

## SUJET DE STAGE DE MASTER 2

Année 2017-2018

[www.lemta.univ-lorraine.fr](http://www.lemta.univ-lorraine.fr)

### Rhéologie des Polymères Semi-Cristallins (PSC), Modélisation de systèmes viscoélastiques hétérogènes

**Encadrement :** Julien Boisse (Responsable), Stéphane André (co-encadrant)

**Contact :** [julien.boisse@univ-lorraine.fr](mailto:julien.boisse@univ-lorraine.fr) +33/0-3 72 74 42 76

Laboratoire d'Energétique et de Mécanique Théorique et Appliquée(LEMMA)

LEMMA, UMR 7563 CNRS - Université de Lorraine - bureau 009J

2, avenue de la Forêt de Haye, 54504 VANDOEUVRE-lès-NANCY cedex FRANCE

#### Contexte :

Mis à part les calculs par dynamique moléculaire, qui se situent en général à des échelles de modélisation de l'ordre de celle de quelques atomes à la dizaine de nm, aucun travail de modélisation ne s'emploie à décrire les microstructures des **Polymères Semi-Cristallins (PSC)** à l'échelle du **micromètre**.

Pourtant, lorsqu'ils sont **sollicités mécaniquement**, c'est à cette échelle qu'interviennent les mécanismes de transformations de la microstructure les plus forts. Cela conduit à penser que pour espérer obtenir une **description correcte des micro-mécanismes de déformation** et être capable de les **transférer vers l'échelle de l'ingénieur**, c'est à ce niveau qu'il faut porter les efforts de modélisation.

L'objectif de science fondamentale de l'équipe de recherche est d'adopter une **méthode de champ de phase** (connue dans le domaine des matériaux métalliques) pour simuler l'**évolution** topologique des **deux phases (cristal/amorphe)** de ces matériaux, de la coupler à un calcul de mécanique à l'échelle du Volume Élémentaire Représentatif et d'en **extraire le contenu physique**.

#### Objectif du stage :

L'objectif premier du stagiaire sera l'utilisation d'une **loi de comportement viscoélastique** dans le code CRAFT qui permettra de distinguer le comportement des **phases amorphe (visco-élastique)** et **cristalline (élastique pur)**. Ce code de calcul fonctionne sur une approche sans maillage qualifiée de "spectrale" qui constituera dans les prochaines années une voie alternative très intéressante aux calculs type Eléments Finis.

Par ailleurs, le stagiaire se formera à d'**autres codes de calculs basés sur la méthode spectrale** entre autres : le code AMITEX développé par le CEA, et le Code DAMASK développé par l'institut Max Planck.

Le second objectif sera de faire une étude comparative de ces codes avec le code CRAFT (déjà maîtrisé au LEMMA). Les comparaisons seront faites sur la base d'un **cas test** correspondant à une microstructure idéalisée de PSC dans lequel un **phénomène de nano-cavitation** semble permettre la transition de morphologie du matériau, phénomène observé réellement mais encore très mal modélisé actuellement pour ces matériaux bien qu'il mobilise 90% des publications sur cet aspect mécanique-microstructure.

#### Objectif du stagiaire :

Nous recherchons un étudiant issu d'une formation de type **Master en Mathématiques Appliquées / modélisation / mécanique**. Le candidat doit avoir développé pendant ses études supérieures des compétences dans les domaines des **fondamentaux en mathématiques** et du **calcul numérique**, doublées d'une bonne connaissance de langages de programmation **C et/ou Fortran** ou de codes de calculs tel que **Matlab** et/ou **Python**.