mesures sont quelque peu bruitées du fait de la détermination délicate du lieu précis de l'inflexion sur une frontière définie par des nœuds. A chaque pas de temps de cette simulation, L'aire \mathcal{A} sous le segment AB et l'angle θ à l'inflexion sont déterminés géométriquement et la tension de surface Γ est calculée (163). La figure 95 présente l'évolution du calcul de Γ en fonction du temps.

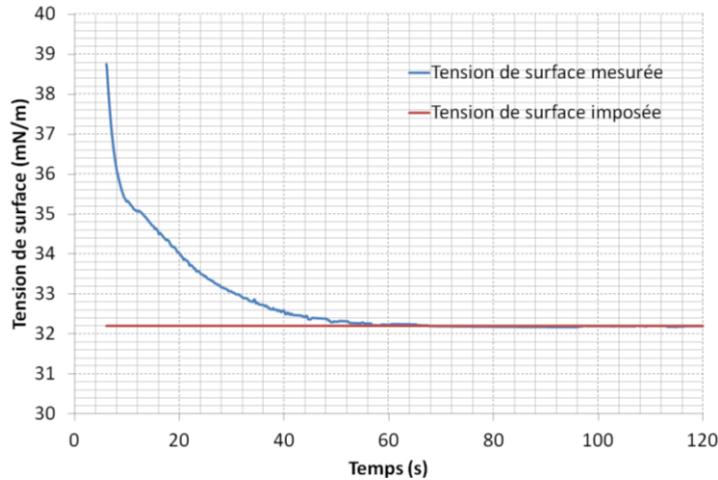


Figure 95 Evolution du calcul de Γ en fonction du temps

Dès lors que la stabilisation de la goutte est obtenue, la tension de surface calculée à l'aide de la géométrie est parfaitement déterminée.

1.2 Simulation de la coalescence

La littérature propose diverses études de la coalescence. Les premiers travaux de Frenkel (1945) et Eshelby (1949) donnent une description de la coalescence de deux sphères. Nous allons développer une démarche permettant d'étendre cette analyse à deux cylindres afin de comparer la simulation à ce modèle. Les travaux de Hopper présentés ont permis d'obtenir les courbes d'évolution temporelle de la coalescence de deux cylindres infinis de rayons D_1 et D_2 avec un rapport $D = \frac{D_1}{D_2}$ allant de 1 à l'infini. La simulation de ces mêmes cas permettra de comparer la simulation mise en place aux résultats théoriques.

1.2.1 Données mesurées en simulation

Avant de simuler la coalescence, il est nécessaire de définir les données qui seront mesurées. En effet, dans le cas d'une analogie au modèle de Frenkel, deux cylindres parfaits coalescent et la détermination du rayon de raccord y et du rayon des cylindres a est évidente (CHAPITRE I .3.1.2.a). Pourtant, comme le montrent les expériences et le modèle de Hopper, un petit rayon local (en A sur la figure 96) se crée sous l'action de la tension de surface rendant difficile la mesure de y , et le rayon de chaque cylindre a qui n'est pas constant sur leur circonférence. La géométrie réelle n'est pas l'assemblage de deux cylindres parfaits.

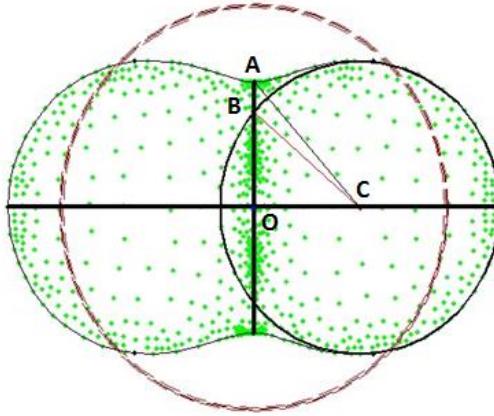


Figure 96 Données mesurées lors de la simulation de coalescence

En déterminant le cercle de rayon a représentant au mieux un cylindre, calculé à l'aide du demi-cercle de droite, il est possible de définir le point B à l'intersection de ce cercle avec le raccord. Deux valeurs de raccord et deux valeurs de rayon de cylindre sont donc mesurables (164).

$$\begin{aligned} a_{moy} &= CB ; \quad a_{max} = CA \\ Y_{moy} &= OB ; \quad Y_{max} = OA \end{aligned} \tag{164}$$

A partir de la détermination des différents paramètres mesurables, différents rapports adimensionnés sont introduits (165).

$$\left[\frac{y}{a} \right]_1 = \frac{Y_{max}}{a_{moy}} ; \left[\frac{y}{a} \right]_2 = \frac{Y_{max}}{a_{max}} ; \left[\frac{y}{a} \right]_3 = \frac{Y_{moy}}{a_{moy}} ; \left[\frac{y}{a} \right]_4 = \frac{Y_{max}}{a_0} \tag{165}$$

où a_0 est le rayon initial des cylindres

Le premier rapport semble prendre en compte au mieux le raccord réel tout en considérant le meilleur rayon pour le cylindre. Le second rapport prend en compte le raccord réel et majore le rayon des cylindres. Le troisième rapport semble le plus pertinent dans le cas de l'analyse de type Frenkel. Il permet de s'approcher du modèle de deux cylindres indéformables. Enfin, le quatrième rapport est celui étudié dans le cadre des analyses de Hopper.

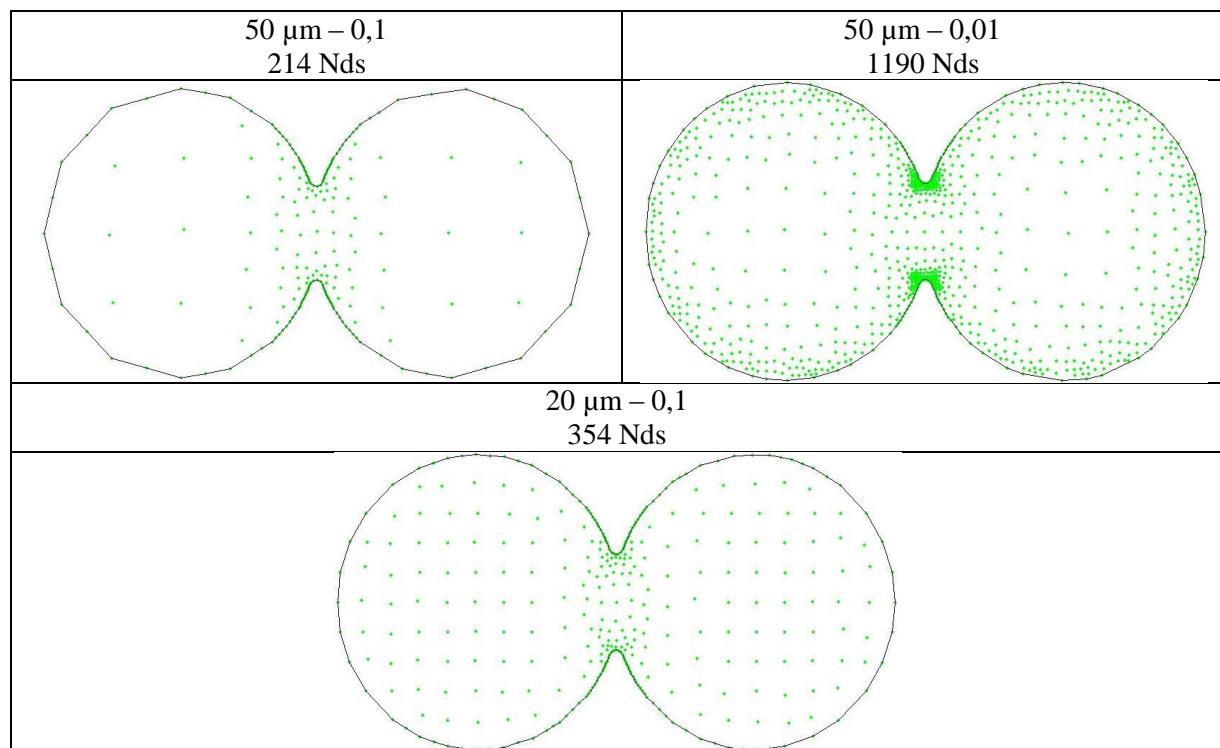
1.2.2 Influence des paramètres de simulation

Plusieurs choix importants peuvent avoir une influence sur les résultats obtenus : la qualité du maillage, le raccord initial entre les cylindres, les choix numériques de résolution, l'actualisation des matrices du système, le choix du critère en angle pour les pas de temps et les lieux de remaillage des segments de frontière. Dans cette partie, une étude d'influence est menée afin de déterminer dans quelles mesures ils impactent la solution. Cette étude permet de choisir les paramètres qui serviront lors de la simulation du procédé.

1.2.2.a Influence du maillage

Afin de vérifier la dépendance des résultats au maillage, une étude de l'influence du maillage est menée sur un cas de coalescence de deux cylindres infinis de mêmes diamètres. Pour cela, différents maillages plus ou moins grossiers sont simulés (Figure 97).

Les deux cylindres ont pour rayon 100 µm. Le rayon local initial au niveau du raccord est fixé à 5 µm. Les maillages initiaux sont obtenus avec le logiciel CATIA DS. Un critère de distance entre nœuds est donné, nous choisissons 5, 20 et 50 µm. Le maillage de la frontière est programmé à l'aide d'une flèche relative (option de création de maillage sur Catia DS définissant l'écart maximal entre la courbe réelle et les nœuds créés relativement à la courbure locale de la frontière) dont le coefficient est fixé soit à 0,1 soit à 0,01. Le maillage est donc adapté à la courbure dès le départ, et le logiciel adapte le maillage initial en volume à ces choix afin d'obtenir une variation progressive de la taille des éléments.



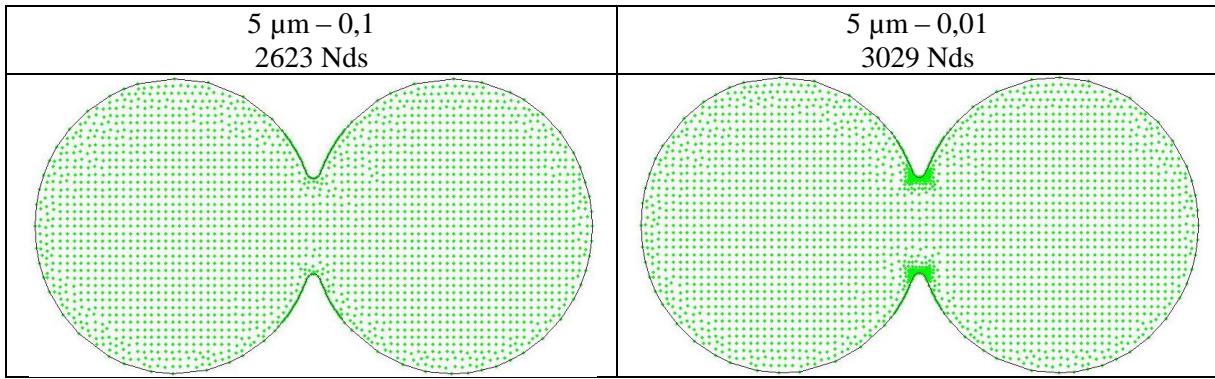


Figure 97 Analyse de l'influence de la taille du maillage sur la solution C-NEM

Notons que sans l'activation de procédures de remaillage aux frontières, il n'est pas possible d'obtenir de résultats corrects rapidement. En effet, dans le cas d'un maillage initial de qualité le long de la frontière, la coalescence rapproche les nœuds et les pas de temps calculés sur un critère de rotation locale deviennent très faibles, on note une oscillation de frontière importante. A l'inverse, un maillage trop grossier de la frontière induit de mauvais mouvements au niveau du raccord, eux aussi induisant des oscillations néfastes à l'avancement de la simulation.

Les procédures de remaillage sont donc activées dans ces simulations. Il faut accorder de l'importance au maillage global dans le domaine, et non au maillage de frontière qui va évoluer et être adapté à la courbure de la frontière.

Le raccord adimensionné numéro 4 (165) correspondant à l'analyse de Hopper est ensuite tracé pour ces différentes simulations (Figure 98).

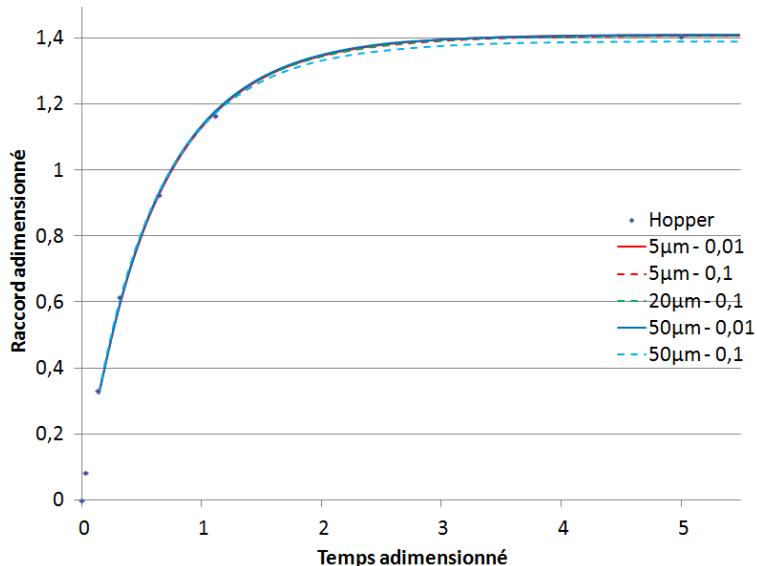


Figure 98 Analyse de l'influence de la taille du maillage sur la solution C-NEM

Quelle que soit la qualité du maillage, on note que les différentes courbes se superposent. La méthode C-NEM n'exige donc pas un maillage de domaine particulièrement fin pour donner de bons résultats.

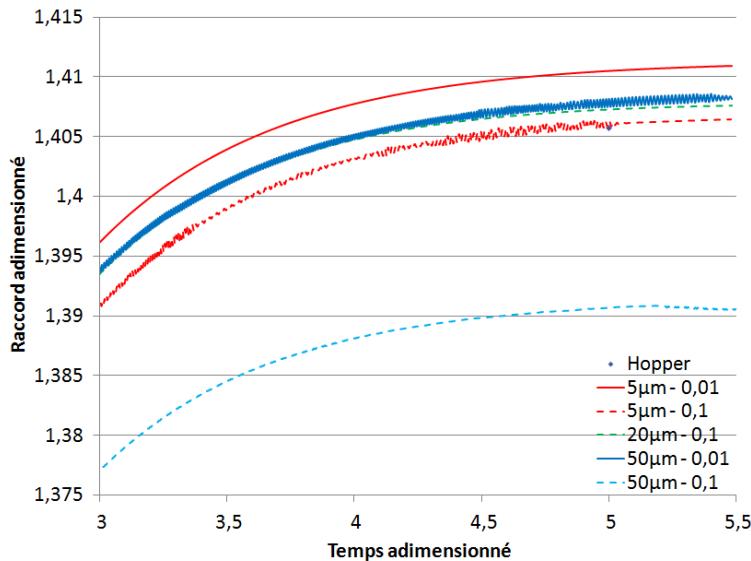


Figure 99 Influence du maillage : étude fine

La solution la plus grossière avec un maillage défini à 50 µm entre nœuds et une flèche relative à 0,1 est quelque peu éloignée des autres résultats. On remarque en particulier que la solution à 50 µm entre nœuds et 0,01 de flèche relative est encadrée par deux solutions qui paraissent meilleures, à 5 µm entre nœuds. On peut conclure que même avec un maillage global grossier, une bonne définition de la frontière et de la zone proche de la frontière permet d'obtenir des résultats corrects. Le choix est donc fait, dans la suite de nos travaux, de créer un maillage initial à 50 µm entre nœuds et un critère de flèche de 0,01.

1.2.2.b Influence du rayon initial

Dans toutes les simulations de coalescence présentées, il est nécessaire de créer un raccord initial. La géométrie initiale est créée à l'aide d'un modèle de deux cylindres dont l'entraxe e est défini afin que l'aire du domaine globale A soit égale à l'aire des deux cylindres initiaux A_0 , et l'ajout d'un raccord local de rayon r tangent aux deux cylindres infinis (Figure 100). Ainsi, bien que la situation initiale ne soit pas complètement réaliste, cela rapproche fortement celle-ci de la géométrie qui pourrait être atteinte au cours de la coalescence.

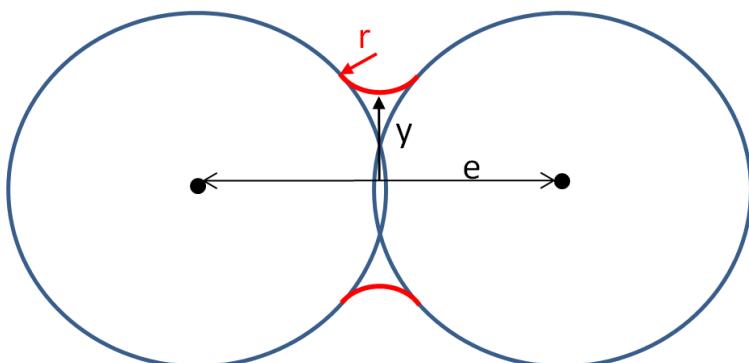


Figure 100 Rayon local r au niveau du raccord

Afin d'évaluer l'influence de ce raccord initial sur la solution, nous simulons quatre cas de coalescence tels que $A = A_0$ en définissant r à 0,5, 1, 5 et 10 μm pour un rayon de cylindre R_0 de 100 μm . En parallèle, nous simulons les quatre mêmes cas tels que $e = 2R_0$ afin de voir si la non correction de l'aire influence les résultats. La figure 101 présente les quatre cas de simulation avec $A = A_0$. L'introduction du rayon adimensionnel r_{ad} (166) permet d'analyser l'impact adimensionnel de ce rayon local pour une coalescence de cylindres de rayons quelconques.

$$r_{ad} = \frac{r}{R_0} \quad (166)$$

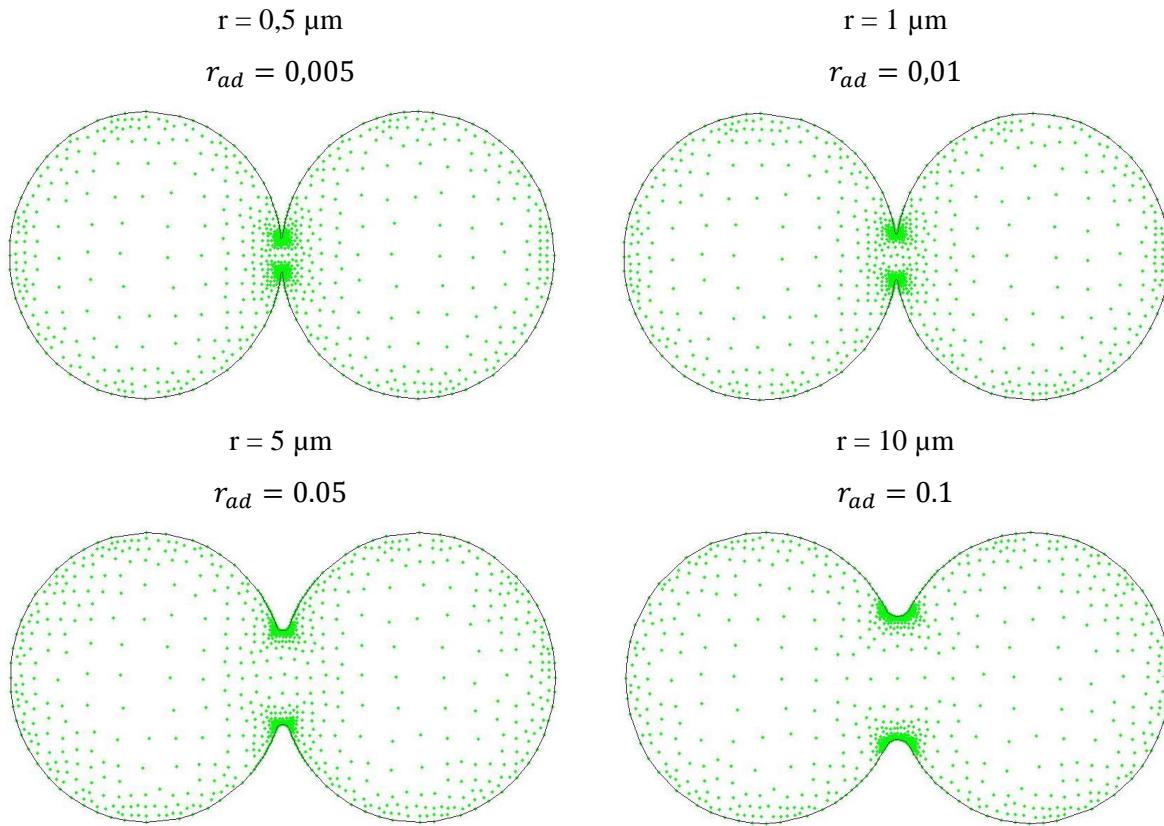


Figure 101 Supports de simulation

La figure 102 présente les courbes d'évolution du raccord adimensionné pour ces huit simulations.

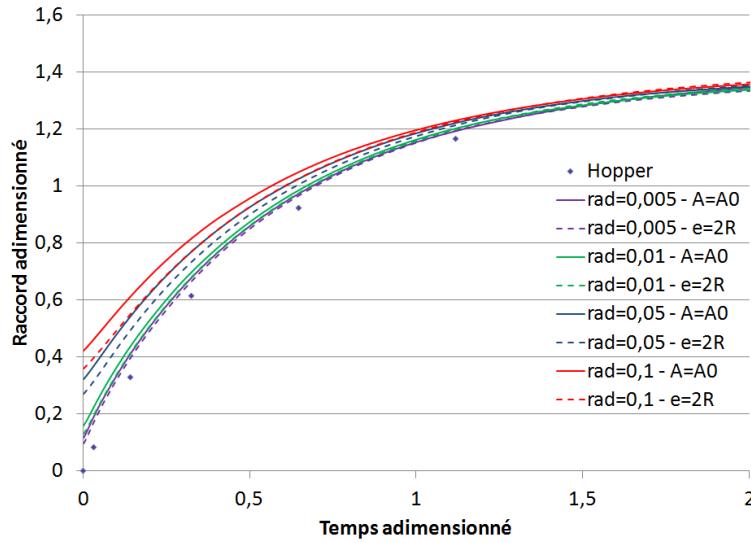


Figure 102 Comparaison de la coalescence de 2 cylindres infinis pour 4 valeurs de $r = (0,5, 1, 5, 10)$

μm

Dans tous les cas étudiés, la coalescence tend vers une valeur identique. On remarque que plus le raccord initial est faible, plus la solution se rapproche de la solution de Hopper.

Dans le cas de très petits rayons locaux au niveau du raccord, les temps de calcul augmentent beaucoup, variant entre 1 et 4 heures. La différence entre un rayon local adimensionné de 0,005 et 0,01 est faible, ainsi que l'impact de la prise en compte de l'aire en changeant l'entraxe.

Dans la suite de nos travaux, le choix sera donc fait de prendre un rayon local de 1 μm .

1.2.2.c Influence des choix numériques

Afin de gagner en mémoire utilisée et en temps de calcul, nous avons mis en place une résolution itérative quasi incompressible et une option permettant de ne pas mettre à jour les matrices hydrodynamique et thermique à tous les pas de temps de déplacement.

Nous avons donc étudié l'influence de la méthode de résolution et du choix du nombre de pas de temps où la matrice est calculée par rapport au nombre de pas de temps total (%) ayant lieu lors d'une simulation de coalescence de deux cylindres infinis comportant environ 1000 nœuds. Bien que l'on demande un nombre de pas de temps entre chaque calcul de matrices, ce calcul a aussi lieu à chaque remaillage ou changement d'état d'un nœud.

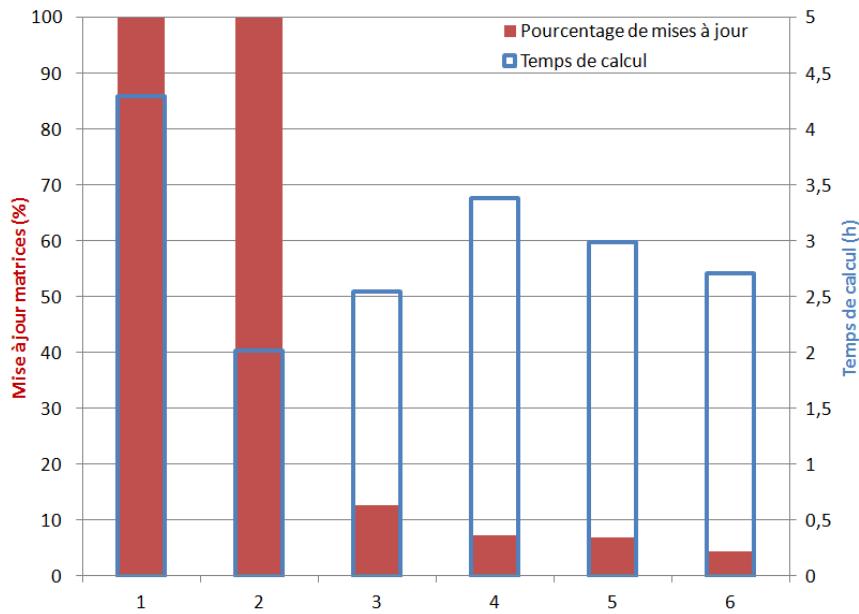


Figure 103 Analyse de l'influence des choix numériques

Tout en calculant les matrices à chaque pas de temps (cas 1 et 2), nous comparons la résolution directe incompressible (cas 1) à la résolution itérative quasi incompressible (cas 2). Le gain en temps de calcul est non négligeable, le temps de calcul étant divisé par un facteur 2.

Ensuite, pour une résolution dans les mêmes conditions que le cas 2, nous diminuons le nombre d'actualisation de matrices (cas 3, 4, 5 et 6) et étudions l'évolution du temps de calcul et de la qualité de la solution. En termes de qualité, dans tous les cas, les résultats de l'étude adimensionnée de l'évolution du rayon de raccord sont très semblables. Par contre, on remarque que le temps de calcul est toujours supérieur au cas avec actualisation des matrices à chaque pas de temps.

Les pas de temps étant calculés avec les vitesses locales, la non-actualisation précise des matrices le long de la frontière induit des oscillations néfastes à la bonne avancée de celle-ci, conduisant à une augmentation du temps de calcul.

Nous faisons la même étude sur un domaine composé d'environ 10000 nœuds simulant le procédé de fusion laser sélective. Les résultats sont présentés sur la figure 104.

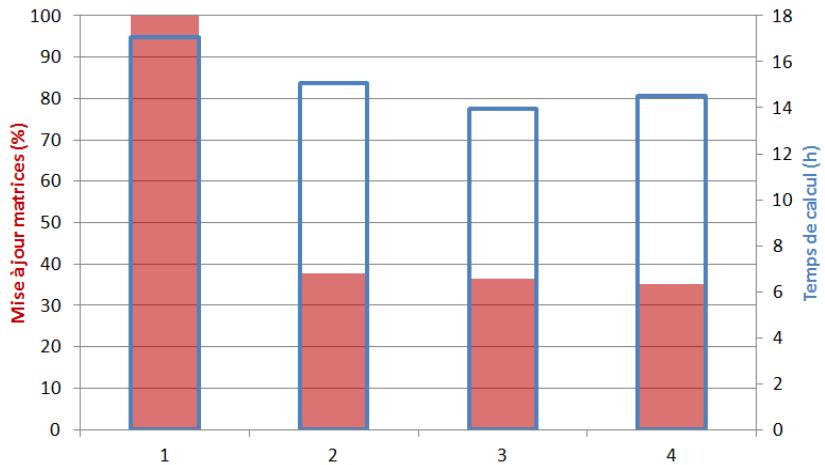


Figure 104 Actualisation des matrices dans le cadre de la simulation du procédé

Dans le cas d'un domaine avec un grand nombre de nœuds, on remarque un gain en temps assez faible. Comme précédemment, le gain escompté n'est pas obtenu. L'actualisation des matrices est réduite de l'ordre de 60 %, et du fait du nombre de nœuds, la part de calcul des matrices devient non négligeable dans le temps de calcul par pas de temps. Il devrait donc y avoir une réduction importante des temps de calcul qui n'est pas observée.

Le choix sera donc fait de calculer les matrices à chaque pas de temps.

1.2.2.d Influence des choix numériques liés à la diminution des oscillations de frontières

La bonne prise en compte de la tension de surface est un élément clé des simulations mises en œuvre. Suite à divers problèmes liés à l'intégration de la tension de surface constante par morceaux, nous avons choisi de l'intégrer de manière linéaire sur les frontières. Cet ajout doit permettre de diminuer les valeurs de tension de surface considérées à chaque nœud, surtout dans les zones où elle change de signe.

Dans un second temps, l'ajout d'un schéma de déplacement des nœuds à l'ordre 2 paraissait une bonne manière de diminuer les mouvements locaux de frontière dans les zones oscillantes.

Ces résultats sont présentés sur la figure 105. La coalescence de deux cylindres infinis a été simulée comme dans les cas précédents, et les temps de calculs affichés en fonction des choix relatifs au souhait de diminution des oscillations de frontière.

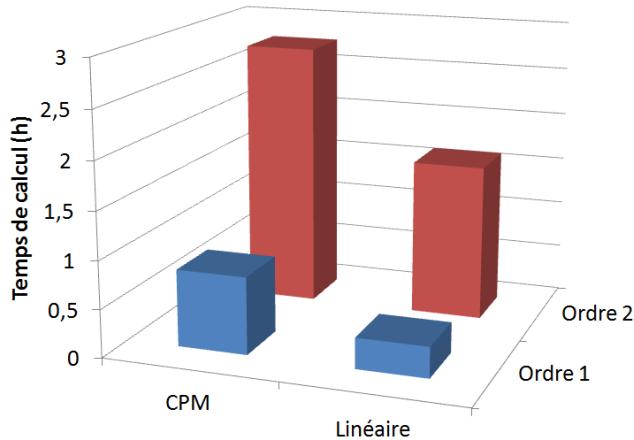


Figure 105 Analyse de l'influence du degré d'intégration de la tension de surface

Nous remarquons que la prise en compte linéaire de la tension de surface le long de la frontière permet de réduire significativement les temps de calculs (facteur 2 environ). Le choix d'utiliser un schéma à l'ordre 2 en déplacement des nœuds induit une augmentation importante des temps de calcul (facteur 4 environ).

Dans le cadre de la simulation du procédé, nous choisissons donc l'intégration linéaire de la tension de surface sur les frontières et un schéma de déplacement des nœuds d'ordre 1.

1.2.2.e Influence du choix du critère de pas de temps

Le pas de temps est adapté aux mouvements du fluide à l'aide d'un calcul de rotation locale de frontière autour des nœuds et une limitation de cette rotation à un angle donné. Nous nous intéressons donc à l'influence de ce choix sur le temps de calcul et la qualité des résultats de la coalescence de deux cylindres infinis avec une résolution itérative quasi incompressible (étude plus rapide) et un calcul des matrices à chaque pas de temps. Le rayon local au niveau du raccord est choisi à 10 µm. Les résultats sont présentés sur la figure 106. Les résolutions sont itératives en quasi incompressible.

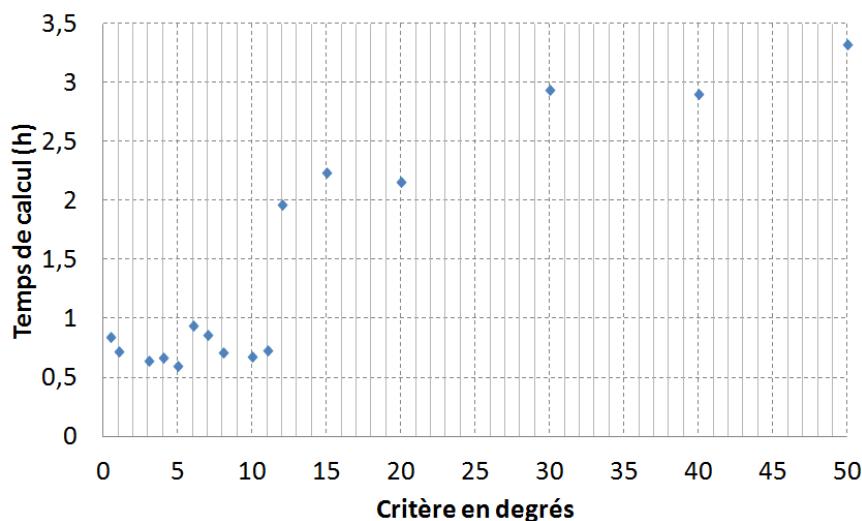


Figure 106 Analyse d'influence du critère de rotation pour le pas de temps

Tant que le critère de rotation est en-dessous de 10° , le temps de calcul est sensiblement similaire. A partir de 11° , on remarque une augmentation importante du temps. Cette augmentation est liée aux oscillations de frontières de plus en plus importantes. La comparaison de l'évolution temporelle du raccord adimensionné montre des résultats très semblables, même avec un critère de 50° . Il faut noter que le choix d'un critère important conduit à des courbures locales de frontières induisant des remaillages locaux, qui peuvent participer à l'augmentation du temps de calcul. Toutefois, l'analyse des vidéos des différentes simulations montre que cette augmentation du nombre de nœuds est faible.

Le choix sera donc fait de prendre un critère de rotation locale valant 5° .

1.2.2.f Influence du lieu de remaillage

Deux types de remaillage de la frontière sont implémentés. L'un permet de créer des nœuds sur les cercles passant par trois points de la frontière alors que l'autre crée ces nœuds sur les segments existants. Nous cherchons donc à étudier l'influence de ce choix sur le temps de calcul, la précision du résultat et la conservation du volume.

La coalescence de deux cylindres infinis avec un raccord initial local valant $10 \mu\text{m}$ est donc simulée pour ces deux conditions de remaillage.

Pour des qualités très semblables d'évolution temporelle adimensionnée du raccord, le temps de calcul dans le cas du remaillage sur les cercles est multiplié par deux par rapport au remaillage sur les segments liant les différents nœuds. C'est donc une mauvaise méthode qui doit augmenter les difficultés liées à la prise en compte de la tension de surface correctement le long de la frontière.

Il est donc choisi de remailler sur les segments.

1.2.3 Analyse adimensionnelle de la coalescence

Les résultats de la littérature montrent que la coalescence est un phénomène dépendant du coefficient adimensionnel C_{ad} (167), aussi appelé nombre capillaire.

$$C_{ad} = \frac{\Gamma}{\eta R_0} \quad (\text{s}^{-1}) \quad (167)$$

Nous simulons donc la coalescence de deux cylindres infinis de mêmes diamètres pour deux valeurs de chacun de ces paramètres (rayon initial, viscosité et tension de surface) en conditions isothermes avec un facteur 10 entre chaque donnée. Le rayon local r_{ad} au niveau du raccord est fixé à 0,05 et la qualité globale de maillage est la même pour les deux géométries différentes.

Les différents cas de simulation sont présentés dans le tableau 24.

R_0	η	Γ
100 μm	100 Pa.s	3 mN/m
100 μm	100 Pa.s	30 mN/m
100 μm	1000 Pa.s	3 mN/m
100 μm	1000 Pa.s	30 mN/m
1 mm	100 Pa.s	3 mN/m
1 mm	100 Pa.s	30 mN/m
1 mm	1000 Pa.s	3 mN/m
1 mm	1000 Pa.s	30 mN/m

Tableau 24 Tableau des différents cas de l'analyse adimensionnelle

Les résultats de ces huit simulations sont présentés sur la figure 107.

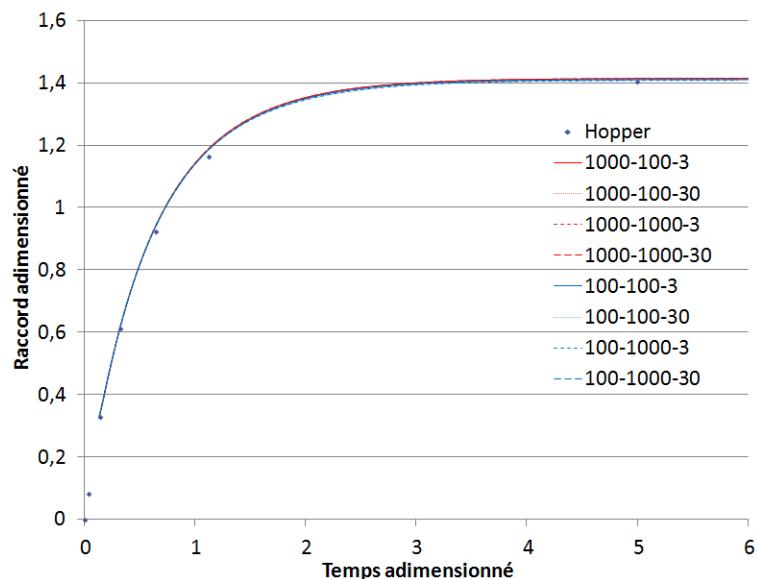


Figure 107 Les 8 cas tests superposés

L'évolution adimensionnelle de la coalescence est confirmée par la simulation, les huit courbes se superposant.

1.2.4 Simulations et modèle de Frenkel établi en 2D

Le modèle de Frenkel 3D semble assez bien représenter la coalescence de sphères. En se basant sur la même démarche, nous établissons un modèle de type Frenkel en 2D et comparons les simulations à celui-ci.

1.2.4.a Développement d'un modèle analytique basé sur celui de Frenkel

Le modèle de Frenkel développé dans la littérature présente l'évolution de la coalescence de deux sphères (CHAPITRE I .3.1.2) sous l'action de la tension de surface, sans pression, gravité ou contact, pour un fluide visqueux newtonien incompressible en négligeant les effets d'inertie et en supposant que la forme reste parfaite, composée de deux entités parfaites qui se rapprochent. Nous proposons d'établir cette relation dans le cas de deux cylindres infinis.

L'égalité des aires des deux cylindres permet d'obtenir la relation entre leur rayon a et l'angle de coalescence θ (168).

$$a = \left(\frac{\pi a_0^2}{\pi - \theta + \frac{\sin 2\theta}{2}} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (168)$$

En déformation bidimensionnelle, la matrice de déformation est différente de la 3D (169).

$$D = \begin{bmatrix} -\dot{\varepsilon} & 0 \\ 0 & \dot{\varepsilon} \end{bmatrix} \quad D:D = 2\dot{\varepsilon}^2 \quad (169)$$

Le calcul des puissances de viscosité (170) et de tension de surface (171) permet d'établir, en les égalisant, l'équation différentielle vérifiée par θ (172).

$$P_{visc} = 2^3 \pi a_0^2 \eta \left[\frac{(\pi - \theta) \sin \theta}{\left(\pi - \theta + \frac{\sin 2\theta}{2} \right)} \right]^2 \dot{\theta}^2 \quad (170)$$

$$P_{ts} = 2^2 \Gamma a_0 \sqrt{\pi} \left[(\pi - \theta) \cos \theta - \frac{\cos \theta + \frac{\sin \theta}{(\pi - \theta)}}{\left(\pi - \theta + \frac{\sin 2\theta}{2} \right)^{\frac{3}{2}}} \right] \dot{\theta} \quad (171)$$

$$\dot{\theta} = \frac{\Gamma}{\eta a_0} \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \left[\frac{\left(\cos \theta + \frac{\sin \theta}{(\pi - \theta)} \right) \cos \theta \left(\pi - \theta + \frac{\sin 2\theta}{2} \right)^{\frac{1}{2}}}{\sin \theta^2 (\pi - \theta)} \right] \quad (172)$$

Un développement limité pour θ proche de zéro permet d'établir la cinétique de la coalescence de deux cylindres infinis comme l'ont fait Frenkel et Eshelby en 3D.

$$\frac{y}{a} = \left(\frac{3}{2\pi} \tau_{Frenkel} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (173)$$

$$\tau_{Frenkel} = \frac{\Gamma}{\eta a_0} t \quad (174)$$

Ce résultat est le même que celui qui a été trouvé dans la littérature (CHAPITRE I .3.1.3.a .ii). Ainsi, le calcul de la cinétique de coalescence de deux cylindres infinis inspiré du modèle de Frenkel 3D que nous avons effectué est correct.

1.2.4.b Analyse du modèle Frenkel 2D

Dans un premier temps, il est possible de comparer le résultat de notre modèle avec celui de Frenkel 3D (Figure 108).

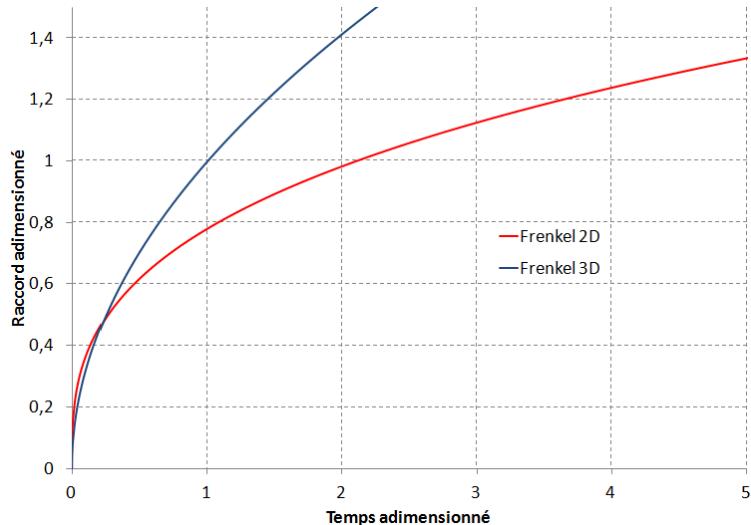


Figure 108 Comparaison du modèle de Frenkel 3D au modèle 2D établi

Très proches au départ, ces courbes deviennent très vite différentes. Retenons cependant que ces résultats sont valides pour des temps très petits.

Comme l'ont fait Pokluda et Bellehumeur, il est possible de calculer la solution de l'équation différentielle de la coalescence (172) à l'aide d'une méthode itérative. La comparaison de la solution exacte de l'équation à sa solution en zéro est proposée sur la figure 109.

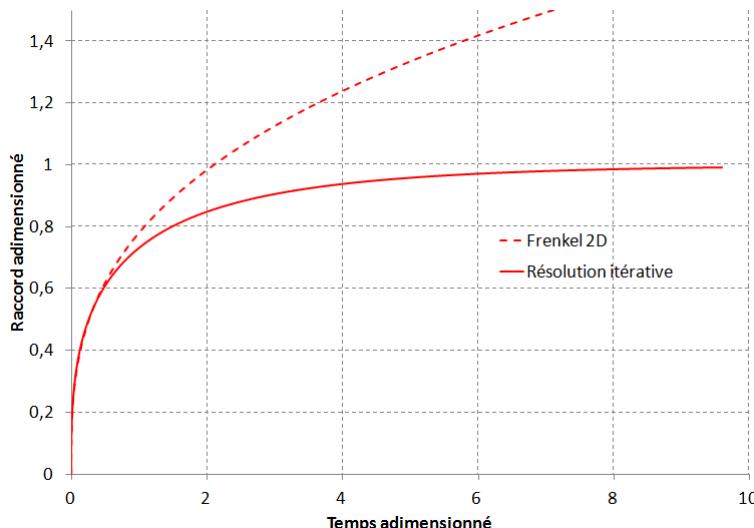


Figure 109 Comparaison du modèle de Frenkel 2D et de la solution itérative de l'équation différentielle

Enfin, nous pouvons comparer les solutions itératives de la coalescence en 2D et 3D (Figure 110).

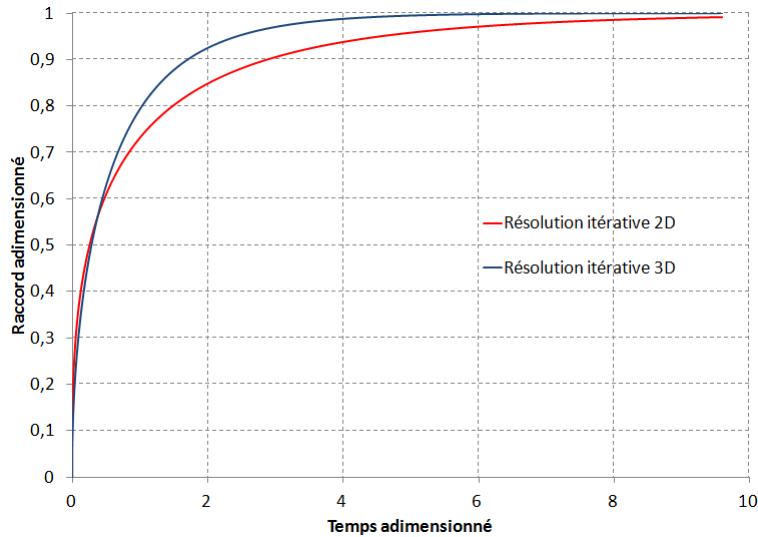


Figure 110 Comparaison des solutions itératives des équations différentielles de la coalescence 2D et 3D

Nous précisions dans le chapitre 1 que des auteurs avaient montré que les phénomènes de coalescence tridimensionnels étaient représentatifs de la 2D. Nous confirmons ici ce résultat en comparant deux modèles basés sur les mêmes hypothèses. Les légères différences de cinétique de coalescence entre la 2D et la 3D sont dues à la puissance de tension de surface, c'est-à-dire à la dérivée de la surface (aire de deux sphères en 3D – périmètre des deux cercles en 2D) du domaine étudié, bien différente entre un cas de deux sphères et de deux cylindres (Figure 111).

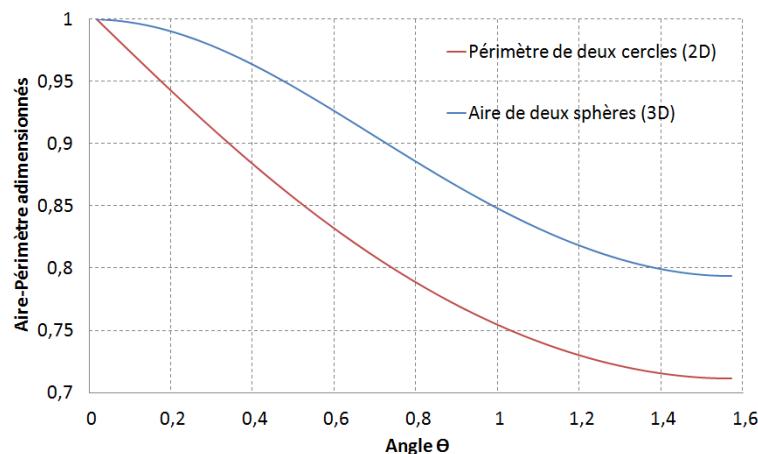


Figure 111 Aire-Périmètre adimensionnés par leur valeur initiale du système étudié dans la méthode Frenkel en fonction de l'angle de coalescence θ

1.2.4.c Simulation de la coalescence - Comparaison avec l'approche de type Frenkel 2D

Nous choisissons de simuler la coalescence de deux cylindres infinis de mêmes rayons initiaux pour un matériau PEEK à 400°C (Tableau 25).

R_0	η	Γ
100 μm	1793,7 Pa.s	32,2 mN/m

Tableau 25 Données de simulation

Nous traçons les raccords adimensionnés numéros 1, 2 et 3 présentés précédemment (165) ainsi que la solution itérative du modèle de Frenkel 2D que nous avons établi (Figure 112).

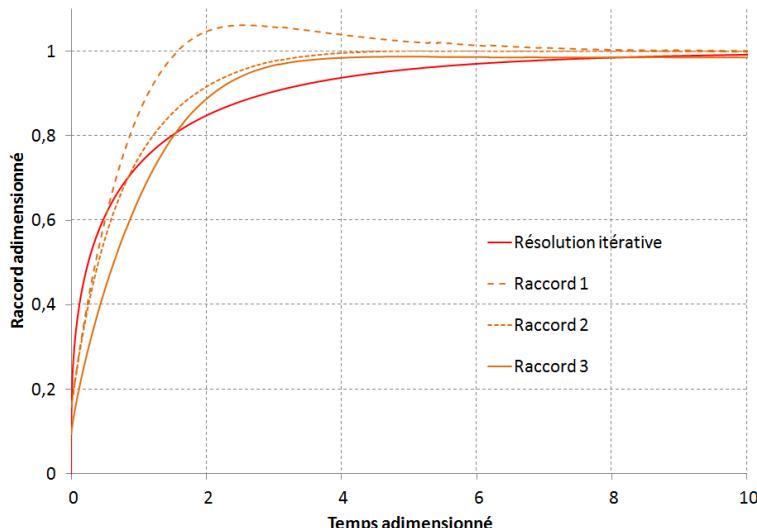


Figure 112 Comparaison de la simulation au modèle de Frenkel 2D résolu de manière itérative

Nous pouvons voir que le modèle de Frenkel ne permet pas de modéliser la coalescence de deux cylindres infinis, quel que soit le rapport d'étude choisi. Ce modèle surestime la cinétique de coalescence au départ, puis la sous-estime après un temps adimensionné inférieur à 2.

1.2.5 Simulations et travaux de Hopper

Les travaux de Hopper ont permis d'obtenir l'évolution exacte de la coalescence de cylindres avec un rapport de diamètre D valant 1, 2, 5, 20 et l'infini. Les mêmes simulations doivent nous permettre de montrer que le logiciel fonctionne correctement.

1.2.5.a Coalescence de cylindres infinis $D = (1,2,5,20,\infty)$

Le modèle de Hopper décrit de manière exacte la cinétique de coalescence de cylindres infinis pour différents rapports entre les rayons des cylindres infinis (CHAPITRE I .3.1.3.a .iii). Nous simulons donc les mêmes cas (Figure 113).

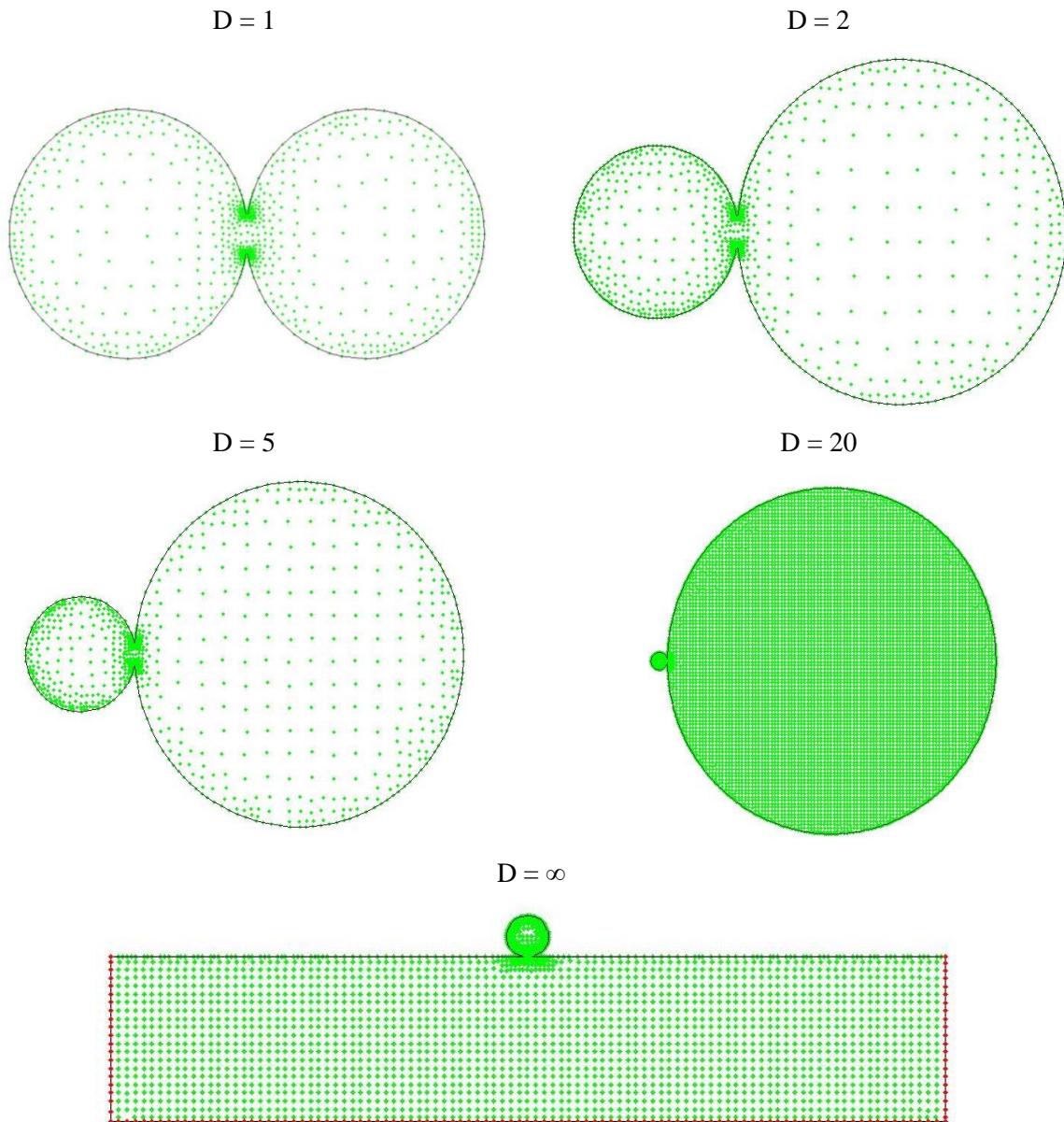


Figure 113 Supports des simulations de coalescence selon Hopper

Toutes les simulations sont effectuées avec les mêmes paramètres, ceux d'un matériau PEEK à une température de 400°C pour un diamètre du petit cylindre D_S toujours identique (Tableau 26).

D_S	η	Γ
200 μm	1793,7 Pa.s	32,2 mN/m

Tableau 26 Données de simulation

Le rayon local au niveau du raccord est fixé à 1 μm .

Pour les cas $D = 1, 2, 5$ et 20 , nous traçons l'évolution du raccord (mesure entre les points matériels du raccord initial et suivis au long de la simulation) adimensionné par le diamètre initial du plus petit

cylindre en fonction du temps adimensionné lui aussi avec le diamètre du petit cylindre D_S (175). Dans le cas $D = \infty$, comme le fait Hopper, nous mesurons la largeur minimale du système jusqu'à sa disparition.

$$\frac{2y}{D_S} = f(\tau_{Hopper}); \tau_{Hopper} = t \frac{\Gamma}{\eta D_S} = t \frac{\Gamma}{\eta 2a_0} \quad (175)$$

où y est le diamètre du raccord

La comparaison des résultats obtenus avec la solution de Hopper est proposée sur la figure 114.

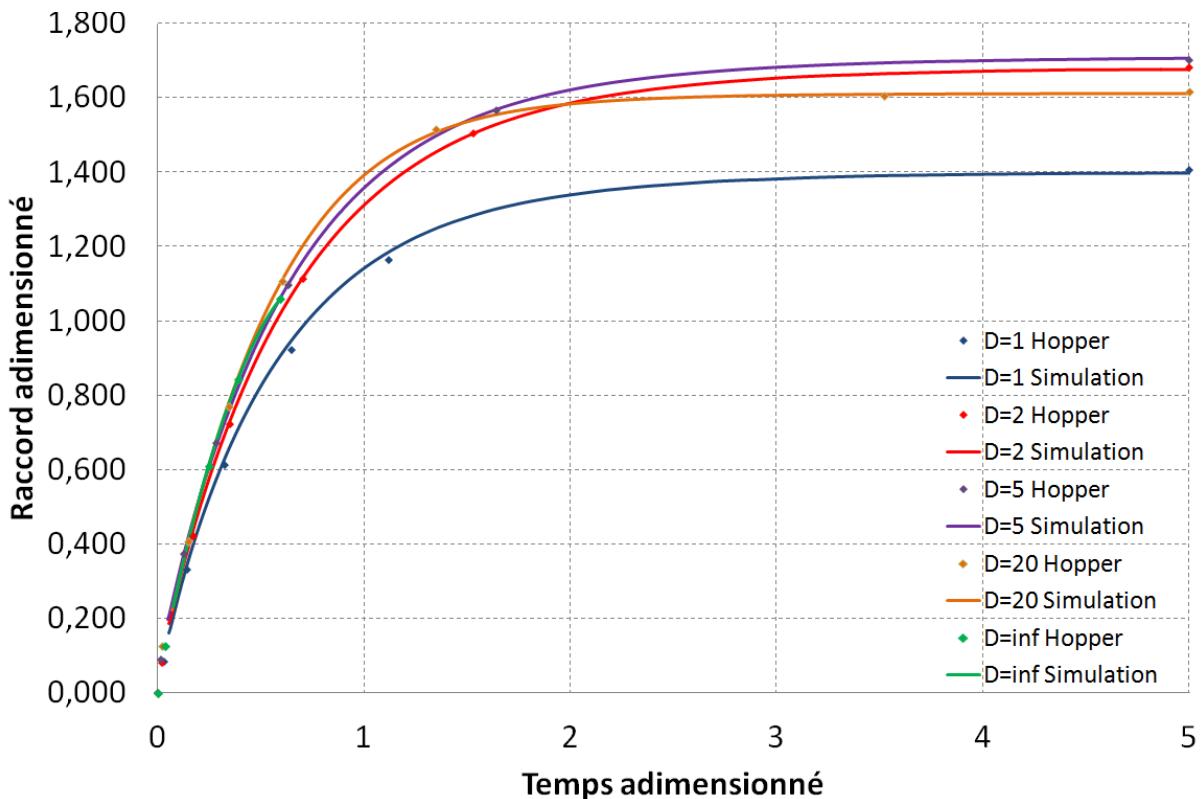


Figure 114 Comparaison de la simulation de la coalescence de deux cylindres infinis à la solution de Hopper

Un petit offset en temps est ajouté aux simulations puisque celles-ci partent d'une situation qui correspond à un temps non nul. La simulation de la coalescence de cylindres infinis donne des résultats correspondant à ceux de Hopper pour les cinq cas simulés.

Les quelques différences ont deux origines possibles :

- imprécisions sur la lecture des images de Hopper (précision de la règle et épaisseur des traits)
- maillages initiaux de simulation présentant un raccord imposé, induisant une forme imparfaite à l'origine.

1.2.5.b Comparaison de l'approche de Frenkel 2D aux résultats de coalescence

Compte tenu de l'adéquation entre les résultats de simulation avec l'approche de Hopper, nous comparons un résultat de simulation avec la solution itérative de l'équation (172) permettant de connaître précisément le rayon de raccord adimensionné dans l'approche de type Frenkel établie en 2D. Il faut noter que l'approche de Frenkel permet d'établir la relation du rayon de raccord y/a_0 en fonction du temps adimensionné de Frenkel. Nous ramenons donc les résultats en y/a_0 et temps adimensionné de Hopper afin de les comparer sur la figure 115.

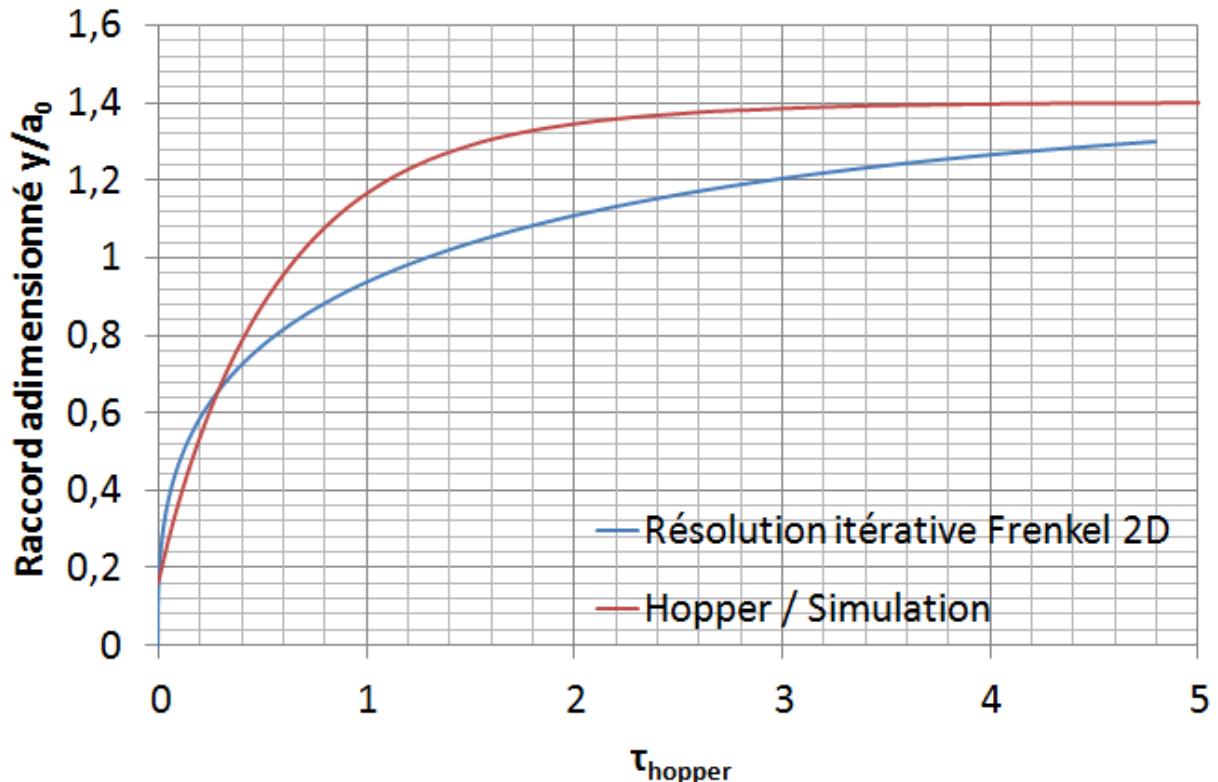


Figure 115 Comparaison de l'approche de Frenkel 2D avec les résultats de coalescence de cylindres infinis identiques par simulation

L'approche de Frenkel surestime la cinétique de coalescence dans les premiers instants de la coalescence, puis la sous estime fortement. Les hypothèses fortes sur la matrice de déformation et la géométrie du système sont sans doute à l'origine de ces différences.

1.2.5.c Influence de la gravité dans le cas $D = \infty$

Il est maintenant possible d'étudier l'influence de la gravité sur la coalescence d'un cylindre sur un support ($D = \infty$). Les diverses études de la littérature indiquent que la gravité a très peu d'influence sur la coalescence de grains dans les cas que nous étudions, sans en donner de limites claires. Nous réalisons donc une simulation avec gravité afin de vérifier ce point. Nous considérons la coalescence d'un cylindre infini de rayon 100 μm posé sur un support ($D = \infty$). La viscosité du fluide est imposée à 1000 Pa.s. La gravité est prise en compte ($9,81 \text{ m.s}^{-2}$) et la masse volumique est fixée 1320 Kg.m^{-3} . La tension de surface varie de 0,1 à 100 mN.m⁻¹.

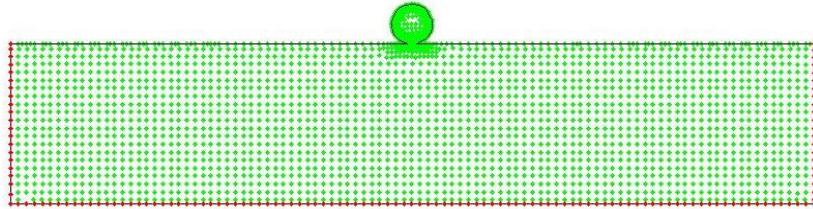


Figure 116 Support de simulation $D = \infty$ avec gravité

Comme le fait Hopper, nous mesurons l'évolution temporelle de la largeur minimale du système tant qu'elle existe. La coalescence étant adimensionnelle lorsque la gravité est négligée, toutes les courbes d'évolution du raccord doivent se superposer quel que soit le coefficient C_{ad} (167) sans gravité. Le tableau 27 présente les différents cas d'analyse.

$R_0 = 100\mu m$				$\mu = 1000 Pa.s$					$\rho = 1320 Kg.m^{-3}$				
$g = 9,81 m.s^{-2}$													
Γ	0,1	0,2	0,5	1	2,5	5	10	20	30	40	50	80	100
C_{ad}	0,0005	0,001	0,0025	0,005	0,0125	0,025	0,05	0,1	0,15	0,2	0,25	0,4	0,5
$g = 0 m.s^{-2}$													
Γ			0,5							40			100
C_{ad}			0,0025							0,2			0,5

Tableau 27 Données de simulation pour l'étude d'influence de la gravité

La figure 117 présente l'évolution du raccord adimensionné pour les trois cas sans gravité pour deux valeurs extrêmes du nombre capillaire C_{ad} et une valeur moyenne.

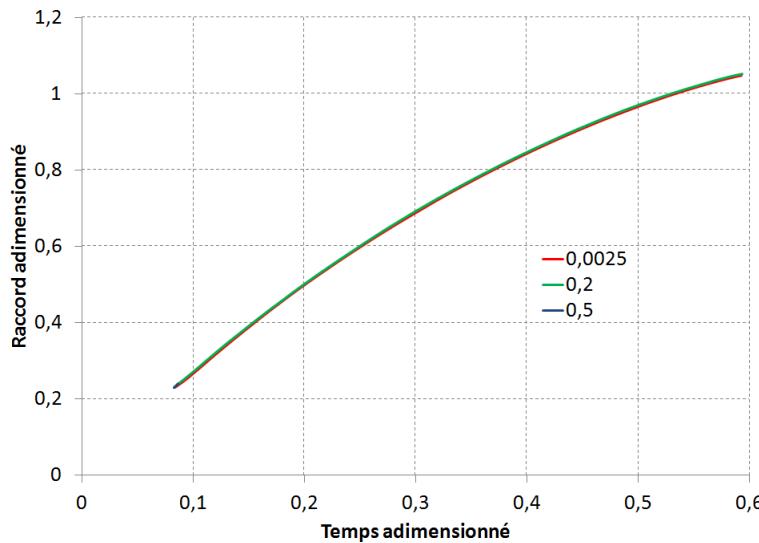


Figure 117 Résultats de simulation pour trois valeurs de C_{ad} sans gravité

On remarque que la coalescence est bien adimensionnelle quel que soit C_{ad} .

La figure 118 présente l'évolution du raccord adimensionné pour trois cas avec gravité.

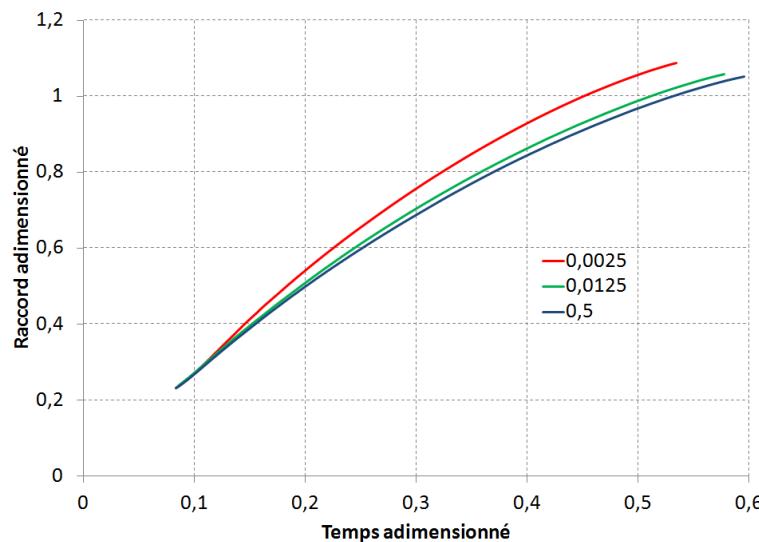


Figure 118 Résultats de simulation pour trois valeurs de C_{ad} en présence de gravité

On remarque que la gravité a une influence sur la cinétique de la coalescence qui dépend du terme C_{ad} . Nous déterminons donc le temps adimensionné à la disparition du raccord pour les différents cas répertoriés dans le tableau 27 et les représentons sur la figure 119.

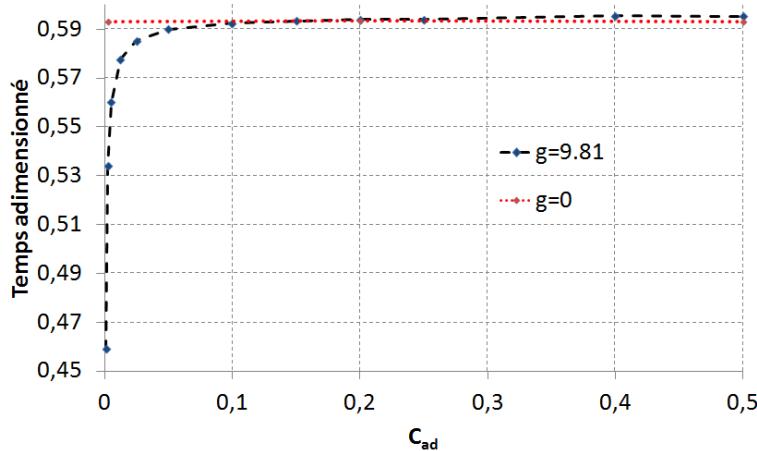


Figure 119 Analyse de l'effet de la gravité

La figure 120 présente l'écart de temps adimensionné entre la solution avec et sans gravité.

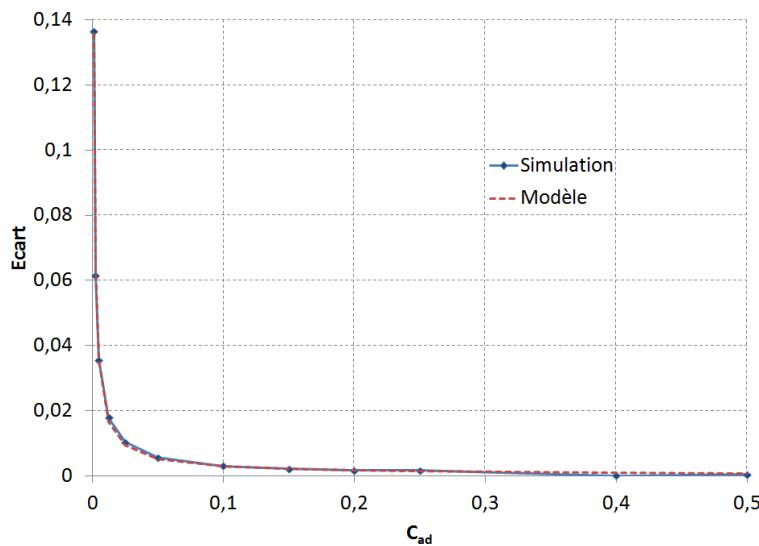


Figure 120 Ecart de temps adimensionné dû à la gravité

En traçant l'écart du temps adimensionné de disparition du raccord minimal avec le cas sans gravité en fonction de $C_{ad}^{\frac{5}{6}}$, on obtient une droite dont le coefficient directeur vaut $4,294 \cdot 10^{-4}$ avec un coefficient de corrélation de 0,9996. Cela permet de déduire le modèle donnant le temps adimensionné de disparition du raccord en fonction de C_{ad} pour C_{ad} allant de 0,001 à 0,5 (176).

$$\tau_{g=9,81} = \tau_{g=0} - 4,294 \cdot 10^{-4} C_{ad}^{\frac{5}{6}} ; C_{ad} \in [0,001; 0,5] \quad (176)$$

Quelques incertitudes sont présentes. Elles sont dues à plusieurs facteurs :

- (1) Les pas de temps choisis ont un effet sur la qualité de la solution, et sur le temps à la disparition du raccord. On sait que le col est présent à un temps donné, et non présent au temps suivant
- (2) la détermination des deux points du raccord est hasardeuse et dépend de la position des nœuds sur les courbes.

Lorsque C_{ad} est très faible (0,0001), on remarque un écrasement du cylindre dans son support, et la frontière du domaine au niveau du raccord se referme, présentant des angles supérieurs à 90°. La tension de surface n'a pas le temps d'agir pour ouvrir le raccord, celui-ci diminue par la disparition de la frontière sous l'effondrement du cylindre. Une procédure de suppression des nœuds dans les zones à angles supérieurs à 90° permet de continuer le calcul, qui devient moins physique. A une valeur de 0,001, ce phénomène n'est visible qu'un court instant (Figure 121 – 0,001), puis la tension de surface reprend son action. Pour des valeurs plus faibles, le phénomène prend une ampleur importante (Figure 121 – 0,00025).

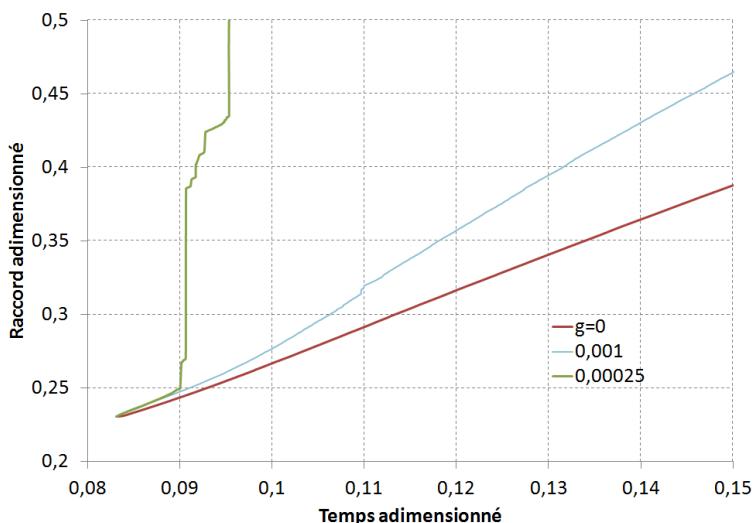


Figure 121 Effet de l'écrasement sur la cinétique de coalescence

On peut donc conclure que la gravité a une influence sur la coalescence dès lors que le coefficient C_{ad} est assez faible ($C_{ad}^{lim} = 0,1$). Ce coefficient limite dépend de la masse volumique du matériau. En-dessous d'une valeur seuil, la disparition du cylindre infini n'est plus gouvernée par la tension de surface mais par l'écrasement du cylindre sur son support ($C_{ad}^{seuil} = 0,001$).

L'augmentation du rayon initial, de la viscosité ou la diminution de la tension de surface entraînent une augmentation de l'influence de la gravité.

Dans de futurs travaux, il serait intéressant d'ajouter l'influence de la masse volumique à ces résultats.

1.2.6 Etude de la vitesse des nœuds lors de la coalescence

Une dernière étude de coalescence va permettre d'obtenir un ordre de grandeur des vitesses des nœuds, afin de valider les hypothèses faites sur le nombre de Reynolds permettant de négliger les effets d'inertie.

1.2.6.a Calcul de la vitesse maximale de l'écoulement en coalescence

La vitesse maximale lors de la coalescence de cylindres est obtenue au niveau du raccord. Lors de la coalescence de deux cylindres de même diamètre, la symétrie du problème selon l'axe défini par le raccord permet de déduire que la vitesse V des deux nœuds de celui-ci est portée par cette direction.

$$V = \frac{dy}{dt} = \frac{\Gamma}{2\eta} \frac{dy_{ad}}{d\tau_{Hopper}} = \frac{\Gamma}{2\eta} \dot{y}_{ad} \quad (177)$$

La vitesse maximale de l'écoulement peut donc être exprimée en fonction de la valeur maximale de la dérivée du raccord adimensionné (178).

$$V_{max} = \frac{\Gamma}{2\eta} \dot{y}_{ad max} \quad (178)$$

Les courbes établies lors de l'analyse de la coalescence de Hopper permettent de calculer le terme $\dot{y}_{ad max}$ au départ de la coalescence (179), que ce soit en mesurant la dérivée à l'aide des deux premières valeurs de Hopper (2,611) ou de la pente à l'origine des simulations (Figure 114) (2,628). La valeur de simulation est retenue car la pente doit être plus forte que la courbe déduite des deux premiers points de Hopper.

$$\dot{y}_{ad max}^{calculé} = 2,628 \quad (179)$$

Du fait du décalage en temps dû au raccord initial, la valeur théorique de $\dot{y}_{ad max}$ est encore un peu supérieure. Nos analyses des courbes de dérivée décalées en temps adimensionné, bien que bruitées par des oscillations locales de frontière, montrent que $\dot{y}_{ad max}$ serait inférieur à 3 (Figure 122).

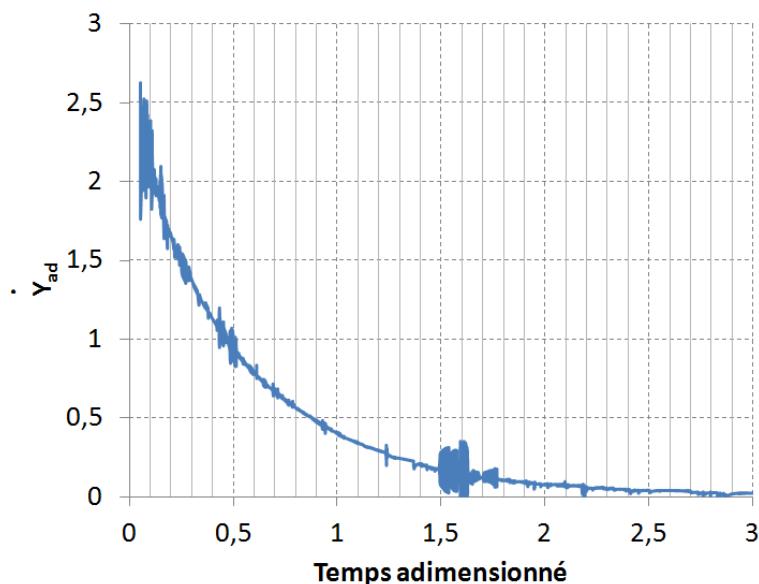


Figure 122 Evolution adimensionnelle de \dot{y}_{ad}

Le bruitage de la courbe est dû aux oscillations de frontières dans le lieu de raccord, point particulièrement soumis à la tension de surface. On peut donc proposer un encadrement de la valeur réelle de $\dot{y}_{ad max}$:

$$2.6 < \dot{y}_{ad_{max}}^{\text{réel}} < 3 \quad (180)$$

Un encadrement de la vitesse maximale obtenue lors de la coalescence de cylindres infinis vaut donc :

$$2.6 \frac{\Gamma}{2\eta} < V_{max} < 3 \frac{\Gamma}{2\eta} \quad (181)$$

Notons que la vitesse du fluide au raccord ne dépend pas des rayons des particules. Dans le cas d'une viscosité de 100 Pa.s et d'une tension de surface de 32,2 mN/m, cette vitesse vaut environ 5.10^{-4} m/s.

1.2.6.b Analyse du taux de déformation et de la viscoélasticité en coalescence

Il est possible d'estimer le taux de déformation initial de nos simulations connaissant la vitesse maximale du fluide au niveau du raccord.

Soit y_{init} le rayon de raccord initial réel d'un ensemble de deux cylindres infinis. Le taux de déformation maximal peut être estimé (182).

$$\dot{\varepsilon}_{max} = \frac{V_{max}}{y_{init}} = \frac{3\Gamma}{2\eta y_{init}} = \frac{3\Gamma}{2\eta a_0 y_{ad_{init}}} \quad (182)$$

Le temps caractéristique de déformation t_{def} est donc obtenu (183) et peut être comparé au temps de reptation du matériau.

$$t_{def} = \frac{1}{\dot{\varepsilon}_{max}} = \frac{2\eta a_0 y_{ad_{init}}}{3\Gamma} \quad (183)$$

Le temps de reptation ou de relaxation terminal est proportionnel à la viscosité. On peut donc introduire le rapport K :

$$\frac{tr(T)}{\eta(T)} = K \quad (184)$$

On peut exprimer le nombre de Deborah tr/t_{def} :

$$\frac{tr(T)}{t_{def}(T)} = \frac{K}{\frac{2a_0 y_{ad_{init}}}{3\Gamma}} = \frac{K}{a_0} \frac{3\Gamma}{2y_{ad_{init}}} \quad (185)$$

L'effet de la viscoélasticité commence à disparaître dès lors que ce nombre devient inférieur à 1, soit :

$$\frac{K}{a_0} < \frac{2y_{ad_{init}}}{3\Gamma} \quad (186)$$

Ainsi, pour négliger les effets de la viscoélasticité lors de la coalescence de deux cylindres infinis de rayons initiaux a_0 avec un rayon de raccord initial adimensionné de 0,1 et une tension de surface de 30 mN.m⁻¹, il faut que le rapport $\frac{K}{a_0}$ respecte la condition suivante :

$$\frac{K}{a_0} < 2,22 \quad (187)$$

Dans le cas des matériaux du projet, les effets de la viscoélasticité au départ de la coalescence disparaissent donc à partir de rayons initiaux des grains de l'ordre de 350 µm pour le matériau A et 450 µm pour le matériau B.

Par analogie avec cette étude, nous pouvons exprimer le temps de déformation t_{def} à tout instant en fonction de la vitesse de l'écoulement au raccord V et du rayon de raccord adimensionné y_{ad} (188).

$$t_{def} = \frac{y}{V} = \frac{a_0 y_{ad}}{V} = \frac{a_0 y_{ad}}{\frac{\Gamma}{2\eta} \dot{y}_{ad}} = \frac{2\eta a_0 y_{ad}}{\Gamma} \frac{1}{\dot{y}_{ad}} \quad (188)$$

Afin de déterminer à partir de quel moment l'effet viscoélastique devient négligeable, il faut donc déterminer \dot{y}_{ad} tel que tr/t_{def} soit inférieur à 1.

$$\frac{\dot{y}_{ad}}{y_{ad}} < \frac{1}{K} \frac{2a_0}{\Gamma} \quad (189)$$

Connaissant les paramètres du matériau étudié, il faut donc déterminer, sur la courbe d'évolution de la coalescence selon Hopper, le rapport \dot{y}_{ad}/y_{ad} . Dans le cas des matériaux du projet, ce rapport est estimé (Tableau 28).

Matériau	K	$a_0 = \frac{d_{50}}{2}$	Γ	Rapport $\frac{\dot{y}_{ad}}{y_{ad}}$ limite
A	$7,72 \cdot 10^{-4}$	$12 \cdot 10^{-6}$	$32 \cdot 10^{-3}$	0,97
B	$1,02 \cdot 10^{-3}$	$10 \cdot 10^{-6}$	$32 \cdot 10^{-3}$	0,61

Tableau 28 Rapports limites de \dot{y}_{ad}/y_{ad} à partir desquels l'effet viscoélastique devient négligeable

L'analyse d'une simulation nous a permis d'obtenir l'évolution de \dot{y}_{ad} en fonction du temps adimensionné (Figure 122). Nous établissons donc la courbe d'évolution de \dot{y}_{ad}/y_{ad} (Figure 123).

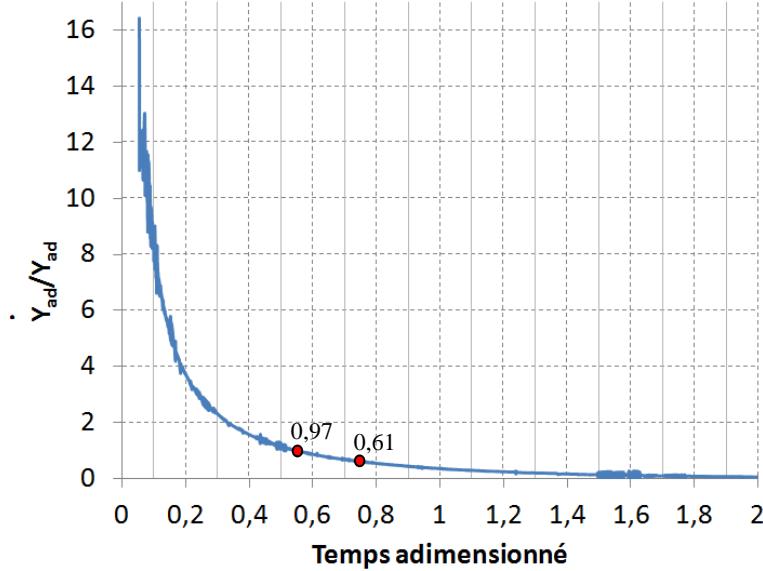


Figure 123 Evolution adimensionnelle de \dot{y}_{ad}/y_{ad}

A l'aide de la figure 123, il est alors possible de déterminer graphiquement le temps adimensionné de coalescence permettant au rapport tr/t_{def} de devenir inférieur à 1 pour chaque matériau. Ensuite, à

l'aide de la figure 124, nous déterminons graphiquement le raccord adimensionné de fin d'effet viscoélastique (Tableau 29).

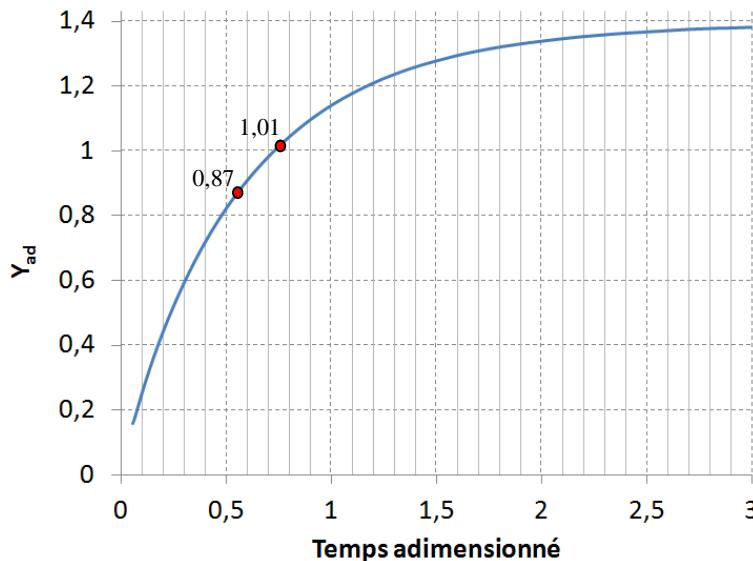


Figure 124 Evolution adimensionnelle de y_{ad}

Matériau	Temps adimensionné	Raccord adimensionné
A	0,55	0,87
B	0,74	1,01

Tableau 29 Données de fin d'effet de la viscoélasticité

On montre donc que la viscoélasticité des matériaux du projet a une influence sur la cinétique de coalescence des grains jusqu'à un raccord adimensionné de l'ordre de 1. Ce résultat s'applique à la moitié des grains du lit de poudre, l'autre moitié ayant un rayon supérieur à $\frac{d_{50}}{2}$.

1.2.6.c Nombre de Reynolds pour les fluides soumis à la tension de surface

Ayant déterminé l'ordre de grandeur de la vitesse maximale du fluide en coalescence, nous pouvons calculer le nombre de Reynolds (190) des fluides soumis à la seule action de la tension de surface (191).

$$R_e = \frac{\rho U L}{\eta} = \frac{\rho V_{max} L}{\eta} = \frac{\rho L \Gamma}{2\eta^2} \dot{y}_{ad\ max} \quad (190)$$

$$R_e = \frac{3 \rho L \Gamma}{2 \eta^2} \quad (191)$$

Nous pouvons estimer le nombre de Reynolds des écoulements intervenant dans la simulation du procédé (Tableau 30). Les rayons moyens des particules que nous simulerons sont d'environ 25 μm .

Variable	Ordre de grandeur
ρ	1300 Kg.m ⁻³
L	25.10 ⁻⁶ m
Γ	30.10 ⁻³ mN.m ⁻¹
η	10 ² Pa.s
R_e	1,5.10 ⁻⁷

Tableau 30 Détermination du nombre de Reynolds des écoulements simulés

Ainsi, le nombre de Reynolds est de l'ordre de 10⁻⁷, il est possible de négliger les effets d'inertie, hypothèse posée lors du développement hydrodynamique et maintenant validée.

1.3 Evolution de cavités fermées

La revue bibliographique du chapitre 1 a permis de trouver des études sur la disparition de cavités vides sous l'action de la tension de surface. Il nous a donc paru intéressant de vérifier que les mêmes simulations permettent de trouver les mêmes résultats.

1.3.1 Données de simulations

Dans les simulations suivantes, les mêmes paramètres seront utilisés. Les valeurs de tension de surface et viscosité seront celles d'un PEEK à 400°C (Tableau 31).

η	Γ
1793.7 Pa.s	32,2 mN.m ⁻¹

Tableau 31 Paramètres du PEEK à 400°C pour les simulations de disparition de cavités

1.3.2 Disque de fluide avec cavité centrée

La simulation de la disparition d'une cavité centrée d'un disque de fluide possède une description analytique de l'évolution temporelle des rayons intérieur et extérieur du domaine (CHAPITRE I .3.1.4.b .i). La même simulation est donc réalisée à partir du maillage défini sur la figure 125. Le rayon initial intérieur est fixé à 100 µm et le rayon initial de la cavité est fixé à 50 µm.

$t = 0\text{s}$

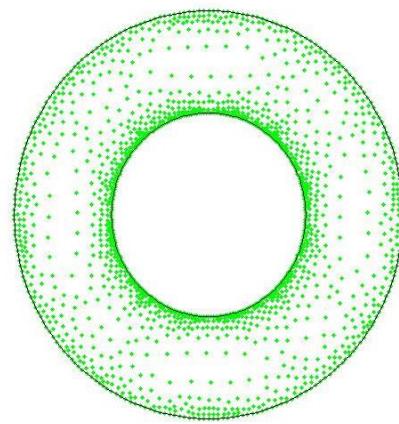
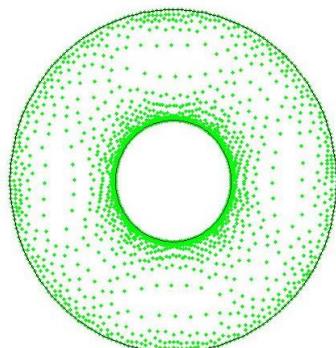


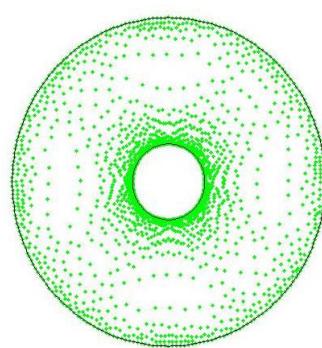
Figure 125 Support de simulation pour la disparition d'une cavité centrée d'un disque de fluide

La simulation de l'évolution de ce domaine est présentée en images sur la figure 126.

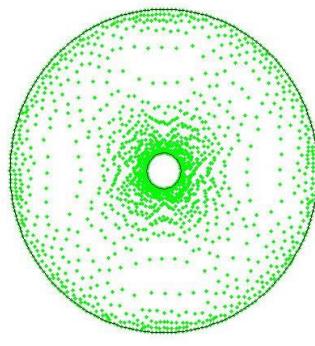
$t = 1\text{s}$



$t = 2\text{s}$



$t = 3\text{s}$



$t = 4\text{s}$

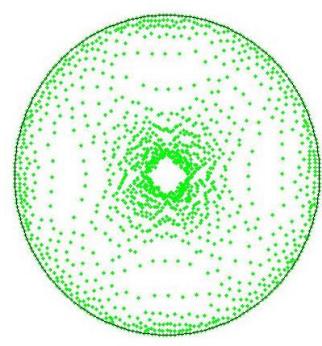


Figure 126 Simulation de la disparition de la cavité centrée

Une procédure numérique permet de supprimer une cavité dès que son aire est plus faible qu'une valeur choisie. Les nœuds dans le domaine issus du remaillage liés à cette frontière sont alors supprimés aussi, induisant un maillage visuellement moins fourni ($t = 4s$).

L'aire délimitée par les deux frontières du domaine est calculée pendant la simulation et permet de calculer les rayons adimensionnés intérieurs r_i et extérieurs r_0 du domaine et de comparer leur évolution en fonction du temps adimensionné avec les résultats de Kropinski (Figure 127).

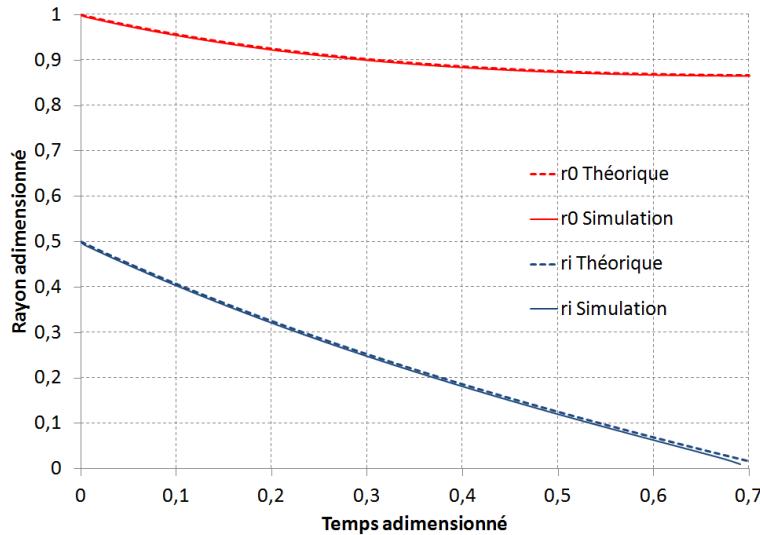


Figure 127 Comparaison des résultats de simulation aux résultats de la littérature

Un parfait accord est obtenu tout au long de la simulation. La très légère différence observée en fin de simulation entre la valeur théorique du rayon intérieur r_i et la valeur de simulation provient très probablement d'une mauvaise discrétisation de la cavité lorsque son aire est très faible.

Notons par ailleurs que le temps réel de disparition d'une cavité t_d peut être estimé en fonction des paramètres matériau :

$$t_d = 0,7 \frac{\eta a_0}{\Gamma}$$

1.3.3 Disque de fluide avec cavité excentrée

La cinétique de disparition d'une cavité excentrée d'un disque de fluide est donnée dans la littérature (CHAPITRE I .3.1.4.b .ii). La même simulation est donc réalisée à partir du maillage défini sur la figure 128. Le rayon initial extérieur est fixé à 100 µm, le rayon initial de la cavité est fixé à 50 µm, et son centre est décalé de 45 µm du centre du cercle extérieur vers le haut.

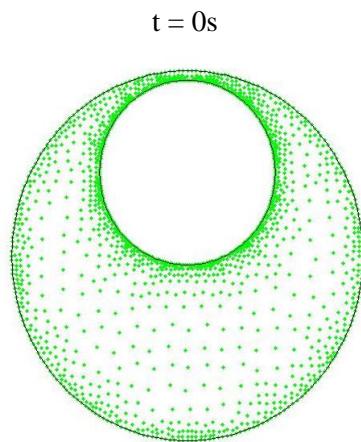


Figure 128 Support de simulation pour la disparition d'une cavité excentrée d'un disque de fluide

La simulation de l'évolution de ce domaine est présentée en images sur la figure 129. Les pointillés rouges représentent la situation finale.

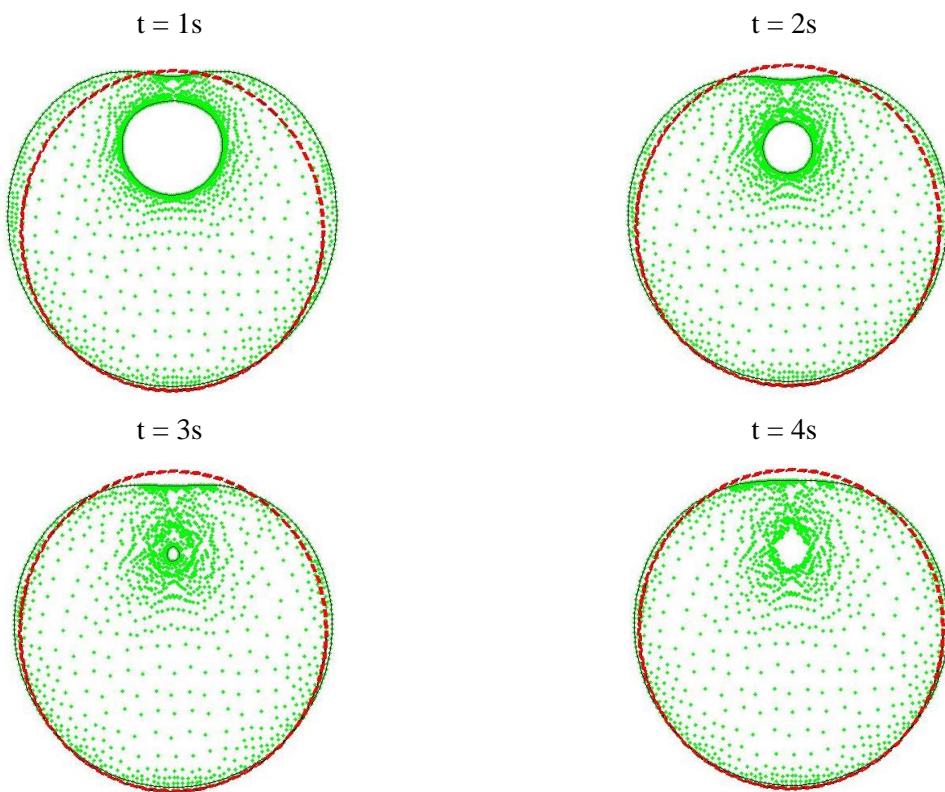


Figure 129 Simulation de la disparition de la cavité centrée

L'aire de la cavité est calculée au cours de la simulation et son évolution adimensionnelle (aire divisée par l'aire du domaine initial sans la cavité en fonction du temps adimensionné) est comparée aux résultats de Kropinski (Figure 130).

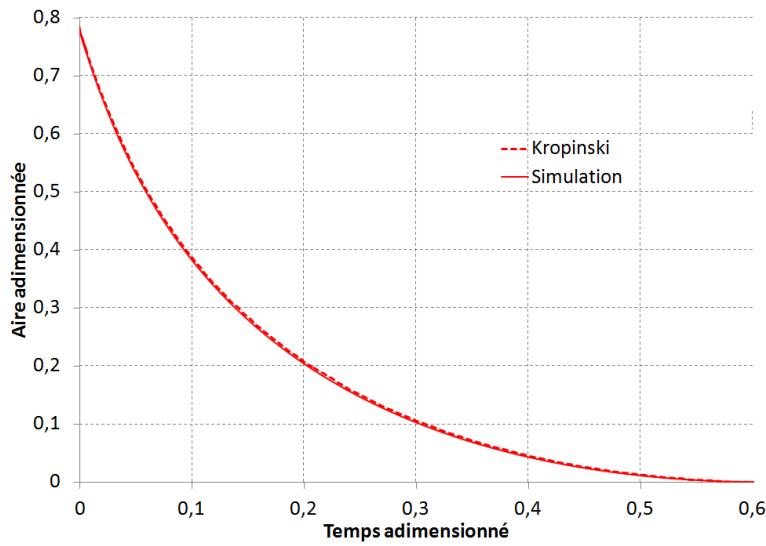


Figure 130 Comparaison des résultats de simulation aux résultats de la littérature

Un parfait accord est obtenu tout au long de la simulation.

1.4 Conclusion

Le logiciel hydrodynamique mis en place a permis de simuler une goutte pendante et d'obtenir une géométrie de goutte exactement égale à la géométrie de la goutte théorique correspondante, et a donc permis de valider la prise en compte de la tension de surface. La simulation de la coalescence de différents cylindres infinis a permis de valider la cinétique d'évolution hydrodynamique du fluide. Une étude d'influence des paramètres numériques de résolution et de maillage a permis de montrer que la méthode C-NEM est fiable. Les choix des paramètres utilisés pour simuler le procédé de fusion laser sélective ont pu être justifiés. Une étude d'influence de la gravité dans le cas de fluides mis en mouvement sous l'action de la tension de surface a été menée et a permis de préciser des conditions sur les paramètres matériaux pour lesquelles la gravité peut être négligée. Nous avons également vérifié que la coalescence des polymères s'effectue avec de très faibles nombres de Reynolds permettant de négliger les effets d'inertie du fluide. Enfin, nous avons montré que la viscoélasticité, négligée dans nos modèles, pouvait avoir une influence non négligeable au début de la coalescence. La comparaison des cinétiques de disparition des cavités a permis de comparer le logiciel à des travaux antérieurs sur les fluides avec tension de surface, et a confirmé que le logiciel hydrodynamique fonctionnait parfaitement.

2 Validation thermique à l'aide de trois cas tests

Afin de vérifier que le logiciel fonctionne thermiquement, nous avons mis en place 3 essais thermiques simples:

- (1) température imposée sur un bord du domaine permettant de vérifier la bonne prise en compte de l'équation de la chaleur.
- (2) flux de convection imposé (température d'air imposée) permettant de vérifier la bonne prise en compte de la convection et des flux.
- (3) passage laser et comparaison des résultats avec COMSOL permettant de valider l'implémentation du modèle laser et de déterminer les coefficients de la loi de diffusion fictive adaptant la thermique 2D à la réalité.

Enfin, nous avons analysé l'impact de la prise en compte de l'enthalpie de fusion sur la température obtenue lors d'un passage laser afin d'estimer l'erreur commise dans nos simulations où elle n'est pas implémentée pour des questions de temps de calcul.

Lors de tous les calculs thermiques, des propriétés thermo-physiques indépendantes de la température ont été considérées: une masse volumique de 1327 kg.m^{-3} , une conductivité thermique de $0,25 \text{ W.m}^{-1.K^{-1}}$, une capacité calorifique de $1320 \text{ J.kg}^{-1}.K^{-1}$ et un coefficient d'échange par convection avec l'air est fixé à $15 \text{ W.m}^{-2}.K^{-1}$.

2.1 Température imposée sur un bord

Partant d'un domaine à température initiale fixée à 0°C , le premier test consiste à imposer une température de 1°C sur un bord, un flux nul sur les autres, puis de comparer l'évolution de la température du domaine à la solution théorique dans un domaine semi-infini (192).

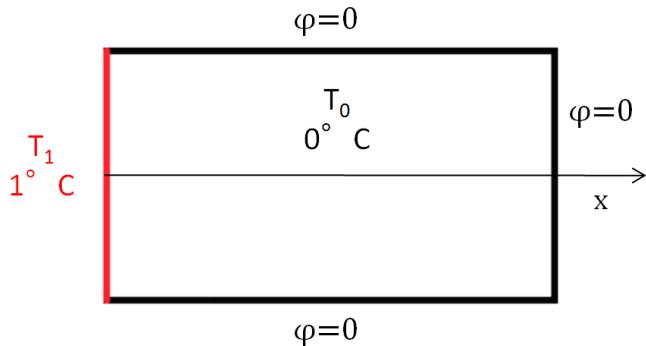


Figure 131 Essai thermique à température imposée : Test 1

$$\frac{T - T_1}{T_0 - T_1} = \operatorname{erf} \left[\frac{x}{2\sqrt{at}} \right] \quad (192)$$
$$a = \frac{\lambda}{\rho c}$$

Dans la simulation, le domaine n'étant pas semi-infini, il faut comparer les solutions avant que l'élévation de température n'atteigne le côté opposé à celui où la température est imposée.

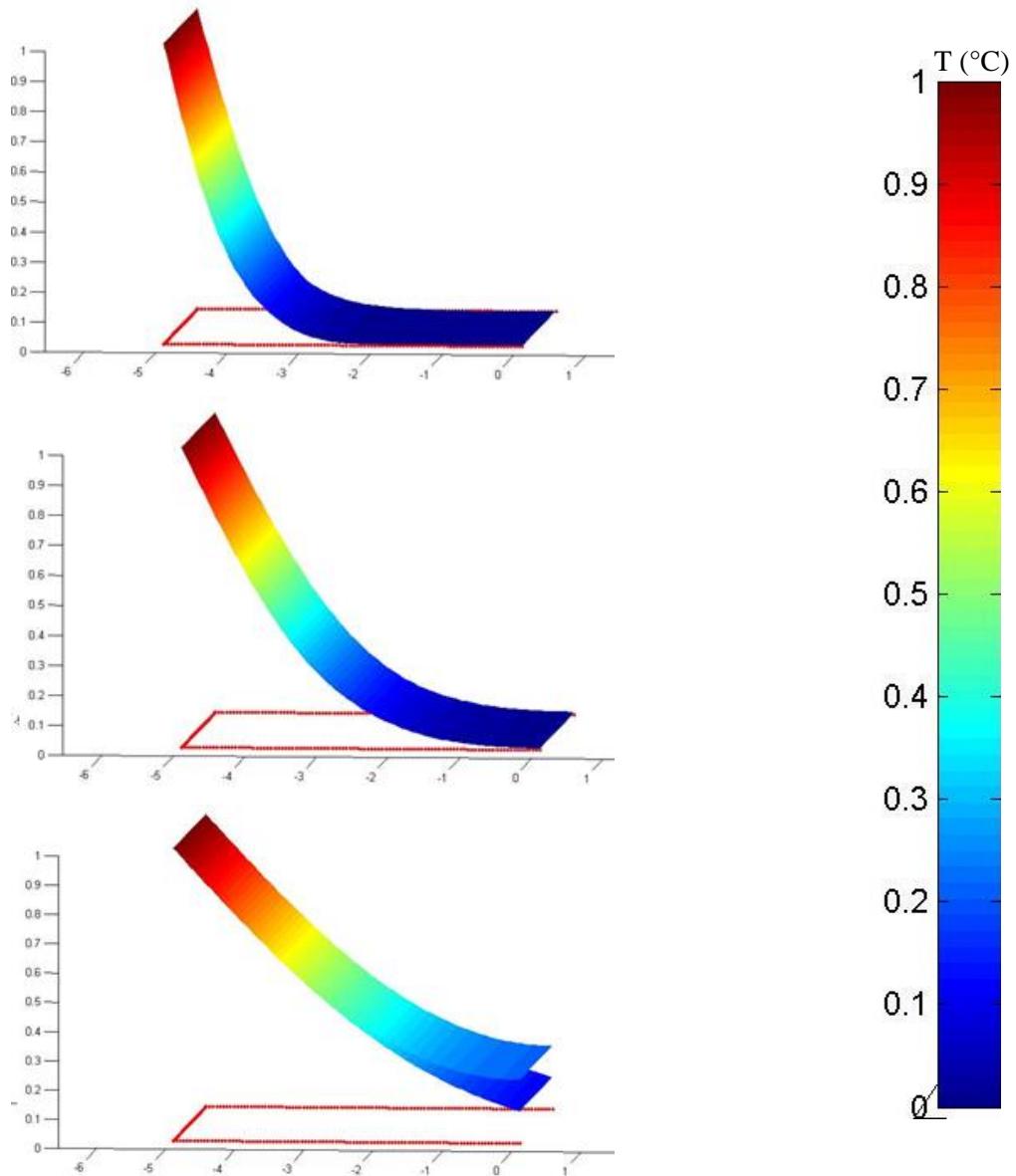


Figure 132 Simulation du test 1 : profils de température du domaine théorique et simulé pour trois temps différents

La température de la simulation suit l'évolution théorique jusqu'au moment où la chaleur atteint le côté opposé du domaine. La température simulée devient alors supérieure à la température du modèle semi-infini.

2.2 Flux de convection imposé

Partant d'un domaine à température initiale fixée à 0°C, le deuxième test consiste à imposer un flux de convection en imposant la température de l'air à 1°C sur un bord, un flux nul sur les autres, puis à comparer l'évolution de la température du domaine à la solution théorique dans un domaine semi-infini (193).

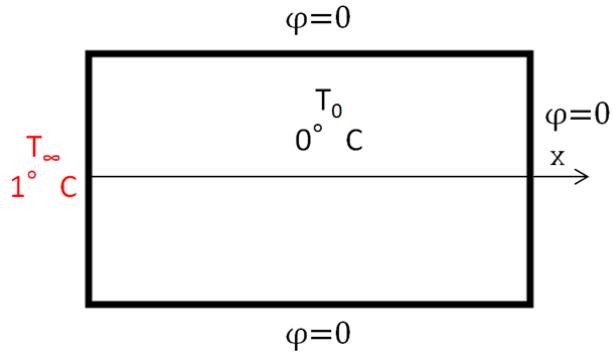


Figure 133 Essai thermique à flux de convection imposé : Test 2

$$\frac{T - T_0}{T_\infty - T_0} = \operatorname{erfc} \left[\frac{x}{2\sqrt{at}} \right] - \exp \left[\frac{h}{\lambda} x + \frac{h^2}{\lambda^2} at \right] \operatorname{erfc} \left[\frac{x}{2\sqrt{at}} + \frac{h}{\lambda} \sqrt{at} \right]$$

$$a = \frac{\lambda}{\rho c} \quad (193)$$

Comme précédemment, le domaine n'étant pas semi-infini dans la simulation, il faut comparer les solutions avant que l'élévation de température n'atteigne le côté opposé à celui où la température est imposée.

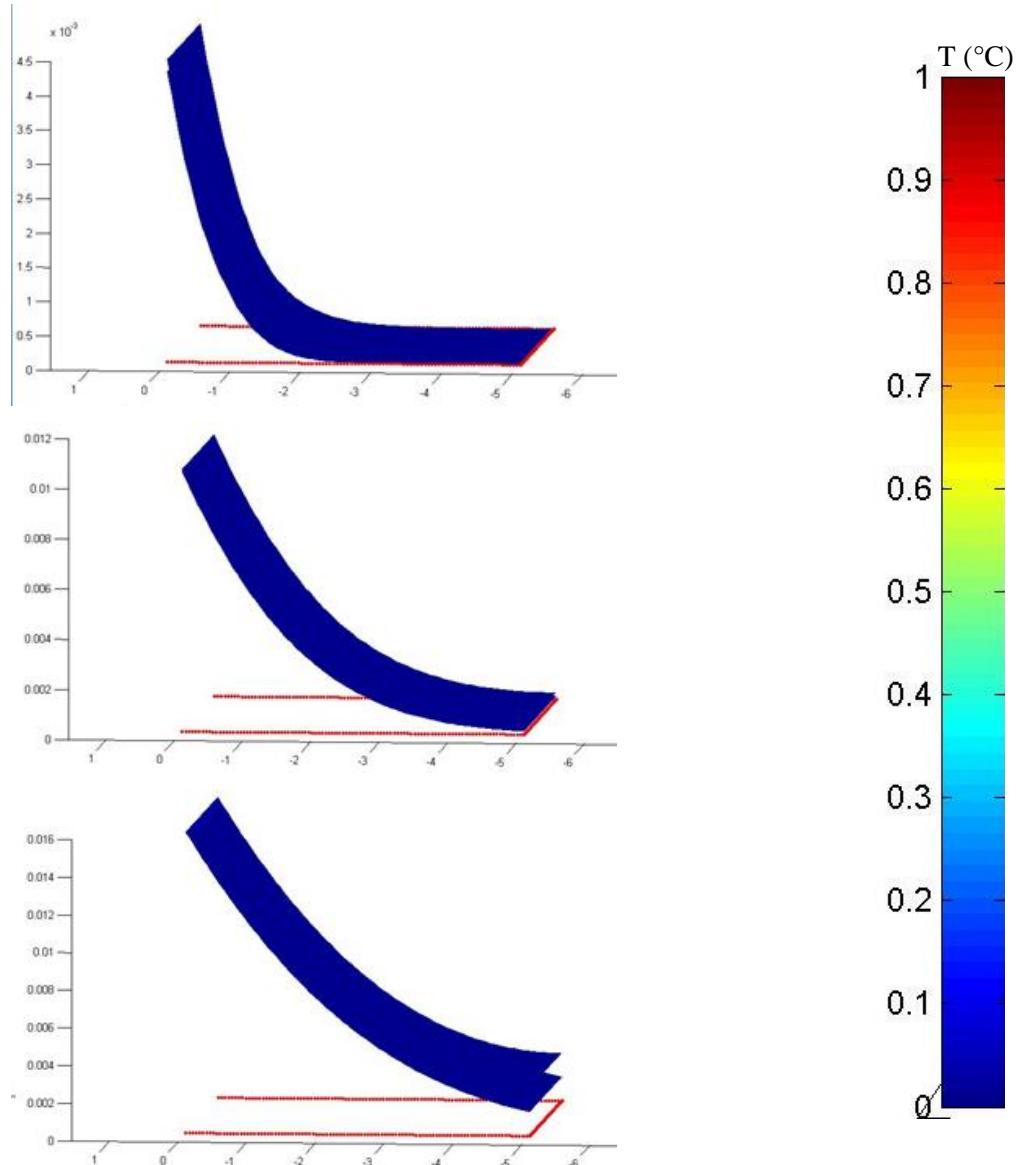


Figure 134 Simulation du test 2 : profils de température du domaine théorique et simulé pour trois temps différents

La température de la simulation suit l'évolution théorique jusqu'au moment où la chaleur atteint le côté opposé du domaine. La température simulée devient alors supérieure à la température du modèle semi-infini.

2.3 Chauffage laser transitoire

Dans un premier temps, nous vérifions que la programmation est correcte en simulant les mêmes cas tests sur Matlab et COMSOL. Ensuite, nous déterminons les coefficients de correction 2D/3D permettant d'augmenter le refroidissement et de simuler une perte thermique dans la troisième dimension.

2.3.1 Validation des modèles

Un domaine de $500 \mu\text{m} \times 900 \mu\text{m}$ à la température initiale de 250°C est maintenu à 250°C sur trois de ses bords et soumis au flux de convection avec l'air à 50°C sur le bord supérieur exposé au laser. Un laser de diamètre $300 \mu\text{m}$, de vitesse $0,5 \text{ m.s}^{-1}$ et de puissance 5 W répartie uniformément et de manière Gaussienne (sans correction proposée CHAPITRE III .1.8.3.a) est alors passé de gauche à droite sur le bord supérieur (course laser de -300 à $+300 \mu\text{m}$). Le coefficient d'extinction est fixé à 7500 m^{-1} .

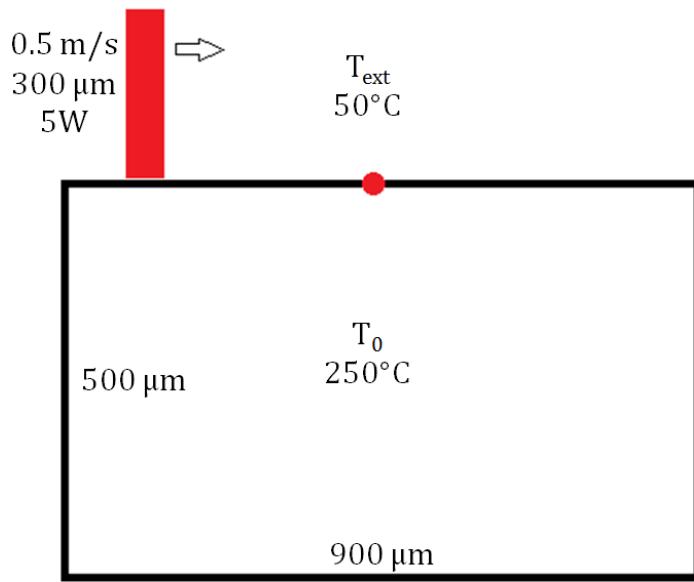


Figure 135 Essai thermique lors d'un passage laser : Test 3

Les pas de temps sont choisis afin d'obtenir les mêmes précisions. L'évolution dans le temps de la température $T(t)$ est étudiée au point central de la surface supérieure en fonction du temps et présentée figure 136 pour une répartition constante et gaussienne de puissance.

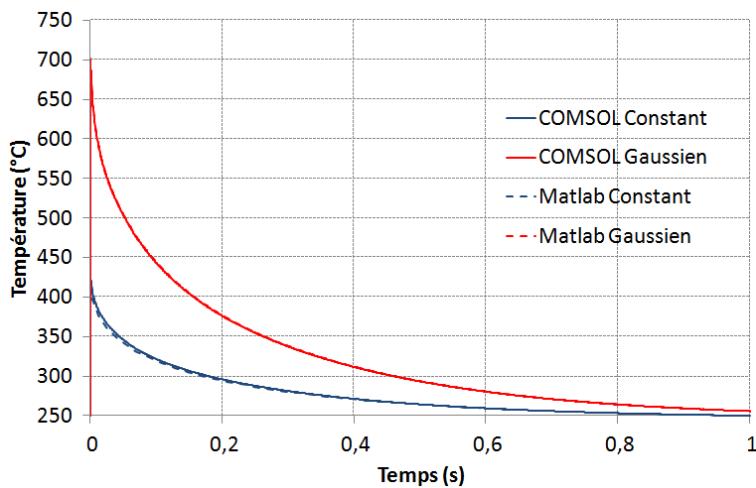


Figure 136 Profil d'évolution de la température du point central en fonction du temps lors de la simulation Matlab et COMSOL

Dans les deux cas, une parfaite adéquation entre les courbes est obtenue et permet de valider la programmation du modèle laser dans Matlab.

2.3.2 Vérification de la validité des choix numériques

Différents essais sont menés afin de voir l'influence des pas de temps thermiques lors du passage laser et lors du refroidissement. Les résultats obtenus montrent que pour des pas de temps laser permettant à celui-ci de passer 10 fois sur chaque point de la surface, et des pas de temps de refroidissement de l'ordre de 10 ms (pas hydrodynamiques courants dans nos simulations), les courbes de passages laser sont identiques. La simulation thermique du procédé avec passage laser sera donc correcte.

2.3.3 Comparaison de la thermique 2D et 3D

Nous réalisons une étude comparative de passages lasers en 2D et 3D pour des distributions de puissance uniformes et Gaussiennes (Figure 137).

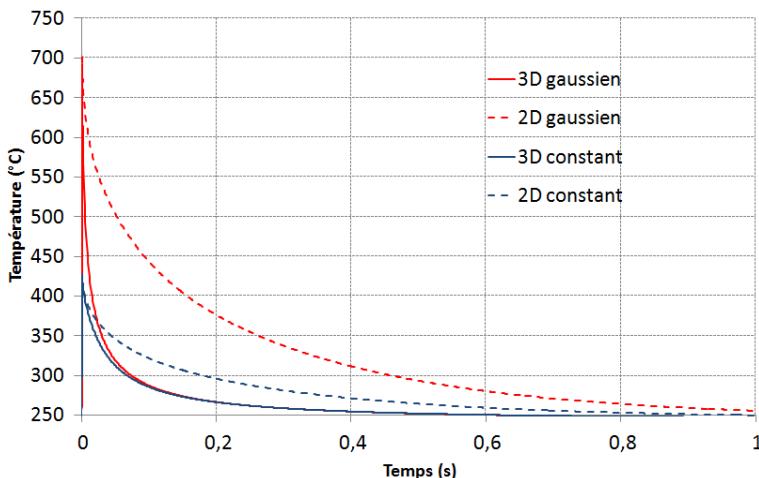


Figure 137 Comparaison de simulations 2D et 3D

Lors du passage laser, les modélisations réalisées permettent d'obtenir les mêmes températures maximales. L'échauffement dans une tranche de matériau au centre du spot laser est donc le même que l'échauffement obtenu lors d'une simulation 3D. Ce résultat tient au fait que le matériau a une diffusion thermique très lente par rapport au temps de passage du laser.

Cependant, les modèles 2D présentent un refroidissement plus faible qu'en 3D du fait de l'absence de diffusion de la chaleur dans la troisième dimension.

2.3.4 Correction 2D/3D

Comme précisé précédemment (CHAPITRE III .1.8.4.b), deux termes de dissipation en surface et en profondeur sont ajoutés au domaine afin de simuler cette diffusion permettant à la thermique 2D de représenter la thermique 3D. Une étude paramétrique est donc menée afin de déterminer les

coefficients k^{2D3D}_s , k^{2D3D}_v et α^{2D3D} permettant d'obtenir une cinétique de refroidissement équivalente en 3D et 2D.

En 3D, le domaine d'étude est un parallélépipède rectangle dont la surface soumise à l'échange avec l'air à 50°C est carrée de côté 900 μm et de profondeur 1000 μm. En 2D, la section verticale centrale de ce domaine 3D est étudiée (Figure 138).

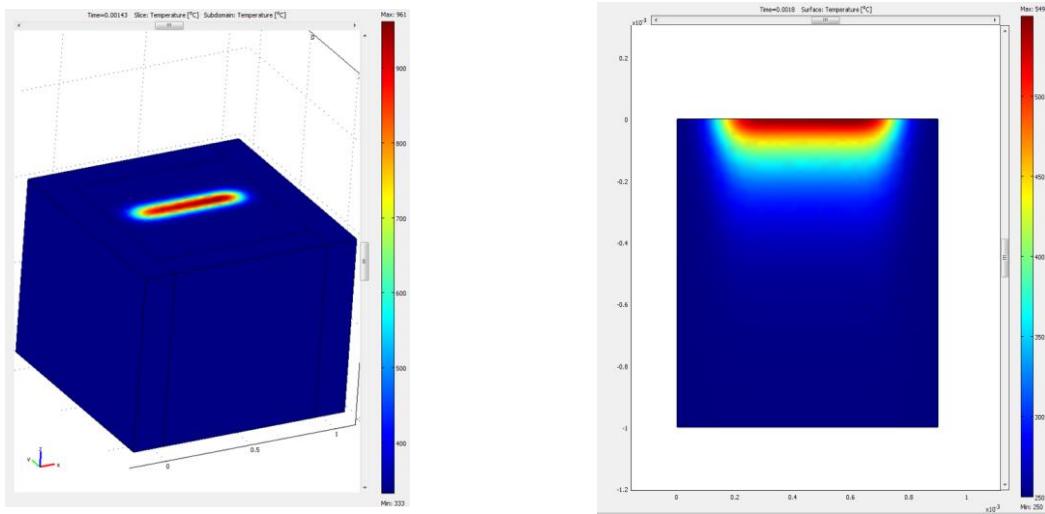


Figure 138 Domaines de simulation

Les bords autres que celui en contact avec l'air sont à température imposée constante. Les paramètres laser et matériau sont les mêmes qu'au paragraphe précédent. L'étude considère des préchauffages T_0 de 250°C, 300°C et 350°C pour deux puissances laser P de 5 W et 10 W. Pour chaque couple de paramètres, l'analyse des températures est effectuée à 4 profondeurs (0 μm, 250 μm, 500 μm et 750 μm). Après différents essais, un choix de paramètres permet d'approcher au mieux la température du modèle 3D. La figure 139 présente les résultats d'étude des températures aux 4 profondeurs pour le couple (T_0, P) = (300°C, 5W).

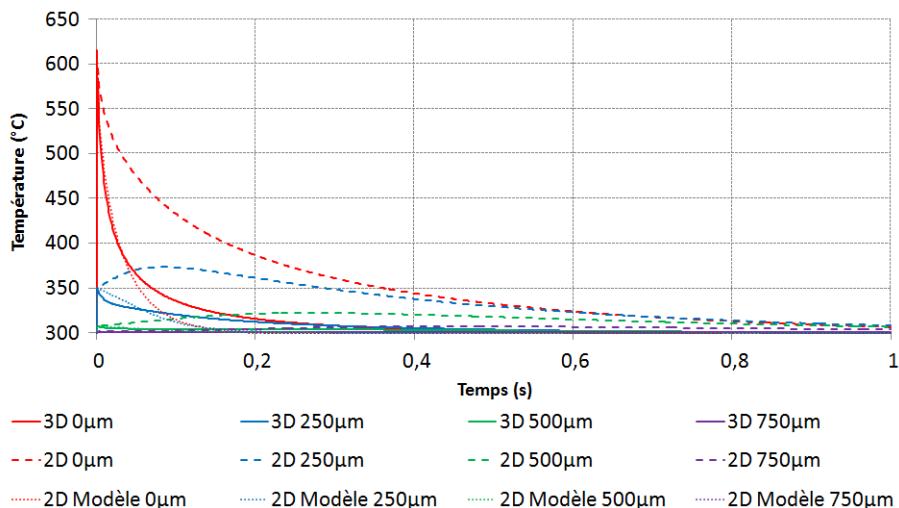


Figure 139 Evolution des températures 3D-2D-2D modifié à $T_0 = 300^\circ\text{C}$ et $P = 5 \text{ W}$

Le modèle permet de se rapprocher de la courbe théorique quelle que soit la profondeur étudiée. La figure 140 montre l'écart entre la température 3D et la température obtenue avec notre modèle 2D corrigé.

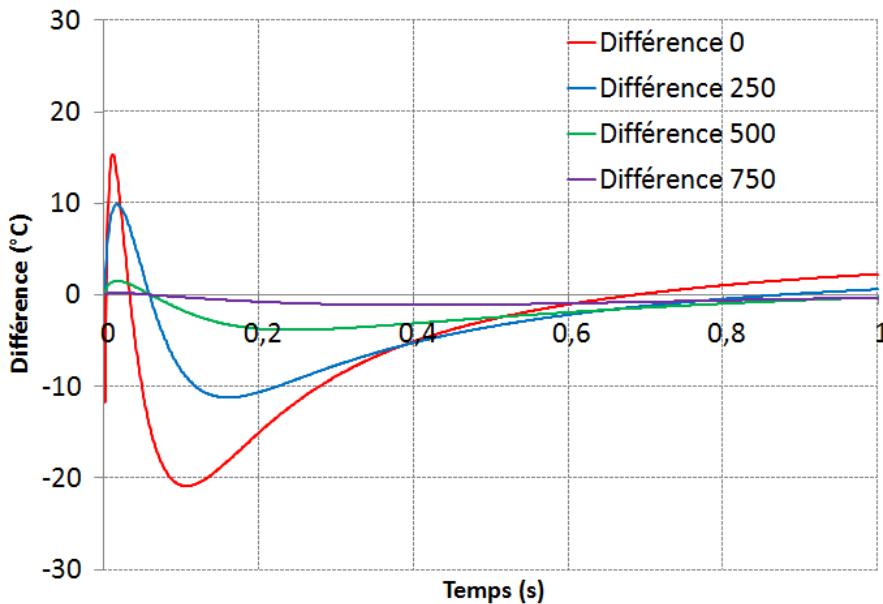


Figure 140 Différence de température en fonction du temps entre 3D et modèle 2D modifié

Le modèle proposé surestime légèrement la température au départ, sans excéder 30° et la sous-estime ensuite, de l'ordre de 30°C aussi. Etant donnés les ordres de grandeur d'élévation de température, cet écart n'a pas d'influence sur les changements d'état de la matière.

L'analyse non présentée des évolutions de température pour les six couples de conditions en préchauffage et puissance permet de montrer que, quel que soit le préchauffage, les courbes obtenues sont quasiment identiques à une puissance donnée. Ainsi, à 5 W, l'écart maximal obtenu est de l'ordre de 20°C, quel que soit le préchauffage (250°C, 300°C et 350°C). Pour une puissance de 10 W, cet écart ne dépasse pas 40°C.

Au final, la dissipation thermique identifiée permettant de réaliser une analogie 2D/3D en thermique est obtenue au niveau de la surface et du cœur de la pièce par (194).

$$\begin{aligned}\varphi_s &= -1000(T - T_0) \\ b_z &= 3 \cdot 10^7(T - T_0)(1 - e^{-10^5 z})\end{aligned}\tag{194}$$

2.3.5 Prise en compte de l'enthalpie de fusion

Les enthalpies de fusion et cristallisation du matériau n'ont pas été prises en compte dans nos simulations pour des raisons de temps de calcul.

Dans le cadre de la simulation de la fusion laser, nous verrons que la température de la matière après le passage du laser atteint très rapidement la température de préchauffage de la poudre, et qu'aucune cristallisation n'a lieu puisque nous choisissons de préchauffer au-dessus de la température de cristallisation (matériau A) ou de transition vitreuse (matériau B).

Dans le cas de la fusion, le changement de phase solide/liquide a lieu. L'utilisation d'une formulation enthalpique de la chaleur spécifique serait donc ici nécessaire afin de prendre en compte l'enthalpie ΔH de fusion du matériau. Toutefois, ces conditions sont contraignantes en termes de temps de calcul. Cette méthode nécessite de plus d'être adaptée aux nœuds à l'état solide, puisque l'enthalpie de fusion ne doit être prise en compte que lors de la fusion.

Afin d'étudier l'impact de la prise en compte de l'enthalpie de fusion, nous avons déterminé un modèle de Cp équivalent Cp_{eq} pour le matériau A (195) et avons simulé un passage laser, soit en considérant un Cp constant, soit avec un Cp équivalent et comparons les résultats obtenus (Figure 142).

$$Cp_{eq} = Cp + \frac{\Delta H}{\sqrt{\pi \Delta T}} e^{-\frac{(T-T_f)^2}{\Delta T}} \quad (195)$$

où ΔH est l'enthalpie de fusion ($J.kg^{-1}$), Cp la capacité calorifique ($J.kg^{-1}.K^{-1}$), ΔT la plage de fusion (K), T_f la température de fusion (K) et T la température du matériau (K)

Dans le cas du matériau A, l'analyse par DSC nous permet d'établir la loi pour Cp_{eq} (196) et présentée sur la figure 141.

$$Cp_e = 1320 + \frac{39000}{\sqrt{\pi 59}} e^{-\frac{(T-611.15)^2}{59}} J.kg^{-1}.K^{-1} \quad (196)$$

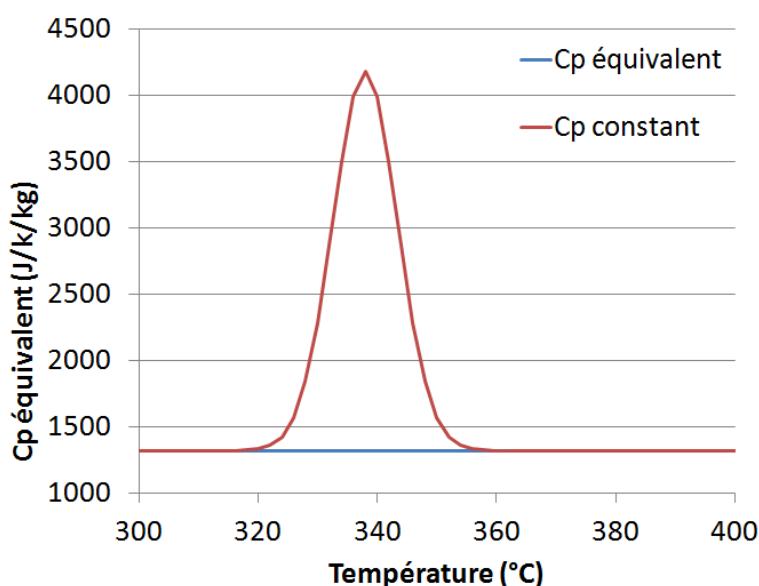


Figure 141 Comparaison de Cp constant avec Cp équivalent pour le matériau A

Ce modèle permet d'obtenir une aire entre les deux courbes égale à l'enthalpie de fusion, 39000 J/kg dans le cas présent.

Nous avons donc simulé un passage laser sous COMSOL avec et sans prise en compte de l'enthalpie de fusion, et comparé l'élévation de température (Figure 142).

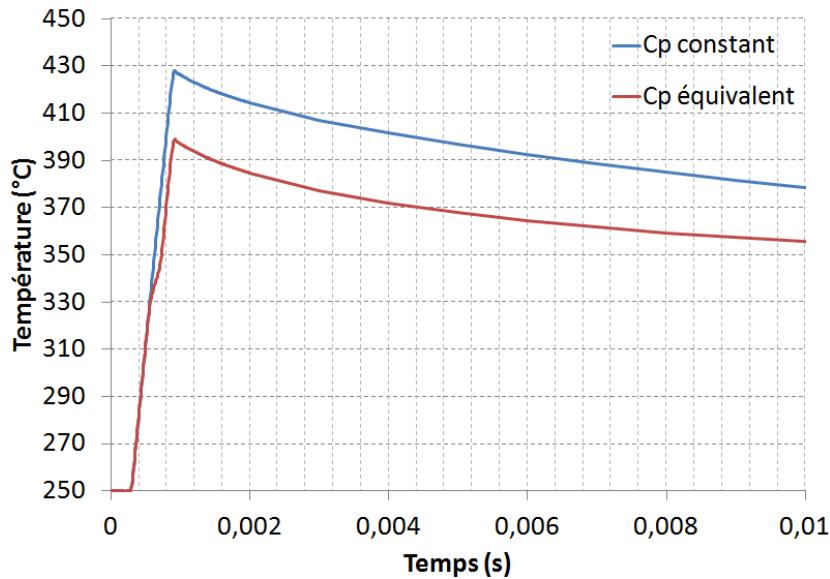


Figure 142 Comparaison des résultats de simulation avec et sans Cp équivalent

La prise en compte de l'enthalpie de fusion induit un échauffement inférieur d'environ 30°C par consommation d'énergie lors du changement de phase. La courbe présentée ci-dessus a été zoomée entre 0 s et 0,01 s, c'est-à-dire pour $T > T_f$ car nous n'avons pas considéré l'hystérésis en température entre le pic de fusion T_f et celui de cristallisation T_c . Au refroidissement, la libération de chaleur ΔH se produit donc à T_f dans le calcul, alors qu'elle n'intervient pas avant T_c . La courbe n'est donc pas juste au-delà des bornes présentées. Toutefois, les erreurs induites par la non-prise en compte de l'enthalpie de fusion restent assez limitées.

3 Conclusion du Chapitre 4

Le logiciel développé a été validé, autant sur le plan hydrodynamique que thermique, permettant de reproduire différents cas tests de dynamique des fluides et thermique dont les solutions sont données dans la littérature.

Les différents choix numériques utilisés pour la simulation du procédé ont été étudiés et validés. Il est donc maintenant possible de simuler le procédé de fusion laser sélective et d'étudier l'influence des différents paramètres matériau et procédé sur la densification et le soudage de la matière.

CHAPITRE V - SIMULATION DU PROCÉDÉ DE FUSION LASER SÉLECTIVE

1 Simulation du procédé

L'objectif consiste à simuler le procédé afin de comprendre, dans un premier temps, les mécanismes mis en jeu lors de la fusion laser sélective de poudres thermoplastiques. Ensuite, les simulations mises en place doivent permettre de montrer comment les différents paramètres matériau et procédé agissent sur la densification de la matière tout en déterminant des plages de paramètres procédé permettant d'obtenir une bonne fusion de la poudre et un soudage correct des grains entre eux. L'un des points importants du procédé consiste à maintenir la matière à l'état liquide le plus longtemps possible. A l'échelle d'une couche, nous pourrons donc déterminer les conditions permettant de rester liquide après passage laser, et lors de l'étalement d'une nouvelle couche de poudre. Etant donné le caractère bidimensionnel de la simulation développée, il ne sera pas possible d'analyser l'évolution de la densité de la matière.

1.1 Echelle microscopique : fusion de la poudre

Dans un premier temps, nous utilisons le logiciel développé sous Matlab pour simuler à l'échelle microscopique un passage laser sur une poudre préchauffée. Cette partie permet d'étudier le passage à l'état liquide de la matière sous le faisceau laser, les cycles thermiques subis, la quantification du soudage (profondeur et cinétique) et la cinétique de densification de la poudre.

1.1.1 Aptitude des poudres à coalescer

Dans un premier temps, il est intéressant de comparer les poudres des matériaux A et B avec un PA12 utilisé en fabrication directe chez Dassault Aviation afin d'analyser leur aptitude à coalescer au regard des modèles de Frenkel et Hopper prédisant la cinétique d'évolution de la coalescence. Si l'on compare les temps caractéristiques de coalescence des matériaux, c'est-à-dire l'inverse du coefficient C_{ad} , pour chaque poudre à T_f et $T_f + 100^\circ\text{C}$ (Figure 143), on montre que le matériau B présente un temps caractéristique de coalescence comparable au PA12 alors que le matériau A risque de coalescer plus difficilement.

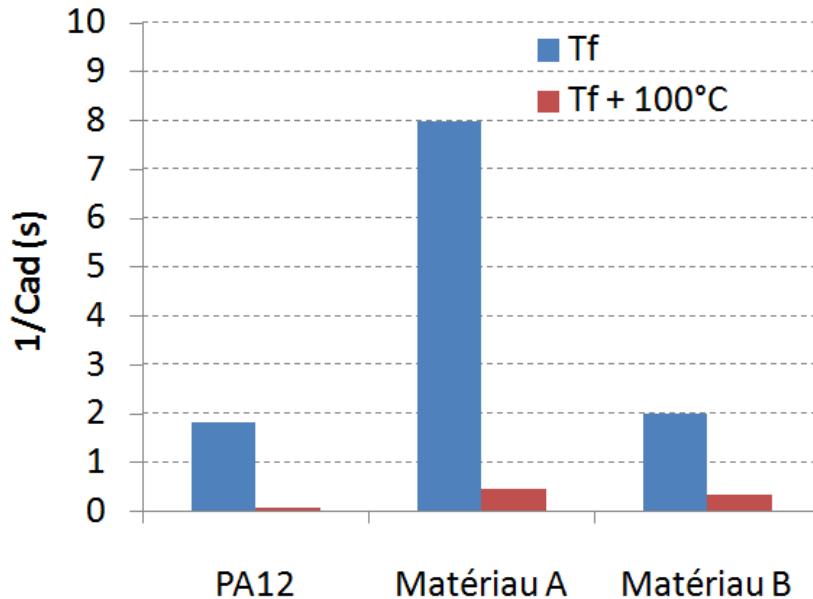


Figure 143 Aptitude des poudres à coalescer

1.1.2 Rappel des choix numériques de simulation

Le chapitre précédent a permis d'étudier l'influence de divers paramètres numériques sur les qualités de résultats et les temps de calcul. Nous rappelons ici les choix retenus pour nos simulations.

Les maillages choisis ont une définition globale de 50 μm par nœud, avec un maillage initial progressif et adapté le long de la frontière avec un critère de flèche proportionnelle défini à 0,01. Le remaillage de frontière est effectué sur les segments tous les 5% d'évolution de la courbure de la frontière concernée, avec un critère de 10° par nœuds. Les pas de temps sont adaptés à une rotation locale des segments de la frontière de 5° . La résolution numérique est effectuée de manière itérative sur un fluide visqueux quasi incompressible. Les matrices sont calculées à chaque pas de temps. Les nœuds sont déplacés avec un schéma à l'ordre 1, la tension de surface est calculée de manière linéaire sur les bords. La viscoélasticité et l'inertie des fluides étudiés sont négligés. Le volume des cavités est considéré comme fixe.

1.1.3 Simulation du procédé

Nous lançons une campagne de simulation afin d'étudier la mise en œuvre du procédé avec les deux matériaux du projet. Les simulations réalisées sont effectuées sur 30 secondes réelles. Pendant les 2 premières secondes, le matériau est maintenu à sa température de préchauffage. Après 2 secondes, le laser se déplace de la gauche vers la droite très rapidement (quelques millisecondes) compte tenu de sa vitesse et de la longueur L du domaine ($L = 1200 \mu\text{m}$). Le choix est fait de procéder à des simulations d'une durée totale de 30 secondes. On laisse donc 28 secondes s'écouler. L'expérience de simulation nous a montré qu'après 30 secondes, les phénomènes physiques (soudage, cycles thermiques et densification) ont eu lieu.

1.1.3.a Étude préliminaire

En attendant de fixer certains paramètres des matériaux, une première analyse complète sur un plan d’expérience (P , V , T_0) réaliste de 60 simulations (Tableau 32) appliquée au matériau A avec des paramètres rhéologiques différents (viscosité et temps de reptation) a été mise en œuvre.

Matériau	A
Puissances laser (W)	1 – 3 – 5 – 7 – 10
Vitesse laser (m/s)	0,5 – 1 – 1,5
Température de préchauffage T_0 (°C)	300 – 310 – 320 – 330

Tableau 32 Plan d’expérience de l’étude préliminaire

Cette étude nous a permis de mettre en évidence, pour une température de préchauffage donnée, une dépendance unique des résultats de simulation au rapport $E_l = P/V$ (puissance laser/vitesse laser) correspondant à une énergie linéaire en J/m. Ces résultats sont en accord avec la littérature qui propose, comme vu au premier chapitre, un paramètre d’énergie surfacique E_a (en 3D) ajoutant au dénominateur du rapport P/V la distance entre les balayages.

La seule différence se situe au niveau de la durée du passage du laser ($t_{laser} = L/V$), donc au temps à partir duquel le refroidissement après échauffement laser commence. Ainsi, selon les cas, le temps auquel le laser s’arrête est de 2.4, 1.2 ou 0.6 ms. Ces différences ne sont pas significatives au regard du temps de cycle global du lit de poudre (cycle thermique, soudage et densification).

1.1.3.b Choix des paramètres de l’étude

Les paramètres matériau imposés dans cette étude sont ceux que nous avons déterminés au deuxième chapitre lors de la caractérisation expérimentale des poudres. La conductivité thermique et la capacité calorifique des matériaux denses sont choisis constantes respectivement égales à $0,25 \text{ W.m}^{-1}.K^{-1}$ et $1600 \text{ J.kg}^{-1}.K^{-1}$.

Compte tenu des résultats de l’étude préliminaire, la simulation de la fusion laser des deux matériaux est réalisée pour 3 préchauffages (Tableau 33) et plusieurs rapports P/V contenus dans le plan d’expérience de l’étude préliminaire (Tableau 34).

Matériau	Températures de préchauffage T_0 (°C)
A	300 – 310 – 320
B	230 – 240 – 250

Tableau 33 Températures de préchauffage des simulations

Vitesse laser V (m/s)	0,5			1		
Puissance laser P (W)	1	7	10	5	7	10
$E_l = P/V$ (W/m)	2	14	20	5	7	10

Tableau 34 Rapports P/V de l’étude du procédé par simulation

Cette étude représente donc 18 simulations par matériau.

1.1.3.c Données analysées

La simulation du procédé doit apporter des résultats sur :

- les cycles thermiques vus par la matière : élévation maximale de température après passage laser et temps de refroidissement
- le soudage des grains entre eux : épaisseurs soudées et cinétique de soudage
- la cinétique de densification de la poudre : étude des courbures de frontière après refroidissement suite au passage laser et 28 secondes après passage laser

1.1.3.d Simulation du procédé

i) *Ordinateurs utilisés*

Chaque simulation mobilise au maximum 4 Go de mémoire RAM. Disposant de 24 Go de RAM par ordinateur, il est possible de simuler au maximum 6 cas en parallèle. Afin d'utiliser au mieux les performances des deux machines multi-cœurs à notre disposition, nous lançons six fois le programme Matlab sur chaque machine en spécifiant l'utilisation d'un cœur par programme avec la commande « `-singleCompThread` ». Ainsi, 12 simulations tournent en parallèle sur deux machines, utilisant au total près des 48 Go de RAM disponible, et environ 80 % des capacités de chaque processeur, un Intel Core I7 CPU 950 3.07 Ghz et un Xéon CPU W3690 3.47 Ghz.

Le tableau 35 présente le temps de calcul nécessaire aux 18 simulations de chaque matériau ramené à l'utilisation d'une entité du logiciel Matlab sur un processeur afin de connaître la base du temps de calcul pour une utilisation.

Matériau	1 processeur	12 processeurs
A	26.3 jours	2.2 jours
B	24.6 jours	2 jours

Tableau 35 Temps de calcul des simulations

Concrètement, il nous a fallu une semaine par ordinateur et par matériau.

ii) *Déroulement d'une simulation type*

Nous présentons (Figure 144) une simulation de la fusion laser du matériau A pour une température de préchauffage de 310°C, une vitesse laser de 1 m.s⁻¹ et une puissance laser de 5 W ($E_l = 5 \text{ J.m}^{-1}$).

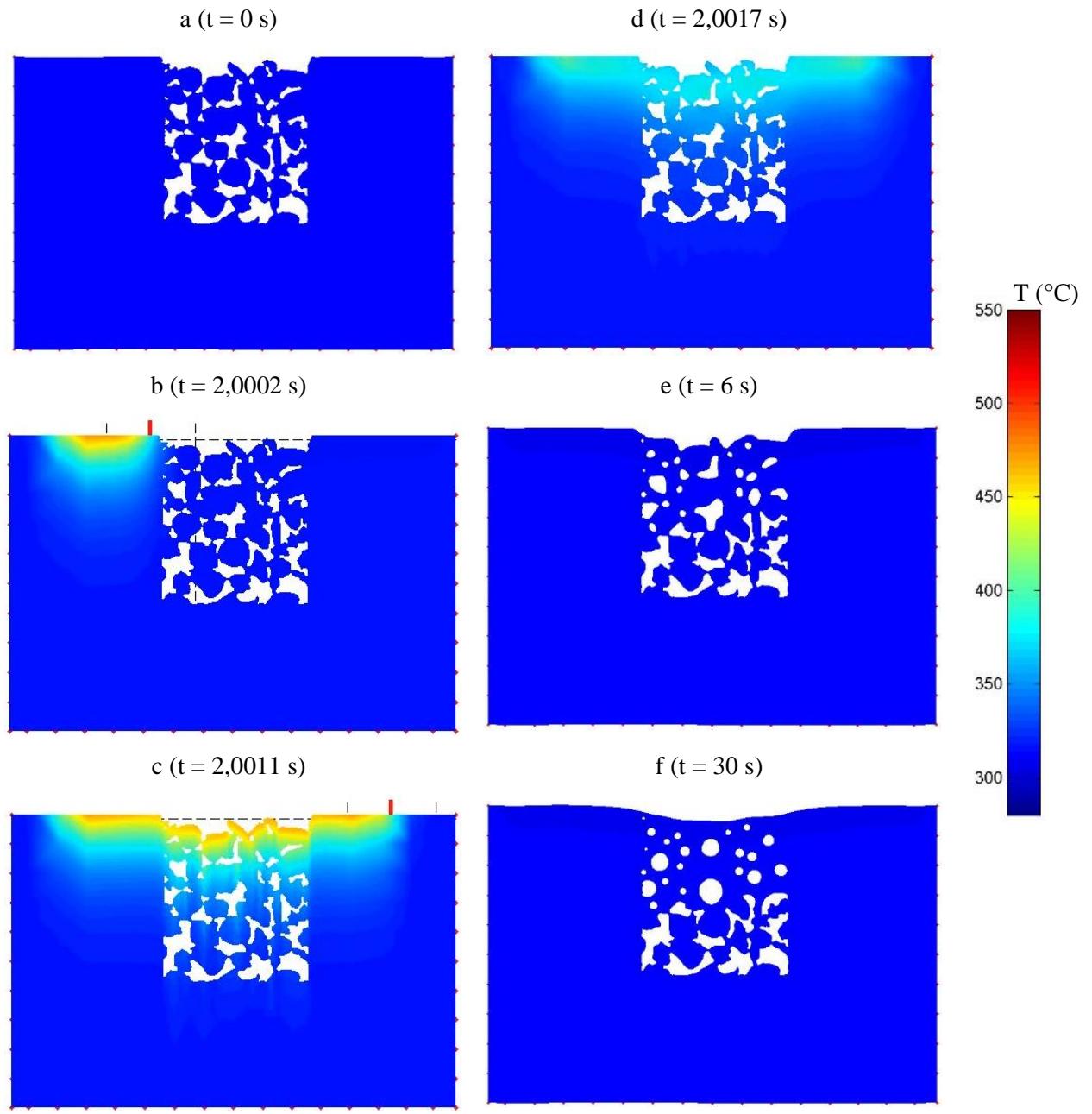


Figure 144 Simulation type du procédé : Matériau A – 310°C – 1 m.s^{-1} – 5 W – $E_l = 5 \text{ J.m}^{-1}$

Sur la figure 144, l'image a) présente l'empilement des grains préchauffés. Les images b) et c) présentent le passage laser et l'échauffement de la matière. Les images d), e) et f) présentent l'évolution du lit de poudre lors du refroidissement.

Cette simulation nous permet de déduire plusieurs données sur les cycles thermiques, le soudage de la matière et la cinétique de densification du lit de poudre sous l'action de la tension de surface, on utilisera le terme densification pour caractériser cette évolution.

iii) Cycle thermique de la matière

L'analyse de la température d'un nœud de la frontière supérieure du domaine (Figure 145) nous permet de déterminer la température maximale T_{\max} atteinte après passage laser (476°C) et le temps t nécessaire au refroidissement de celle-ci jusqu'à 1% de la température de préchauffage (0.14 s). Pour chacun des 36 cas de simulation, ces deux valeurs sont donc étudiées et tracées en fonction de l'énergie linéaire E_l injectée dans le matériau (Figure 146 et Figure 147).

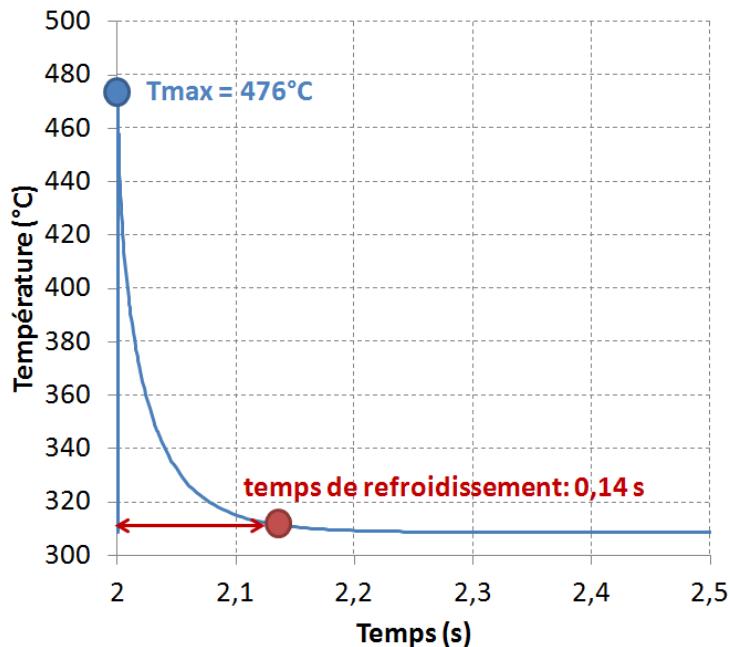


Figure 145 Étude thermique de la simulation type

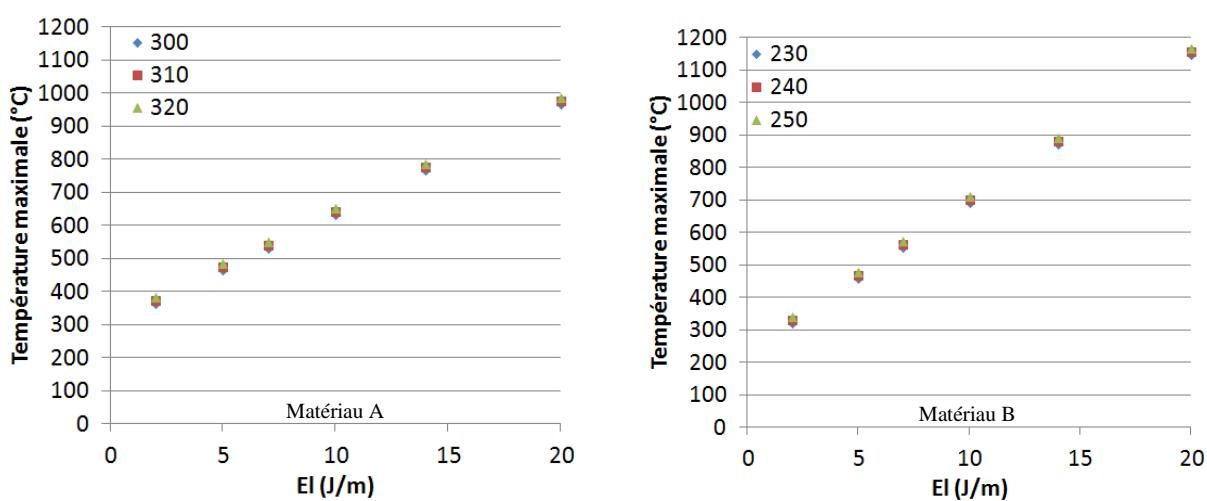


Figure 146 Températures maximales atteintes pour les matériaux A et B

De manière très logique, la température maximale atteinte dépend de la température de préchauffage et est surtout proportionnelle au facteur E_l (Tableau 36). Ce résultat est obtenu du fait de la faible diffusivité des polymères sur le temps de passage du laser. Ainsi, même si la vitesse laser évolue, le temps d'échauffement ne laisse pas à la chaleur le temps de diffuser.

Matériau A	$T_{max} = T_0 + 33,48E_l$
Matériau B	$T_{max} = T_0 + 45,92E_l$

Tableau 36 Bilan des températures maximales simulées

On peut constater que la surface du matériau B subit logiquement un échauffement plus important que le matériau A car son coefficient d'extinction est supérieur (10500 m^{-1} contre 7500 m^{-1}).

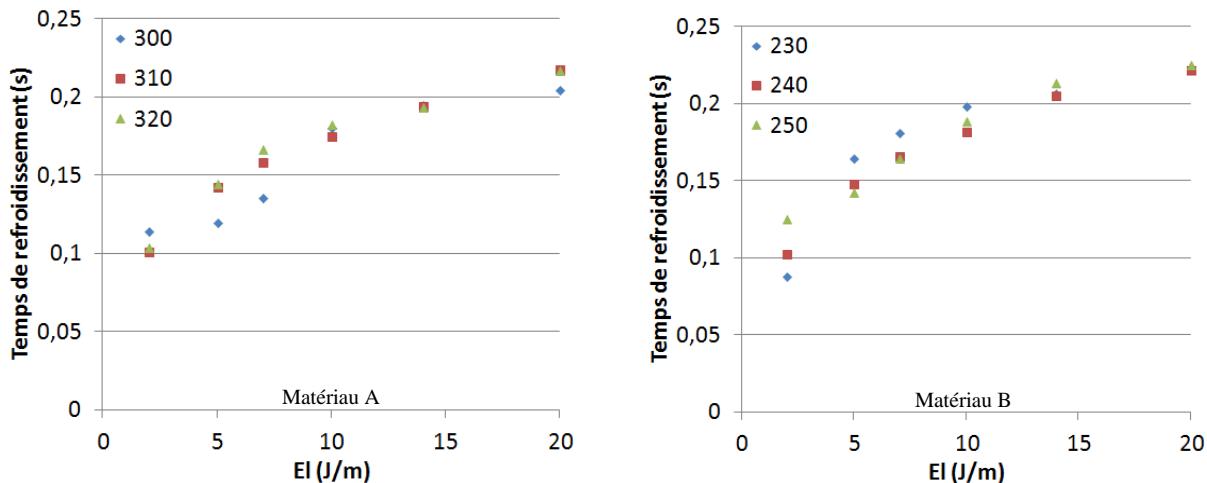


Figure 147 Temps de refroidissement pour les matériaux A et B

Le refroidissement est très rapide, que ce soit pour le matériau A ou le matériau B, et la matière revient à la température de préchauffage après au maximum 0,25 s. La température de préchauffage a une faible influence sur les temps de refroidissement après le passage du laser.

iv) Caractérisation du soudage

Le soudage est étudié en fonction du critère S introduit précédemment (60) et des temps de relaxation de chaque matériau. Ainsi, nous parlerons de soudage correct ou bon soudage lorsque $S \geq 1$. L'analyse du soudage (Figure 148) permet de déterminer les profondeurs liquéfiées et soudées en fonction du temps et d'en déduire quelle proportion de matière liquéfiée conduit à un bon soudage, après combien de temps, sur quelle profondeur et au bout de combien de temps la profondeur de soudage définitive est atteinte.

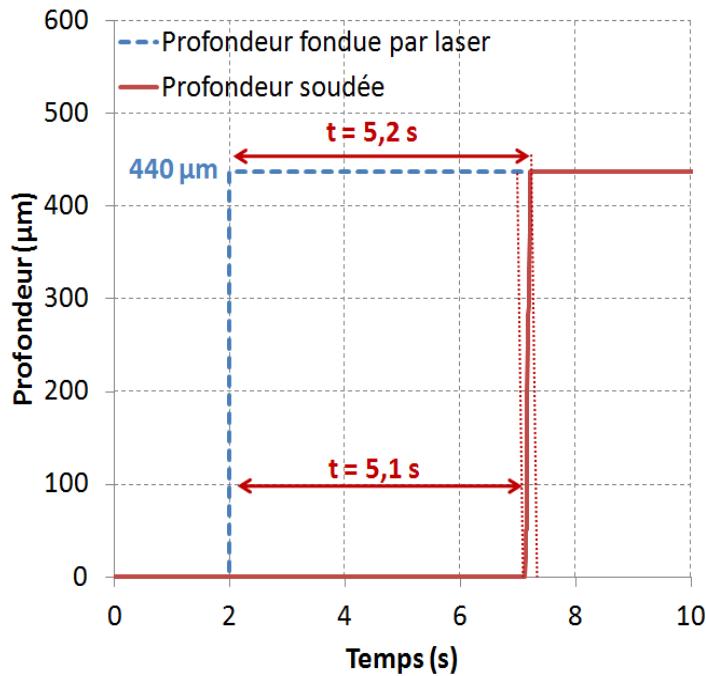


Figure 148 Étude de soudage pour la simulation type

Dans le cas de cette simulation, des zones liquéfiées commencent à obtenir un bon critère de soudage ($S=1$) 5,1 s après passage laser, et l'intégralité de la matière liquéfiée atteint un soudage complet 5,2 s après passage laser sur une profondeur de 440 μm .

L'évolution de la profondeur de soudage est très rapide (0.1 s). Rappelons que si nous mettions en place une simulation isotherme (sans passage laser) avec une matière initialement à l'état liquide, l'intégralité du domaine verrait son critère local S passer à 1 au même moment, et la profondeur de soudage passerait immédiatement de 0 μm à la profondeur maximale du domaine. L'analyse de la vidéo de la simulation type montre que l'échauffement du laser ne permet pas de différencier localement la qualité du soudage en surface et en profondeur. Ainsi, le critère S de soudage de toute la matière du domaine est sensiblement à la même valeur durant toute la simulation, la surface ayant une faible avance. L'apparition du critère $S=1$ se fait donc d'abord en surface, puis toute la matière liquide passe elle aussi à un $S=1$ quelques millisecondes après. C'est pourquoi l'évolution est si rapide. Dans des cas de simulation à énergie plus importante, le soudage commence à apparaître en surface ayant pris une avance suite à l'échauffement laser plus important, jusqu'à ce qu'il soit là aussi, rattrapé par toute la matière en profondeur en un cours instant.

La figure 149 présente la cartographie du soudage à la fin de la simulation type. Toute la zone rouge possède un critère de soudage supérieur à 1. On remarque que toute la matière qui a été liquéfiée présente un bon soudage (S prend uniquement les valeurs 1 ou 0).

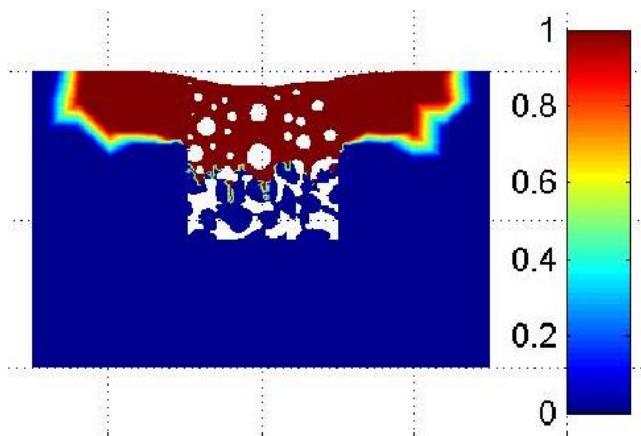


Figure 149 Cartographie de l'état de soudage de la matière.

>1 soudage complet - <1 soudage incomplet

Pour chacun des 36 cas de simulation, ces trois valeurs sont donc étudiées et tracées en fonction de l'énergie linéaire E_l injectée dans le matériau (Figure 150, Figure 153 et Figure 151).

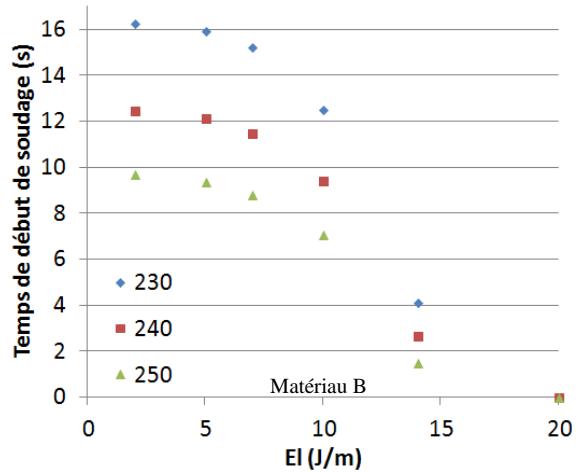
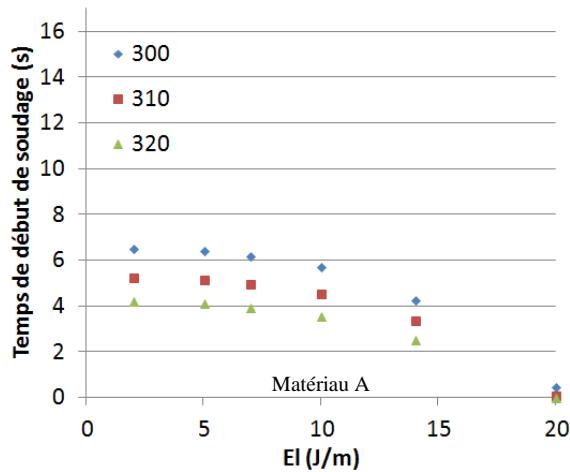


Figure 150 Temps d'apparition de soudage correct pour les matériaux A et B

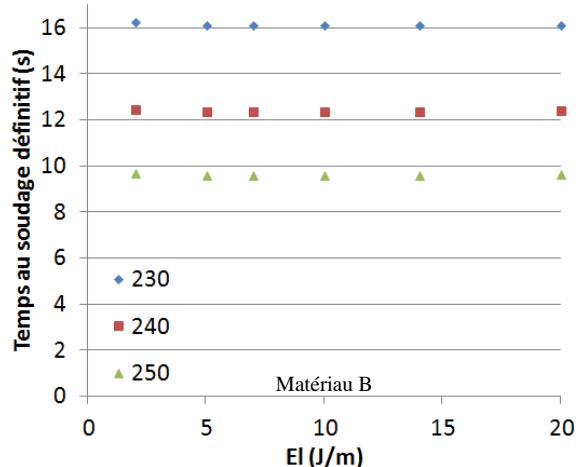
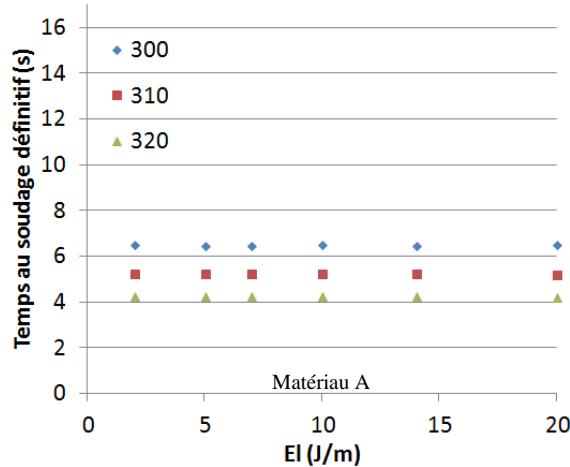


Figure 151 Temps au soudage définitif pour les matériaux A et B en fonction de E_l

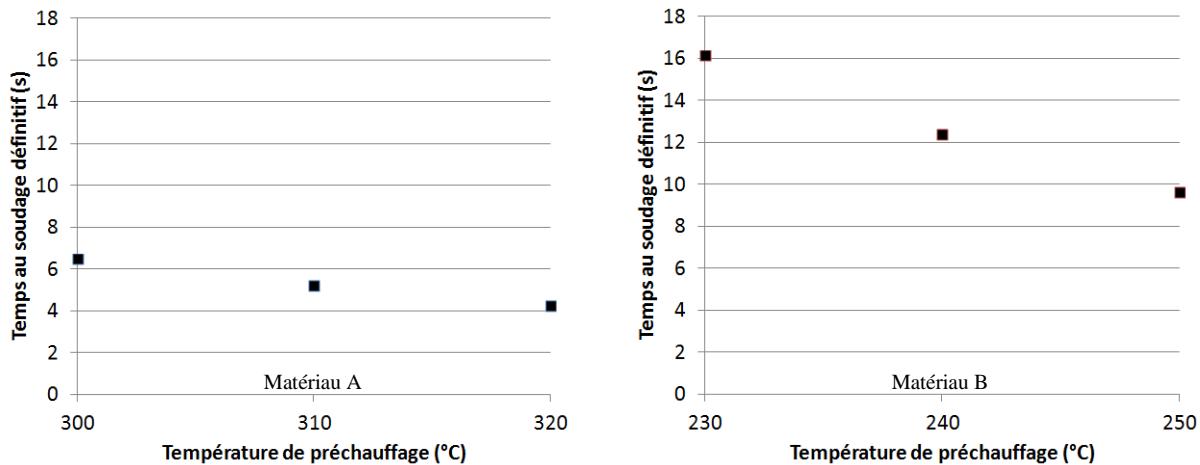


Figure 152 Temps au soudage définitif pour les matériaux A et B en fonction de T_0

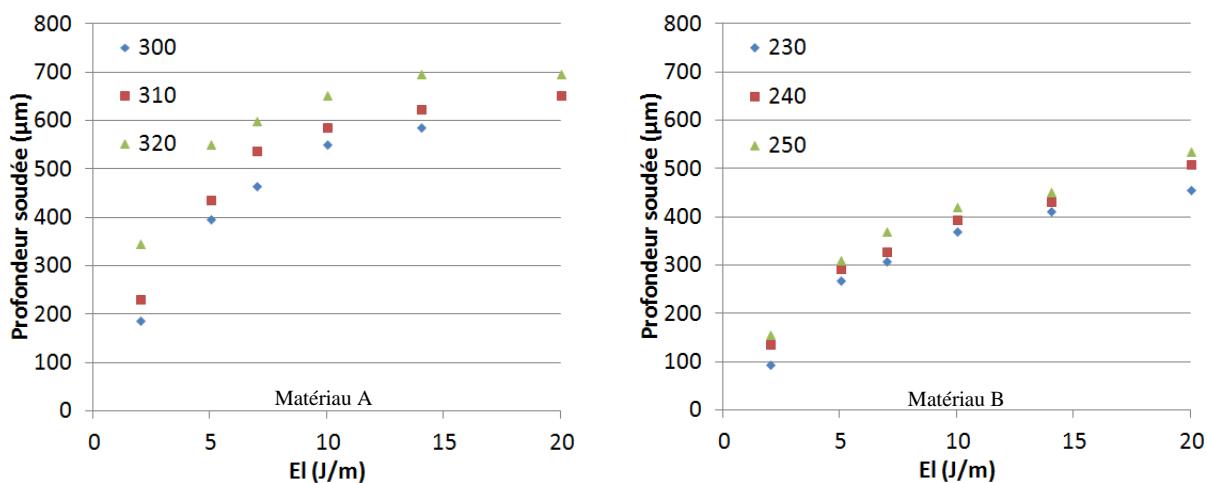


Figure 153 Profondeur de soudage atteinte pour les matériaux A et B

Une bonne qualité de soudage est obtenue plus rapidement pour le matériau A que le matériau B (Figure 150). Selon la valeur de l'énergie linéique déposée E_l , un soudage correct en surface du matériau peut apparaître très rapidement après passage laser ($<0,5$ s). Toutefois, pour les deux matériaux, la profondeur de soudage définitive est obtenue après un temps de 7 secondes (matériau A) et 16 secondes (matériau B) (Figure 153).

Pour des énergies déposées élevées (15 à 20 J.m⁻¹), l'échauffement laser peut conduire localement la surface à obtenir un critère de bon soudage très rapidement après passage laser. Toutefois, le temps permettant d'obtenir la profondeur de soudage maximale est indépendant de l'énergie déposée E_l et l'évolution de la profondeur de soudage va se faire en un court instant lorsque toute la matière du domaine à la température T_0 va voir son critère S passer au-dessus de 1. On comprend donc que la température de préchauffage soit le paramètre responsable des cinétiques globales du soudage (Figure 152).

Les différences observées sur les temps d'obtention du soudage sont directement liées au temps de reptation des chaines moléculaires du polymère aux températures de préchauffage des poudres (Figure 154). En effet, bien que les deux matériaux présentent des temps de relaxation similaires à leur température de fusion, leurs zones de préchauffage et donc de maintien après refroidissement ne sont pas les mêmes, la présence d'une large zone de fusion débutant à 250°C pour le matériau B (Figure 27) impose un préchauffage en-dessous de 250°C, induisant un ralentissement important du phénomène de reptation et une augmentation du temps de soudage. Ces temps d'obtention de profondeur de soudage définitif correspondent directement au temps de reptation des polymères aux températures de préchauffage choisies. En effet, à la limite liquide/solide dans la profondeur du lit de poudre, la matière liquéfiée subit une évolution quasi-isotherme à la température de préchauffage.

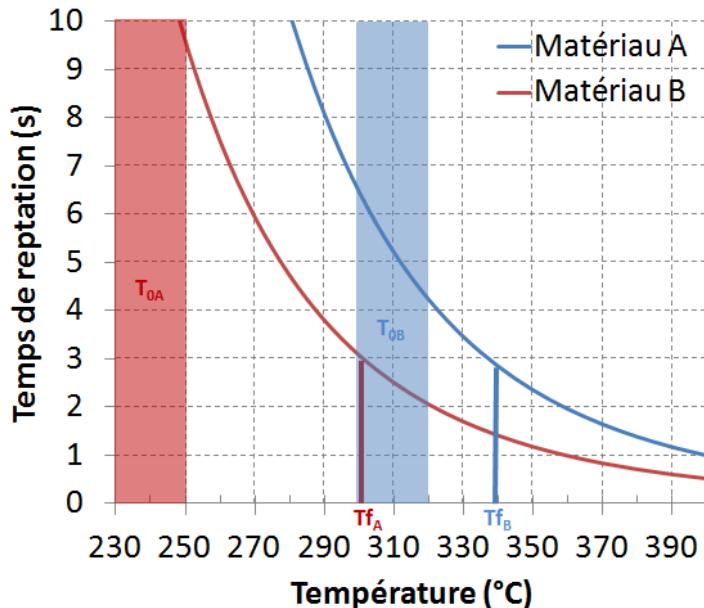


Figure 154 Comparaison des temps de reptation des matériaux A et B en fonction de la température
 T_f Températures de fusion - T_0 Plages de préchauffage

La profondeur de soudage évolue avec l'énergie injectée E_l . Pour le matériau A, dès 1 J.m^{-1} , une profondeur de soudage proche de $200 \mu\text{m}$ est obtenue. La profondeur de soudage tend à se stabiliser vers $700 \mu\text{m}$ lorsque l'énergie atteint le niveau de 20 J.m^{-1} . Dans le cas du matériau B, la profondeur de soudage obtenue est plus faible, de l'ordre de $100 \mu\text{m}$ à une énergie de 1 J.m^{-1} , et tend à se stabiliser vers $500 \mu\text{m}$ à une énergie de 20 J.m^{-1} . Cette différence provient de l'atténuation plus rapide en profondeur du rayonnement laser sur le matériau B, induisant une pénétration plus faible et un échauffement en surface plus important. En considérant que pour souder une nouvelle couche de poudre sur une ancienne, il faille refondre la moitié de la couche précédente, ces données permettent prédire des épaisseurs de couches de poudre maximales utilisables en fonction de l'énergie injectée (Tableau 37).

Matériau	$E_l = 1 \text{ J. m}^{-1}$	$E_l = 20 \text{ J. m}^{-1}$
A	140 μm	470 μm
B	70 μm	340 μm

Tableau 37 Epaisseurs de couche permettant une refusion de la moitié de la couche précédente

La température de préchauffage a une faible influence sur les profondeurs de soudage, de l'ordre de 100 μm pour les valeurs extrêmes testées, elle change les temps d'apparition d'un soudage correct et de l'obtention de la profondeur de soudage correct maximale de quelques secondes.

v) Cinétique de densification

L'analyse de l'évolution de la courbure moyenne adimensionnée en surface (Figure 155) permet de déterminer la cinétique de densification du lit de poudre. Dans la suite, nous parlerons de densification pour caractériser cette évolution. Le passage laser induit une première évolution du lit de poudre très rapidement. Ensuite, selon la température de préchauffage, la matière à l'état liquide continue d'évoluer lentement. Nous nous intéressons donc à la valeur de courbure adimensionnée au moment où la température revient à la température de préchauffage (paragraphe précédent) et à la valeur de la courbure à la fin de la simulation, 28 secondes après le passage laser.

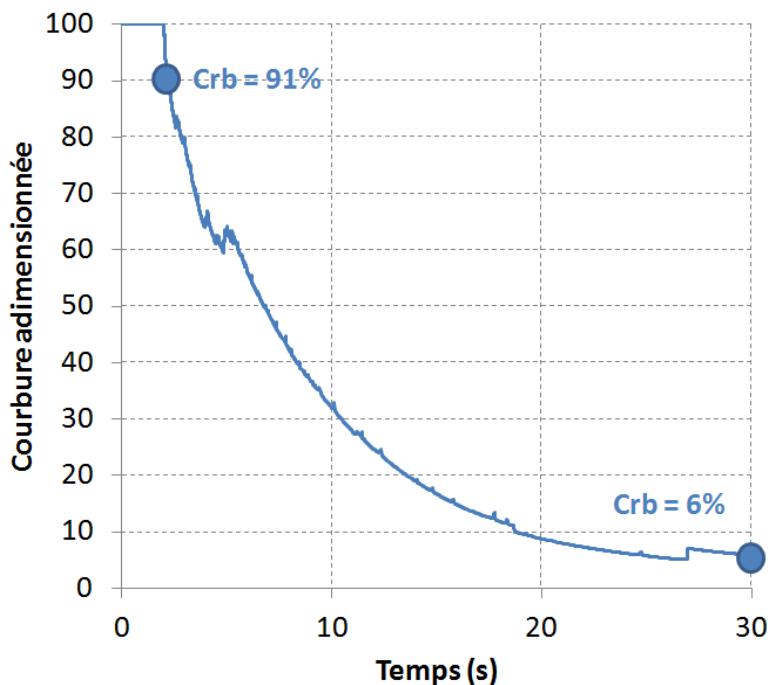


Figure 155 Étude de densification de la simulation type

Dans le cas de cette simulation, la courbure adimensionnée atteinte après refroidissement vaut 91 % et la courbure 28 secondes après passage laser vaut 6 %.

Pour chacun des 36 cas de simulation, ces deux valeurs sont donc étudiées et tracées en fonction de l'énergie linéique E_l injectée dans le matériau (Figure 156 et Figure 157).

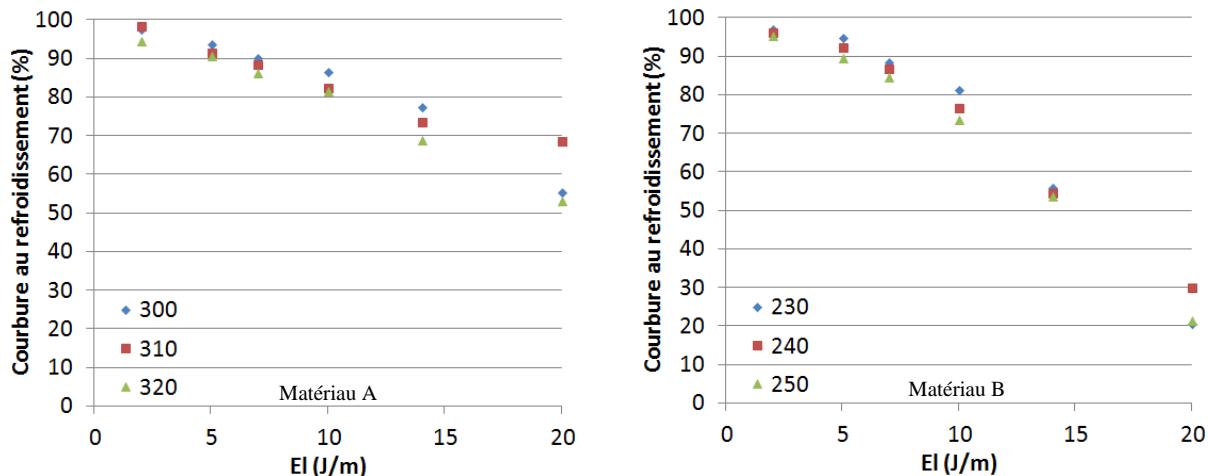


Figure 156 Courbure adimensionnée après refroidissement pour les matériaux A et B

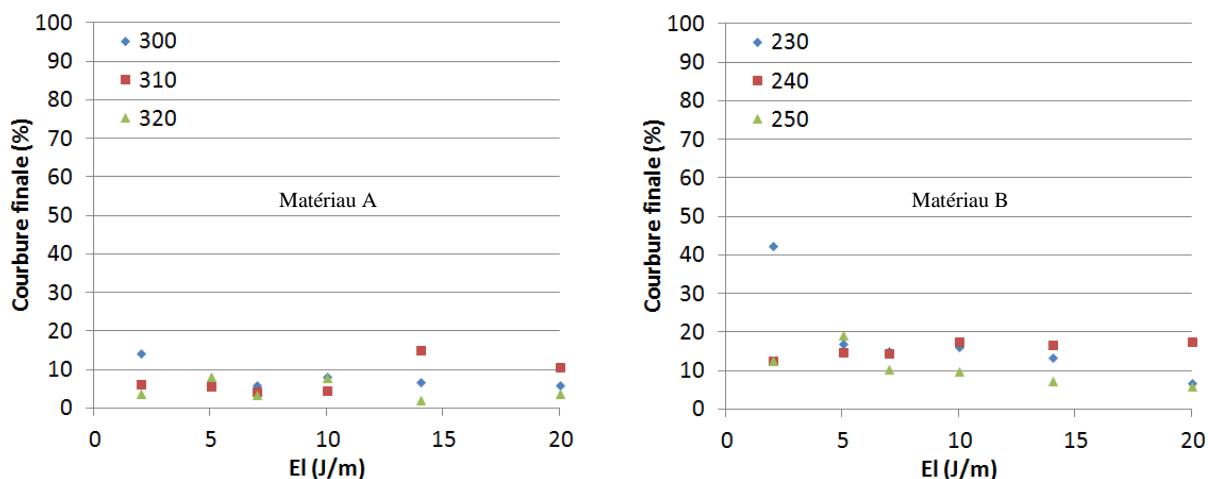


Figure 157 Courbure adimensionnée de fin de simulation pour les matériaux A et B

La température de préchauffage n'a pas une influence notable sur la densification du lit de poudre.

Quelle que soit l'énergie apportée au matériau dans la gamme $1\text{-}20 \text{ J.m}^{-1}$, pendant les quelques dixièmes de secondes entre l'échauffement induit par le laser et le moment auquel la matière est redescendue à la température de préchauffage, la densification n'est pas totale. Toutefois, pour des énergies proches de 20 J.m^{-1} , le matériau B obtient un état de densification relativement proche de l'état final. Le matériau B présente un état de densification après refroidissement meilleur que le matériau A du fait de sa plus faible viscosité aux hautes températures (Figure 158). De plus, le matériau B subit un échauffement plus important que le matériau A à même énergie injectée (Figure 146). Dans tous les cas, 28 secondes après passage laser, un état de densification stable est obtenu pour chaque matériau et pour toutes les énergies comprises entre 1 J.m^{-1} et 20 J.m^{-1} . Le matériau A présente un état final densifié meilleur que le matériau B du fait de sa plus faible viscosité dans sa plage de température de préchauffage (Figure 158). En effet, comme précisé dans l'analyse des différences sur

les temps d'apparition du soudage, bien que le matériau B présente une viscosité plus faible que le matériau A à sa température de fusion, leurs zones de préchauffage et donc de maintien après refroidissement ne sont pas les mêmes. Ainsi, la présence des deux pics de fusion du matériau B et d'une très large plage de fusion ne permet pas de profiter de sa faible viscosité près de sa température de fusion.

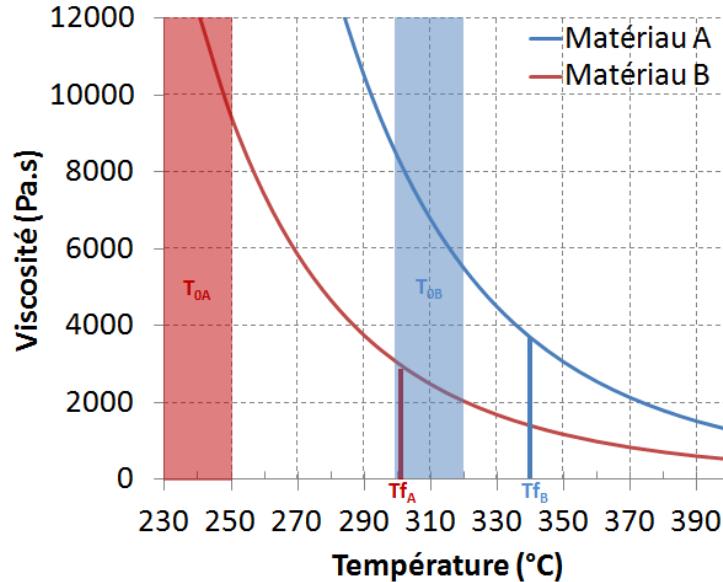


Figure 158 Comparaison des viscosités des matériaux A et B en fonction de la température

Tf Températures de fusion - T_0 Plages de préchauffage

vi) Influence de la gravité dans le cadre de la fusion laser sélective

D'après les analyses effectuées au chapitre 4, et compte tenu des températures maximales obtenues, les viscosités varient entre 10000 Pa.s et 5 Pa.s, pour des grains les plus gros de l'ordre de 50 µm de rayon. Nous montrons donc que le coefficient C_{ad} varie entre 120 et 0,06 dans le cadre du procédé. La gravité n'ayant une influence que pour des valeurs de C_{ad} inférieures à 0,1, elle n'a donc que peu d'effet et seulement lors du passage laser, pendant un temps très court.

1.1.4 Comparaison avec l'expérience

Différents essais de fusion de poudre instrumentés ont été réalisés sur le banc de fusion sélective du laboratoire conçu et réalisé au cours du projet FADIPLAST. Ces essais, réalisés juste avant la fin de la thèse, ont consisté à réaliser des lignes de fusion sur lit de poudre, pour différentes conditions de puissance P (2.5 W à 10 W) et de vitesse V (0.2 m.s⁻¹ à 0.7 m.s⁻¹), à une température de préchauffage T_0 comprise entre 300°C et 340°C. Le matériau utilisé pour ces essais est proche du matériau B, à l'exception de sa formulation chimique et de sa plage de fusion (260-300 pour le matériau B et 340-370 pour le matériau de l'expérience). Par conséquent, les températures de préchauffage sont également différentes.

Au niveau diagnostic, des mesures de température et des analyses par caméra rapide ont été mises en œuvre pour étudier l'interaction laser – lit de poudre.

1.1.4.a Réalisation d'une ligne de fusion – Temps caractéristique de fusion

Le suivi par caméra CCD des déplacements de la matière à la surface du lit de poudre permet de mesurer des temps caractéristiques de fusion. Sur la Figure 159, on met en évidence une fin de densification à environ 0.8 s pour un matériau initialement à la température ambiante.

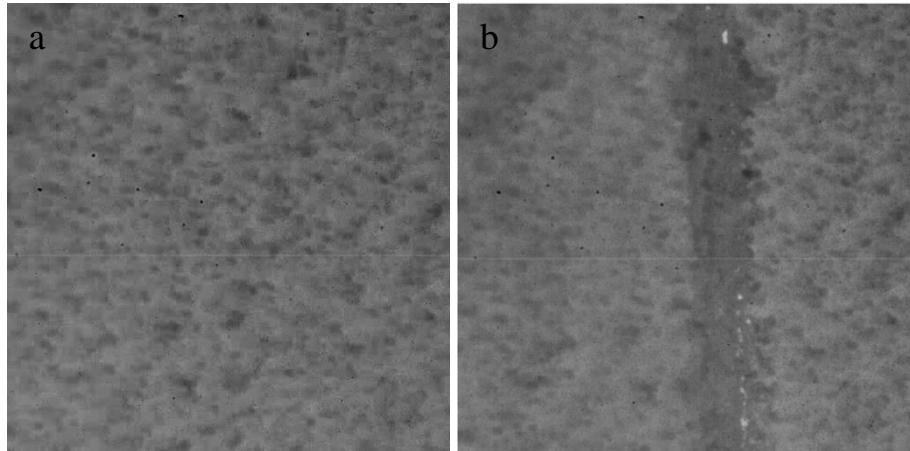


Figure 159 Analyse par caméra CCD (1 kHz) d'une ligne de fusion laser (11 W – 0,4 m.s⁻¹, T₀=293 K)
(a) avant le passage du laser - (b) après stabilisation du déplacement de la matière

1.1.4.b Mesures de température par caméra thermique

Des mesures de température par caméra thermique (FLIR SC4000, bande spectrale 2-4 μm) ont été effectuées pour différentes conditions expérimentales. L'émissivité de la surface à l'état liquide, indispensable pour utiliser la loi de Planck, et déduire les cycles thermiques, a été calibrée en se plaçant juste au-dessus du point de fusion du matériau, détectable à l'œil nu par un changement de texture de la surface. Sur le matériau A, une émissivité de l'ordre de 0.94 a été identifiée. L'un des problèmes auquel nous avons été confrontés, a été la résolution spatiale de la mesure (longueur équivalente à 1 pixel), très proche du diamètre du faisceau laser (250 μm). Dans ces conditions, les niveaux de température mesurés ont nécessairement été moyennés et par conséquent sous-estimés par rapport aux températures locales sous le faisceau.

Dans tous les cas étudiés, les élévations de températures mesurées lors du passage du laser ont été comprises entre +20°C et +120°C, soit des échauffements très modérés, par rapport à ce qui est prédict par la simulation. Un exemple de cycle thermique est présenté en figure 160.

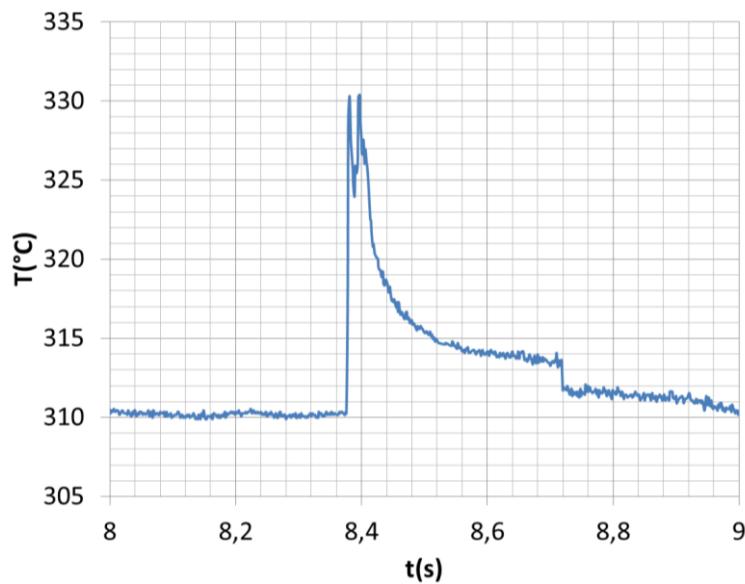


Figure 160 Cycle de température mesuré par caméra thermique ($P=5\text{ W}$, $V=0,3\text{ m/s}$, $T_0=310^\circ\text{C}$)

Si la durée du cycle thermique est réaliste (0.3 s) et proche des résultats de simulation (0.25 s), la température maximale apparente mesurée (330°C) est inférieure à la température de fusion du polymère, alors que ce dernier a fondu. L'effet de moyenne par la caméra thermique évoqué plus haut explique ce résultat.

1.1.4.c Etude des profondeurs fondues

Nous avons également mesuré, au microscope optique (Figure 161), et sur des lignes de fusion simples, les profondeurs fondues par le laser, afin de les comparer aux simulations numériques.

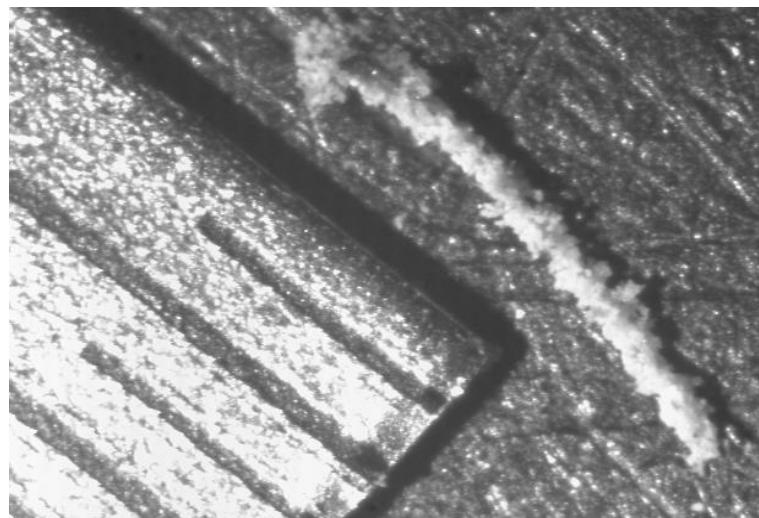


Figure 161 Mesure de la profondeur fondu par un passage laser (10 W , 2 m/s)

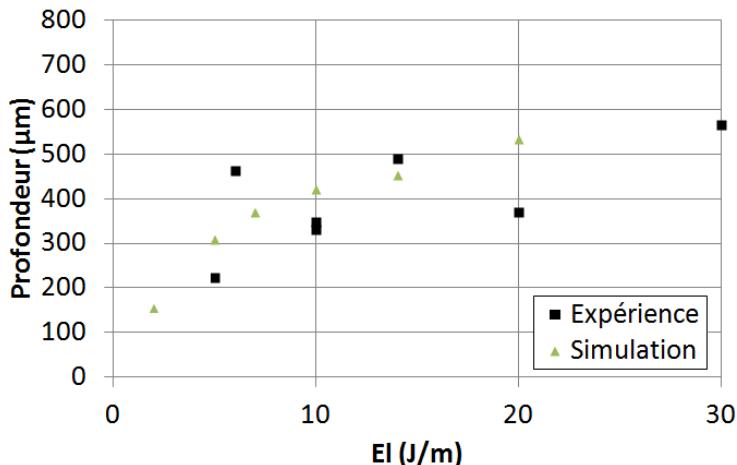


Figure 162 Profondeurs fondues / soudées. Comparaison expérience-simulation

Les résultats montrent une dépendance importante des profondeurs fondues avec l'énergie linéique E_l , comme pour la simulation numérique. Les ordres de grandeur des profondeurs fondues sont bien reproduits par la simulation (Figure 162), même si les températures de préchauffage sont différentes (250°C pour le matériau de la simulation - 300°C pour l'expérience).

1.1.5 Synthèse des résultats de la simulation à l'échelle microscopique

La simulation à l'échelle microscopique du procédé de fusion laser sélective de poudre thermoplastique a été menée pour plusieurs conditions de mise en œuvre machine (température de préchauffage, puissance et vitesse laser). Une première étude avec un plan d'expérience de 60 cas de simulation a permis de montrer une dépendance des résultats à la température de préchauffage et à l'énergie E_l , rapport de la puissance laser sur la vitesse laser. Les plans de simulation ont donc été réduits permettant de ne simuler que 18 cas par matériau.

La simulation du procédé pour des énergies de 1 à 20 W/m, valeurs usuellement utilisées par les PME du projet, a été mise en œuvre pour chaque matériau.

Dans un premier temps, nous avons montré que la température de préchauffage a une influence notable sur les temps d'apparition d'une qualité de soudage correcte et sur le temps auquel le soudage maximal est atteint. Elle a une influence modérée sur les profondeurs soudées, qui peuvent varier au maximum de 100 μm pour les valeurs extrêmes testées, mais elle n'a pas d'influence importante sur les autres données analysées.

A l'échelle du temps de fabrication des couches (de l'ordre de la minute), l'échauffement par le laser est très bref, n'excédant pas 0,25 secondes avant que la matière ne revienne à la température de préchauffage. Les échauffements induits par le laser varient entre 50°C et 900°C.

Pratiquement, la poudre thermoplastique subit donc le cycle thermique global suivant : (1) depuis l'état solide, elle est portée à une température de préchauffage T_0 inférieure à la température de fusion

(2) le cycle d'échauffement - refroidissement rapide imposé par le laser induit sa fusion et la ramène à cette même température de préchauffage T_0 lui permettant d'être maintenue à l'état liquide à condition que T_0 soit supérieure à sa température de cristallisation T_c (3) un premier refroidissement est induit par l'étalement d'une nouvelle couche de poudre plus froide (4) le refroidissement final intervient (de T_0 à $T_{ambiant}$) dans la profondeur des bacs de fabrication lors de la fabrication globale de la pièce. Ce maintien à l'état liquide, facilité par l'hystéresis entre la fusion et la cristallisation d'un polymère semi-cristallin, permet au soudage et à la densification d'avoir lieu. La zone de préchauffage (de travail) des thermoplastiques doit donc bien être située entre leur température de cristallisation et de fusion (Figure 163).

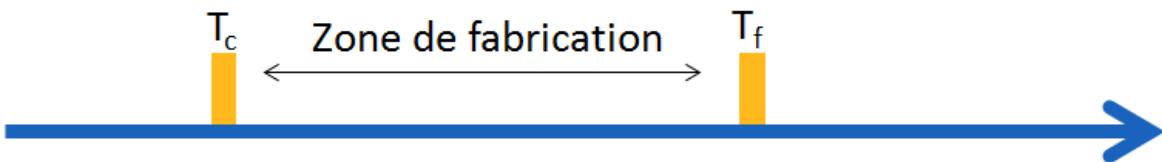


Figure 163 Plage de température de fabrication pour les thermoplastiques

L'analyse du soudage permet de montrer que toute la matière reste liquide dans les conditions simulées, et atteint un niveau de soudage correct (reptation des chaines) au maximum 16 secondes après passage laser (Figure 151). Bien que l'échauffement laser puisse induire l'apparition locale d'un bon soudage en surface, le soudage global en profondeur est piloté par la température de préchauffage. La qualité du soudage des grains fondus est donc toujours bonne lors de la mise en œuvre du procédé sur nos matériaux.

L'analyse de la densification montre que l'échauffement bref du laser ne permet pas à la matière de s'écouler totalement sous l'effet de la tension de surface. Toutefois, une trentaine de secondes après passage laser, et quelles que soient les conditions de mise en œuvre du procédé de fusion sélective, la densification des matériaux A et B de notre étude est terminée.

Le passage laser sur un matériau amorphe le conduirait à se solidifier après 0,25 secondes au maximum. Cela présente plusieurs inconvénients:

- le soudage de la matière ne peut pas être correct
- l'obtention d'une bonne densification demande l'utilisation d'un polymère de faible viscosité, donc de faible masse molaire, qui en restant amorphe ne peut avoir de bonnes propriétés mécaniques
- l'air prisonnier dans des cavités fermées n'a pas le temps de diffuser et induit des pertes de propriétés mécaniques

Pour obtenir de meilleures performances, il faudrait augmenter significativement l'énergie introduite dans la matière pour diminuer la viscosité, mais les échauffements importants conduiraient à la

dégradation du matériau. Ainsi, les matériaux amorphes ne sont pas adaptés à ce procédé, qui sera plus pour un eux un procédé de prototypage rapide. Le matériau B du projet est particulier : bien qu'il soit amorphe après mise en forme (il cristallise difficilement), sa poudre est semi-cristalline, on peut donc avoir une température de préchauffage très supérieure à sa transition vitreuse.

En conclusion, une trentaine de secondes après le passage du laser, les différents phénomènes semblent avoir conduit à une qualité finale de matière correcte. Toutefois, dans la pratique, il arrive que ces temps ne soient pas suffisants. En effet, la densification conduit à la création de porosités fermées qui disparaissent avec le temps par diffusion des gaz dans la matière liquide. Il est donc nécessaire, après fusion laser, de maintenir la matière à l'état liquide assez longtemps (quelques dizaines de secondes à quelques minutes). L'un des risques expérimentaux est la solidification de la couche fondu lors de l'étalement de la couche de poudre suivante. C'est pourquoi la suite de nos travaux est consacrée à l'étude des conditions d'étalement d'une nouvelle couche de poudre permettant à la matière de ne pas refroidir en-dessous de sa température de solidification.

Cette analyse permet d'orienter le développement de matériaux adaptés au procédé de fusion laser selective :

- (1) Tout d'abord, leur viscosité à l'état liquide doit être la plus faible possible, pour favoriser la densification après fusion laser et la cinétique de soudage
- (2) Afin de maintenir un préchauffage à une température induisant une faible viscosité et un faible temps de retpation (meilleure densification et soudage plus rapide), il est préférable que le matériau possède une plage de fusion étroite et une zone hors fusion et cristallisation bien marquée. Le matériau B du projet présente deux phases cristallines obligeant à maintenir la matière à une température de préchauffage plus de 50°C en-dessous de sa température de fusion afin de ne pas fondre tout le bac.
- (3) Il est nécessaire de laisser au gaz occlus dans le polymère le temps de diffuser en maintenant la matière à l'état liquide le plus longtemps possible. Il serait donc intéressant de développer des matériaux ayant des coefficients de diffusion du gaz (air ou gaz inerte) très importants, voire même de s'orienter vers de la fabrication directe sous vide.

1.2 Echelle macroscopique : maintien à l'état liquide

Suite à la fusion laser de la matière et à sa densification, celle-ci doit rester à l'état liquide le plus longtemps possible. L'apport d'une nouvelle couche de poudre de température inférieure à la matière liquide peut induire un refroidissement suffisant pour cristalliser la matière et limiter la densification. Les travaux présentés ici visent à étudier l'influence de l'étalement d'une couche de poudre sur la température de la matière fondu afin de déterminer les paramètres optimaux permettant de maîtriser le refroidissement induit.

Une étude préalable nous a permis de nous assurer que les résultats obtenus convergent et sont les mêmes, que la modélisation soit bi- ou tridimensionnelle.

1.2.1 Paramètres intervenant dans la thermique lors de l'étalement

Les différents paramètres intervenant dans la thermique de la matière fondues lors de l'étalement de couches de poudre sont répertoriés dans le tableau 38 avec les valeurs qui seront étudiées.

Température de la matière fondues (Préchauffage) T_0	295 à 335 °C
Température de la couche de poudre T_p	150 à 250°C
Epaisseur de la couche E_p	100 à 500 μm
Vitesse d'étalement de la couche V_p	0,5 à 2 m.s ⁻¹

Tableau 38 Paramètres intervenant dans la thermique de l'étalement

Le coefficient d'échange par convection avec l'air sur la frontière est fixé à 15 W.m⁻².K⁻¹ et la température de l'air est choisie à 50°C. Cette température est la valeur la plus faible ayant été obtenue lors des essais sur le banc de fusion laser. Elle représente donc le cas le plus défavorable dans cette étude.

Les paramètres de la matière fondues sont ceux d'un PEEK ordinaire (Tableau 39). Les paramètres de la poudre (Tableau 40) sont déduits de ceux de la matière dense grâce au taux de compaction de la poudre ($c = 0,25$) et de la conductivité équivalente calculée avec le modèle de Maxwell (159).

ρ	C_p	λ
1072 kg.m ⁻³	1600 J.kg ⁻¹ .K ⁻¹	0,25 W.m ⁻¹ .K ⁻¹

Tableau 39 Propriétés thermo-physiques de la matière dense (fondues)

ρ	C_p	λ
268 kg.m ⁻³	1600 J.kg ⁻¹ .K ⁻¹	0,0440 W.m ⁻¹ .K ⁻¹

Tableau 40 Propriétés thermo-physiques du lit de poudre

1.2.2 Effets des choix initiaux

Le choix des conditions aux limites thermiques du domaine, du modèle de conductivité pour la poudre et du point d'analyse de la température peuvent avoir un impact sur l'étude menée. Ces choix et leurs effets sont donc étudiés.

1.2.2.a Choix des conditions aux limites

Deux essais d'étalement sont effectués avec deux types de conditions aux limites sur les bords latéraux et le bord inférieur : une température imposée constante et une condition de symétrie (flux nul : $-\lambda \cdot \nabla T$)

=0). Le refroidissement induit par l'étalement d'une couche de 100 µm d'épaisseur, à une vitesse de 0,1 m.s⁻¹ et à une profondeur de 10 µm de la surface est comparé pour les deux types de conditions (Figure 164).

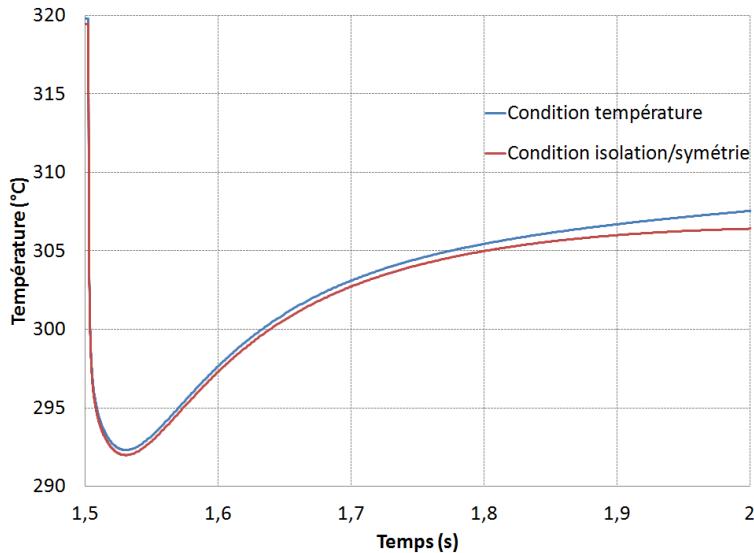


Figure 164 Comparaison de l'influence du type de conditions aux limites

L'effet de ces conditions aux limites sur le domaine modélisé étant très faible lors du refroidissement induit par l'étalement de la couche, nous imposerons la température dans la suite de l'étude.

1.2.2.b Choix de la conductivité thermique de la poudre

Il a été nécessaire de choisir un modèle de conductivité pour la poudre, basé sur des modèles parallèle, série et une combinaison des deux (Tableau 22). Afin d'analyser l'impact des différents choix, nous simulons un étalement ($T_0 = 335^\circ\text{C}$, $\text{Ep} = 100 \mu\text{m}$, $\text{Tp} = 250^\circ\text{C}$, $\text{Vp} = 0,5 \text{ m/s}$) avec trois conductivités différentes (Tableau 41) (Figure 165).

Modèle Parallèle	Modèle de Maxwell	Modèle Série
$\lambda = 0,0338 \text{ W.m}^{-1}.K^{-1}$	$\lambda = 0,0440 \text{ W.m}^{-1}.K^{-1}$	$\lambda = 0,0822 \text{ W.m}^{-1}.K^{-1}$

Tableau 41 Conductivité thermiques pour la poudre

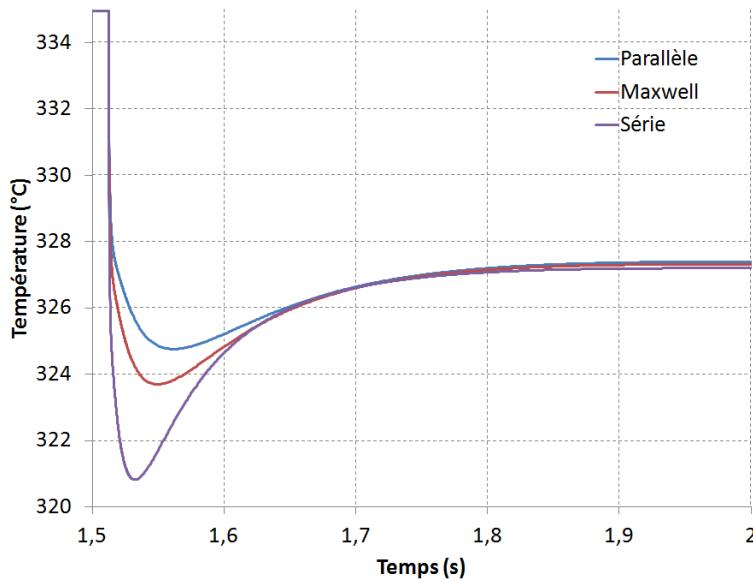


Figure 165 Influence de la conductivité thermique

Plus la conductivité de la couche de poudre est élevée, et plus le refroidissement est important, mais la valeur de cette conductivité a une faible influence (quelques degrés) sur les températures minimales atteintes. Le choix d'un modèle de Maxwell est donc maintenu.

1.2.2.c Mesures de température en surface et en profondeur

i) Analyse de la température en surface

L'analyse du refroidissement induit par l'étalement doit être faite le plus près possible de l'interface. Cependant, des problèmes numériques à l'interface des deux domaines lors de l'activation de la fonction de conductivité nous conduisent à ne pas étudier la température exactement sur l'interface. Afin d'illustrer ces problèmes, une analyse de la température à quatre profondeurs est menée (Figure 166) pour le cas ($T_0 = 335^\circ\text{C}$, $\text{Ep} = 100 \mu\text{m}$, $\text{Tp} = 250^\circ\text{C}$, $\text{Vp} = 0,5 \text{ m/s}$).

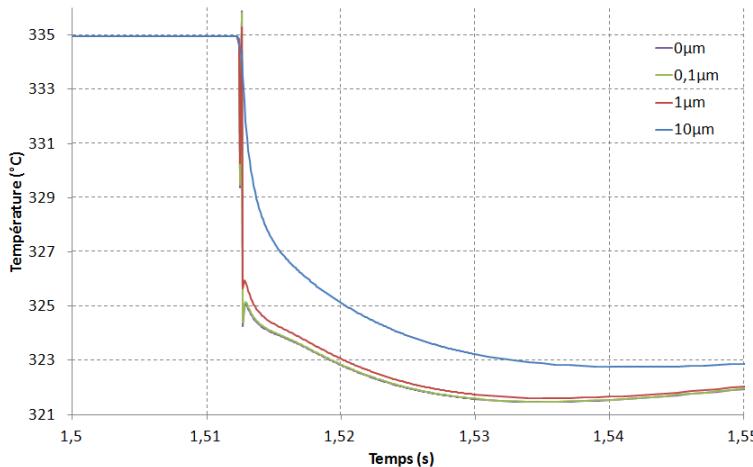


Figure 166 Choix d'une profondeur de mesure fiable

Si à 0, 0,1 ou 1 μm de profondeur, on note un comportement thermique anormal au moment de l'activation de la couche de poudre, à 10 μm de profondeur, ce comportement est stabilisé. Comme la différence de température avec la surface est très faible (moins de 2°C), nous choisissons donc d'étudier l'évolution de température à des profondeurs supérieures et égales à 10 μm .

ii) Analyse de l'évolution de la température dans l'épaisseur du lit de poudre

Les simulations sont réalisés dans le cas ($T_0 = 300^\circ\text{C}$, $Ep = 100 \mu\text{m}$, $T_p = 150^\circ\text{C}$, $V_p = 0,5 \text{ m/s}$). La figure 167 présente l'évolution de la température pour différentes profondeurs. La couche de poudre étalée est à la température de 150°C. Lors de l'activation de sa conductivité, sa température augmente alors du fait de l'échauffement induit par la matière fondue plus chaude. Les trois températures mesurées dans la profondeur montrent logiquement une atténuation nette de l'influence de l'étalement vers 100 μm de profondeur.

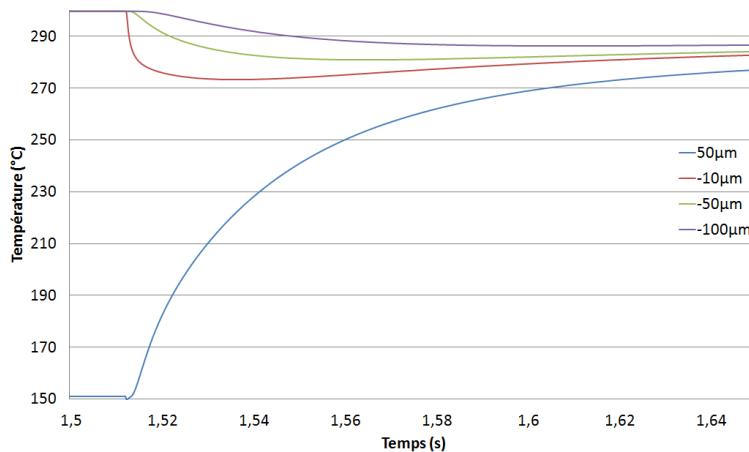


Figure 167 Evolution de la température locale de la matière lors de l'étalement dans la couche de poudre étalée (50 μm) initialement à 150°C et à -10 μm , -50 μm et -100 μm en profondeur dans la matière liquide préchauffée à 300°C

Par la suite, seule la température à 10 μm de profondeur sera étudiée.

1.2.3 Influence des différents paramètres d'étalement

Nous considérons ici l'effet des différents paramètres d'étalement (température de couche, vitesse d'étalement et épaisseur de couche) sur la thermique de la matière fondue.

1.2.3.a Influence de la température de la poudre et de la matière fondue

Dans cette partie, les paramètres fixes sont ($Ep = 100 \mu\text{m}$, $V_p = 0,5 \text{ m/s}$). La température de la matière fondue varie de 300 à 320°C. La température est étudiée en fonction du temps à 10 μm sous la surface. L'étalement est réalisé à trois températures différentes (150, 200 et 250°C). Les résultats d'évolution de température pour différents couples *Température matière fondue - Température poudre* sont présentés ci-dessous (Figure 168).

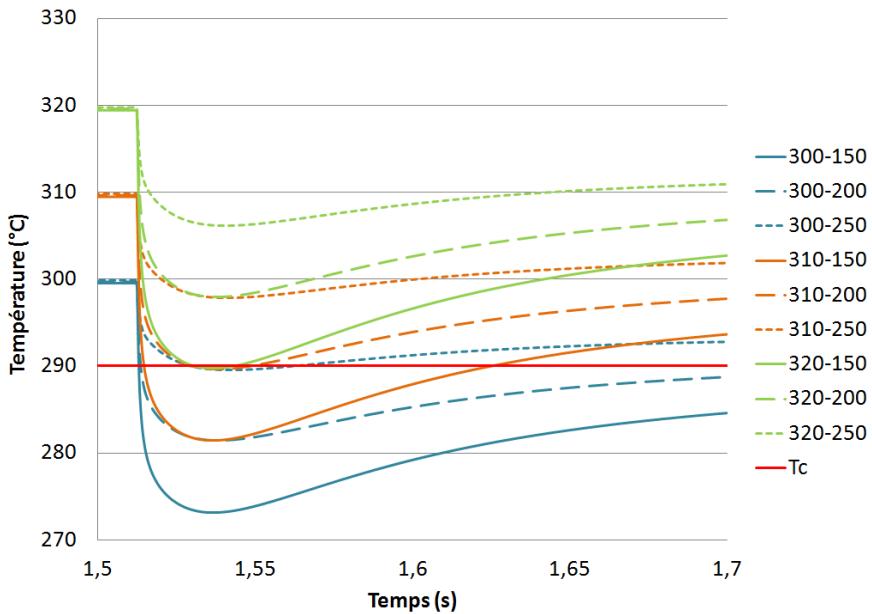


Figure 168 Refroidissement imposé par l'étalement d'une couche de poudre de 100 μm pour différents couples Température matière fondue ($^{\circ}\text{C}$)- Température de couche de poudre étalée ($^{\circ}\text{C}$)

On remarque que le refroidissement en-dessous de la température de cristallisation du polymère T_c est obtenu pour différentes combinaisons de températures matière et couches de poudre étalée. Les chutes de température sont comprises entre 10 et 30°C.

1.2.3.b Influence de la vitesse d'étalement

La simulation d'un d'étalement de poudre à deux vitesses différentes (0,5 à 2 m.s^{-1}) est ensuite réalisée (Figure 169). Les paramètres fixes sont ($T_0 = 320^{\circ}\text{C}$, $E_p = 100 \mu\text{m}$, $T_p = 150^{\circ}\text{C}$).

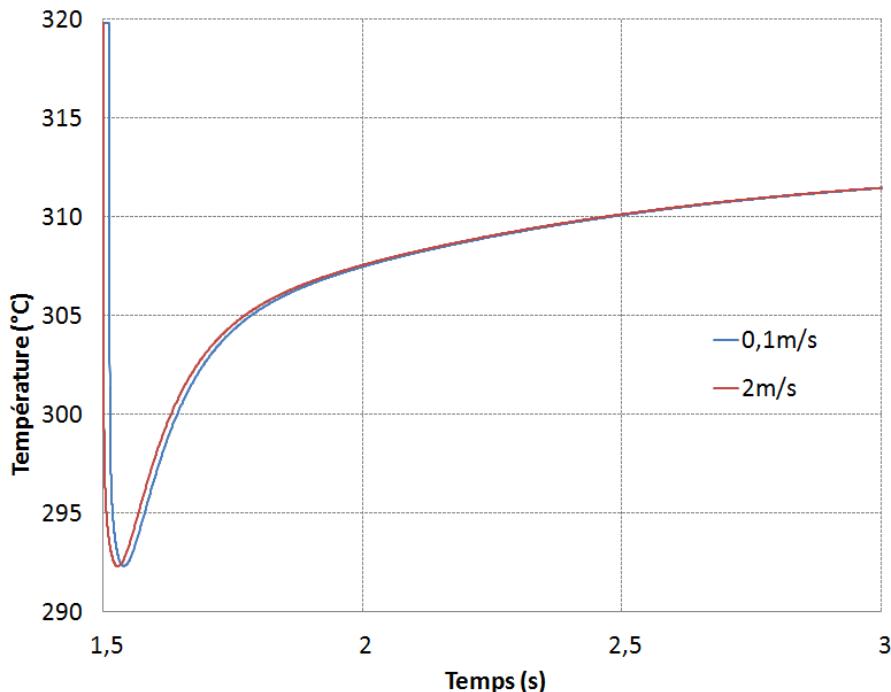


Figure 169 Refroidissement induit par deux étalements à des vitesses différentes

La vitesse d'étalement n'a pas d'influence notable sur la thermique de la matière fondu. Dans la suite, la vitesse d'étalement est donc fixée à 0,5 m/s.

1.2.3.c Influence de l'épaisseur de la couche

L'influence de l'épaisseur de couche est évaluée. Les courbes de refroidissement induit par l'étalement à 10µm de profondeur sont proposées (Figure 170) pour des épaisseurs de couches de 100 à 1500µm. Les paramètres fixes sont ($T_0 = 335^\circ\text{C}$, $T_p = 100^\circ\text{C}$, $V_p = 0,5 \text{ m.s}^{-1}$).

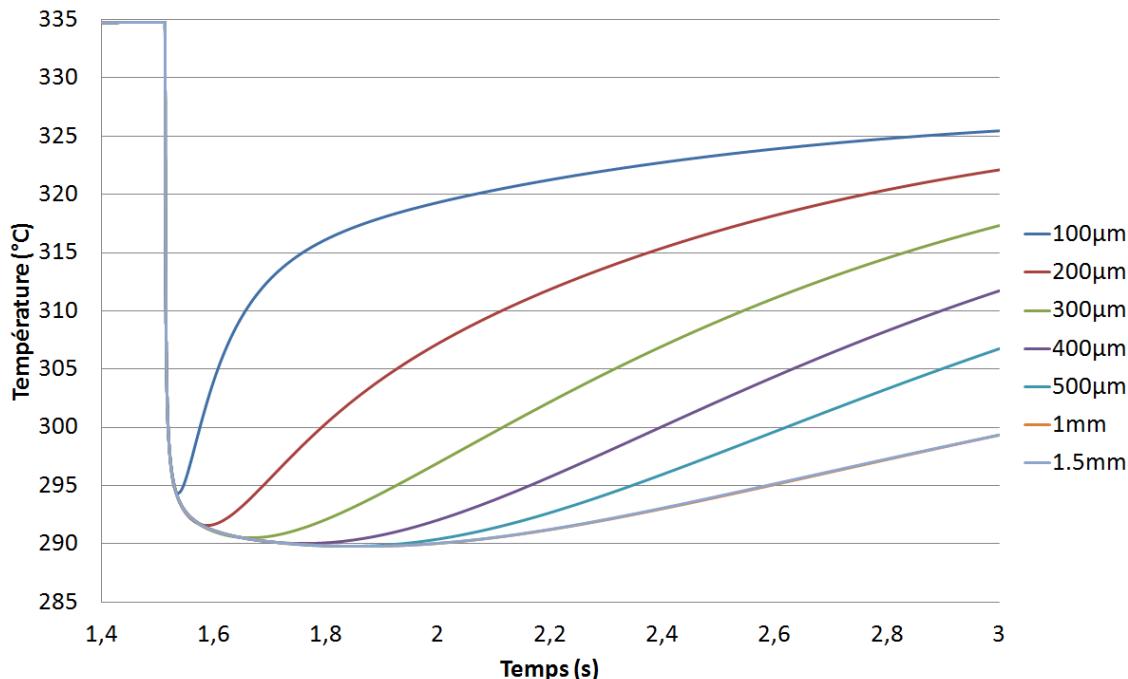


Figure 170 Influence de l'épaisseur de la couche étalée sur le refroidissement de la couche fondu

L'épaisseur de couche a une légère influence (3-4°C) sur le refroidissement induit par l'étalement. La courbe la plus profonde (1.5mm) représente l'enveloppe des températures minimales obtenues lors des différentes simulations.

1.2.4 Mise en place des courbes d'isovaleurs de refroidissement

Nous avons vu que selon le choix des paramètres d'étalement, il est possible ou non d'induire un refroidissement atteignant la température de cristallisation du polymère. Bien que la cinétique thermique (dT/dt) ait une influence sur la cristallisation, nous nous focalisons ici uniquement sur la chute de température engendrée par l'étalement.

Pour un même refroidissement, différents jeux de paramètres sont possibles. Nous proposons donc de mettre en place des courbes prenant en compte tous les paramètres influents dans la thermique de la poudre lors de l'étalement (température de la matière fondu, température de la couche de poudre étalée et épaisseur de la couche étalée) et de déterminer quelles sont les combinaisons de paramètres induisant un même refroidissement à différentes valeurs (290, 300, 310 et 320°C).

1.2.4.a Principe

Après avoir réalisé des simulations de refroidissement pour différents couples *Température de la matière fondu / Température de la couche de poudre étalée* à chaque épaisseur de couche (Tableau 42), nous déterminons par une interpolation linéaire les températures de couche de poudre permettant d'atteindre des refroidissements à 290, 300, 310 et 320°C.

La figure 171 permet de mieux comprendre la démarche. La matière fondu est initialement à 310°C. La couche de 250°C induit un refroidissement vers 297°C, celle de 200°C induit un refroidissement à 289°C. On a donc le delta de refroidissement (8°C) correspondant à un delta de 50°C entre deux températures de couche. On peut donc estimer qu'une couche à 205°C (45°C en-dessous de 250°C) induirait un refroidissement à 290°C à l'aide d'une règle de trois (297-8*45/50). Ainsi, on a le couple *Température de matière fondu / Température de couche* 310/205 induisant un refroidissement à 290°C. On procède ainsi pour toutes les données du tableau 42.

Températures de la matière fondu Préchauffage °C	Température de la poudre °C	Epaisseur de couche µm
295 – 300 – 310 – 320 – 335	150 – 200 – 250	100 – 200 – 300 – 400 – 500

Tableau 42 Etude complète de l'étalement

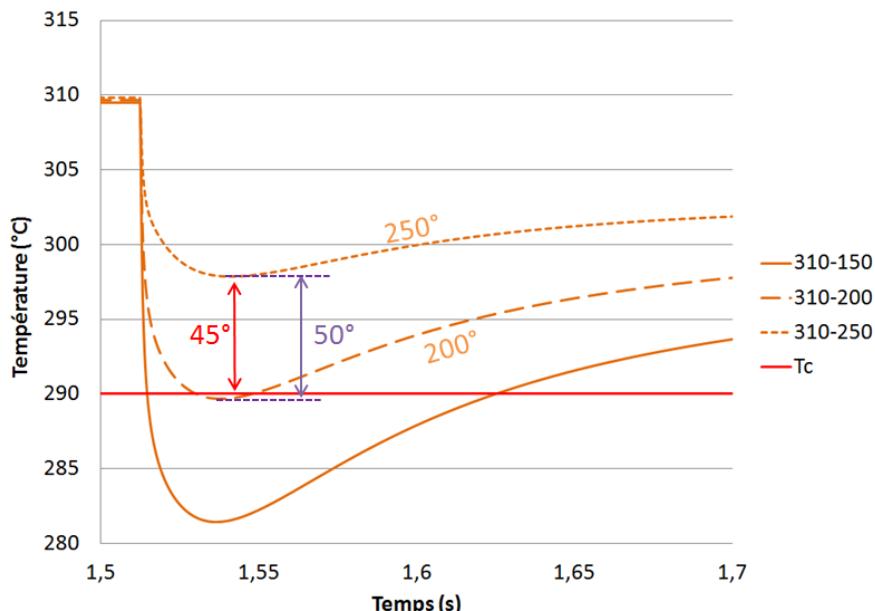


Figure 171 Détermination de l'épaisseur de couche permettant d'atteindre différentes températures Δ de 50°C sur Tp \rightarrow Δ de 8°C en refroidissement \Leftrightarrow Δ de 45°C sur Tp \rightarrow Δ de 7°C en refroidissement

1.2.4.b Détermination des isovaleurs de refroidissement du matériau A lors de l'étalement

Rappelons que la vitesse d'étalement a un effet négligeable sur ces résultats et que la mesure est effectuée à 10 µm sous la surface. La figure 172 présente l'analyse du refroidissement induit dans la matière fondu par l'étalement d'une couche de poudre. Pour quatre valeurs de température atteinte

par la matière fondu lors de l'étalement (290°C , 300°C , 310°C et 320°C) et pour 5 épaisseurs de couche étalée par valeur de température atteinte ($100\ \mu\text{m}$, $200\ \mu\text{m}$, $300\ \mu\text{m}$, $400\ \mu\text{m}$ et $500\ \mu\text{m}$), la connaissance de la température de la couche étalée et la température de la matière fondue (préchauffage) permet de tracer des droites d'isovaleurs de refroidissement.

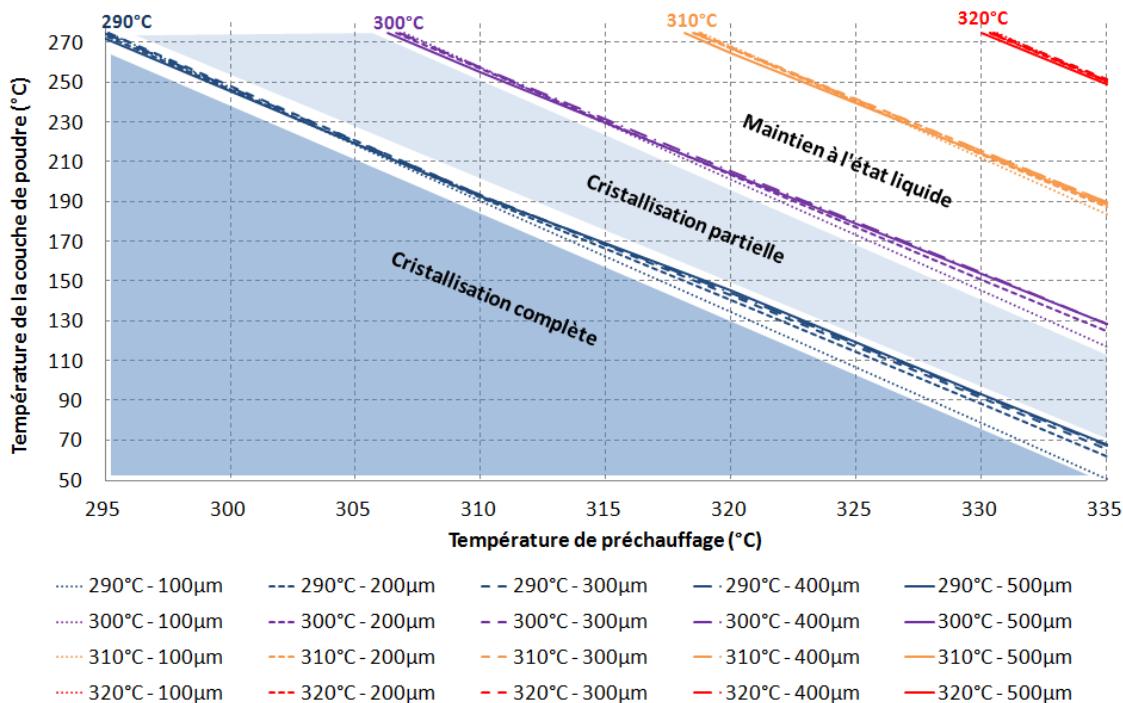


Figure 172 Isovaleurs de refroidissement à 290°C , 300°C , 310°C , 320°C du matériau A lors de l'étalement de couches de poudre d'épaisseurs de $100\ \mu\text{m}$ à $500\ \mu\text{m}$ et déduction des plages de paramètres d'étalement permettant de ne pas cristalliser la matière

Il est alors possible d'obtenir, selon le choix du couple *Température de préchauffage / Température de couche étalée*, la température minimale obtenue dans la matière fondu lors de l'étalement. On confirme très clairement que l'épaisseur de couche a une faible influence sur ce refroidissement.

L'établissement des ces isovaleurs met en évidence différentes zones utiles au précédent. En effet, une zone de cristallisation complète est observée lorsque la matière fondu descend en-dessous de 290°C , sa température de cristallisation. Une seconde zone de cristallisation partielle est représentée, lorsque la matière descend entre 290°C et 300°C , plage du pic de cristallisation du matériau A. Enfin, une zone de non cristallisation apparaît, lorsque la matière ne descend pas en-dessous de 310°C . Cette zone correspond à celle qui doit être choisie dans le but de maintenir la matière fondu à l'état liquide après étalement.

Ce type de diagramme (ou d'abaque) *Température de couche de poudre – Température de préchauffage* facilite finalement la mise en œuvre du procédé.

1.2.4.c Détermination des isovaleurs de refroidissement du matériau B lors de l'étalement

Compte tenu du faible écart des propriétés thermiques des matériaux A et B et de la proportionnalité des résultats aux différentes températures, il est possible d'étendre notre étude aux températures de mise en œuvre du matériau B.

Nous proposons donc le même type de courbes d'isovaleurs de refroidissement à 160°C, 190°C et 220°C et les zones de solidification et maintien à l'état liquide pour le matériau B (Figure 173) en négligeant l'effet de l'épaisseur de couche étalée.

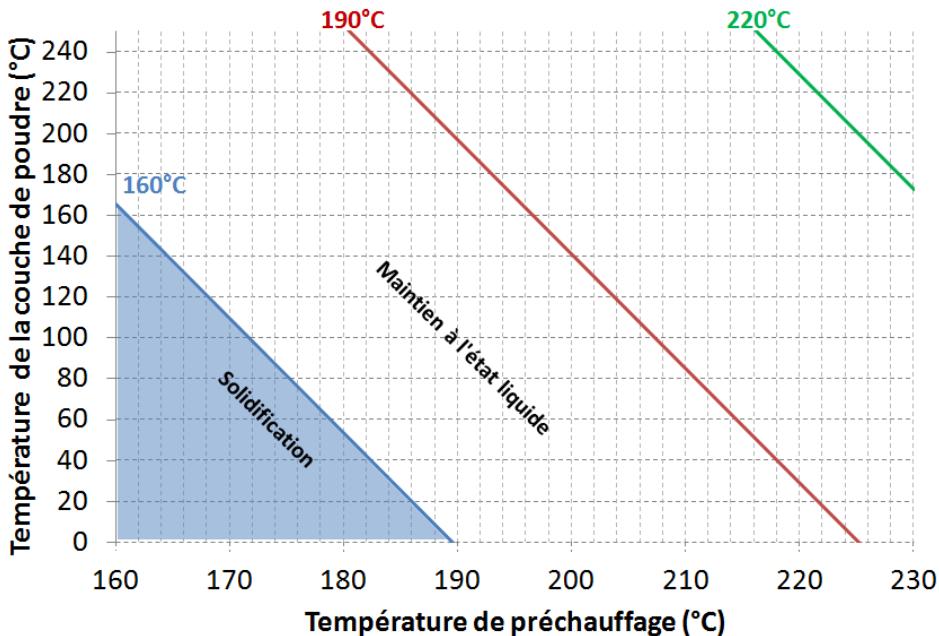


Figure 173 Isovaleurs de refroidissement du matériau B à 160°C, 190°C et 220°C lors de l'étalement dans les minutes suivant la fusion laser

Rappelons que ce diagramme n'est réaliste que pendant les premières minutes après fusion laser pour ce matériau. En effet, bien que non mise en évidence sur l'analyse DSC menée, l'étude de pièces créées par le procédé de fabrication directe montre que la cristallisation du matériau B a lieu pendant le refroidissement global de la pièce avant d'avoir atteint sa température de transition vitreuse.

1.2.5 Application de la démarche au PA12

Le procédé de fusion laser sélective est maîtrisé pour le PA12. Il paraît donc intéressant de mettre en place la même démarche que précédemment afin de proposer un critère de choix des conditions d'étalement permettant de maîtriser le refroidissement de la matière fondu. La même démarche est donc appliquée à ce matériau afin d'obtenir les courbes d'isovaleurs de refroidissement à 150°C et 160°C et les zones de solidification de la matière et de maintien à l'état liquide (Figure 174).

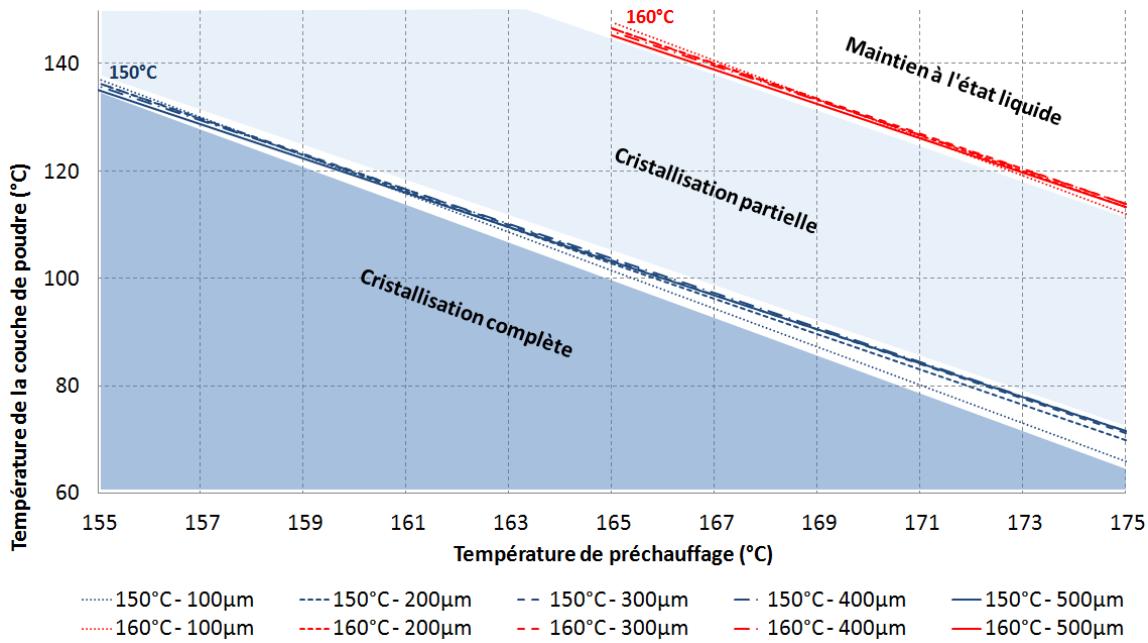


Figure 174 Isovaleurs de refroidissement à 150°C à 160°C du PA12 lors de l'étalement

Ces données semblent en très bon accord avec les paramètres utilisés dans les machines industrielles chez les fabricants du projet FADIPLAST.

1.2.6 Synthèse sur l'étude de l'étalement d'une nouvelle couche

L'étalement de la poudre est l'un des points clés du procédé car il peut, lorsqu'il est mal maîtrisé, conduire à la cristallisation brutale de la couche fondu, donc à l'arrêt de la densification, du soudage, et à des distorsions de la matière. Nous avons donc étudié numériquement tous les facteurs permettant d'optimiser cet étalement :

- (1) Nous avons montré que la vitesse d'étalement et l'épaisseur de la couche étalée n'ont pas d'influence notable sur la thermique de la matière fondu dans la gamme de vitesses du procédé (0,5 à 2 m/s).
- (2) les paramètres à optimiser sont donc la température de la couche étalée, et la température de pré et post-chauffage de la couche fondu qui, considérées simultanément, conditionnent la chute de température induite par l'étalement.

Notre étude a permis de définir des courbes d'iso-valeurs de refroidissement induit par l'étalement. Elles permettent de définir les paramètres d'étalement induisant un même refroidissement au sein de la matière, proche de la surface. Il est donc possible de choisir des paramètres d'étalement permettant de ne pas descendre en-dessous de la température de cristallisation du matériau afin de le maintenir à l'état liquide, que ce soit pour le matériau A, le matériau B ou un PA 12, utilisés en fusion laser sélective. Du fait de son absence de cristallisation lors de l'étalement d'une nouvelle couche de poudre, le matériau B offre une plus large gamme de paramètres que le matériau A permettant son maintien à l'état liquide.

CONCLUSIONS

L'étude bibliographique a permis de montrer que les propriétés mécaniques du matériau mis en forme par le procédé de fusion laser sélective de poudres thermoplastiques dépendaient de façon drastique de la densification obtenue, ce qui nous a amené à étudier les mécanismes physiques contrôlant cette densification au cours du procédé.

Nous n'avons pas trouvé d'études faisant référence à des simulations numériques permettant de modéliser la fusion laser d'un lit de poudre, la caractérisation du soudage des grains et les cinétiques de densification sous l'effet des actions de tension de surface. Nous avons donc d'abord mis en place une simulation à l'échelle microscopique de la densification d'un lit de poudre sous l'action de la tension de surface après le passage laser. Le logiciel a été entièrement développé en utilisant la méthode C-NEM et implémentée sur le logiciel Matlab. La simulation bidimensionnelle mise en place prend en compte le couplage entre la mécanique des fluides visqueux newtoniens incompressibles et la thermique. Afin d'obtenir une thermique réaliste du procédé par une simulation 2D, un flux additionnel a été ajusté en comparant des simulations macroscopiques 2D et 3D. La modélisation de la géométrie des poudres étudiées a été obtenue à partir de mesures en tomographie X et l'interaction laser matière a été identifiée expérimentalement par une loi de Beer-Lambert. Cette simulation apporte des résultats sur le cycle thermique de la matière lors du passage laser (température maximale atteinte, temps de refroidissement), sur la qualité du soudage de la matière (cinétique et profondeur de soudage) ainsi que sur la cinétique de densification du lit de poudre par l'étude de la courbure moyenne de la frontière supérieure du domaine.

Le logiciel de simulation a été validé, il a permis de retrouver les résultats des cas hydrodynamiques classiques rencontrés dans la littérature : coalescence de deux cylindres, goutte pendante, cinétique de disparition de cavités. Plusieurs cas-tests thermiques ont montré que l'équation de la chaleur et les conditions limites en température et en flux étaient parfaitement intégrées. Enfin la simulation du passage d'un rayon laser sur le logiciel développé et sur le logiciel COMSOL ont permis de montrer que l'implémentation du modèle d'absorption de l'énergie du rayonnement laser était correcte.

Une première étude a permis de définir un critère basé uniquement sur les paramètres des poudres (viscosité, tension de surface, granulométrie) qui permet de quantifier l'effet de la gravité dans le cas de mouvements fluides sous l'action de la tension de surface : la gravité pourrait avoir une influence dans le procédé lors du passage laser, quelques dixièmes de secondes. Une seconde étude a permis d'analyser l'influence de la viscoélasticité lors de la coalescence en étudiant les variations du nombre

de Deborah. Nous avons montré que compte tenu du faible diamètre des grains de poudre, le comportement viscoélastique pouvait jouer sur la cinétique de coalescence au tout début du phénomène. Nous avons choisi de négliger ce dernier paramètre pour l'étude du procédé compte tenu de sa faible influence.

Suite à ces études, nous avons mis en place la simulation du procédé. Des plans d'expériences numériques ont été établis. Différents paramètres influents ainsi que leurs variations ont été fixés et validés par les industriels du projet mettant en œuvre les poudres sur leurs machines. Ces plans d'expériences avaient pour but d'analyser diverses influences de paramètres matériau et procédé et de déterminer les temps caractéristiques de procédé. Nous avons confirmé que le cycle thermique subit par la matière est l'élément primordial qu'il faut maîtriser pour créer des pièces de bonnes caractéristiques mécaniques et de bonnes densités.

Tout d'abord, les résultats de simulation montrent assez logiquement que la cinétique de densification dépend fortement du rapport de la puissance du laser et de sa vitesse de déplacement. Nous avons déterminé les températures maximales atteintes en surface de la poudre et les cinétiques de refroidissement. Ainsi, les échauffements sont de l'ordre de 50°C à 900°C et la matière, quelles que soient les conditions simulées, redescend à la température de préchauffage au maximum 0.25 secondes après le passage du laser. La densification du matériau par coalescence après le passage laser peut être presque totale à condition que les viscosités soient faibles, mais de façon générale les temps de densification sont beaucoup plus longs. Il devient alors évident que la matière doit rester à l'état fondu après le passage du laser pour parfaire la densification, mais aussi pour permettre à l'air emprisonné dans des cavités fermées de s'évacuer par diffusion dans le polymère à l'état fondu. Cette condition nécessaire au procédé peut être facilement réalisée pour les polymères semi-cristallins puisque leur température ou plage de cristallisation est bien inférieure à la température de fusion ; on en déduit donc que la température du lit de poudre dans la zone de travail doit se situer entre les températures de cristallisation et de fusion, plage qui peut être néanmoins très étroite si les domaines de fusion et cristallisation sont larges. Une analyse calorimétrique du matériau en DSC permet donc de déterminer assez facilement cette température. En conséquence, la mise en forme de polymères amorphes par ce procédé n'est pratiquement pas possible car soit les densités induites ne seront pas suffisantes, soit les masses moléculaires utilisées seront beaucoup trop faibles pour obtenir des propriétés mécaniques satisfaisantes, ainsi pour ces matériaux ce procédé restera un procédé de prototypage rapide.

La qualité du soudage a été caractérisée selon un critère basé sur le temps de relaxation terminal du polymère, assimilé au temps de reptation. Nous avons montré que les temps permettant d'obtenir une profondeur de soudage effectif sont de l'ordre de 10 à 20 secondes selon les caractéristiques rhéologiques des matériaux utilisés. Les profondeurs de soudage varient entre 100µm et 700µm selon

les conditions de procédé. La température de préchauffage de la poudre dans la zone de travail a une influence non négligeable sur la cinétique de soudage ainsi qu'une petite influence sur les profondeurs de soudage, de l'ordre de 100 μ m pour 20 degrés de variation. Toutefois, elle est relativement peu influente sur les autres données analysées.

Après une trentaine de secondes, nous avons finalement montré que le soudage et la densification sous l'action de la tension de surface sont terminés, quels que soient les matériaux étudiés. Pourtant, l'expérience des entreprises montre que ce n'est pas forcément suffisant pour obtenir de bonnes densités de matière. En effet, un phénomène non modélisé dans l'étude permet de faire disparaître en partie l'air emprisonné par diffusion à travers le polymère fondu. Ces temps caractéristiques, de l'ordre de la minute ou de plusieurs minutes, imposent aussi la nécessité du maintien à l'état liquide de la matière lors de l'ajout des nouvelles couches de poudre de polymère non fondu sur la matière fondu après le passage laser. Nous avons donc mené l'étude du refroidissement induit par l'étalement d'une couche de poudre en développant une simulation à une échelle macroscopique, en considérant les matériaux homogènes. Cette simulation a été mise en place avec le logiciel éléments finis commercial COMSOL.

Les paramètres variant dans l'étude ont donc été la vitesse d'étalement, l'épaisseur de la couche, la température du polymère fondu (température de préchauffage), la température de la couche étalée. Nous avons montré que la vitesse d'étalement de la couche et son épaisseur n'avaient pas d'influence significative sur le refroidissement induit. Cette étude, menée dans un cas idéal de températures bien maîtrisées, a permis de proposer des abaques pour les deux matériaux du projet, permettant aux industriels de connaître les conditions d'étalement induisant un refroidissement à une température donnée.

PERPECTIVES

D'un point de vue matériau, il est nécessaire de prendre en compte l'enthalpie de fusion lors de la transition solide/liquide de la poudre au moment de la fusion laser (logiciel à l'échelle microscopique). Une méthode de Cp équivalent pourrait être implémentée. Lors de l'étude du refroidissement induit par l'étalement, il faudrait ajouter la prise en compte de l'enthalpie de cristallisation liée à un modèle de cristallisation. Afin d'analyser les temps de diffusion des gaz à travers le polymère fondu, il faut déterminer et implémenter un modèle de diffusion des gaz. Enfin, l'ajout d'un modèle de comportement viscoélastique permettrait d'étudier son influence aux premiers instants de la coalescence.

D'un point de vue numérique, il serait intéressant de passer à la 3D. Cela permettrait de prendre en compte une thermique plus réaliste, de mieux intégrer les effets de bord sur les pièces, d'analyser l'évolution des porosités ouvertes et la création de porosités fermées dans le lit de poudre et d'intégrer les phénomènes de diffusion des gaz amenant à l'analyse complète du procédé et permettant de prédire la densité de la matière. Cependant, les temps de calcul sont aujourd'hui prohibitifs, et des développements importants doivent être entrepris pour analyser la géométrie des surfaces et la collision de frontières. La méthode Level Set est une méthode vers laquelle il serait intéressant de s'orienter afin de comparer les possibilités offertes par rapport à la méthode C-NEM. Enfin, l'utilisation de techniques de réduction de modèles type PGD (Chinesta et al., 2010) pourrait permettre de lever certains verrous.

Enfin, d'un point de vue technologique, il paraît intéressant d'augmenter la cinétique de disparition des porosités, soit par l'utilisation de gaz qui diffusent rapidement (hélium), soit en développant la mise en œuvre de la fusion laser sous vide. L'utilisation de plusieurs lasers en série ou d'une stratégie à plusieurs passages laser sur la matière permettrait d'augmenter le temps passé à haute température et pourrait permettre d'augmenter la productivité, voire d'envisager l'obtention de performances améliorées sur les pièces obtenues avec des matières amorphes.

Références

- Acherjee, B., Kuar, A., Mitra, S., Misra, D. (2012). Effect of carbon black on temperature field and weld profile during laser transmission welding of polymers: AFEM study. *Optics & Laser Technology*, 44, 514-521.
- Ajoku, U., Hopkinson, N., Caine, M. (2006a). Experimental measurement and finite element modelling of the compressive properties of laser sintered Nylon-12. *Materials Science and Engineering: A*, 428, 211-216.
- Ajoku, U., Saleh, N., Hopkinson, N., Hague, R., Erasenthiran, P. (2006b). Investigating mechanical anisotropy and end-of-vector effect in laser-sintered nylon parts. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part B: Journal of Engineering Manufacture*, 220, 1077-1086.
- Alfaro, I., Yvonnet, J., Chinesta, F., Cueto, E. (2007). A study on the performance of natural neighbour-based Galerkin methods. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 71, 1436-1465.
- Amado, F., Schmid, M., Levy, G., Wegener, K. (2011). Advances in SLS Powder Characterisation. *International Solid Freeform Fabrication Symposium*, Austin (TX).
- Bae, S., Kim, D., Choi, K., Yoo, S. (2008). Application and evaluation performance of DMS in the SLS process. *International Congress on Applications of Lasers & Electro-Optics*, Temecula (CA).
- Beal, V., Paggi, R., Salmoria, G., Lago, A. (2009). Statistical evaluation of laser energy density effect on mechanical properties of polyamide parts manufactured by selective laser sintering. *Journal of Applied Polymer Science*, 113, 2910-2919.
- Bellehumeur, C. (1997). Polymer sintering and its role in rotational molding. *PhD thesis*, McMaster University.
- Bellehumeur, C., Kontopoulou, M., Vlachopoulos, J. (1998). The role of viscoelasticity in polymer sintering. *Rheologica Acta*, 37, 270-278.
- Bellehumeur, C., Tiang, J. (2002). Simulation of non-isothermal melt densification of polyethylene in rotational molding. *Polymer Engineering and Science*, 42, 215-229.
- Bigg, D. (1995). Thermal conductivity of heterophase polymer compositions. *Advances in Polymer Science*, 119, 1-30.
- Bordival, M., Schmidt, F., Le Maoult, Y., Cosson, B., Plantamura, B (2010). A ray tracing method to simulate the infrared heating of semi-transparent thermoplastics. *International Journal of Material Forming*, 3, 809-812.
- Caulfield, B., McHugh, P., Lohfeld, S. (2007). Dependence of mechanical properties of polyamide components on build parameters in the SLS process. *Journal of Materials Processing Technology*, 182, 477-488.
- Charles, R., Pozrikidis, C. (1998). Significance of the dispersed-phase viscosity on the simple shear flow of suspensions of two-dimensional liquid drops. *Journal of Fluid Mechanics*, 365, 205-234.
- Charrier, J.M. (1991). Polymeric Materials and Processing: Plastics, Elastomers and Composites. *Hanser Publishers, New York*.
- Chinesta, F., Ammar, A., Cueto, E. (2010). Recent Advances and New Challenges in the Use of the Proper Generalized Decomposition for Solving Multidimensional Models. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 17, 327-350.

- Chinesta, F., Cueto, E., Cescotto, S., Lorong, P. (2011). Natural element method for the simulation of structures and processes. *ISTE Ltd / John Wiley & Sons* .
- Coelho, J. M., Abreu, M. A., Carvalho Rodrigues, F. (2004). Methodologies for determining thermoplastic films optical parameters at 10.6 µm laser wavelength. *Polymer Testing*, 23, 307-312.
- Condotta, R. (2005a). Coulabilité des poudres cohésives : Mesure aux faibles contraintes, granulaires humides et application à une poudre industrielle. *Thèse de doctorat*, INP Toulouse.
- Condotta, R., De Ryck, A. (2005b). Dilatancy and yield stress of dry and wet beads, *5th International Conference on the Micromechanics of Granular Media: Powders and Grains*, Stuttgart.
- Cosson, B., Chevalier, L., Yvonnet, J. (2008). Optimization by the C-NEM Method of the Stretch-Blow Molding Process of a PET Bottle Near Tg. *International Journal of Material Forming*, 1, 707-710.
- Cosson, B., Schmidt, F., Le Maoult, Y., Bordival, M. (2011). Infrared heating stage simulation of semi-transparent media (PET) using ray tracing method. *International Journal of Material Forming*, 4, 1-10.
- Crawford, R., Scott, J. (1987). The formation and removal of gas bubbles in a rotational moulding grade PE. *Plastics and Rubber Processing and Applications*, 7, 85-99.
- Crowdy, D. (2002). Theory of exact solutions for the evolution of a fluid annulus in a rotating Hele-Shaw cell. *Quarterly of Applied Mathematics*, 60, 11-36.
- Crowdy, D. (2003). Viscous sintering of unimodal and bimodal cylindrical packings with shrinking pores. *European Journal of Applied Mathematics*, 14, 421-445.
- De Gennes, P.G. (1971). Reptation of a polymer chain in the presence of fixed obstacles. *Journal of Chemical Physics*, 55, 572-579.
- Demarquette, N. (2003). Evaluation of experimental techniques for determining interfacial tension between molten polymers. *International Materials Reviews*, 48, 247-269.
- Demarquette, N., Teodora Da Silva, F., Brandi, S., Gouvea, D. (2000). Surface Tension of Polyethylene Used in Thermal Coating. *Polymer Engineering and Science*, 40 , 1663-1671.
- Dong, L., Makradi, A., Ahzi, S., Remond, Y. (2007). Finite element analysis of temperature and density distributions in selective laser sintering process. *Materials Science Forum*, 553, 75-80.
- Dong, L., Makradi, A., Ahzi, S., Remond, Y., Sun, X. (2008). Simulation of the densification of semicrystalline polymer powders during the selective laser sintering process: Application to Nylon 12. *Polymer Science Series A*, 50, 704-709.
- Dong, L., Makradi, A., Ahzi, S., Remond, Y. (2009). Three-dimensional transient finite element analysis of the selective laser sintering process. *Journal of Materials Processing Technology*, 209, 700-706.
- Dotchev, K., Yusoff, W. (2009). Recycling of polyamide 12 based powders in the laser sintering process. *Rapid Prototyping Journal*, 15, 192-203.
- Drummer, D., Rietzel, D., Kühnlein, F. (2010). Development of a characterization approach for the sintering behavior of new thermoplastics for selective laser sintering. *Physics Procedia*, 5, 533-542.
- Dumoulin, E., Colin, C., Renard, J., Allain, R. (2012). Selective Laser Sintering Of High Temperature Resistant Thermoplastic Powders. *Powder Metallurgy World Congress & Exhibition*, Yokohama (JP).

- Dupin, S. (2012). Etude fondamentale de la transformation du polyamide 12 par frittage laser: mécanismes physico-chimiques et relations microstructures/propriétés. *Thèse de Doctorat*, INSA de Lyon.
- Eshelby, J. (1949). Discussion of ‘Seminar on the Kinetics of Sintering’. *Metallurgical Transactions*, 185, 796–813.
- Franco, A., Lanzetta, M., Romoli, L. (2010). Experimental analysis of selective laser sintering of polyamide powders: an energy perspective. *Journal of Cleaner Production*, 18, 1722-1730.
- Franco, A., Romoli, L. (2012). Characterization of laser energy consumption in sintering of polymer based powders. *Journal of Materials Processing Technology*, 212, 917-926.
- Frenkel, J. (1945). Viscous flow of crystalline bodies under the action of surface tension. *J. Phys.*, 9, 385-391.
- Ganesan, V., Rosentrater, K., Muthukumarappan, K. (2008). Flowability and handling characteristics of bulk solids and powders – a review with implications for DDGS. *Biosystems Engineering*, 101, 425-435.
- Garabedian, R., Helble, J. (2001). A Model for the Viscous Coalescence of Amorphous Particles. *Journal of Colloid and Interface Science*, 234, 248-260.
- Garabedian, R., Helble, J. (2007). Modeling coalescence in multiple-particle systems. *Journal of Aerosol Science*, 39, 71-81.
- Gebhardt, A. (1997). Current trends in RP and RT. *Kunststoffe Plast Europe*, 87, 27-30.
- Gibson, I., Shi, D. (1997). Material properties and fabrication parameters in selective laser sintering process. *Rapid Prototyp Journal*, 3, 129-136.
- Girardot, J., Ranc, N., Schneider, M., Favier, V. (2012). Modélisation du procédé de perçage laser, interaction laser/matière à bas flux. *2nd Workshop IRM-DSP*, Paris.
- Gogos, G. (2004). Bubble Removal in Rotational Molding. *Polymer Engineering and Science*, 44, 388-394.
- Goodridge, R., Tuck, C., Hague, R. (2012). Laser sintering of polyamides and other polymers. *Progress in Materials Science*, 57, 229-267.
- Gornet, T.J. (2002a). Characterisation of selective laser sintering TM to determine process stability. *Proceeding of Solide Freeform Fabrication*, Austin (TX).
- Gornet, T. (2002b). Improving selective laser sintering consistency. *CAD/CAM publishing*, San Diego (CA).
- Hiram, Y., Nir, A. (1983). A Simulation of Surface Tension Driven Coalescence. *Journal of Colloid and Interface Science*, 95, 462-470.
- Hirao, K., Tomozawa, M. (1987). Kinetics of Crack Tip Blunting of Glasses. *Journal of the American Ceramic Society*, 70, 43-48.
- Ho, H., Gibson, I., Cheung, W. (1999). Effects of energy density on morphology and properties of selective laser sintered polycarbonate. *Journal of Materials Processing Technology*, 89-90, 204-210.
- Ho, H. C., Cheung, W., Gibson, I. (2003). Morphology and properties of selective laser sintered bisphenol A polycarbonate. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 42, 1850-1862.
- Hooper, R., Macosko, C., Derby, J. (2000). Assessing a flow-based finite element model for the sintering of viscoelastic particles. *Chemical Engineering Science*, 55, 5733-5746.

- Hopkinson, N., Hague, R., Dickens, P. (2006). *Rapid manufacturing: an industrial revolution for a digit age*. Chichester, UK: John Wiley & Sons.
- Hopper, R. W. (1984). Coalescence of two equal cylinders: exact results for creeping viscous plane flow driven by capillarity. *Journal of the American Ceramic Society*, 67, c262-c264 .
- Hopper, R. (1992). Stokes flow of a cylinder and half-space driven by capillarity. *Journal of Fluid Mechanics*, 243, 171-181.
- Hopper, R. W. (1993a). Coalescence of two viscous cylinders by capillarity: Part I, Theory. *Journal of the American Ceramic Society*, 76, 2947-2952.
- Hopper, R. W. (1993b). Coalescence of two viscous cylinders by capillarity: Part II, Shape evolution. *Journal of the American Ceramic Society*, 76, 2953-2960.
- Ilie, M., Kneip, J., Mattei, S., Nichici, A. (2007a). Simulation du procédé de soudage laser par transparence de polymères thermoplastiques. *Congrès Français de Thermique*, Île des Embiez (FR).
- Ilie, M., Kneip, J., Mattei, S., Nichici, A., Roze, C., Girasole, T. (2007b). Through-transmissionlaserweldingofpolymers – temperature field modeling and infrared investigation. *Infrared Physics & Technology*, 51, 73-79.
- Ilie, M., Cicala, E., Grevey, D., Mattei, S., Stoica, V. (2009). Diode laser welding of ABS: Experiments and process modeling. *Optics & Laser Technology*, 41, 608-614.
- Illoul, A. L. (2008). Mise en oeuvre de la méthode des éléments naturels contrainte en 3D. Application au cisaillage adiabatique. *Thèse de Doctorat*, Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Métiers.
- Israelachvili, J. N. (1992). Intermolecular and Surface Forces. *Bonston : Academic Press*.
- Jacobs, P. (1992). Rapid Prototyping and Manufacturing - Fundamentals in stereolithography. *Published by the Society of Manufacturing Engineers in cooperation with the Computer and Automated Systems Association of SME*.
- Jagota, A., Dawson, P. R. (1990). Simulation of the Viscous Sintering of Two Particles. *Journal of the American Ceramic Society*, 73, 173-177.
- Jagota, A., Argento, C., Mazur, S. (1998). Growth of adhesive contacts for Maxwell viscoelastic spheres. *Journal of Applied Physics*, 83, 250-259.
- Jarrige, R., Andraud, C., Lafait, J., Eveno, M., Menu, M., Diniz, N. (2011). Determination of the complex optical index of red pigments, vermillion. *Proceedings of SPIE – The International Society for Optical Engineering*, Munich.
- Jarrige, R. (2012). Détermination des propriétés optiques de matériaux granulaires. *Thèse de Doctorat*. Université Pierre et Marie Curie.
- Johnson, K., Kendall, K., Roberts, A. (1971). Surface Energy and the Contact of Elastic Solids. *Proceedings of the Royal Society of London*, 324, 301-313.
- Keller, B. (1998). Rapid Prototyping: Grundlagen Zum Selektiven Lasersintern Von Polymerpulver. *Shaker Verlag*.
- Keller, B., Pfeifer, R., Su, W., Eyerer, P. (1998). Temperature dependent optical properties of polymers as a basis for laser process modeling. *Solid Freeform Fabrication Proceedings*, Austin (TX).
- Kim, D., An, Y., Choi, K. (2005). Development and performance evaluation of industrial 3D real object duplication system by Selective Dual-Laser Sintering process. *International Congress on Applications of Lasers and Electro-Optics*, Miami (FL).

Kim, D., Ahn, Y., Bae, S., Kim, C., Kim, H. (2006a). Development of polyamide-6 powders and its effect on the fabrication by selective laser sintering. *International Congress on Applications of Lasers and Electro-Optics*, Scottsdale (AZ).

Kim, D., Ahn, Y., Bae, S., Choi, B., Choi, K. (2006b). A study on the selective dual laser sintering process for the solid freeform fabrication system. *International Congress on Applications of Lasers & Electro-Optics*, Scottsdale (AZ).

Kolossov, S., Boillat, E., Glardon, R. F., Locher, M. (2004). 3D FE simulation for temperature evolution in the selective laser sintering process. *International Journal of Machine Tools and Manufacture*, 44, 117-123.

Kontopoulou, M., Vlachopoulos, J. (1999). Bubble dissolution in molten polymers and its role in rotational molding. *Polymer Engineering and Science*, 39, 1189-1198.

Kontopoulou, M., Vlachopoulos, J. (2001). Melting and Densification of Thermoplastic Powders. *Polymer Engineering and Science*, 41, 155-169.

Korwin, D. M., Lange, S. R., Eaton, W. C., Joseph, I., Pye, L. D. (1992). A Study of the Sintering Behavior of Glass in Two Geometric Configurations. *XVI International Congress on Glass*, 2, 253-258.

Krantz, M., Zhang, H., Zhu, J. (2009). Characterization of powder flow: Static and dynamic testing. *Powder Technology*, 194, 239-245.

Kropinski, M. (2002). Numerical Methods for Multiple Inviscid Interfaces in Creeping Flows. *Journal of Computational Physics*, 180, 1-24.

Kruth, J., Wang, X., Laoui, T., Froyen, L. (2003). Lasers and materials in selective laser sintering. *Assembly Automation*, 23, 357-371.

Kruth, J., Mercelis, P., Froyen, L., Rombouts, M. (2004). Binding Mechanisms in Selective Laser Sintering and Selective Laser Melting. *15th Solid Freeform Fabrication Symposium*, Austin (TX).

Kruth, J.-P., Levy, G., Klocke, F., Childs, T. (2007). Consolidation phenomena in laser and powder-bed based layered manufacturing. *CIRP Annals - Manufacturing Technology*, 56, 730-759.

Kruth, J.-P., Levy, G., Schindel, R., Craeghs, T., Yasa, E. (2008). Consolidation of polymer powders by selective laser sintering. *Proceedings of the 3rd International Conference on Polymers and Moulds Innovations*, Gent (B).

Kuczynski, G., Neuville, B., Toner, H. (1970). Study of sintering of poly(methyl methacrylate). *Journal of Applied Polymer Science*, 14, 2069-2077.

Kuiken, H. (1990). Viscous sintering: the surface-tension-driven flow of a liquid form under the influence of curvature gradients at its surface. *Journal of Fluid Mechanics*, 214, 503-515.

Leigh, D. (2010). LS production in a multiple platform environnement. *Additive Manufacturing International Conference*, Loughborough University, (UK).

Lin, Y., Hui, C., Jagota, A. (2001). The role of viscoelastic adhesive contact in the sintering of polymeric particles. *Journal of Colloid and Interface Science*, 237, 267-282.

Lontz, J.F. (1963). Sintering of Polymer Materials. *First Symposium on Fundamental Phenomena in the Material Sciences*, Plenum Press, Boston.

Lontz, J.F. (1964). Sintering of polymer material, in Fundamental Phenomena in the Material Science, New York: Plenum Press.

Lorong, P., Plateforme Simulation Numérique M2P, http://plateformesn-m2p.ensam.eu/CNEM_Pages

- Mackenzie, J., Shuttleworth, R. (1949). A Phenomenological Theory of Sintering. *Proceedings of the Physical Society. Section B*, 62, 833-852.
- Majewski, C. E., Zarringhalam, H., Hopkinson, N. (2008). Effect of the degree of particle melt on mechanical properties in selective laser sintered Nylon-12 parts. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part B: Journal of Engineering Manufacture*, 222, 1055-1064.
- Manga, M., Stone, H. (1993). Buoyancy-driven interactions between two deformable viscous drops. *Journal of Fluid Mechanics*, 256, 647-683.
- Martinez, M., Cueto, E., Doblare, M., Chinesta, F. (2004). Updated lagrangian free surface flow simulations with natural neighbour Galerkin methods. *International Journal of Numerical Methods in Engineering*, 60, 2105-2129.
- Martinez-Herrera, J. I., Derby, J. J. (1994). Analysis of capillary driven viscous flows during the sintering of ceramic powders. *A.I.Ch.E. Journal*, 40, 1794-1803.
- Martinez-Herrera, J. I., Derby, J. J. (1995). Viscous sintering of spherical particles via finite element analysis. *Journal of the American Ceramic Society*, 78, 645-649.
- Maxwell, J. C. (1873). Conduction through heterogeneous media - A treatise on Electricity and Magnetism, *Oxford: Clarendon Press*.
- Mazur, S., Plazek, D. (1994). Viscoelastic effects in the coalescence of polymer particles. *Progress in Organic Coatings*, 24, 225-236.
- Mazur, S. (1995). Coalescence of Polymer Particles, in M. Narkis and N. Rosenzweig, *Polymer Powder Technology*, Chichester : John Wiley & Sons.
- McAlea, K., Forderhasse, P., Booth, R. (1998). Selective laser sintering of polymer powder of controlled particle size distribution. *US patent 5817206*.
- Mercelis, P., Kruth, J.P., Residual stresses in selective laser sintering and selective laser melting, *Rapid Prototyping Journal*, 12, 254-265
- Mie, G. (1908). Beiträge zur optik trüber medien speziell kolloidaler metallösungen. *Annals of Physics*, 4, 376-445.
- Morais, D., Valera, T. S., Demarquette, N. (2006). Evaluation of the Surface Tension of Poly(vinyl butyral) Using the Pendant Drop Method. *Macromolecular Symposia*, 245-246, 208-214.
- Moreira, J., Demarquette, N. (2001). Influence of temperature, molecular weight, and molecular weight dispersity on the surface tension of PS, PP, and PE. I. Experimental. *Journal of Applied Polymer Science*, 82, 1907-1920.
- Morita, A., Carastan, D., Demarquette, N. (2002). Influence of drop volume on surface tension evaluated using the pendant drop method. *Colloid & Polymer Science*, 280, 857-864.
- Muller, J. (2008). Etude des changements de phase de polymère dans le procédé de rotomoulage : coalescence et cristallisation couplées à la thermique du procédé. *Thèse de Doctorat*, INSA de Lyon.
- Narkis, M. (1979). Sintering Behavior of Poly(Methyl Methacrylate) Particles. *Polymer Engineering and Science*, 19, 889-892.
- Nelson, J., Xue, S., Barlow, J., Beaman, J., Marcus, H., Bourell, D. (1993). Model of the selective laser sintering of bisphenol-A polycarbonate. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 32, 2305-2317.
- Nicodeau, C. (2005). Modélisation du soudage en continu de composites à matrice thermoplastique. *Thèse de Doctorat*, Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Métiers.

- Nwabunma, D., Kyu, T. (2007). Polyolefin Blends. *New York : John Wiley & Sons*.
- Oshima, T., Zhang, Y.-L., Hirota, M., Suzuki, M., Nakagawa, T. (1995). The effect of the types of mill on the flowability of ground powders. *Advanced Powder Technology*, 6, 35-45.
- Ott, H. J. (1989). Laser stereo-lithography - from the CAD-model to the prototype. *Laser-Praxis*, 24-26.
- Pandey, P. (2012). On the Rapid Prototyping Technologies and Applications in Product Design and Manufacturing. *Materials Science Forum*, 710, 101-109.
- Pham, D., Dotchev, K., Yusoff, W. (2008, November). Deterioration of polyamide powder properties in the laser sintering process. *Part C: Journal of Mechanical Engineering Science*, 222, 2163-2176.
- Pokluda, O., Bellehumeur, C., Vlachopoulos, J. (1997). Modification of Frenkel's Model for Sintering. *AIChE Journal*, 43, 3253-3256.
- Primo, A., Wrobel, L., Power, H. (2000). An indirect boundary-element method for slow viscous flow in a bounded region containing air bubbles. *Journal of Engineering Mathematics*, 37, 305-326.
- Richardson, S. (1992). Two-dimensional slow viscous flows with time-dependent free boundaries driven by surface tension. *European Journal of Applied Mathematics*, 3, 193-207.
- Riedel, D., Castex, M. (1999). Effective absorption coefficient measurements in PMMA and PTFE by clean ablation process with a coherent VUV source at 125 nm. *Applied Physics A: Materials Science & Processing*, 69, 375-380.
- Rietzel, D., Aquite, W., Drummer, D., Osswald, T. (2011a). Polymer powders for Selective Laser Sintering – Production and Characterization. *44th Conference on Manufacturing Systems*, Madison (WI).
- Rietzel, D., Drexler, M., Kühnlein, F., Drummer, D. (2011b). Influence of temperature fields on the processing of polymer powders by means of laser and mask sintering technology. *International SFF Symposium – An Additive Manufacturing Conference*, Austin (TX).
- Rosenzweig, N. (1980). D.Sc. dissertation. *Technion, Haifa* .
- Rosenzweig, N., Narkis, M. (1981). Dimensional variations of two spherical polymeric particles during sintering. *Polymer Engineering and Science*, 21, 582-585.
- Ross, J., Miller, W., Weatherly, G. (1981). Dynamic computer simulation of viscous flow sintering kinetics. *Journal of Applied Physics*, 52, 3884-3888.
- Salmoria, G., Ahrens, C., Klauss, P., Paggi, R., Oliveira, R., Lago, A. (2007). Rapid Manufacturing of Polyethylene Parts With Controlled Pore Size Gradients Using Selective Laser Sintering. *Materials Research*, 10, 2011-214.
- Salmoria, G., Leite, J., Paggi, R. (2009). The microstructural characterization of PA6/PA12 blend specimens fabricated by selective laser sintering. *Polymer Testing*, 28, 746-751.
- Sambridge, M., Braun, J., McQueen, H. (1995). Geophysical parameterization and interpolation of irregular data using natural neighbours. *Geophysical Journal International*, 122, 837-857.
- Schmidt, M., Pohle, D., Rechtenwald, T. (2007). Selective Laser Sintering of PEEK. *CIRP Annals - Manufacturing Technology*, 56, 205-208.
- Schulze, D. (2008). Powders and Bulk Solids: Behavior, Characterization, Storage and Flow. *Springer Berlin - Heidelberg – New York – Tokyo*.

- Scribben, E., Baird, D., Wapperom, P. (2006). The role of transient rheology in polymeric sintering. *Rheologica Acta*, 45, 825-839.
- Seville, J., Tüzün, U., Clift, R. (1997). Processing of Particulate Solids, Powder Technology. *Blackie Academic & Professional*.
- Shi, Y., Li, Z., Sun, H., Huang, S., Zeng, F. (2004). Effect of the properties of the polymer materials on the quality of selective laser sintering parts. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part L: Journal of Materials: Design and Applications*, 218, 247-252.
- Speka, M., Matteï, S., Piloz, M., Ilie, M. (2008). The infrared thermography control of the laser welding of amorphous polymers. *NDT & E International*, 41, 178-183.
- Spence, A. G. (1994). Analysis of Bubble Formation and Removal in Rotationally Molded Products. *PhD thesis*, The Queen's University of Belfast.
- Spence, A., Crawford, R. (1996). The Effect of Processing Variables on the Formation and Removal of Bubbles in Rotationally Molded Products. *Polymer Engineering and Science*, 36, 993-1009.
- Stauffer, J. (1965). The Measurement of Surface Tension by the Pendant Drop Technique. *The Journal Of Physical Chemistry*, 69, 1933-1938.
- Stout, B., Andraud, C., Stout, S., Lafait, J. (2003). Absorption in multiple-scattering systems of coated spheres. *Journal of the Optical Society of America*, 20, 1050-1059.
- Sukumar, N., Moran, B., Belytschko, T. (1998). The Natural Element Method in Solid Mechanics. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 43, 839-887.
- Sun, M., Beaman, J. (1991). A three dimensional model for selective laser sintering. *Solid Freeform Fabrication Proceedings*, Austin.
- Sussman, M., Fatemi, E. (1999). An efficient, interface-preserving level set redistancing algorithm and its application to interfacial incompressible fluid flow. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 20, 1165-1191.
- Tan, K., Chua, C., Leong, K., Cheah, C., Cheang, M., Abu Bakar, M., et al. (2003). Scaffold development using selective laser sintering of polyetheretherketone-hydroxyapatite biocomposite blends. *Biomaterials*, 24, 3115-3123.
- Tanguy, S. (2004). Développement d'une méthode de suivi d'interface. Applications aux écoulements diphasiques. *Thèse de Doctorat*. Université de Rouen.
- Tolochko, N., Khlopkov, Y., Mozzharov, S., Ignatiev, M., Laoui, T., Titov, V. (2000). Absorptance of powder materials suitable for laser sintering. *Rapid Prototyping Journal*, 6, 155-161.
- Tontowi, A., Childs, T. (2001). Density prediction of crystalline polymer sintered parts at various powder bed temperatures. *Rapid Prototyping Journal*, 7, 180-184.
- Traversoni, L. (1994). Natural neighbor finite elements. In International Conference on Hydraulic Engineering Software. *Hydrosoft Proceedings - Computational Mechanics Publications*, 2, 291-297.
- Van der Vorst, G., Mattheij, R. (1992). Numerical analysis of a two-dimensional viscous sintering problem with non-smooth boundaries. *Computing*, 49, 239-263.
- Van der Vorst, G., Mattheij, R., Kuiken, H. (1992). A boundary element solution for two-dimensional viscous sintering. *Journal of Computational Physics*, 100, 50-63.
- Van der Vorst, G. (1993). Integral method for a two-dimensional Stokes flow with shrinking holes applied to viscous sintering. *Journal of Fluid Mechanics*, 257, 667-689.

- Van der Vorst, G. (1994). Modelling and numerical simulation of viscous sintering. *PhD thesis*, Eindhoven University of Technology.
- Vasquez, M., Cross, J., Hopkinson, N., Haworth, B. (2012). Developing new laser sintering materials for snowboarding applications. *Procedia Engineering*, 34, 325-330.
- Vigneaux, P. (2007). Méthodes Level Set pour des problèmes d'interface en microfluidique. *Thèse de Doctorat*. Université Sciences et Technologies – Bordeaux.
- Wagner, T., Hoefer, T., Knies, S., Eyerer, P. (2004). Laser Sintering of High Temperature Resistant Polymers with Carbon Black Additives. *International Polymer Processing*, 19, 395-401.
- Wahab, M., Dalgarno, K., Cochrane R.F., H. S. (2009). Development of Polymer Nanocomposites for Rapid Prototyping Process. *Proceedings of the World Congress on Engineering*, 2, 1499-1504.
- Walkley, M., Gaskell, P., Jimack, P., Kelmanson, M., Summers, J. (2005). Finite Element Simulation of Three-Dimensional Free-Surface Flow Problems. *Journal of Scientific Computing*, 24, 147-162.
- Wang, P., Li, X., Xiao, J., Zhu, F., Yang, Y. (2006). Research on sintering parameters and prototyping quality of SLS polymer powders, *International Congress on Applications of Lasers and Electro-Optics*, Scottsdale (AZ).
- Wei, H., Thompson, R., Park, C., Chen, P. (2010). Surface tension of high density polyethylene (HDPE) in supercritical nitrogen: Effect of polymer crystallization. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 354, 347-352.
- Wohlers, T. (2010). Wohlers Report 2010: An in-depth global study on the advances in additive manufacturing technologies and applications. *Annual Worldwide Progress Report*, Wohlers Associates.
- Woicke, N., Wagner, T., Eyerer, P. (2005). Carbon Assisted Laser Sintering of Thermoplastic Polymers. *Annual Technical Conference*, Boston (MA).
- Xing, P., Bousmina, M., Rodrigue, D. (2000). Critical Experimental Comparison between Five Techniques for the Determination of Interfacial Tension in Polymer Blends: Model System of Polystyrene/Polyamide-6. *Macromolecules*, 33, 8020-8034.
- Yan, C., Shi, Y., Yang, J., Liu, J. (2009). Preparation and selective laser sintering of nylon-12 coated metal powders and post processing. *Journal of Materials Processing Technology*, 209, 5785–5792.
- Yan, C., Shi, Y., Hao, L. (2011). Investigation into the Differences in the Selective Laser Sintering between Amorphous and Semi-crystalline Polymers. *International Polymer Processing*, 16, 416-423.
- Yang, Pitchumani, R. (2002). Healing of thermoplastic polymers at an interface under nonisothermal conditions. *Macromolecules*, 35, 3213-3224.
- Yang, C., Shih, Y., Hao, L. (2011). Investigation into the differences in the selective laser sintering between amorphous and semi-crystalline polymers. *International polymer processing*, 26, 416-423.
- Yang, X., Di, W., Yu, D. (2012). Development and Application of Four Typical Rapid Prototyping Technologies. *Applied Mechanics and Materials*, 160, 165-169.
- Yvonnet, J., Ryckelynck, D., Lorong, P., Chinesta, F. (2004). A new extension of the natural element method for non-convex and discontinuous problems: The constrained natural element method (C-NEM). *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 60, 1451 - 1474.
- Yvonnet, J., Coffignal, G., Ryckelynck, D., Lorong, P., Chinesta, F. (2006). A simple error indicator for meshfree methods based on natural neighbors. *Computers & Structures*, 84, 1301-1312.

Zarringhalam, H. (2007). Investigation into crystallinity and degree of particle melt in selective laser sintering. *PhD Thesis*, Loughborough University.

Zhou, H., Derby, J. (1998). Three-dimensional finite-element analysis of viscous sintering. *Journal of the American Ceramic Society*, 81, 533-540 .

Zhou, H., Derby, J. (2001). An assessment of a parallel, finite element method for three-dimensional, moving-boundary flows driven by capillarity for simulation of viscous sintering. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 36, 841-865.

Zoller, P., Walsh, D. (1995). Standard Pressure Volume Temperature Data for Polymers. *Lancaster: Technomic Publishing Company*.

SIMULATION DU PROCEDE DE FABRICATION DIRECTE DE PIECES THERMOPLASTIQUES PAR FUSION LASER DE POUDRE

RESUME : Le procédé de fabrication directe de pièces thermoplastiques est un procédé innovant qui permet de créer sans outillage, à partir d'une modélisation géométrique numérique, des pièces de géométrie complexe en quelques heures. La fabrication dite additive est réalisée par étalement successif de couches de poudre thermoplastique de quelques dizaines de micromètres, dont une partie est fondue sous rayonnement laser et refroidie lentement afin de permettre la densification de la poudre par diffusion de l'air emprisonné. La résistance mécanique finale du matériau dépend fortement de cette densification. Un grand nombre de paramètres procédé et matériau influencent les mécanismes physiques mis en jeu qui sont contrôlés par la thermique du procédé. La clé de la maîtrise de ce procédé réside dans la parfaite maîtrise de la thermique du lit de poudre. Cette étude a pour objectif de modéliser le procédé de fabrication directe de pièces thermoplastiques haute température de type PEEK. Dans un premier temps, une simulation microscopique de la fusion laser d'un lit de poudre préchauffé et de la coalescence des grains est développée à l'aide de la méthode C-NEM implémentée sur le logiciel Matlab. Les cycles thermiques, la densification et le soudage des grains sont étudiés en fonction des paramètres matériau et procédé. Dans un second temps, l'étude de la thermique d'une couche de poudre à l'état liquide refroidie par apport d'une nouvelle couche de poudre par-dessus est menée à l'aide d'un logiciel éléments finis commercial. L'objectif est de définir les conditions d'étalement permettant au polymère fondu de rester à l'état liquide.

Mots clés : fusion, laser, sélective, simulation, frittage, poudre, thermoplastique, coalescence, densification, polymère.

SIMULATION OF THE SELECTIVE LASER SINTERING PROCESS ON THERMOPLASTIC POWDER

ABSTRACT : Direct manufacturing technology using Selective Laser Sintering of thermoplastic powder allows obtaining final parts in a short time, with a high degree of geometry flexibility and evolution. Parts are built layer by layer, a specific area of each layer is melted by the laser radiation and the whole part is cooled down slowly to induce a good densification, permitting the gas diffusion through the melted material. The mechanical properties of parts made by this process highly depend on the final polymer density. A lot of process and material parameters control the parts properties. The key of the process master lies in its perfect thermal control. The aim of this work is to model the selective laser sintering process for high temperature polymers like PEEK at two scales. Firstly, a microscopic simulation of the melting and the grain coalescence of preheated polymer powder bed is performed using the C-NEM method implemented on Matlab. This tool allows to study the material thermal cycles, the powder densification and the welding quality of grains for different material and process parameters. Then, the thermal study of the additional powder layer spreading on the melted layer is performed on a commercial finite element software. This study aims to determine the good spreading conditions allowing the melted material not to decrease below its crystallization temperature to enhance material densification.

Keywords : selective, laser, sintering, simulation, melting, thermoplastic, powder, coalescence, densification, polymer.